

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA MARIA
CENTRO DE TECNOLOGIA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA DE
PROCESSOS**

**MODELAGEM, SIMULAÇÃO E CONTROLE DE UMA
COLUNA DE DESTILAÇÃO DESCONTÍNUA
APROPRIADA À PRODUÇÃO DE ETANOL EM
PEQUENA ESCALA**

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

Felipe Ketzer

Santa Maria, RS, Brasil

2013

**MODELAGEM, SIMULAÇÃO E CONTROLE DE COLUNAS
DE DESTILAÇÃO APROPRIADAS À PRODUÇÃO DE
ETANOL EM PEQUENA ESCALA**

Felipe Ketzer

Dissertação apresentada ao Curso de Mestrado do Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Processos, da Universidade Federal de Santa Maria (UFSM, RS), como requisito parcial para obtenção do grau de **Mestre em Engenharia de Processos.**

Orientador: Prof. Dr. Marcio Schwaab
Coorientadora: Prof^a. Dr^a. Nina Paula Gonçalves Salau

Santa Maria, RS, Brasil

2013

**Universidade Federal de Santa Maria
Centro de Tecnologia
Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Processos**

A Comissão Examinadora, abaixo assinada, aprova a Dissertação de Mestrado,

**MODELAGEM, SIMULAÇÃO E CONTROLE DE COLUNAS DE
DESTILAÇÃO APROPRIADAS À PRODUÇÃO DE ETANOL EM
PEQUENA ESCALA**

elaborada por
Felipe Ketzer

como requisito parcial para obtenção do grau de
Mestre em Engenharia de Processos

COMISSÃO EXAMINADORA:

Marcio Schwaab, Dr.
(Presidente/Orientador)

Nina Paula Gonçalves Salau, Dra. (UFSM)

Paula Bettio Staudt, Dra. (UFRGS)

Fernanda de Castilhos, Dra. (UFSM)

Santa Maria, 28 de fevereiro de 2013.

Agradecimentos

Agradeço primeiramente a Deus que, de alguma forma ou outra, acredito que nos orienta pelos caminhos da vida.

Agradeço a meus pais, Dilson Alceu Ketzer e Silvia Terezia Ketzer, e a minha irmã Luisa Andrea Ketzer, pelo apoio incondicional e pela compreensão.

Agradeço a Danieli Pizzatto Colpo, minha namorada, com quem passei os últimos anos e sempre me ajudou com muita paciência, compreensão, amor e motivação na busca dos objetivos.

Agradeço a todos os colegas e demais amigos, em especial a Cindi de Oliveira Gehlen e ao Glênio Rosinski Ribeiro, colegas desde a graduação em Engenharia Química, com quem convivi inúmeros momentos de alegria ao longo dos últimos anos.

Agradeço aos professores Marcio Schwaab e Nina Paula Gonçalves Salau pela orientação e conselhos ao longo do mestrado.

Agradeço ao professor Rafael Pelegrini Soares pela ajuda relacionada à modelagem e utilização do software EMSO.

Agradeço a CAPES (Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Ministério da Educação) pela bolsa de incentivo à pesquisa disponibilizada.

Agradeço ao restante do corpo docente e aos funcionários pela amizade, apoio e incentivo ao longo desses últimos dois anos.

“Rir muito e com frequência. Ganhar o respeito de pessoas inteligentes e o afeto das crianças. Merecer a consideração de críticos honestos e suportar a traição de falsos amigos. Apreciar a beleza, encontrar o melhor nos outros. Deixar o mundo um pouco melhor, seja por uma saudável criança, um canteiro de jardim ou uma redimida condição social. Saber que ao menos uma vida respirou mais fácil porque você viveu. Isso é ter tido sucesso.”

— *Ralph Waldo Emerson*

RESUMO

Dissertação de Mestrado
Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Produção
Universidade Federal de Santa Maria

MODELAGEM, SIMULAÇÃO E CONTROLE DE COLUNAS DE DESTILAÇÃO APROPRIADAS À PRODUÇÃO DE ETANOL EM PEQUENA ESCALA

AUTOR: FELIPE KETZER

ORIENTADOR: MARCIO SCHWAAB

COORIENTADORA: NINA PAULA GONÇALVES SALAU

Data e Local de Defesa: Santa Maria, 28 de fevereiro de 2013.

O passivo ambiental enfrentado pela indústria de combustíveis fósseis motiva a busca por fontes renováveis de energia. Embora o Brasil seja o segundo maior produtor de etanol mundial, há um déficit produtivo cuja tendência é aumentar até 2015. Nesse sentido, é muito importante ampliar as áreas de cultivo de matérias prima do etanol, bem como aumentar o número de unidades de produção deste biocombustível. Mini-usinas de etanol surgem como uma alternativa interessante para a descentralização da produção, porém sua concepção e operação necessitam de grande eficiência para viabilizar o funcionamento. Este trabalho apresenta o estudo da modelagem, simulação e controle de uma coluna de destilação descontínua para a separação da mistura binária etanol-água com o objetivo de produzir etanol hidratado combustível, com concentração entre 95,1% (v/v) e 96% (v/v), conforme especificações da ANP. A coluna de destilação, localizada no Colégio Politécnico da Universidade Federal de Santa Maria, serviu de base para a modelagem fundamental, a qual foi efetuada com o uso do *software* EMSO. Foram analisados diferentes modelos de equilíbrio de fases, dentre os quais o modelo de *Van Laar* para o cálculo do coeficiente de atividade da mistura em fase líquida, aliado ao modelo de mistura vapor ideal, foi o que apresentou os melhores resultados. Neste estudo, também foram avaliadas diferentes estratégias de controle para manter a concentração do produto de topo dentro da especificação do etanol hidratado combustível exigida pela ANP. O algoritmo de controle escolhido foi o Proporcional Integral projetado com modelos paramétricos discretos lineares e através de diferentes métodos de sintonia existentes na literatura. Critérios de robustez e desempenho foram usados para a escolha do melhor controlador. Três variáveis de processo candidatas à variável manipulada na estratégia de controle foram comparadas: vazão de vapor de aquecimento no destilador, da vazão de água de resfriamento no pré-condensador e razão de refluxo. Os resultados mostraram que a estratégia mais eficiente foi aquela em que a vazão de água de resfriamento no pré-condensador foi usada como variável manipulada. Além de garantir que a concentração seja mantida muito próxima a do azeótropo formado pela mistura etanol-água, a manipulação desta variável permite que uma maior quantidade de etanol hidratado combustível seja produzida.

Palavras-chave: Etanol Combustível, Destilação, Mini Usinas, EMSO, Controle de Processos.

ABSTRACT

Thesis for the degree of Master of Science
Graduate Program in Process Engineering
Federal University of Santa Maria

MODELING, SIMULATION AND CONTROL OF DISTILLATION COLUMNS SUITABLE FOR THE PRODUCTION OF ETHANOL IN SMALL SCALE

AUTHOR: FELIPE KETZER

ADVISOR: MARCIO SCHWAAB

COADVISOR: NINA PAULA GONÇALVES SALAU

Date and Local of defense: Santa Maria, February, 28, of 2013

The environmental liabilities that are faced by fossil fuel industry motivate the search for renewable energy sources. Although Brazil is the second largest world producer of bioethanol, the current production deficit is expected to go up by 2015. In this direction, it is utmost important to widen the ethanol feedstock cultivated area, as well as expanding the number of production units of this biofuel. Small ethanol plants emerge as an interesting alternative for the decentralization of production. However, the design and operation of such plants require high efficiency to enable their operation. This work presents the study of modeling, simulation and control of a batch distillation column for the separation of binary mixture ethanol-water to produce hydrous ethanol fuel with a concentration between 95.1% (v/v) and 96% (v/v), according to ANP specifications. The distillation column, located at the Polytechnic College of the Federal University of Santa Maria, was used as basis for the fundamental modeling which was performed using the software EMSO. Different models of phase equilibria were analyzed, being the *Van Laar* model for calculating the activity coefficient of the mixture in the liquid phase, coupled with ideal vapor mixture model, the one that have shown the best results. In this study, different control strategies were also proposed and evaluated to keep the top product concentration on the ANP specification for hydrous ethanol fuel. The chosen control algorithm was the Proportional Integral designed with discrete linear parametric models and through different tuning methods found in the literature. Robustness and performance criteria were used to select the best controller. Three process variables, candidates to be the manipulated variable of the control strategy, were compared: heating steam flow rate of reboiler, cooling water flow rate of pre-condenser and reflux ratio. The results have shown that the most efficient strategy was the one in which the flow of cooling water flow rate of pre-condenser was used as the manipulated variable. Besides ensuring that concentration is kept quite close to the azeotrope formed by ethanol-water mixture, another advantage of this variable in a control strategy is to allow the production of a high hydrous ethanol fuel.

Keyword: Fuel Ethanol, Distillation, Small-Scale Plant, EMSO, Process Control.

LISTA DE TABELAS

Tabela 2.1 – Principais países produtores de biocombustíveis	23
Tabela 2.2 – Produção efetiva total, demanda e déficit da produção de etanol no Brasil (em bilhões de litros)	25
Tabela 3.1 – Características do hardware utilizado	50
Tabela 3.2 – Parâmetros e variáveis utilizados no Modelo I.....	56
Tabela 3.3 – Condições iniciais utilizadas no modelo I	56
Tabela 3.4 – Modelos de equilíbrio utilizados na simulação do modelo I	58
Tabela 3.5 – Parâmetros utilizadas no Modelo II.....	66
Tabela 3.6 – Condições iniciais utilizadas no modelo II.....	67
Tabela 3.7 – Variáveis da análise de sensibilidade do modelo II.....	68
Tabela 4.1 – Variáveis da análise de sensibilidade do modelo II.....	74
Tabela 4.2 – Funções de transferência e modelos discretos usados na identificação da resposta da temperatura do pré-condensador mediante manipulação da vazão de vapor de aquecimento, da vazão de água de resfriamento, e da razão de refluxo.....	78
Tabela 4.3 – Critérios de desempenho e robustez do controlador da vazão de vapor na base da coluna projetado com o modelo linear	82
Tabela 4.4 – Ganho proporcional e Tempo integral para o controlador da manipulação da vazão de vapor gerados pelo método ITAE regulatório	82
Tabela 4.5 – Critérios de desempenho e robustez do controlador da vazão de água no pré-condensador projetado com o modelo linear	84
Tabela 4.6 – Ganho proporcional e Tempo integral para o controlador da manipulação da vazão de água gerados pelo método Kappa-Tau para desempenho	84
Tabela 4.7 – Critérios de desempenho e robustez do controlador da razão de refluxo projetado com o modelo linear	86
Tabela 4.8 – Ganho proporcional e Tempo integral para o controlador da manipulação da razão de refluxo gerados pelo método Kappa-Tau para robustez	86
Tabela 4.9 – Comparação entre a composição e a quantidade destilada para as situações estudadas.....	94

LISTA DE SÍMBOLOS

- A_c – quantidade destilada no acumulador, em mol;
- D – vazão de destilado, em mol/min;
- G_A – função de transferência resultante da identificação pela perturbação na vazão de água no pré-condensador;
- G_R – função de transferência resultante da identificação pela perturbação na razão de refluxo;
- G_V – função de transferência resultante da identificação pela perturbação na vazão de vapor no destilador;
- H – acúmulo molar em um estágio de equilíbrio qualquer, em mol;
- H_C – acúmulo molar no condensador, em mol;
- H_D – acúmulo molar no destilador, em mol;
- $h^l(i)$ – entalpia da mistura etanol-água na fase líquida, no estágio i , em kJ/mol;
- $h^v(i)$ – entalpia da mistura etanol-água na fase vapor, no estágio i , em kJ/mol;
- i – contador de estágios de equilíbrio;
- j – contador de componente;
- K_P – ganho proporcional do controlador;
- L – vazão de produto na fase líquida, em mol/min;
- L_R – vazão de líquido que retorna à coluna por refluxo, em mol/min;
- NE – número de pratos da coluna de destilação;
- P – pressão do sistema, em mmHg;
- $P_{(j,i)}^{SAT}$ – Pressão de vapor saturado para o componente ‘j’ no estágio ‘i’, em mmHg;
- $Q_{FORNECIDO}$ – energia fornecida ao destilador por meio do vapor saturado, em kJ/min;
- Q_{PC} – energia removida do pré-condensador, em kJ/min;
- Q_{TOTAL} – energia fornecida ao destilador ao longo da destilação, em kJ;
- R – razão de refluxo;
- $T(i)$ – temperatura no estágio de equilíbrio i , em K;
- T_D – tempo derivativo do controlador;
- T_I – tempo integral do controlador;
- V – vazão de produto na fase vapor, em mol/min;
- $V_{ÁGUA}$ – vazão de água que circula na serpentina de resfriamento do pré-condensador, em m³/min;
- V_{TOPO} – vazão de produto no topo da coluna de destilação, em mol/min;
- V_{VAPOR} – vazão de vapor saturado que circula na serpentina de aquecimento do destilador, em m³/min;
- $x(i,j)$ – composição em fase líquida do componente j no estágio i , em mol/mol;
- x_D – composição de etanol no acumulador, em mol/mol;
- $y(i,j)$ – composição em fase vapor do componente j no estágio i , em mol/mol;
- β_{DEST} – fração vaporizada no destilador;
- β_{PC} – fração vaporizada no pré-condensador;

ΔH_{VAPOR} – diferença entre a energia do vapor saturado na entrada e a do líquido na saída da serpentina, em kJ/m³;

$\Delta H_{ÁGUA}$ – diferença entre a energia da água na fase líquida na entrada e na saída da serpentina, em kJ/m³;

ϕ_L – fugacidade na fase líquida;

ϕ_V – fugacidade na fase vapor;

$\lambda_{DESTILADOR}$ – entalpia de vaporização da solução hidroalcoólica no destilador, em kJ/mol;

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 2.1 – Evolução dos biocombustíveis no Brasil	21
Figura 2.2 – Produção mundial de etanol e biodiesel entre 2000 e 2011	22
Figura 2.3 – Produção de etanol de diferentes matérias primas	26
Figura 2.4 – Produção de cana de açúcar no Brasil	26
Figura 2.5 – Potencial de produção de cana de açúcar sem irrigação	28
Figura 2.6 – Representação de uma coluna de destilação descontínua	35
Figura 2.7 – Modelo de estágio de equilíbrio	38
Figura 3.1 – Coluna de destilação em estudo	48
Figura 3.2 – Calota S-90 para a concentração do etanol	48
Figura 3.3 – Fluxograma do modelo I para a coluna de destilação descontínua	52
Figura 3.4 – Simulação da concentração nos estágios de equilíbrio para mistura ideal....	57
Figura 3.5 – Simulação da composição no topo para os modelos de equilíbrio líquido vapor indicados na Tabela 3.4	59
Figura 3.6 – Simulação da concentração de topo para razão de refluxo $R = 500$	60
Figura 3.7 – Fluxograma do modelo II para a coluna de destilação descontínua.....	62
Figura 3.8 – (a) Temperatura e (b) Composição de etanol no condensador (topo) para as simulações V_{vapor1} , V_{vapor2} e V_{vapor3}	69
Figura 3.9 – (a) Temperatura e (b) Composição de etanol no condensador para as simulações $V_{\acute{a}gua1}$, $V_{\acute{a}gua2}$ e $V_{\acute{a}gua3}$	70
Figura 3.10 – (a) Temperatura e (b) Composição de etanol no condensador (topo) para as simulações $Refluxo1$, $Refluxo2$ e $Refluxo3$	71
Figura 4.1 – Esquema da coluna de destilação descontínua usado para a proposta da estrutura de controle.	73
Figura 4.2 – (a) Resposta da temperatura do pré-condensador mediante (b) variação da vazão de vapor de aquecimento no destilador	75
Figura 4.3 – (a) Resposta da temperatura do pré-condensador mediante (b) variação da vazão de água no pré-condensador	75
Figura 4.4 – (a) Resposta da temperatura do pré-condensador mediante (b) variação da razão de refluxo da coluna	76
Figura 4.5 – Resposta da temperatura do pré-condensador para uma mudança em seu <i>setpoint</i> , utilizando a função de transferência G_V	83
Figura 4.6 – – Resposta da temperatura do pré-condensador para uma mudança em seu <i>setpoint</i> , utilizando a função de transferência G_A	85
Figura 4.7 – Resposta da temperatura do pré-condensador para uma mudança em seu <i>setpoint</i> , utilizando a função de transferência G_R	87
Figura 4.8 – (a) Temperatura e (b) Concentração no pré-condensador para o controle por meio da manipulação da vazão de vapor saturado para o <i>setpoint</i> de 351,5993 K88	
Figura 4.9 – Manipulação da vazão de vapor saturado ao longo da destilação para o <i>setpoint</i> de 351,5993 K.....	89
Figura 4.10 – (a) Temperatura e (b) Concentração no pré-condensador para o controle por meio da manipulação da vazão de água de resfriamento do pré-condensador para o <i>setpoint</i> de 351,5993 K.....	90
Figura 4.11 – Manipulação da vazão de vapor saturado ao longo da destilação para o <i>setpoint</i> de 351,5993 K.....	91

Figura 4.12 – (a) Temperatura e (b) Concentração no pré-condensador para o controle por meio da manipulação da razão de refluxo para o <i>setpoint</i> de 351,5993 K.....	92
Figura 4.13 – Manipulação da vazão da razão de refluxo ao longo da destilação para o <i>setpoint</i> de 351,5993 K.....	93
Figura 4.14 – (a) Concentração de topo e (b) Vazão de produto destilado pela manipulação da vazão de vapor saturado no destilador.....	94
Figura 4.15 – (a) Concentração de topo e (b) Vazão de produto destilado pela manipulação da vazão água de resfriamento no pré-condensador.....	95
Figura 4.16 – (a) Concentração de topo e (b) Vazão de produto destilado pela manipulação da razão de refluxo	95

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO.....	15
1.1 Objetivo Geral	17
1.1.1 Objetivos Específicos	17
1.2 Estrutura da Dissertação	17
2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	19
2.1 Biocombustíveis	19
2.2 Produção de Etanol no Brasil	24
2.3 Colunas de destilação	30
2.4 Modelagem de colunas de destilação	34
2.5 Simulação de colunas de destilação.....	39
2.6 Controle de colunas de destilação	42
3. MODELAGEM MATEMÁTICA	47
3.1 Descrição dos equipamentos utilizados	47
3.1.1 Coluna de destilação	47
3.1.2 Hardware e Softwares utilizados	49
3.2 Modelos termodinâmicos	50
3.2.1 Modelos de entalpia de mistura	50
3.2.2 Modelos de equilíbrio líquido/vapor	50
3.3 Modelagem da coluna de destilação	51
3.3.1. Modelo I	51
3.3.2. Modelo II	61
4. ESTRATÉGIAS DE CONTROLE	72
4.1 Estrutura de controle.....	72
4.2 Análise do processo em malha aberta	73
4.3 Identificação	77
4.4 Métodos de sintonia de controladores	79
4.4.1. Controlador da vazão de vapor na base da coluna.....	81
4.4.2. Controlador da vazão de água no pré-condensador.....	83
4.4.3. Controlador da razão de refluxo	85
4.5 Análise do processo em malha fechada.....	87
4.5.1. Controlador para a manipulação da vazão de vapor saturado no destilador.....	87
4.5.2. Controlador para a manipulação da vazão de água de resfriamento no pré-condensador	89
4.5.3. Controlador para a manipulação da razão de refluxo	91
4.5.4. Comparação entre as estratégias de controle	93
5. CONCLUSÕES.....	97
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	100
APÊNDICES.....	110
APÊNDICE A – Entalpias da mistura etanol-água nas fases líquida e vapor.....	110

APÊNDICE B – Modelos para o cálculo do coeficiente de atividade	113
APÊNDICE C – Cálculo da pressão de saturação.....	115
APÊNDICE D – Métodos de sintonia de controladores PI.....	116
APÊNDICE E – Critérios de avaliação dos controladores.....	121

1. INTRODUÇÃO

Os combustíveis fósseis satisfazem a maioria das necessidades de energia primária no mundo, contribuindo em mais de 80% no consumo de energia total. Apesar dos inúmeros benefícios que o uso intenso de combustíveis fósseis tem trazido para a humanidade durante o último século, o dano ambiental tem sido considerável, devido à emissão de gases de efeito estufa produzidos durante a sua combustão. Este passivo ambiental é uma das principais razões para o desenvolvimento e utilização de fontes renováveis de energias alternativas, tais como o bioetanol e o biodiesel.

Países como o Brasil e os Estados Unidos são os principais produtores mundiais de biocombustíveis para o setor de transportes. O etanol produzido por estes países corresponde em torno de 87% do total mundial produzido. Nos Estados Unidos, o etanol é produzido principalmente a partir do milho; já no Brasil, a partir da cana de açúcar.

O Brasil é o maior produtor e exportador mundial de etanol à base de cana de açúcar e espera ampliar a sua produção com o aumento da demanda doméstica e internacional (UNICA, 2010). Embora seja o maior produtor, existe um déficit produtivo cuja tendência, caso não ocorram medidas para aumentar a produção, é crescer ainda mais. O acréscimo necessário na produção ocorrerá com a implantação de novas usinas e plantações, mas também exigirá aumento da produção de usinas já existentes, bem como aumento de produtividade de campos já cultivados. Neste sentido, se torna importante aperfeiçoar os métodos de produção, aumentando a eficiência de colunas de destilação com a utilização de métodos de controle adequados.

O processo de produção do etanol combustível compreende desde a fermentação da matéria prima até a operação unitária de destilação. Os materiais utilizados na fermentação

alcoólica são obtidos a partir de matéria prima amilácea, tais como milho, mandioca e batata inglesa, bem como a partir de açúcares, oriundos da cana de açúcar, beterraba e do sorgo sacarino. Estas fontes geram um mosto fermentado com teor alcoólico em torno de 10%, em volume, o qual é purificado com a utilização de colunas de destilação. Este processo de separação é capaz de purificar o etanol a teores compatíveis com a legislação nacional de combustíveis, o que faz com que seja amplamente utilizado em usinas de produção de etanol.

A separação de compostos com a utilização de colunas de destilação, além de ser utilizada na purificação do etanol, também é um processo amplamente utilizado nas indústrias química, petroquímica, de refino e mesmo na indústria de alimentos para a separação de líquidos ou uma mistura de vapores de substâncias. No entanto, este processo demanda muita energia, e até mesmo pequenas melhorias podem economizar grandes quantidades de energia. De acordo com Enweremadu e colaboradores (2009), o processo de destilação em plantas de produção de etanol pode consumir mais da metade do total da energia utilizada na usina.

Devido ao grande gasto energético, o grande desafio dos engenheiros de automação e otimização é projetar sistemas de controle para colunas de destilação que garantam a qualidade dos produtos com um consumo mínimo de energia. Para propor a estrutura de controle é necessário obter o modelo do processo, seja fundamental ou empírico. Em alguns casos, a representação da dinâmica destes modelos de forma rigorosa compreende a etapa mais trabalhosa para o projetista. Porém, somente com o modelo há como identificar a resposta do sistema a eventuais distúrbios e, principalmente, determinar as condições para manter a operação da coluna de forma a obter os produtos nas especificações desejadas.

De uma forma geral, podem-se ter dois tipos de variáveis a serem controladas: as associadas ao controle do inventário; e as associadas ao balanço de energia da coluna. As associadas ao controle do inventário estão relacionadas com o balanço de massa do sistema, como pressão da coluna e os níveis no vaso de topo e de fundo da torre. As associadas ao balanço de energia da coluna estão relacionadas com a qualidade dos produtos, como as temperaturas. O controle do inventário é mais crítico, pois é o que mantém a operação do sistema. Por exemplo, se a pressão da coluna ou os níveis dos reservatórios não puderem ser controlados de forma satisfatória, então haverá dificuldades em manter a coluna em operação. Por outro lado, as variáveis associadas à qualidade não impedem a operação, mas têm grande impacto econômico e são importantes para otimizar o sistema (CAMPOS e TEIXEIRA, 2009).

1.1 Objetivo Geral

Este trabalho tem por objetivo construir um modelo fenomenológico de uma coluna de destilação descontínua para a separação da mistura binária etanol/água e, assim, propor uma estrutura de controle para o processo de modo que o produto de topo seja mantido dentro das especificações desejadas.

1.1.1 Objetivos Específicos

- i) Construir um modelo fenomenológico com as características de construção da coluna de destilação descontínua no Colégio Politécnico da Universidade Federal de Santa Maria visando à proposta de uma estratégia de controle para este equipamento;
- ii) Estudar o equilíbrio termodinâmico de fases para a mistura binária etanol-água, a fim de encontrar o melhor equilíbrio para o modelo da coluna de destilação em estudo;
- iii) Selecionar e analisar as variáveis do processo de destilação descontínua (candidatas à variável manipulada) que tenham influência na quantidade e qualidade do produto de topo, (variável controlada) para a posterior identificação de modelos paramétricos discretos lineares para o projeto de controladores Proporcional Integral (PI);
- iv) Projetar os controladores PI através de métodos de sintonia existentes na literatura e comparar sua performance destes através de critérios de robustez e desempenho;
- v) Propor a estrutura de controle mais eficiente para manter o produto de topo dentro nas especificações desejadas.

1.2 Estrutura da Dissertação

Esta dissertação se divide em cinco capítulos, conforme descritos a seguir:

O capítulo 1 trata da introdução ao tema a ser abordado. O capítulo 2 consiste em uma revisão bibliográfica sobre os principais temas, como biocombustíveis, produção de etanol no Brasil e também a modelagem, simulação e controle de colunas de destilação.

O capítulo 3 corresponde à modelagem e simulação da coluna de destilação descontínua. Neste é apresentada a coluna de destilação em estudo, os softwares e as características dos demais equipamentos utilizados no trabalho. Na sequência são apresentados os modelos termodinâmicos de equilíbrio de fases utilizados na construção do modelo fenomenológico, tais como as equações de estado cúbicas e modelos para o cálculo do coeficiente de atividade em fase líquida, e ainda o modelo para o cálculo das entalpias de líquido e de vapor da mistura etanol-água. A seguir são apresentadas as simulações para avaliar dois modelos propostos: a) Modelo composto apenas pelo balanço de massa, denominado modelo I e b) Modelo composto pelo balanço de massa e balanços de energia no destilador e no condensador parcial, denominado modelo II, o qual possibilita avaliar diferentes estratégias de controle visando sua posterior implementação.

O capítulo 4 consiste na apresentação das estratégias de controle propostas neste trabalho, utilizando como base o modelo II apresentado no capítulo 3. Inicialmente é feita a análise do processo em malha aberta para verificar variações na concentração do produto de topo frente a perturbações do tipo degrau nas variáveis do processo candidatas à variável manipulada na estratégia de controle. Na sequência, fazendo-se uso do conjunto de dados gerados pelo modelo durante esta análise, são identificados modelos paramétricos discretos lineares representativos da dinâmica do processo. Com os modelos lineares identificados obtêm-se as funções de transferência em malha aberta necessárias para o projeto dos controladores PI, juntamente com os métodos de sintonia existentes na literatura. As estratégias de controle propostas são então implementadas no modelo II para a simulação deste em malha fechada. A performance das estratégias de controle são comparadas através de critérios de robustez e desempenho visando à escolha da mais eficiente para manter o produto de topo dentro nas especificações desejadas.

O capítulo 5 corresponde à conclusão deste trabalho de dissertação, onde são retomados os principais resultados obtidos nos capítulos 3 e 4 e são apresentadas sugestões para trabalhos futuros.

2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1 Biocombustíveis

Os biocombustíveis começaram a ser produzidos no final do século XIX, quando o etanol foi obtido a partir de milho e quando o primeiro motor de Rudolf Diesel funcionou com óleo de amendoim. Até a década de 1940, os biocombustíveis foram vistos como uma forma viável de utilização como combustíveis para transporte, mas a queda dos preços dos combustíveis fósseis desmotivou o desenvolvimento desta tecnologia. O interesse na produção comercial voltou novamente em meados da década de 1970, com a produção de bioetanol, ou, simplesmente, etanol. Nesta época ocorreu a primeira crise mundial do petróleo e, então, o etanol começou a ser produzido a partir da cana de açúcar no Brasil e, em seguida, a partir do milho nos Estados Unidos. Em muitas partes do mundo, o maior crescimento na produção de biocombustíveis tem ocorrido nos últimos 10 anos, apoiado por políticas governamentais de amparo à produção e consumo.

A crescente industrialização e o aquecimento na indústria automobilística mundial levaram a um crescimento acentuado da demanda de combustíveis derivados do petróleo. Combustíveis fósseis, hoje, ocupam 80% da energia primária consumida no mundo, dos quais 58% são consumidos pelo setor dos transportes (NIGAN e SINGH, 2011).

Políticas de apoio aos biocombustíveis são, muitas vezes, impulsionadas devido a preocupações com a segurança energética, juntamente com o desejo de sustentar o setor agrícola e revitalizar o setor rural. Uma das medidas mais comuns é a adição de

biocombustíveis nos combustíveis fósseis utilizados para transportes, aliado a outras medidas como, por exemplo, incentivos fiscais (IEA, 2011).

Nesse sentido, tem sido cada vez maior a atenção dada para a produção de biodiesel e bioetanol como fontes de combustíveis renováveis, com o intuito de substituir ou complementar a gasolina e o diesel derivados do petróleo. Esta tendência é resultado, entre outros aspectos, do aumento dos preços do petróleo no mercado internacional e da pressão para reduzir as emissões de dióxido de carbono na atmosfera (RATHMANN *et al.*, 2010).

De acordo com Ajanovic (2011), a produção global de biocombustíveis é relativamente baixa, mas está em constante crescimento. A preocupação ambiental, aliada a preocupações de segurança energética, refletem-se na obrigação legal de usar biocombustíveis em alguns países como Estados Unidos, Brasil, França, Alemanha entre outros, fazendo com que estabeleçam metas para substituir parte dos combustíveis fósseis por biocombustíveis.

Os Estados Unidos têm fomentado, por via de atos legislativos, a redução de sua dependência de combustíveis fósseis pelo estímulo a eficiência energética e pelo aumento da participação de biocombustíveis em sua matriz energética. No ano de 2011, a produção e o consumo de etanol nos Estados Unidos alcançaram, respectivamente, 52,8 e 48,7 bilhões de litros. Devido à alta produção e ao excesso de oferta de etanol, em 2011 os Estados Unidos passaram a exportadores de etanol, disponibilizando 4,5 bilhões de litros, sendo 1,1 bilhão de litros desse total destinados ao Brasil (MME, 2012).

A União Europeia, que divulgou no final de 2008 um conjunto de diretivas, conhecida como “Triplo 20” ou *Climate and Energy Package*, estabeleceu algumas medidas a serem cumpridas até 2020: diminuir a emissão de dióxido de carbono em 20% e aumentar a participação de fontes renováveis na matriz energética em 20%. No setor automotivo, foi estabelecida a meta de participação de 5% de combustíveis renováveis no consumo até 2015, sendo 4% provenientes de biocombustíveis de primeira geração, e 1% de fontes alternativas tecnologicamente mais avançadas. Para 2020, a meta é ter a participação de 10% de combustíveis renováveis, sendo 6% provenientes de biocombustíveis de primeira geração, e 4% de fontes alternativas (UE, 2008).

O governo japonês, por outro lado, concentra a maioria de suas iniciativas na busca de soluções para a diminuição da demanda de energia, e não para a produção de biocombustíveis propriamente dita, juntando esforços em políticas de eficiência energética. Assim, se busca novas estratégias para diminuir a dependência do país em combustíveis fósseis em 20% até

2030. No setor de transportes, por exemplo, os investimentos priorizam as novas tecnologias, como carros elétricos e híbridos (MME, 2012).

Segundo a ANP (2012), no Brasil, cerca de 45% da energia e 18% dos combustíveis consumidos já são renováveis. No restante do mundo, 86% da energia vêm de fontes energéticas não renováveis.

A evolução dos biocombustíveis no Brasil pode ser observada na Figura 2.1. O histórico de produção de biocombustíveis tem origem na primeira crise mundial do petróleo, ocorrida em 1973. Em 1979, já se adotava a adição de 15% de etanol à gasolina. Atualmente, a adição de etanol na gasolina varia entre 18% e 25% (E18 e E25), e é determinada pelo governo. Em relação ao biodiesel, diferentemente de países da União Europeia que já possuem incentivos a produção de biodiesel desde meados da década de 1990, o Brasil começou a adotar medidas semelhantes somente a partir do Programa Nacional de Biodiesel, lançado em 2005. Este plano estabeleceu a mistura, inicialmente voluntária, de 2% (B2), e, a partir de 2008, obrigatória e com percentuais crescentes de biodiesel no diesel fóssil. Em janeiro de 2010, alcançou-se a mistura de 5% de biodiesel (B5), a qual é mantida até hoje. Segundo o MME (2012), essa medida fez com que de 2005 até outubro de 2011 fossem adicionados 5,6 bilhões de litros de biodiesel ao diesel fóssil.

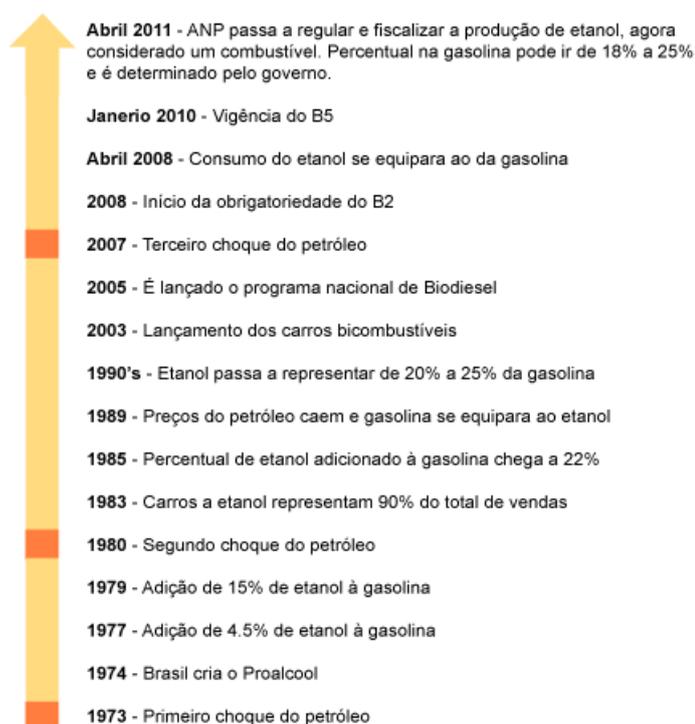


Figura 2.1 – Evolução dos biocombustíveis no Brasil
Fonte: ANP (2012)

Hoje, os biocombustíveis fornecem cerca de 3% do total de combustíveis utilizados para transporte em todo mundo, e em certos países esses percentuais são ainda mais elevados. No Brasil, por exemplo, os biocombustíveis representavam cerca de 21% do uso de combustíveis de transporte. Nos Estados Unidos, esse percentual é de 4%, e na União Europeia é de 3% (IEA, 2011).

A produção de biocombustíveis tem aumentado desde o início dos anos 2000, como pode ser observado na Figura 2.2. A produção mundial de etanol e de biodiesel chegaram aos 86,1 e aos 21,4 bilhões de litros, respectivamente, no ano de 2011. O total produzido passou de pouco menos de 18 bilhões de litros em 2000 para pouco mais de 107 bilhões em 2011.

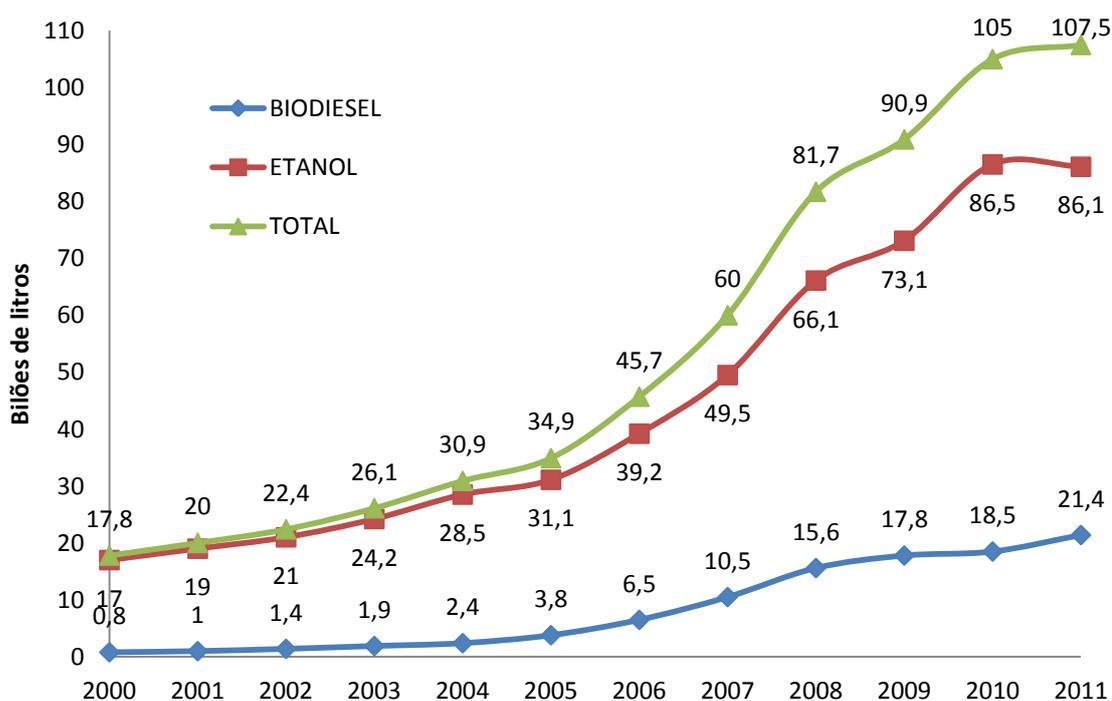


Figura 2.2 – Produção mundial de etanol e biodiesel entre 2000 e 2011

Fonte: REN21 (2012)

Estados Unidos e Brasil são os principais produtores mundiais de biocombustíveis, como pode ser observado na Tabela 2.1. Do total de etanol produzido em 2011, estes dois países correspondem a pouco mais de 87% da produção mundial (REN21, 2012).

A produção de biocombustíveis pode ser dividida em três gerações, de acordo com o método de produção e a matéria-prima utilizada. A primeira geração trabalha com sementes,

grãos e açúcares como substrato. A produção de etanol ocorre a partir da fermentação do amido (trigo, cevada, milho, batata) ou açúcares (cana de açúcar, beterraba) e a produção de biodiesel ocorre a partir da transesterificação de óleos vegetais (soja, girassol, palma, coco). Já a segunda geração trabalha com materiais lignocelulósicos, produzindo etanol a partir da hidrólise enzimática e o biodiesel a partir de processos termoquímicos. A terceira geração promove a utilização de algas como substrato, produzindo tanto o etanol quanto o biodiesel a partir de algas específicas (NIGAM e SINGH, 2011).

Tabela 2.1 – Principais países produtores de biocombustíveis

País	Etanol	Biodiesel	Total
	Bilhões de litros		
Estados Unidos	54,2	3,2	57,4
Brasil	21,0	2,7	23,7
Alemanha	0,8	3,2	3,9
Argentina	0,2	2,8	3,0
França	1,1	1,6	2,7
China	2,1	0,2	2,3
Total Mundial	86,1	21,4	107,5
Total na União Europeia	4,3	9,2	13,5

Fonte: REN21 (2012)

Muitos estudos sobre a produção de etanol a partir de biomassa lignocelulósica já foram feitos. Um dos motivos é que esses materiais são mais abundantes e mais baratos que biomassas a base de sacarose e amido ou oleaginosas. A exemplo das vantagens de se produzir etanol a partir de material lignocelulósico, Farrell e colaboradores (2006) estimam que, enquanto o etanol de milho reduz em 13% emissão dos gases de efeito estufa, o etanol celulósico poderia reduzir em até 88%. No entanto, existem muitas limitações para a produção de etanol a partir de material lignocelulósico, tais como a taxa de degradação enzimática lenta

e o alto custo das enzimas. Como consequência, a biomassa de primeira geração ainda é a principal matéria prima utilizada para a produção de etanol (YAMADA *et al.*, 2011).

A disponibilidade de matéria prima para a produção de biocombustíveis varia de acordo com a geografia, o clima e a economia. Para a produção de biodiesel, por exemplo, o óleo de canola é bastante utilizado na Europa, o óleo de palma predomina em países tropicais e o óleo de soja e as gorduras animais são utilizados nos Estados Unidos e no Brasil (MOSER e VAUGHN, 2012).

A produção de etanol de primeira geração ocorre a partir de materiais amiláceos, tais como milho, mandioca e batata doce, bem como a partir de açúcares, oriundos da cana de açúcar, beterraba e do sorgo sacarino. Nos Estados Unidos, o etanol de milho é atualmente o biocombustível predominante e já está ocupando mais de 30% do milho produzido. Por essa razão, há um potencial limitado para a expansão de lavouras e, portanto, qualquer aumento de área plantada de milho deve ser feito mediante redução na área plantada de outras culturas. Por outro lado, o Brasil, que usa a cana de açúcar como matéria-prima, está usando apenas 1,6% de sua área total cultivada e pastagens e 5% de suas terras cultiváveis para a produção de etanol de cana de açúcar. Deste modo, fica evidente a considerável capacidade de expansão da área cultivada e da produção de cana sem competir com a produção de alimentos (GOLDEMBERG *et al.*, 2008). Em relação ao uso da terra, a utilização da cana é mais eficiente que a do milho, pois a obtenção de etanol por unidade de terra é 45% maior para o etanol de cana de açúcar quando comparado com o etanol de milho (CRAGO *et al.*, 2010).

2.2 Produção de Etanol no Brasil

A demanda de etanol no Brasil é maior que a produção. De acordo com o BNDES (2012), esse déficit tende a crescer e para isso serão necessários muitos investimentos na produção de etanol. A Tabela 2.2 mostra a produção efetiva total de etanol estimada até 2015, bem como a demanda potencial e o déficit resultante. Com a atual perspectiva, o déficit acumulado poderá chegar a 29,2 bilhões de litros até 2015, caso não sejam tomadas medidas para ampliação da área plantada e para aumentar a eficiência dos processos produtivos.

A tecnologia de produção do etanol representa uma importante área científica no desenvolvimento de biocombustíveis. O processo de produção depende da matéria prima

utilizada, conforme ilustrado na Figura 2.3, e é dividida em duas etapas principais: a obtenção do etanol a partir da biomassa e a separação do etanol fermentado, geralmente com a utilização de colunas de destilação. O etanol pode ser produzido a partir de qualquer material que contenha açúcar que, juntamente com a ação de micro-organismos como bactérias e leveduras, podem metabolizá-lo. O etanol também pode ser produzido a partir de polissacarídeos, como o amido e a celulose, que são quebrados em monossacarídeos para, então, serem metabolizados para o etanol (DODIC *et al.*, 2012).

Tabela 2.2 – Produção efetiva total, demanda e déficit da produção de etanol no Brasil (em bilhões de litros)

	2012	2013	2014	2015	Acumulado 2012-2015
Produção efetiva total	28,4	32,1	33,9	35,5	129,9
Demanda potencial	32,5	36,8	42,3	47,5	159,1
Déficit	4,1	4,7	8,4	12,0	29,2

Fonte: Adaptado de BNDES (2012)

O açúcar é a matéria prima que possui o método de produção mais simplificado, pois a fermentação ocorre de maneira direta, sem necessitar de outras etapas químicas ou biológicas de preparo do substrato. Já o amido, pelo fato de ser um polissacarídeo, necessita de pré-tratamento, como cozimento e hidrólise enzimática, a fim de formar monossacarídeos os quais serão fermentados até a formação do etanol. Por fim, o material lignocelulósico, assim como o amido, também é um polissacarídeo e necessita da hidrólise enzimática ou química para a formação de monossacarídeos fermentáveis e produção de etanol (NIGAN e SINGH, 2011; BALAT e BALAT, 2009).

No Brasil, a produção de etanol se dá, na sua maior parte, a partir da cana de açúcar. A área cultivada com essa cultura na safra 2012/2013 está estimada em 8527,8 mil hectares, distribuídas em todos os estados produtores conforme suas características. O estado de São Paulo é o maior produtor, com pouco menos de 52% da produção, seguido por Minas Gerais e Goiás, ambos com pouco menos de 9% do total produzido, como se pode observar na Figura

2.4. A área de cana de açúcar destinada a produção neste ano apresentou um crescimento de 2,1%, ou 171,7 mil hectares, em relação à safra passada. A falta de investimento em novas unidades ou mesmo na ampliação da capacidade de processamento das já existentes, bem como a renovação de áreas já cultivadas, dificulta um maior crescimento (CONAB, 2012).

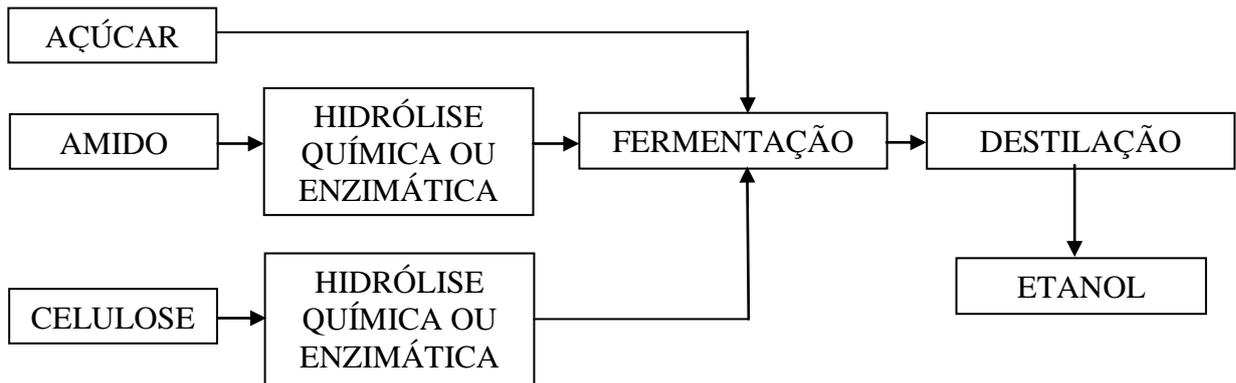


Figura 2.3 – Produção de etanol de diferentes matérias primas

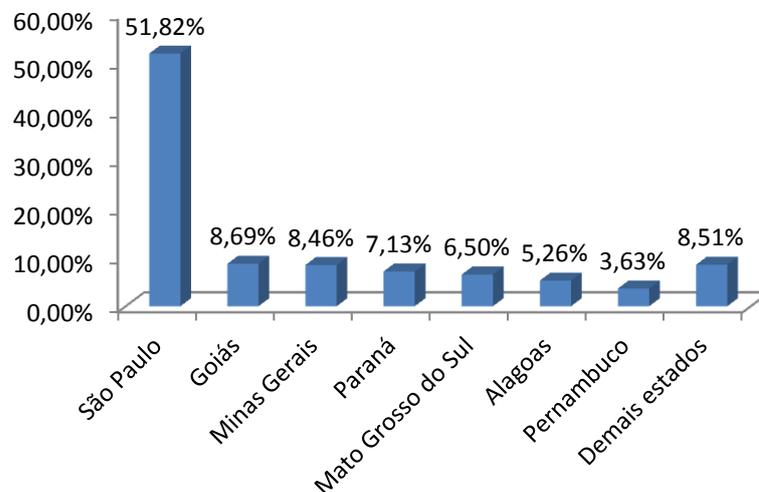


Figura 2.4 – Produção de cana de açúcar no Brasil

Fonte: CONAB (2012)

Leite e colaboradores (2009) pesquisaram áreas potencialmente econômicas para a produção de cana de açúcar no Brasil, eliminando todas as áreas ambientalmente sensíveis, como a amazônia, o pantanal e a mata atlântica. Ainda, foram excluídas desse estudo as reservas indígenas, as áreas militares e as áreas com dificuldades técnicas de plantio e

colheita, como as que possuem declividade maior de 12%. O potencial de produção de cana de açúcar, sem irrigação, é mostrado na Figura 2.5. O objetivo deste estudo foi avaliar a viabilidade de se substituir 5% do total de gasolina consumido por etanol de cana de açúcar. Concluiu-se que, para isso, seria necessário aumentar em três vezes a área atualmente cultivada.

Com o intuito de identificar áreas favoráveis ao cultivo de cana de açúcar, foi realizado um estudo de zoneamento agroecológico da cana de açúcar no Brasil. Neste estudo foram selecionadas áreas de cultivo com potenciais de expansão, com o objetivo de fornecer subsídios técnicos e econômicos, como financiamentos e seguros agrícolas, para formulação de políticas públicas visando o ordenamento da expansão e a produção sustentável de cana-de-açúcar no território brasileiro. De acordo com zoneamento agroclimático, 1,5 milhão de hectares no Rio Grande do Sul estão aptos para o plantio de cana, especialmente em uma faixa que vai do Litoral Norte até a região central do Estado e no Noroeste. A realização do zoneamento foi essencial para criar condições para que a atividade seja desenvolvida. Isto porque as famílias de agricultores só têm acesso ao PRONAF para plantar em áreas que estão dentro do zoneamento para o vegetal. Do contrário, é preciso buscar dinheiro no mercado, com juros bem maiores (EMBRAPA, 2009).

Especificamente para o caso do Rio Grande do Sul, a perspectiva de produção de etanol hidratado a partir de cana de açúcar é, para a safra de 2012, de pouco mais de 7,53 milhões de litros, representando aproximadamente 0,053% da produção nacional (CONAB, 2012). Uma das justificativas desse baixo valor em relação ao restante do país é o clima, pois a incidência de frio e o clima seco dificultam o cultivo. Espera-se que, a partir do zoneamento de áreas propícias ao cultivo, seja ampliada a capacidade produtiva do estado, adaptando essa cultura de maneira que a produtividade seja semelhante às áreas de plantio na região sudeste.

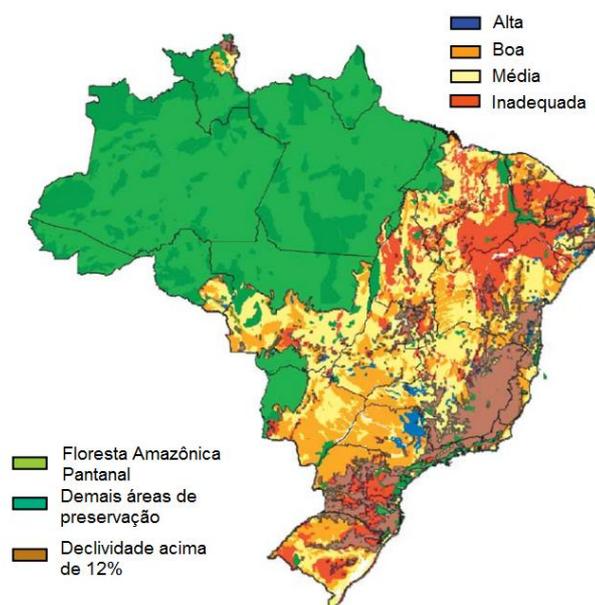


Figura 2.5 – Potencial de produção de cana de açúcar sem irrigação

Fonte: LEITE e colaboradores (2009)

De acordo com Almeida e Silva (2011), pouco menos de 2% da demanda de etanol no Rio Grande do Sul é produzida no próprio estado. O restante vem de outras regiões do país, aumentando os custos do produto ao mercado consumidor. A produção de cana de açúcar no estado não reflete a realidade do potencial de produtividade devido ao fato de mais de 90% da área ocupada com essa cultura ser destinada a outras finalidades, como produção de melado, rapadura e alimentação de animais. Atualmente, a produção de etanol se dá em apenas uma usina, a COOPERCANA, que fica em Porto Xavier, no noroeste do Estado, e tem a capacidade de produzir entre 6 e 8 milhões de litros por ano. Em 2013, o Estado deve consumir 1 bilhão de litros, sendo que 500 milhões de litros devem ser utilizados pela BRASKEM para a fabricação do plástico verde no Polo Petroquímico.

Como alternativa à utilização de cana de açúcar, estão sendo estudados outros substratos cultivados na região sul do país, como a batata doce, a mandioca, o arroz e o sorgo sacarino. Todas essas alternativas devem ser avaliadas quanto ao custo aquisitivo, à facilidade de transformação, ao rendimento em álcool, à disponibilidade e à possibilidade de expansão. De acordo com Yang e colaboradores (2011), existem muitos métodos de avaliação das biomassas de etanol, como análise energética, análise econômica, análise ambiental, e análise exergética. Não existe um método geral para avaliar a sustentabilidade do sistema, mas cada método tem suas vantagens dentro de cada perspectiva específica. Balat e Balat (2009) citam

várias questões para a comparação das matérias primas, entre elas: composição química da biomassa; práticas de cultivo; uso de recursos; balanço energético; emissão de gases do efeito estufa e gases de destruição do ozônio; absorção de minerais da água e do solo; uso de pesticidas; erosão do solo; preço da biomassa e custo logístico, levando em conta a matéria prima e os coprodutos.

Em relação à diversificação de matérias primas, o etanol obtido a partir da batata doce é um exemplo de alternativa viável para a produção. De acordo com Jin e colaboradores (2012), este produto é capaz de produzir etanol em quantidades entre duas e três vezes maior que o milho e se aproxima da quantidade produzida a partir da cana de açúcar, mostrando ser uma matéria prima promissora.

A obtenção de etanol a partir de mandioca é mais difundida em países como Tailândia e China. Essa cultura tem algumas vantagens sobre as demais matérias primas. Primeiro, é uma planta tropical, com raízes ricas em amido, que é cultivada em terras onde o arroz, o trigo, o milho e a cana não possuem viabilidade de plantio. Segundo, o fato de não ser um alimento básico de consumo evita gerar uma crise alimentar tal qual o milho e o trigo poderiam gerar (YANG *et al.*, 2011). A produtividade de etanol a partir da mandioca ainda é baixa, mas pode ser aumentada a partir de processos técnicos e biogenética (CHASINBOON e CHONTANAWAT, 2011).

A produção de etanol a partir do arroz é adotada em países com grandes áreas plantadas com essa cultura, a exemplo do Japão, onde o governo propõe políticas agrícolas de incentivo à produção de arroz de alto rendimento em campos de arroz subutilizados. A produção de etanol convencional não ocorre a partir do amido bruto, o que torna o processo caro e complexo. Porém, com enzimas e micro-organismos específicos este problema pode ser eliminado, o que reduz os custos de produção (YAMADA *et al.*, 2011).

A obtenção de etanol a partir do sorgo sacarino tem como vantagem o fato de essa cultura ser adaptada ao clima quente, altamente tolerante à seca e às altas temperaturas. É uma alternativa viável para a produção de etanol devido ao alto teor de carboidratos fermentáveis e ao baixo custo de insumos para o cultivo (LINTON *et al.*, 2011).

Em relação à possibilidade de aumento da produção, surgem microdestilarias como forma alternativa de descentralização da fabricação em meio a inúmeras plantas industriais de fabricação de etanol. Nos modelos de mini usinas, as unidades têm capacidade de produção de até 20000 litros de etanol hidratado por dia. Elas utilizam, em geral, cana-de-açúcar ou sorgo sacarino como matéria prima para biomassa e representam boa alternativa para a implantação

de um programa de álcool com finalidades energéticas, com grande alcance nacional, a custos relativamente reduzidos (MICHEL Jr., 2010). De um ponto de vista mais amplo, o qual inclui os aspectos social, econômico e ecológico, a produção em pequena escala representa um caminho viável, com o intuito de suprir demandas regionais, diminuir a concentração de terras, diminuir gastos de transportes até centros consumidores e contribuir para o aporte financeiro dos produtores rurais.

2.3 Colunas de destilação

A fermentação de biomassas convencionais a base de açúcares e amido geram um mosto com teor de etanol em torno de 10% (v/v), enquanto a fermentação de substratos celulósicos gera um mosto com concentração em torno de 5% (v/v) (HAELSSIG *et al.*, 2011). Para a utilização como combustível, o etanol deve ser purificado até corresponder às especificações mínimas exigidas por regulamentação. De acordo com a resolução nº 7 da ANP (2011), o etanol anidro combustível deve ter concentração mínima de 99,6% (v/v), enquanto o etanol hidratado combustível deve ser entre 95,1% (v/v) e 96,0% (v/v).

O etanol e a água formam uma mistura azeotrópica à concentração de aproximadamente 95,6% (v/v), ou 0,894 (mol de etanol/mol de solução), à temperatura de 78,2°C. Quando um azeótropo é evaporado, o vapor resultante tem a mesma relação entre os componentes que a mistura original na fase líquida. Essa característica impede que simples colunas de destilação produzam etanol anidro, necessitando de alguns processos e técnicas adequadas para atingir essa especificação. Os métodos para desidratação do etanol mais comumente utilizados são a destilação extrativa e azeotrópica, a destilação a vácuo e os processos com membranas moleculares (HAELSSIG *et al.*, 2011; KUMAR *et al.*, 2010). De acordo com Lee e Pahl (1985), o processo de obtenção do etanol anidro por destilação extrativa ou azeotrópica envolve três etapas: a primeira é a obtenção do etanol a partir do mosto fermentado até a composição do azeótropo; a segunda é a destilação extrativa ou azeotrópica usando um componente para quebrar o azeótropo e remover a água remanescente; e a terceira é a separação do terceiro componente para que seja reciclado.

A coluna de destilação, apesar de possuir elevado consumo de energia e, conseqüentemente, baixa eficiência termodinâmica, é o equipamento mais utilizado tanto para

a produção de etanol hidratado quanto para a produção de etanol anidro, em termos de destilação azeotrópica ou extrativa. O princípio de separação é baseado nas diferenças de volatilidade das substâncias que compõe a mistura. Vapores são produzidos mediante o aquecimento da base da coluna, onde se localiza o refeedor, também chamado de destilador. À medida que esses vapores ascendem pelo interior da coluna, são enriquecidos com o componente mais volátil, até serem condensados no condensador. Por outro lado, a porção líquida que desce pelo interior da coluna é enriquecida com o componente menos volátil e se concentra na base da coluna. O condensado formado no topo da coluna é dividido em duas porções: uma é retirada como produto final da destilação e a outra retorna à coluna na forma de refluxo.

As colunas possuem diversas classificações. As principais estão relacionadas com o método de separação e com o regime de operação. O método de separação depende da configuração interna da coluna, a qual pode ser composta por pratos ou recheios. Já o regime de operação pode ser classificado como contínuo, semicontínuo ou descontínuo.

A separação de misturas por destilação depende principalmente da superfície de contato entre o líquido e o vapor. Existe uma grande variedade de dispositivos de contato líquido-vapor, porém os mais usados são os pratos, os recheios randômicos e os recheios estruturados. A escolha entre uma coluna com recheio ou uma coluna com pratos é baseada, principalmente, em aspectos econômicos, na eficiência de contato, além de considerar a capacidade de carga e a queda de pressão em cada situação (SIMONS, 2007).

Durante as últimas duas décadas, colunas recheadas estruturadas têm sido amplamente utilizadas em processos de transferência de massa como destilação e absorção. Isso se deve ao fato de essa estrutura proporcionar uma maior área de contato, melhor desempenho hidráulico, menor queda de pressão e maior capacidade de carga em comparação com recheios randômicos ou colunas com pratos. Os recheios estruturados são feitos sob medida para um determinado diâmetro e se constituem de chapas, em geral metálicas, corrugadas e dispostas paralelamente umas às outras. Recheios estruturados com área superficial específica aparente entre 125 e 350 m²/m³ são muito utilizadas em indústrias, chegando a 700 m²/m³ em alguns casos específicos (WANG *et al.*, 2006).

Os recheios do tipo randômico ainda são muito utilizados em processos de transferência de massa. São recheios discretos, com forma geométrica bem definida, como cilindros e selas, os quais são colocados de forma aleatória na coluna. O tipo mais comum deste recheio é o anel de *Raschig*, o qual vem sendo aperfeiçoado desde o início do século

XX. A configuração atualmente utilizada possui aspectos semelhantes aos recheios estruturados, aliado a vantagens na transferência de massa encontrada em colunas com pratos. Porém, em casos onde a razão entre o diâmetro da coluna e o tamanho nominal do recheio for maior que 20, ou em casos onde o leito da coluna possuir grande altura, ocorre uma queda na eficiência da transferência de massa. Uma das causas é a má distribuição do recheio, o que faz com que o líquido escoe preferencialmente pelas paredes da coluna. Uma vez na parede, o líquido desce de forma mais rápida, e como resultado a eficiência na transferência de massa diminui (SCHULTES, 2003).

A coluna de destilação de pratos possui o interior dividido em diversos pratos, ou bandejas, as quais estão, geralmente, espaçadas por distâncias iguais. Os produtos vaporizados sobem por aberturas nas bandejas e o líquido desce por outras aberturas, em contracorrente com o vapor que sobe. Os três principais tipos de bandeja são as bandejas com borbulhadores, os pratos perfurados e os pratos valvulados. As bandejas com borbulhadores são compostas por uma ou mais chapas, com furos, nas quais são montados os borbulhadores. Estes, por sua vez, são constituídos de uma parte cilíndrica, colocada verticalmente em cada furo, de uma campânula e de um sistema de fixação deste conjunto à bandeja. Por outro lado, nos pratos perfurados os borbulhadores são substituídos por orifícios, os quais são dimensionados de maneira a permitir a passagem dos vapores no sentido ascendente, sem deixar o líquido descer. Já os pratos valvulados contêm furos, nos quais são colocadas válvulas. Essas válvulas variam sua abertura de acordo com o fluxo de vapor, não permitindo o vazamento de líquido.

As colunas de pratos são amplamente utilizadas em processos de separação desde o século XIX. Os principais estudos feitos para caracterizar esses dispositivos são de natureza hidrodinâmica. Os detalhes dos processos hidrodinâmicos são extremamente complexos e ainda não são completamente compreendidos, porém o fato de serem equipamentos robustos dispensa esse entendimento. A compreensão dos fenômenos hidrodinâmicos das fases líquida e vapor nos pratos são, no entanto, úteis para o ajuste e otimização de projetos de pratos modernos, de modo a aumentar a capacidade e eficiência de separação dos compostos (HIRSCHBERG *et al.*, 2005).

Algumas alterações na configuração dos pratos estão sendo propostas com o objetivo de melhorar a transferência de massa e a hidrodinâmica. Em pratos com leve inclinação, promotores de escoamento na saída dos vertedouros (*downcomers*) e válvulas melhoram o escoamento do líquido sobre o prato. Com isto se admitem altas vazões de líquido e vapor em relação a pratos convencionais e a eficiência da transferência de massa entre as fases vapor e

líquida é aumentada. Domingues (2005) estudou pratos de destilação com escoamento em contracorrente, conhecidos como pratos de *dualflow*, onde o líquido e o vapor passam de um prato ao outro através dos mesmos furos, sem a presença de vertedouros específicos. Constatou-se que, apesar de poder ser hidráulicamente instável, esta configuração diminui problemas de incrustações, bem como perda de carga é menor e a capacidade de carga é maior, pois o escoamento se dá em toda a seção transversal da coluna.

Em termos de classificação quanto ao regime de operação, as colunas são divididas, basicamente, pelo método de alimentação da solução que se quer separar. A destilação descontínua, também chamada de destilação batelada, ocorre com uma única carga inicial, a qual deve ser destilada até ser obtido o produto na quantidade e pureza que se deseja. O processo semicontínuo, ou semibatelada, é semelhante ao processo descontínuo, com a diferença de a coluna ser alimentada de maneira contínua ou discreta, a fim de se obter o produto final nas condições desejadas. Por fim, o processo contínuo é aquele onde há a alimentação contínua da matéria prima a ser destilada, em condições de temperatura e composição adequadas ao processo.

A destilação descontínua é uma operação unitária muito eficiente, a qual permite o fracionamento de uma mistura multicomponente em seus constituintes puros em uma única coluna. Devido a sua flexibilidade e a seu baixo custo de investimento, a destilação descontínua está se tornando cada vez mais importante em indústrias que fabricam produtos de química fina e farmacêuticos. No entanto, a destilação descontínua tem algumas desvantagens, tais como demanda de energia elevada e altas temperaturas de operação no recipiente de alimentação. Estes fatores, aliados a tempos de residência elevados, podem levar a degradação térmica das substâncias (WARTER *et al.*, 2004).

A destilação semicontínua é usada em alguns casos específicos, como na destilação reativa e na destilação extrativa. O funcionamento de tais colunas é muito semelhante às colunas de destilação descontínuas, exceto pelo fato de que uma alimentação é introduzida na coluna de um modo contínuo ou semicontínuo (MUJTABA, 2004).

A destilação contínua é uma das técnicas de separação mais amplamente utilizadas na indústria de processos químicos. Um exaustivo conhecimento científico e prático em relação a essa operação unitária foi desenvolvido ao longo das últimas décadas. Nesta configuração, a alimentação se dá de forma contínua, em qualquer etapa intermediária da coluna. Os componentes mais leves da alimentação serão vaporizados, enquanto os componentes mais pesados tendem a descer com o líquido. Os estágios superiores à região de alimentação

formam a seção de retificação da coluna, enquanto os estágios inferiores, a seção de esgotamento. Existem alguns casos onde a coluna pode ter mais de uma corrente de alimentação, quando as regiões de retificação e esgotamento não forem bem definidas (THOMAS, 1999).

2.4 Modelagem de colunas de destilação

A modelagem de colunas de destilação é frequentemente dividida em três grupos: modelagem baseada em primeiros princípios, modelagem empírica e modelagem híbrida. A modelagem fundamental, baseada em primeiros princípios, também chamada de ‘caixa-branca’ ou simplesmente de modelagem termodinâmica, é baseada em propriedades físicas do sistema, através de equações de conservação de massa, energia e quantidade de movimento. A modelagem empírica, também chamada de modelagem ‘caixa-preta’ utiliza os dados de entrada e saída da coluna para estabelecer uma relação entre ambas. Com esta abordagem não é necessário compreender a dinâmica interna da coluna e o esforço computacional pode ser reduzido. Já a modelagem híbrida, ou modelo ‘caixa-cinza’, combina a modelagem fundamental e modelagem empírica, utilizando as vantagens dos dois modelos. Esta seção abordará a modelagem fundamental, apesar de o modelo empírico ser predominantemente utilizado na indústria. O objetivo é compreender a dinâmica das colunas de destilação, visto que modelos ‘caixa-preta’ não são usados para prever o comportamento do sistema para diferentes condições de funcionamento (TRUONG *et al.*, 2010).

A destilação descontínua é uma importante operação frequentemente utilizada para a produção em pequena escala. Sua característica mais importante é a flexibilidade, que permite lidar com as incertezas do material alimentado e as especificações do produto. Um arranjo simples de uma coluna de destilação descontínua de pratos é apresentado na Figura 2.6. Consiste, basicamente, em três partes: um reservatório localizado na base, onde é inserida a carga inicial da coluna; a coluna de retificação, composta por pratos e acoplada a um sistema de condensação parcial ou total; e, por fim, o acumulador, onde é armazenado o produto da destilação (MUJTABA, 2004, DIWEKAR, 1995).

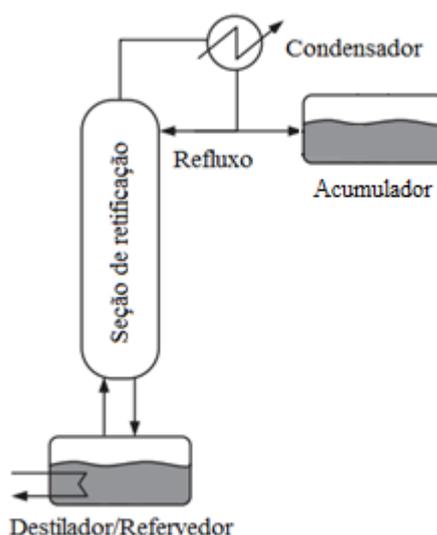


Figura 2.6 – Representação de uma coluna de destilação descontínua

Fonte: MUJTABA (2004); DIWEKAR (1995)

A alimentação é inserida na base da coluna, onde se localiza o destilador, e, então, é aquecida para que ocorra o fluxo ascendente de vapor. À medida que o vapor formado no destilador avança ao longo dos pratos, fica mais rico no componente mais volátil (fase leve), até chegar ao topo e ser condensado. Após a condensação no topo da coluna, o produto pode retornar à coluna ou pode ser retirado como produto final. Quando o produto é retornado à coluna, é misturado novamente com o vapor. Isto permite uma transferência de massa adicional dos componentes da fase mais volátil para a fase vaporizada e, como consequência, a corrente de vapor se torna mais rica do mais volátil, e a de líquido, do menos volátil. O retorno de líquido à coluna é chamado de refluxo, e a razão entre o destilado formado e o líquido que retorna à coluna é chamada de razão de refluxo (MUJTABA, 2004).

A modelagem de colunas de destilação depende de suas características. A destilação contínua e descontínua diferem, por exemplo, em termos de alimentação da coluna. Por outro lado, as colunas com pratos e com recheios possuem diferentes métodos de avaliação da transferência de massa, em função de a distribuição espacial ser muito mais complexa em colunas com recheio (TABRIZI e EDWARDS, 1992).

De acordo com Keller e Górak (2013), existem diversas combinações de modelos, as quais podem envolver mecanismos de transferência de massa, reações químicas e comportamento hidrodinâmico. Em geral, no entanto, as diferentes combinações são classificadas em modelos de estágios de equilíbrio e modelos de estágios de não equilíbrio,

dependendo da forma com que a transferência de massa entre a fase líquida e a fase vapor é estimada. A precisão dos resultados da simulação depende muito da qualidade dos parâmetros utilizados no modelo. Quanto mais complexo o modelo, mais parâmetros são necessários. Conseqüentemente, um maior aprofundamento no modelo nem sempre é a melhor escolha, pois o acesso a alguns parâmetros e os eventuais custos de sua determinação devem ser considerados na modelagem.

Para melhorar a economia, flexibilidade, operacionalidade e segurança de processos baseados em colunas de destilação, o projeto deve considerar tanto o comportamento estacionário quanto o dinâmico. Na fase de concepção, a simulação dinâmica é necessária para determinar as respostas às perturbações dinâmicas no processo, tais como níveis dos reservatórios, quantidade de produto formado, composição do produto formado, bem como a seleção e localização dos sensores e atuadores de controle. A modelagem dinâmica também pode identificar se as metas de produção podem ser alcançadas, e detectar sistemas de controle que são ou não são adequados para atender as especificações desejadas (KOOIJMAN, 1995).

A modelagem de colunas de destilação se iniciou em 1893, quando Sorel, por meio de cálculos do estágio de equilíbrio, representou a destilação em estado estacionário. Estas equações incluíam balanços parciais e globais de matéria e de energia, responsáveis pelas transferências de massa e de calor (KOOIJMAN, 1995; NOERES *et al.*, 2003). O primeiro modelo de destilação descontínua foi proposto em 1902 por Rayleigh (1902), e consiste em um único estágio de equilíbrio onde o vapor é removido do destilador durante um intervalo de tempo determinado e é condensado no condensador.

Os primeiros trabalhos com metodologias propostas para a solução de sistemas de separação modelados prato a prato surgiram na década de 30. Somente a partir da década de 50, com o surgimento do computador digital, foram realizados investimentos sólidos no desenvolvimento de novos algoritmos e simuladores. Apesar deste investimento, apenas alguns modelos simplificados eram utilizados nas simulações, devido à baixa capacidade de processamento. Distefano (1968) apresentou um sistema de equações diferenciais para representar a dinâmica de colunas de destilação batelada multicomponente, servindo de base para muitos trabalhos desde então. A partir da década de 70, os primeiros simuladores comerciais começaram a ser introduzidos na indústria e o desenvolvimento de modelos rigorosos não parou mais (KISTER, 1992; STAUDT, 2007).

Staudt (2007) propôs a divisão de modelos de colunas em rigorosos ou reduzidos. Dentro dos modelos rigorosos estão os modelos de não equilíbrio e os de equilíbrio. Os modelos de não equilíbrio consideram a hipótese de não haver equilíbrio termodinâmico entre a fase líquida e a vapor, gerando um sistema mais complexo, que é modelado, quase que invariavelmente, a partir das equações de Maxwell-Stefan. Os modelos de equilíbrio, como se pode deduzir, são baseados nas relações de equilíbrio químico, térmico e mecânico. Por fim, os modelos reduzidos contêm simplificações e aproximações para facilitar a resolução do sistema, o que diminui, por vezes, a precisão do modelo.

Jain e colaboradores (2012) mostraram que modelos reduzidos possuem significativa diferença em relação aos modelos rigorosos e semirrigorosos, sendo que os modelos reduzidos apresentam os piores resultados, porém um menor tempo computacional. Baur *et al.* (2000) compararam modelos de equilíbrio e não equilíbrio para colunas de destilação reativas. O design e a operação de colunas reativas são mais complexos que os envolvidos em reatores ou colunas de destilação convencionais. Observou que para estes casos se deve recorrer a modelagens de estágios de não equilíbrio para dimensionar as complexas interações de transferência de massa entre as fases líquida e vapor. Por outro lado, a relativa simplicidade de colunas de destilação convencionais permite que o modelo de equilíbrio seja capaz de representar satisfatoriamente a dinâmica da transferência de massa em cada estágio.

Um modelo de estágio de equilíbrio é apresentado na Figura 2.7. Em cada estágio se têm as entradas de líquido (L) e de vapor (V) dos pratos adjacentes, assim como, eventualmente, pode existir a entrada de uma alimentação adicional, cada uma contendo suas respectivas composições e cargas térmicas. Deste mesmo estágio saem vazões de líquido e de vapor, depois de atingir o equilíbrio. O equilíbrio termodinâmico é alcançado quando são satisfeitas as condições de equilíbrio químico, térmico e mecânico do estágio. O equilíbrio químico ocorre quando há a igualdade entre as fugacidades (\hat{f}_i), o térmico se dá pela igualdade de temperaturas (T) e o mecânico pela igualdade de pressão (P) entre a fase líquida e a fase vapor, representados pelas equações 2.1, 2.2 e 2.3, respectivamente (HENLEY e SEADER, 1981; STAUDT, 2007; SIMONS, 2007).

$$\hat{f}_i^L = \hat{f}_i^V \quad (2.1)$$

$$T^L = T^V \quad (2.2)$$

$$P^L = P^V \quad (2.3)$$

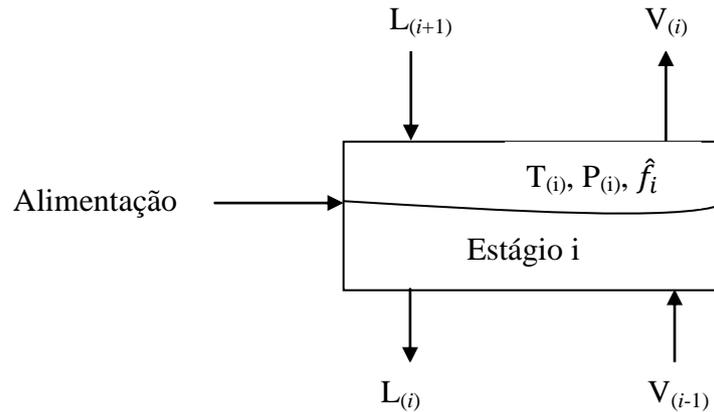


Figura 2.7 – Modelo de estágio de equilíbrio

Fonte: KISTER (1992); SIMONS (2007)

Na tentativa de se obter um modelo detalhado do comportamento dos fluidos em um prato devem ser feitas algumas suposições a fim de não torná-lo extremamente complexo. Considerar que o líquido e o vapor são uma mistura perfeita, que o estágio esteja em equilíbrio térmico e sem gradientes de temperatura, bem como que a pressão do prato seja constante, são algumas considerações que podem ser feitas no sentido de simplificar o modelo (DIWEKAR, 1995; MUJTABA, 2004). As simplificações estão relacionadas com o tamanho e a complexidade do problema, com a relação entre o tempo para simulação e o tempo real da batelada, com a rapidez, disponibilidade e confiabilidade de um método de integração numérica e com a capacidade do computador a ser utilizado. Além disto, deve-se observar qual é a influência nos resultados das simulações.

Muitos modelos de processos de destilação disponíveis possuem simplificações, principalmente no fato de considerar a pressão, o acúmulo e o fluxo interno de líquido e de vapor constantes. Zhu (2010) propôs um modelo rigoroso, considerando estas variações, e obteve resultados com grande precisão quando comparados a valores experimentais, mesmo não considerando perdas de calor e o acúmulo de vapor em cada prato. Por outro lado, Choe e Luyben (1987) concluíram que, para colunas de destilação que operam em alta pressão, o

acúmulo da fase vaporizada em cada estágio não pode ser desprezado e, ainda, que em colunas de baixa pressão, a pressão deve ser calculada ao longo da coluna, pois tem grande influência na temperatura em cada estágio.

2.5 Simulação de colunas de destilação

A integração numérica do sistema de equações algébrico-diferenciais (EADs) formado pela modelagem da destilação descontínua é uma das etapas mais críticas da simulação dinâmica do processo. De acordo com Diwekar (1995), são equações diferenciais de matéria e energia, em termos de composição e entalpia, para cada estágio, além de equações algébricas para o cálculo de fluxos internos de vapor e líquido, para o cálculo da razão de refluxo, para o cálculo dos modelos termodinâmicos, entre outras relações.

Um típico sistema de equações algébrico-diferenciais de uma coluna de destilação consiste em um grande e esparso conjunto de equações diferenciais e de equações algébricas lineares e não lineares. As não linearidades são geradas no cálculo das propriedades termodinâmicas, como a fugacidade e entalpias, dependentes das temperaturas. Geralmente o sistema de equações diferenciais formado possui autovalores bem diferentes. Estes sistemas são conhecidos por sistemas rígidos (*stiff*). Na destilação descontínua o sistema é frequentemente muito rígido, devido ao alto valor das entalpias, volatilidades relativas, ou às grandes diferenças entre os acúmulos nos pratos e no destilador ou acumulador. O sistema possui equações diferenciais de resposta rápida, a exemplo das variáveis hidráulicas que são da ordem de segundos, e equações diferenciais de resposta lenta, relacionadas à resposta dinâmica das composições, que são na ordem de minutos ou horas. Se um método de integração não rígido for utilizado para resolver um sistema rígido, o passo de integração deverá ser pequeno para manter a estabilidade. Diminuindo o passo de integração, maior será o tempo computacional (LUZ Jr., 1993).

O maior problema encontrado na simulação de sistemas de equações algébrico-diferenciais reside na etapa de inicialização das variáveis envolvidas (BISCAIA Jr e VIEIRA, 2000). Define-se o índice diferencial do sistema de equações algébrico-diferenciais (EADs) como sendo o número mínimo de vezes que esse sistema de equações deve ser diferenciado até ser transformado em um sistema de equações diferenciais ordinárias (EDOs), o qual, por

definição, possui índice 0. A inicialização é dita consistente quando os valores das variáveis e de suas derivadas no tempo inicial satisfazem ao sistema estendido correspondente. Assim, não basta que o sistema original seja satisfeito, mas também as equações criadas pelas diferenciações e manipulações algébricas efetuadas no sistema original, com o objetivo de transformá-lo num sistema de EDOs, sejam satisfeitas no tempo inicial. Portanto, os sistemas com índice superior (maior que 1) e mesmo alguns de índice 1 devem ser inicializados de forma consistente, caso contrário os códigos numéricos disponíveis para a solução de EADs não conseguem convergir ou apresentam desempenho ruim.

De acordo com Kooijman (1995) podem ser utilizadas duas abordagens para a resolução de sistemas de EAD. Uma delas consiste em resolver separadamente as equações algébricas e as equações diferenciais, chamado de resolução sequencial. Embora possa parecer vantajoso, pois os dois sistemas resultantes têm menor dimensão, este método não é rigoroso, e pode levar a obtenção de um falso transiente. A outra abordagem é integrar todo o sistema de equações diferenciais e algébricas simultaneamente, chamada de resolução simultânea. Ranzi e colaboradores (1988), ao propor a simulação dinâmica de colunas de destilação, afirmam que a estratégia de resolver primeiramente um sistema algébrico e em seguida as equações diferenciais é menos eficiente que a resolução simultânea, em termos computacionais, porém é um método mais robusto e pode ser indicado para a simulação de partidas de colunas de destilação (*startup*).

Existem dois principais tipos de métodos de resolução destes sistemas: métodos múltiplos passos e métodos de passos simples. Os métodos de passos simples dependem somente do passo de integração imediatamente anterior, e, como sugere o nome, os métodos multipassos dependem múltiplos passos de integração anteriores ao passo calculado, tornando esse método mais realista que o de passo simples. Os principais métodos multipassos são os chamados métodos de diferenciação regressiva (BDF – *Backwards Differentiation Formula*), onde o mais usado é o código DASSL, desenvolvido por PETZOLD (1982). Já os métodos de integração numérica de passos simples mais conhecidos são o método de Euler e o de Runge-Kutta.

Kooijman (1995) citou algumas vantagens e desvantagens do uso de métodos de diferenciação regressiva em comparação com o método Runge-Kutta. Apesar de possuir um código mais complicado e de o cálculo do passo não ser tão simples quanto para o método de Runge Kutta, os métodos de diferenciação regressiva possuem fácil estimação de erro de truncamento e requerem um reduzido número de cálculo de funções e suas derivadas a cada

passo. Ainda, a integração numérica de passos simples pode gerar um inconveniente devido à necessidade de se utilizar passos de integração muito pequenos para garantir a estabilidade do método e assim aumentar o tempo computacional.

Os primeiros métodos de solução de sistemas de equações algébrico-diferenciais surgiram no início da década de 70. Gear (1971) foi o primeiro a apresentar um algoritmo para a resolução destes sistemas, o qual usou códigos adaptados para a solução de equações diferenciais ordinárias. Hindmarsh (1980) criou o integrador LSODI, o qual é apropriado para resolver qualquer sistema implícito de equações diferenciais ordinárias ou sistemas de equações algébrico diferenciais. Petzold (1982) propôs a solução implícita de sistemas de equações algébrico diferenciais com o uso do código DASSL. O código DASSL é semelhante ao LSODI, visto que também é um método que utiliza a diferenciação regressiva para fazer avançar a solução de um intervalo de tempo para o intervalo seguinte. No entanto, existem diferenças significativas entre estes dois códigos, tanto na forma como são utilizados quanto nas estratégias internas de cálculo da solução.

Desde a década de 80, os métodos de integração e os computadores tiveram muitos avanços, contribuindo para a solução de sistemas algébricos diferenciais de colunas de destilação. Holland e Liapis (1983) utilizaram o método proposto por Gear (1971) e o método de Runge Kutta para a resolução de problemas de simulação dinâmica envolvendo colunas de destilação contínuas. Skjellum e Morari (1990) utilizaram o código DASSL, adaptado a multiprocessadores, para a resolução do sistema de equações diferenciais resultantes da simulação dinâmica de uma coluna de destilação. Reis e colaboradores (2006) utilizaram o código DASSL para resolver o sistema de equações gerado na modelagem de uma coluna de destilação azeotrópica. Jain e colaboradores (2012) utilizaram o código DASSL para a solução de modelos rigorosos, semirrigorosos e reduzidos de sistemas de colunas de destilação batelada.

Alguns trabalhos tratam da simulação da partida ou parada de colunas de destilação. Nessas situações, a planta está longe de seu estado normal de produção, com grande alteração nas variáveis termodinâmicas e hidráulicas da coluna, tornando sua resolução mais complicada. De acordo com Ruiz e colaboradores (1988), a operação de partida de uma coluna pode ser dividida em três etapas distintas: a fase descontínua, caracterizada por grandes variações de pressões e temperaturas específicas; a fase semicontínua, onde a temperatura e a pressão apresentam comportamento altamente não linear; e a fase contínua, sendo a fase final da partida, a partir da qual a operação da coluna atinge o estado

estacionário. De acordo com este mesmo autor, a fase mais crítica é a semicontínua, onde a coluna passa da operação do refluxo total para o refluxo de operação, a fim de manter um estado estacionário específico. Wang e colaboradores (2003) simularam a partida de uma coluna de destilação em batelada a partir do estado frio, validando o modelo com uma coluna de destilação em escala piloto. Já Wozny e Li (2004) validaram um modelo de partida de uma coluna e, assim, avaliaram a razão de refluxo e as taxas de calor no destilador, com a finalidade de diminuir o tempo de partida e de evitar grandes desperdícios com produtos fora de especificação.

2.6 Controle de colunas de destilação

A teoria de controle pode ser dividida em dois grandes grupos: teoria de controle clássica e teoria de controle moderna ou avançada. Essa divisão se deu, basicamente, devido a possibilidade utilização da computação a partir da década de 1960, a qual proporcionou a solução de sistemas mais complexos. O controle clássico utiliza métodos de resposta de frequência, desenvolvidos por Bode e Nyquist, e do lugar das raízes, desenvolvido por Evans, para projetar sistemas em malha fechada satisfazendo requisitos de robustez. As principais características desta teoria são o uso de modelos mais simplificados, com uma entrada e uma saída (SISO – *single input, single output*), e o uso da transformada de Laplace como principal ferramenta de trabalho. As leis de controle predominantes, as quais são utilizadas até hoje, são pertencentes à família do PID, introduzido originalmente por N. Minorsky em 1922 (OGATA, 2000). Já a teoria de controle moderna surgiu com a possibilidade de se utilizar o computador para resolver sistemas complexos no domínio do tempo, bem como com a necessidade de solucionar problemas não lineares e multivariáveis (MIMO – *Multiple input, multiple output*) resultantes de processos industriais. A abordagem de sistemas passou a ser descrita no domínio de tempo conhecido por espaço de estados, o qual possibilita a resolução de sistemas não lineares e multivariáveis (LONGHI, 2001).

O controle em colunas de destilação é amplamente estudado. Este processo de separação permite desde a implementação de técnicas convencionais até a de algoritmos avançados, onde a questão mais importante é evitar desvios de operação, estabilizando o perfil da coluna. De acordo com Seader e Henley (2006), a concepção de uma coluna de destilação

descontínua pode ser complexa. Dois aspectos principais devem ser considerados: os produtos a serem obtidos e o sistema de controle a ser utilizado. Os parâmetros básicos são o número de pratos, a quantidade de carga inicial no destilador, a quantidade de calor e a razão de refluxo variável no tempo.

Devido ao grande gasto energético, Campos e Teixeira (2009) citam que o grande desafio dos engenheiros de automação e otimização é projetar sistemas de controle para colunas de destilação que garantam a qualidade dos produtos com um consumo mínimo de energia. A estratégia de controle dependerá da configuração da coluna de destilação e do produto que se queira produzir. Ao contrário da destilação contínua que opera em regime estacionário, a destilação em batelada é uma operação intrinsecamente transiente, pois as condições de operação se modificam conforme a quantidade do componente mais volátil se esgota na base da coluna de destilação. A falta de alimentação contínua no equipamento descontínuo torna os perfis de temperatura e composição instantâneos ao longo da coluna, podendo exigir sistemas de controle diferenciados. Portanto a operação em batelada é caracterizada por obter um produto no topo da coluna de composição variável ao longo da operação, quando opera à razão de refluxo constante.

De acordo com Kister (1990) o controle de colunas de destilação trabalha em cima de três princípios básicos: manter a operação da coluna em uma condição estável; regular as condições da coluna para que os produtos alcancem as especificações requeridas; e, por fim, alcançar esses dois objetivos anteriores de maneira mais eficiente. Isso significa maximizar a recuperação de produto, minimizar o consumo de energia, e, muitas vezes, essas condições ao mesmo tempo.

As variáveis de uma malha de controle são divididas em controladas ou manipuladas. Variáveis controladas, ou variáveis do processo, são quaisquer quantidades, propriedades ou condições físicas medidas com o objetivo de efetuar a indicação ou o controle do processo. Variáveis manipuladas são as grandezas operadas com a finalidade de manter a variável controlada no valor desejado. Bequette (2010) descreve como principais variáveis controladas no controle de colunas de destilação a pressão, a temperatura, os níveis dos reservatórios e as composições de topo e de fundo da coluna. Já como variáveis manipuladas a energia fornecida ao destilador e retirada no condensador, bem como a razão de refluxo.

De acordo com Luyben (1999) a escolha da estrutura de controle é muito mais importante que a escolha do algoritmo de controle (P, PI, PID, MPC...), ou que a escolha do método de sintonia (*Ziegler e Nichols, Cohen e Coon, ITAE...*). Kister (1990) cita algumas

estratégias na automação em colunas de destilação, tais como o controle do destilador, o controle do condensador ou da pressão da coluna, o controle da temperatura e da composição e o controle da razão de refluxo. Os controles do condensador e do destilador regulam a entrada e saída de energia. Esses controles devem responder adequadamente a mudanças na coluna, minimizando a transmissão de distúrbios e tornando o processo eficiente em termos energéticos. A falha nessas ações de controle conduz à instabilidade da operação. O controle da pressão está associado ao controle do condensador e é considerado um dos controles mais importantes da coluna, sendo fundamental para obter os produtos nas especificações desejadas. Para o controle da composição existem dois principais métodos: o controle da temperatura e o controle por analisador de composição. A medida da temperatura é utilizada com o objetivo de inferir a composição e para isso necessita de um modelo capaz de representar a relação temperatura-composição. Por outro lado, o analisador fornece a composição diretamente, não necessitando de modelos de inferência para obter o resultado. Por fim, o controle da razão de refluxo possibilita estabelecer uma relação entre a qualidade e a quantidade de produto formada, devendo ser adequada a cada estratégia de produção.

A destilação, assim como muitos processos industriais como reações químicas altamente exotérmicas, neutralizações de pH e sistemas em batelada, pode apresentar comportamentos altamente não lineares. Apesar da natureza não linear desses processos químicos, a teoria clássica de controle de processos é baseada em modelos lineares. Assim, para realizar a análise de um sistema por meio de ferramentas clássicas e a sintonia de controladores clássicos como, por exemplo, um controlador PID, é necessário realizar, inicialmente, a linearização do modelo. Existem dois tipos de linearizações: a linearização analítica, que consiste na expansão em uma série de Taylor, truncada no termo de primeira ordem; e a linearização numérica consiste no cálculo das derivadas do modelo em função das variáveis de estado e as variáveis de entrada. Em ambos os métodos de linearização, o objetivo é reescrever o modelo linearizado na forma de espaço de estados. Sendo assim, um modelo inicialmente não linear e multivariável pode ser resolvido tanto pela abordagem clássica, como nos casos da utilização de controladores tradicionais PID, quanto pela abordagem moderna, com a utilização de métodos mais sofisticados, como redes neurais, lógica *fuzzy*, controle preditivo e controle adaptativo.

Fabro e colaboradores (2005) utilizaram técnicas de controle preditivo inteligente para controlar a partida de uma coluna de destilação contínua. Neste trabalho, uma estrutura de controle *fuzzy* foi sintonizada por algoritmos genéticos e redes neurais foram utilizadas para

prever o comportamento do sistema. A eficiência desta estratégia possibilita sua aplicação em processos em geral que tenham como características um grande tempo de resposta, fortes não linearidades entre outras características que dificultam o controle de sistema.

Stenz e Kuhn (1995) compararam a estratégia de controle convencional com a lógica *fuzzy* para o controle de uma coluna de destilação batelada. O controlador convencional foi projetado a partir de métodos de controle lineares e não lineares convencionais. Em ambos os casos, as variáveis manipuladas foram o calor no destilador e a razão de refluxo, e as variáveis controladas foram a composição dos produtos e a carga interna da coluna. A composição dos produtos e a carga interna são medidas indiretamente pela temperatura e queda de pressão ao longo dos estágios, respectivamente. Constatou-se que ambas as estratégias, a convencional e a lógica *fuzzy*, foram eficientes para a automação da coluna de destilação em estudo.

Embora as técnicas de controle avançado forneçam um importante caminho para o controle de colunas de destilação, os controladores de ação PID ainda são amplamente utilizados no controle em indústrias, pois são controladores eficazes e de fácil implementação. Eles possuem muitas funções importantes, entre elas a eliminação de distúrbios no estado estacionário por meio da ação integral e a capacidade de prever o comportamento do processo a partir da ação derivativa. Esses controladores são suficientes para controlar diversos processos, particularmente nos quais os requisitos de desempenho são um pouco mais modestos. De acordo com Astrom e Hagglund (2001), mais de 90% das malhas de controle de processos industriais utilizam controladores da família PID. Em processos químicos, variáveis como temperatura, pressão, vazão, abertura de válvulas entre outras são usualmente controladas por controladores PID. Processos multivariáveis podem ser controlados por controladores PID multivariáveis descentralizados, fazendo-se necessária uma sintonia destes de modo que considere as interações existentes entre diferentes variáveis do sistema.

Ainda que seja muito usado, o controlador PID não funciona satisfatoriamente em algumas aplicações industriais. Segundo Fonseca e colaboradores (2004), as principais causas desse desempenho insatisfatório são: problemas do processo e variações na dinâmica; dificuldades de controle, como não linearidades, interações perturbações e ruídos; erro nas estratégias de controle, sintonia inadequada, problemas em válvulas e atuadores, entre outros. Essa realidade mostra que é importante o desenvolvimento de tecnologia para melhorar o desempenho de malhas de controle utilizando controladores do tipo PID.

Existem vários métodos de sintonia de controladores, dentre os quais: os métodos empíricos, como *Ziegler Nichols* ou *Cohen Coon*; os métodos analíticos, como a técnica do

lugar das raízes; e, por fim, métodos de sintonia baseados em técnicas de otimização (BEHROOZSARAND e SHAFIEI, 2011).

De acordo com Campos e Teixeira (2006), a obtenção do modelo de processos não lineares pode ser feita a partir de uma perturbação na forma degrau na variável manipulada e verificando a resposta da variável controlada. Assim, podem ser extraídos os valores dos parâmetros característicos do processo como o ganho, a constante de tempo e o tempo morto. Para estes tipos de modelo de processo vários métodos de sintonia empíricos de PID típicos foram desenvolvidos para a determinação dos parâmetros do controlador, dentre eles os métodos *Ziegler e Nichols*, *Cohen e Coon*, *ITAE* ou *Kappa Tau*.

Alguns trabalhos na literatura propõem o uso de métodos de sintonia para controladores utilizados em colunas de destilação. Barroso-Muñoz e colaboradores (2007) utilizaram o método de sintonia *Ziegler Nichols* para a sintonia de um controlador PI utilizado em um processo de destilação reativa com acoplamento térmico. O método se mostrou eficaz e foi utilizado com o objetivo de controlar a fração molar do produto a partir da manipulação da realimentação do produto na coluna reativa. O método de *Ziegler Nichols* também foi usado por Nooraii e colaboradores (1997), e se mostrou eficiente para sintonizar um controlador PI empregado em uma coluna de destilação em escala piloto. Já Adel e colaboradores (2009) compararam métodos de sintonia para um sistema de controle descentralizado de uma coluna de destilação binária metanol/água. As variáveis controladas foram as concentrações de metanol no topo e na base da coluna, enquanto as variáveis manipuladas foram o fluxo de vapor e a razão de refluxo. O controlador usado foi do tipo PI, e os métodos de sintonia avaliados foram o *Cohen-Coon*, o *Multiloop*, o *Ziegler Nichols* e o *ITAE*. Os critérios avaliados foram o tempo de estabilização, a sobre-elevação e a oscilação, que, quanto menores, melhores as respostas. Neste caso, o melhor método de sintonia encontrado foi o *ITAE* e o método *Cohen-Coon* foi o que registrou os piores resultados.

Independente da estratégia de controle, do tipo de algoritmo utilizado e do tipo de sintonia aplicado, o controle de colunas de destilação tem a função de manter a operação da coluna de acordo com a estratégia de produção adotada pelo operador. Com isso, busca-se definir a melhor configuração de variáveis controladas e manipuladas, bem como propor a utilização do algoritmo de controle e do método de sintonia mais adequados, satisfazendo requisitos de desempenho, robustez e estabilidade frente a eventuais distúrbios que possam ocorrer na planta.

3. MODELAGEM MATEMÁTICA

3.1 Descrição dos equipamentos utilizados

3.1.1 Coluna de destilação

A modelagem da coluna de destilação foi feita com base em uma coluna de destilação descontínua localizada no colégio politécnico da Universidade Federal de Santa Maria, conforme ilustrado na Figura 3.1. O equipamento é do modelo DBL-600, fabricado pela empresa Limana Poliserviços, com capacidade de produção de 200 litros de etanol por dia (LIMANA, 2008).

A coluna de destilação é composta por um destilador, por 20 pratos e, no topo, por um condensador parcial e um total, acoplados em série. O destilador tem capacidade para até 600 litros de solução hidroalcoólica e é aquecido mediante adição de vapor supersaturado em uma serpentina localizada na sua parte interna. O controle manual de temperatura do destilador pode ser feito mediante manipulação da vazão de vapor na serpentina de aquecimento.

Os estágios intermediários consistem em pratos, os quais possuem calotas do tipo S-90 (Figura 3.2) para a concentração do vapor do etanol, bem como vertedouros (*downcomers*) para o escoamento da fase líquida. Cada prato possui capacidade de armazenamento aproximada de 5 litros de produto.

O pré-condensador, também chamado de deflegmador, consiste em um condensador parcial, o qual tem a função de controlar a vazão de produto de topo que deixa a coluna de destilação, a qual é totalmente condensada no condensador total. Este arranjo utilizado para a

condensação de produto de topo acaba influenciando na vazão de destilado formada, bem como na concentração, uma vez que possibilita o controle da temperatura do topo. Este controle manual de temperatura pode ser feito mediante manipulação da vazão de água de resfriamento no pré-condensador.



Figura 3.1 – Coluna de destilação em estudo



Figura 3.2 – Calota S-90 para a concentração do etanol

Fonte: LIMANA (2008)

Após sair do condensador parcial, a solução é totalmente condensada no condensador total. Ao deixar o condensador total, o líquido condensado desce por meio de um tubo em U, onde uma parte retorna à coluna como líquido refluxado e a outra é retirada como produto final. Este controle manual é feito mediante a manipulação da abertura da válvula de retirada

do produto final. Desta maneira, a razão de refluxo acaba sendo controlada indiretamente por meio da pressão diferencial gerada entre o prato por onde retorna o líquido refluxado, o topo da coluna e a válvula de retirada de produto final.

Sendo assim, as variáveis que podem ser manipuladas são as aberturas das válvulas da vazão de vapor saturado no destilador, da vazão de água de resfriamento no pré-condensador e da vazão de retirada de produto final. Com isso, é possível fazer o controle das temperaturas de base e de topo da coluna, bem como da razão de refluxo e, conseqüentemente, da quantidade destilada. Ainda, o equipamento possui indicadores de temperaturas no destilador, no condensador parcial, no condensador total, bem como indicador de pressão no destilador e de pressão do vapor supersaturado que circula na serpentina de aquecimento. A medição do teor alcoólico do produto é feita com a utilização de um densímetro manual que fornece a graduação *Gay Lussac* ($^{\circ}\text{GL}$) da mistura.

3.1.2 Hardware e Softwares utilizados

A modelagem e o controle da coluna de destilação foram realizados com a utilização do *software* EMSO, juntamente com o aplicativo de *software* VRTherm. A versão do *software* EMSO utilizada foi a 0.9.60.0. O simulador EMSO (*Environment for Modeling, Simulation and Optimization*) é um ambiente gráfico completo onde o usuário pode modelar sistemas complexos, estacionários ou dinâmicos. O método integrador utilizado nas simulações foi o código DASSL (PETZOLD, 1982), já integrado ao *software* EMSO. Ainda, o simulador possui uma biblioteca de modelos aberta, EML, distribuída livremente, a qual possibilita o desenvolvimento de modelos combinados para simulação (SOARES, 2003). Já a inclusão do aplicativo VRTherm[®] (VRTECH, 2005) ao EMSO torna possível a obtenção das propriedades físicas termodinâmicas dos compostos contidos em sua biblioteca, auxiliando na modelagem, simulação e otimização dos processos. O aplicativo fornece propriedades de componentes puros e de misturas a partir de diversas correlações e de modelos como *Redlich-Kwong*, *Peng-Robinson*, *Van der Waals*, entre outros (SMITH *et al.*, 2000).

Já a identificação, a simulação e a sintonia dos controladores utilizados foram feitas com a utilização do *software* MatLab e com a interface deste com o *software* EMSO. O hardware utilizado para as simulações possui as especificações indicadas na Tabela 3.1.

Tabela 3.1 – Características do hardware utilizado

Modelo do processador	<i>Intel® Core™ 2 Duo Processor T6500</i>	
	<i>Clock Speed</i>	2,1 GHz
	<i>L2 cache</i>	2 MB
	<i>FSB speed</i>	800 MHz
Memória RAM	<i>4 GB</i>	

3.2 Modelos termodinâmicos

3.2.1 Modelos de entalpia de mistura

Os modelos para os cálculos das entalpias utilizados foram baseados no trabalho de Llano-Restrepo e Aguilar-Arias (2003). Foram calculadas as entalpias da fase vapor e da fase líquida a partir da temperatura e da composição para a mistura etanol-água. As equações estão representadas no apêndice A.

3.2.2 Modelos de equilíbrio líquido/vapor

A relação de equilíbrio entre a fase líquida e a fase vapor é, provavelmente, a etapa mais importante da modelagem da destilação de uma mistura etanol-água. Este fato se dá devido ao comportamento não ideal desta mistura, dependendo de modelos termodinâmicos para estimar as composições em cada fase, prevendo o azeótropo da mistura formado na concentração de etanol de 0,894 mol/mol (KUMAR *et al.*, 2010).

O equilíbrio termodinâmico pode ser expresso em termos de igualdade de potenciais químicos ou, mais comumente, em termos de igualdade de fugacidades entre a fase líquida e a fase vapor. As fugacidades podem ser expressas em termos de coeficientes de fugacidade (ϕ), preferencialmente para a fase vapor, ou em termos de coeficientes de atividade (γ), preferencialmente para fase líquida.

Neste trabalho, além do equilíbrio de fases considerando misturas ideais, foi estudada a abordagem de equilíbrio γ - ϕ (γ - ϕ). Para o cálculo de γ foram avaliados os modelos de *Van Laar*, *Wilson* e *Margules*, implementados no *software* EMSO, além do modelo UNIFAC modificado (*Dortmund*), presente no aplicativo VRTherm. Para o cálculo de ϕ , foram testados os modelos de *Peng Robinson* e *Redlich Kwong*, ambos presentes no aplicativo de *software* VRTherm.

No apêndice B são apresentados os modelos de cálculo dos coeficientes de atividade pelos modelos de *Van Laar*, *Wilson* e *Margules*, bem como no apêndice C é apresentado o cálculo da pressão de saturação para o etanol e para a água. Tendo em vista que os modelos UNIFAC modificado (*Dortmund*), *Peng Robinson* e *Redlich Kwong* já estão programados no aplicativo de *software* VRTherm, suas equações não serão apresentadas neste trabalho.

3.3 Modelagem da coluna de destilação

O estudo da modelagem de colunas de destilação baseou-se no desenvolvimento de dois modelos, chamados de modelo I e de modelo II. O modelo I foi proposto com a intenção de se avaliar a dinâmica do processo de destilação descontínua, bem como avaliar os modelos termodinâmicos para o equilíbrio entre o líquido e o vapor da mistura etanol-água. Para tanto, foram considerados apenas os balanços de massa ao longo dos estágios de equilíbrio. Então, devido a essa simplificação, o modelo possui fácil inicialização, onde as simulações em quaisquer condições iniciais para as variáveis foram consistentes, ultrapassando esta etapa dificultosa da simulação e fornecendo valores de condições iniciais para a inicialização do modelo II. Já com o modelo II, buscou-se a inclusão dos balanços de energia na base e no topo da coluna de destilação, pois, somente desta maneira, foi possível adequar uma estrutura de controle envolvendo trocas de energia na base e no topo da coluna.

3.3.1. Modelo I

O modelo I compreende a modelagem de uma coluna de destilação descontínua contendo os balanços diferenciais de massa em cada estágio de equilíbrio e as demais

equações algébricas que compõem o modelo. A temperatura em cada estágio é resultado do equilíbrio termodinâmico de fases. A coluna de destilação pode ser dividida em quatro partes principais: o destilador, os estágios intermediários, o condensador e o acumulador, conforme mostra o fluxograma da Figura 3.3. O modelo é composto por 20 estágios intermediários de equilíbrio (20 pratos), além do 1º estágio, correspondente ao destilador, e ao 22º estágio, correspondente ao condensador.

A fim de simplificar o modelo I foram feitas algumas hipóteses, conforme apresentado a seguir:

- i) Acúmulo da fase vapor em cada estágio é desprezível;
- ii) Acúmulo molar da fase líquida constante nos pratos intermediários e no condensador;
- iii) Condensador total sem sub-resfriamento;
- iv) Perdas de energia desprezíveis;
- v) Vazões internas de líquido (L_i) e de vapor (V_i) constantes ao longo da coluna;
- vi) Pressão de operação constante;
- vii) Queda de pressão ao longo da coluna desprezível;
- viii) Mistura perfeita da fase líquida e da fase vapor;

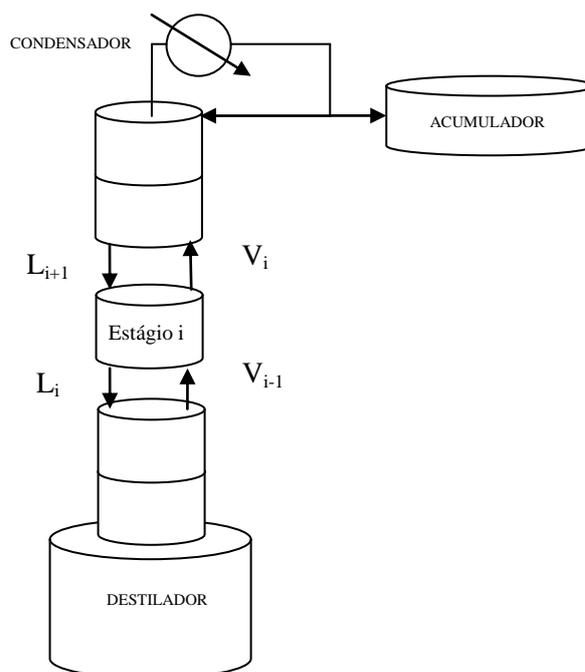


Figura 3.3 – Fluxograma do modelo I para a coluna de destilação descontínua

As equações 3.1, 3.2 e 3.3 representam o cálculo diferencial das composições no destilador, nos estágios intermediários e no condensador, respectivamente. As composições molares das frações líquida e vapor são $x(j,i)$ e $y(j,i)$, respectivamente, onde 'j' refere-se ao componente, e 'i' refere-se ao estágio de equilíbrio. Neste caso, o componente 1 é o etanol, e o 2 a água. Já os estágios de equilíbrio compreendem desde o destilador (1° estágio) até o condensador (22° estágio). V é a vazão de vapor da mistura etanol-água que é formada a partir do destilador, em mol/min. H_D é o acúmulo molar no 1° estágio (destilador), assim como H é o acúmulo molar nos estágios intermediários e H_C é o acúmulo molar no condensador. Ainda, R é o valor da razão de refluxo.

Para o destilador ($i = 1$):

$$\frac{d(x(j,i))}{dt} = \frac{V}{H_D} \cdot (x(j,i) - y(j,i) + \frac{R}{R+1} \cdot (x(j,i+1) - x(j,i))) \quad (3.1)$$

Para os estágios intermediários ($i = 2 \dots 21$):

$$\frac{d(x(j,i))}{dt} = \frac{V}{H} \left(y(j,i-1) - y(j,i) + \frac{R}{R+1} \cdot (x(j,i+1) - x(j,i)) \right) \quad (3.2)$$

Para o condensador ($i = 22$):

$$\frac{d(x(j,i))}{dt} = \frac{V}{H_C} (x(j,i-1) - x(j,i)) \quad (3.3)$$

O modelo possui outras equações, como a equação 3.4 que representa o balanço global da coluna, e as equações 3.5 e 3.6, que representam a quantidade destilada no acumulador (Ac) e a composição de etanol (x_D), respectivamente, do produto final no tanque acumulador. Ainda, ' D ' é a quantidade de destilado formada, a qual é calculada pela equação 3.7.

$$\frac{d(H_D)}{dt} = -D \quad (3.4)$$

$$\frac{d(Ac)}{dt} = D \quad (3.5)$$

$$\frac{d(x_D)}{dt} = \frac{D}{Ac} \cdot (y(1,22) - x_D) \quad (3.6)$$

$$D = \frac{V}{R + 1} \quad (3.7)$$

O cálculo de equilíbrio entre as fases é feito mediante relação de equilíbrio representada na equação 3.8, onde são avaliados os modelos de equilíbrio termodinâmicos. Os coeficientes de fugacidade e atividade são calculados para a temperatura, pressão e composição em que se encontra o estágio. Como estimativa da demanda de energia do processo, a equação 3.9 calcula o total de energia adicionada ao destilador (Q_{Total}) a partir da energia fornecida pelo vapor saturado ($Q_{Fornecido}$), calculada por meio da equação 3.10. A quantidade de energia fornecida é calculada a partir do produto entre a vazão de vapor (V_{Vapor}), em m³/min, e a energia do vapor na serpentina (ΔH_{Vapor}), em kJ/m³. A energia do vapor na serpentina (ΔH_{Vapor}) é calculada pela diferença entre a energia do vapor na entrada e na saída da serpentina, a determinada pressão e temperatura, considerando que a serpentina tenha área de troca térmica suficiente para que toda a massa de vapor se condense.

$$y(j, i) \cdot \phi^{vapor}(j, i) = x(j, i) \cdot \phi^{liquido}(j, i) \quad (3.8)$$

$$\frac{d(Q_{Total})}{dt} = Q_{Fornecido} \quad (3.9)$$

$$Q_{Fornecido} = V_{Vapor} \cdot \Delta H_{Vapor} \quad (3.10)$$

Por fim, as equações 3.11 e 3.12 fazem com que o somatório das composições seja igual à unidade para as frações de líquido e de vapor, respectivamente. Ainda, a equação 3.13 apresenta o cálculo da vazão de vapor (V), em mol/min, da mistura hidroalcoólica formada a partir do destilador, a qual é representada pela razão entre o calor gerado no destilador ($Q_{Fornecido}$), em kJ/min, e a entalpia de vaporização da mistura hidroalcoólica no destilador ($\lambda_{Destilador}$), em kJ/mol, a temperatura, pressão e composição determinadas.

Para cada estágio ($i = 1..22$),

$$\sum_{j=1}^2 x(j, i) = 1 \quad (3.11)$$

Para cada estágio ($i = 1..22$),

$$\sum_{i=1}^2 y(j, i) = 1 \quad (3.12)$$

$$V = \frac{Q_{Fornecido}}{\lambda_{Destilador}} \quad (3.13)$$

Observa-se que a determinação da temperatura em cada estágio foi feita a partir do equilíbrio termodinâmico, onde foi usada a biblioteca de equações do *software* EMSO ou as rotinas de cálculo implementadas neste. Sendo assim, eliminou-se o cálculo da variação de temperatura de forma explícita, sendo esta calculada de forma implícita a partir dos modelos termodinâmicos, necessitando apenas da pressão e da composição, resultante da integração das equações 3.1, 3.2 e 3.3.

A partir da elaboração do modelo I, foram feitas inúmeras simulações com o objetivo de avaliar o comportamento da coluna de destilação descontínua, bem como dos modelos termodinâmicos de equilíbrio entre a fase líquida e a fase vapor. Inicialmente, foi avaliada qualitativamente a dinâmica da coluna de destilação a fim de observar se o comportamento da simulação condiz com o comportamento de uma coluna descontínua. Para tanto, os parâmetros e variáveis utilizados e as condições iniciais do modelo estão representados na Tabela 3.2 e na Tabela 3.3, respectivamente.

A quantidade e a composição inicial no destilador são estimativas aproximadas, tomando como referência a alimentação inicial padrão, a qual é realizada na coluna de destilação em estudo, ou seja, um volume de 600 litros de solução hidroalcoólica, com composição volumétrica em torno de 10°GL. Da mesma maneira, as condições de temperatura e pressão estimadas para a troca de calor na serpentina foram tomadas a partir de condições de operação da coluna de destilação descontínua em estudo.

Tabela 3.2 – Parâmetros e variáveis utilizados no Modelo I

Parâmetro/Variável	Símbolo	Valor/Condições
Pressão da coluna	P	1 atm
Acúmulo nos pratos	H	1000 mol
Acúmulo no condensador	H_C	3000 mol
Razão de refluxo	R	5
Vazão de vapor	V_{Vapor}	5 m ³ /min
Energia trocada na serpentina	ΔH_{Vapor}	Temperatura = 416,05 K Pressão = 4 atm

Tabela 3.3 – Condições iniciais utilizadas no modelo I

Variável	Símbolo	Valor inicial
Quantidade no destilador	H_I	31000 mol
Concentração de etanol no destilador ($i = 1$)	$x(I,i)$	0,033
Concentração de etanol nos estágios intermediários ($i = 2..21$)	$x(I,i)$	0,7
Concentração de etanol no condensador ($i = 22$)	$x(I,i)$	0,8
Quantidade destilada	H_D	1 mol
Concentração do produto destilado	x_D	0.5
Quantidade de energia total gasta no destilador	Q_{Total}	0 kJ/min

A primeira análise a ser feita refere-se ao comportamento do modelo em relação à dinâmica da destilação descontínua em si. Para tanto, analisa-se o comportamento dinâmico considerando a mistura na fase líquida e na fase vapor como ideais, cujo resultado foi apresentado na Figura 3.4.

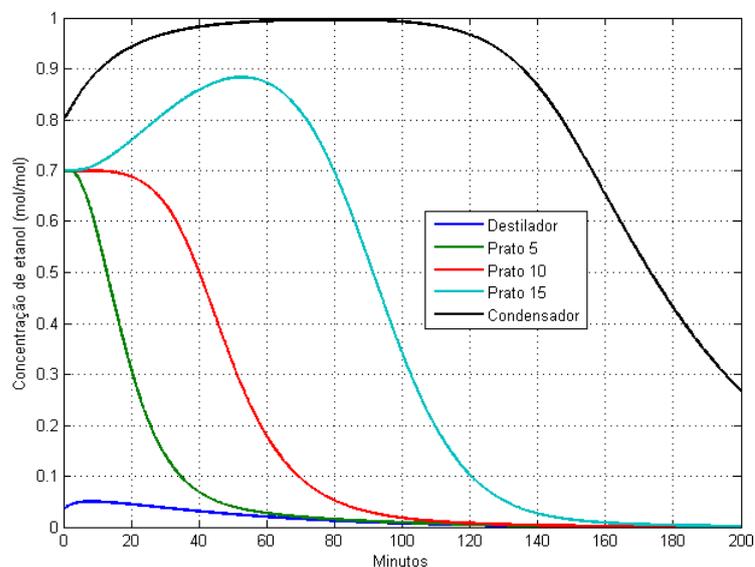


Figura 3.4 – Simulação da concentração nos estágios de equilíbrio para mistura ideal

A destilação descontínua não possui um estado de operação estacionário como na destilação contínua, tendo em vista que na contínua, mantida a mesma alimentação e as variáveis de operação, os estágios de equilíbrio operam nas mesmas condições de temperatura, composição e pressão ao longo da destilação. No caso da destilação descontínua, à medida que se altera a composição no destilador, todas as demais variáveis termodinâmicas dependentes de temperatura, composição e pressão sofrem alterações. Ocorre que esta alteração na dinâmica do equilíbrio líquido-vapor faz com que a operação da coluna de destilação se dê na condição que muitos autores chamam de estado pseudoestacionário, que consiste no período da destilação descontínua que tem início no instante em que os perfis de temperatura e composição se estabilizam, e tem fim a partir do instante em que, em função de se esgotar o composto mais volátil na base da coluna, se desestabilizam.

Pela análise da Figura 3.4, observa-se que o comportamento segue o esperado para a destilação descontínua, onde os perfis de composição do etanol atingem o estado pseudoestacionário e, após esgotamento de etanol na base da coluna, tendem a zero. No entanto, a composição de topo ultrapassa a composição do azeótropo para a mistura etanol-água, o que, na realidade, não ocorre em colunas de destilação convencionais. Sendo assim, o próximo passo é avaliar os modelos termodinâmicos de equilíbrio líquido-vapor. Para tanto,

serão avaliados os modelos contidos no aplicativo de software VRTherm e também os implementados em EMSO.

O objetivo desta etapa do trabalho foi avaliar qual a melhor abordagem para o cálculo de equilíbrio de fases da mistura binária etanol-água especificamente para o modelo da coluna de destilação em estudo. O critério de avaliação utilizado para a escolha do melhor modelo foi a composição correspondente ao azeótropo da mistura. A Tabela 3.4 apresenta um resumo da combinação entre os modelos de equilíbrio de fases utilizados para a simulação do cálculo do coeficiente de atividade do líquido pelo modelo UNIFAC, do cálculo do coeficiente de fugacidade da fase vapor pelos modelos de *Peng Robinson* (PR) e *Redlich Kwong* (RK), bem como a combinação destes com o modelo ideal de uma ou outra fase. Ainda, são avaliados os modelos de *Wilson*, *Margules* e *Van Laar* para o cálculo dos coeficientes de atividade, os quais estão implementados em EMSO. Os resultados das composições de topo para cada combinação são apresentados na Figura 3.5.

Tabela 3.4 – Modelos de equilíbrio utilizados na simulação do modelo I

Modelo	Fase líquida	Fase vapor
ELV 1	UNIFAC	PR
ELV 2	UNIFAC	RK
ELV 3	Ideal	PR
ELV 4	Ideal	RK
ELV 5	UNIFAC	Ideal
ELV 6	Margules	Ideal
ELV 7	Wilson	Ideal
ELV 8	Van Laar	Ideal

A primeira análise que pode ser feita a partir da Figura 3.5 é a de que, nos casos onde a fase líquida foi considerada ideal, o modelo não conseguiu prever o azeótropo de 0,894 mol/mol (KUMAR *et al.*, 2010), o que se observa nos modelos ELV 3 e ELV 4. Já os modelos onde a fase vapor foi considerada ideal, como o apresentado nas curvas ELV 5, ELV

6, ELV 7 e ELV 8, ou nos casos ELV1 e ELV 2, a composição de topo não ultrapassou o azeótropo.

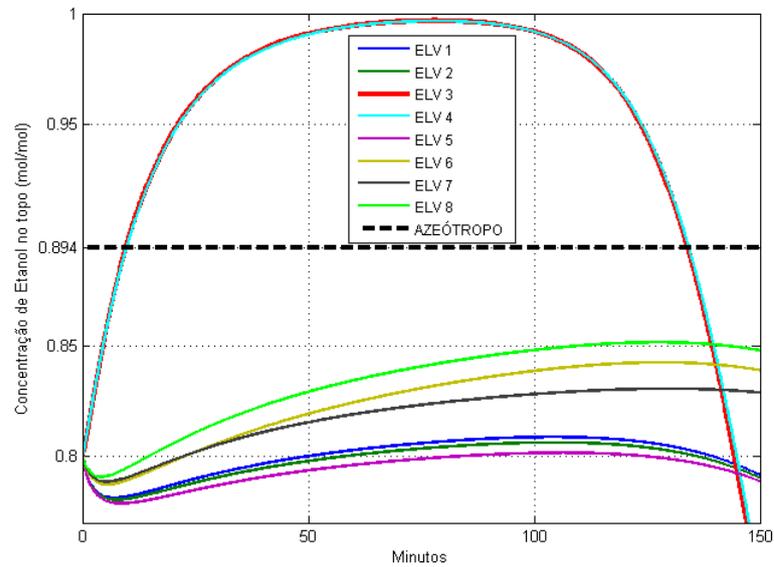


Figura 3.5 – Simulação da composição no topo para os modelos de equilíbrio líquido vapor indicados na Tabela 3.4

Uma vez descartados os modelos ELV 3 e ELV 4, foram testados os demais modelos na condição próxima do refluxo total, ou seja, com um valor para a razão de refluxo muito maior que o utilizado na simulação até então. Com uma grande recuperação de produto, ou seja, com uma razão de refluxo muito alta, o produto de topo é purificado ao seu valor máximo, e, assim, é possível verificar qual é a maior concentração de etanol que pode ser obtida. Para isso, serão utilizados os mesmos valores dos parâmetros e variáveis indicados na Tabela 3.2 e as mesmas condições iniciais da Tabela 3.3, à exceção do valor da razão de refluxo, o qual será alterado de 5 para 500. A Figura 3.6 mostra os resultados da concentração de topo para os modelos de equilíbrio indicados na Tabela 3.4, exceto os modelos ELV 3 e ELV 4.

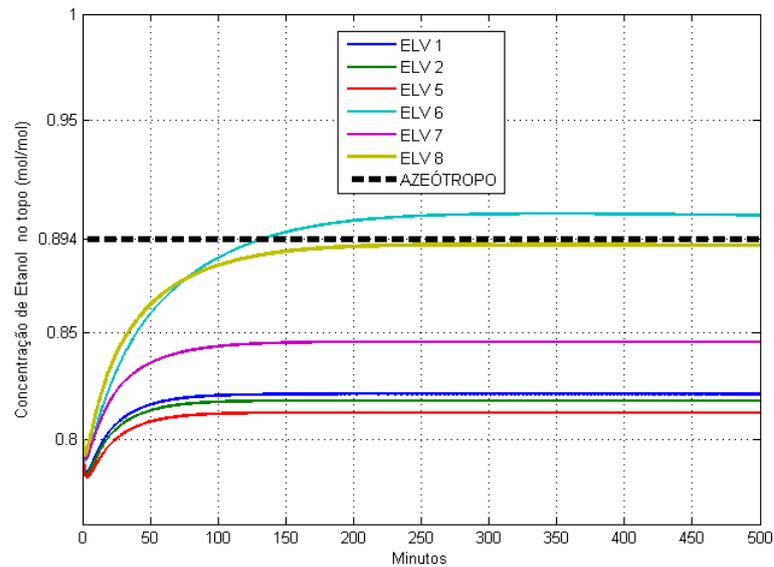


Figura 3.6 – Simulação da concentração de topo para razão de refluxo $R = 500$

A partir da análise da figura 3.6 pode-se observar que a curva ELV 8, representada pelo modelo de *Van Laar*, foi a mais coerente, pois levou a composição de topo a valores muito próximos do azeótropo (0.893 mol etanol/mol solução, enquanto o azeótropo é 0.894 mol etanol/mol solução). Os demais modelos fornecem composições ora acima do azeótropo, como no caso ELV 6 representado pelo modelo de *Margules*, ora muito abaixo do azeótropo, como nos demais casos, o que não é suficiente, pois se espera que a simulação da coluna de destilação com uma razão de refluxo muito alta forme um produto de topo com a concentração próxima a do azeótropo.

Sendo assim, a simulação do modelo da coluna de destilação descontínua com o modelo de equilíbrio líquido-vapor representado pela modelagem termodinâmica de *Van Laar* para o cálculo do coeficiente de atividade foi a que apresentou os melhores resultados, sendo a situação em que se obteve a concentração de topo mais próxima a concentração do azeótropo com o modelo de coluna de destilação em estudo.

3.3.2. Modelo II

O modelo II foi proposto com o intuito de avaliar as quantidades de energia trocadas na base e no topo da coluna, a fim de tornar o modelo mais próximo da coluna de destilação em estudo e, assim, permitir a elaboração de uma estratégia de controle apropriada. A Figura 3.7 mostra o fluxograma que representa o modelo II, composto por 5 partes principais: o destilador, os pratos intermediários (onde NE é o número total de pratos), o pré condensador (deflegmador), o condensador total e o acumulador.

O modelo II possui algumas simplificações, conforme apresentado a seguir:

- i) Acúmulo da fase vapor desprezível;
- ii) Acúmulo molar da fase líquida constante nos pratos intermediários, no pré-condensador e no condensador;
- iii) Condensador total sem sub-resfriamento;
- iv) Perdas de energia desprezíveis;
- v) Pressão de operação constante;
- vi) Queda de pressão ao longo da coluna desprezível;
- vii) Mistura perfeita da fase líquida e da fase vapor;
- viii) Vazão interna de vapor dependente da fração vaporizada no destilador;
- ix) Vazão interna de líquido dependente da fração vaporizada no pré-condensador;

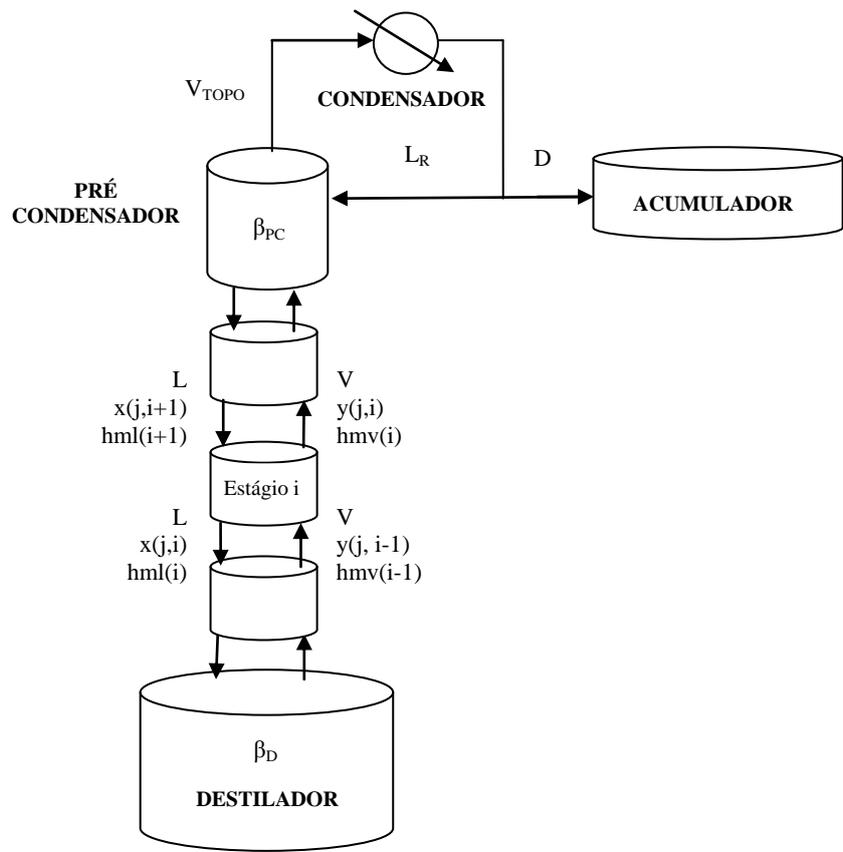


Figura 3.7 – Fluxograma do modelo II para a coluna de destilação descontínua

O modelo II considera as trocas de calor na base e no topo da coluna de destilação. Para tanto o destilador e o pré-condensador são modelados como tanques *flash* dinâmicos com os balanços de massa e energia e as demais equações algébricas, como a equação da fração vaporizada e a da composição das fases resultantes. O objetivo desta abordagem é permitir o cálculo da fração que se encontra no estado vapor e no estado líquido, possibilitando uma estimativa das vazões de líquido e de vapor internas de produto na coluna de destilação. Desta maneira, o modelo II terá a determinação da composição da fase líquida em cada estágio feita a partir do balanço de massa e a determinação da temperatura ocorrerá de duas formas distintas: pelo balanço de energia (no destilador e no pré-condensador) e por meio do modelo termodinâmico de *Van Laar*, tal qual foi utilizado no modelo I (para os demais estágios).

A energia total é dada pela soma da energia interna, cinética e potencial. Para a maioria dos processos químicos onde existem efeitos térmicos, a energia cinética e a energia potencial são desprezadas, pois sua contribuição é muito menor que a da energia interna. Já a energia interna é calculada pela diferença entre a entalpia e o trabalho realizado

(BEQUETTE, 1998). Tendo em vista que neste estudo não são consideradas variações na pressão e no volume, ou seja, o trabalho realizado é nulo, os balanços de energia são calculados somente em termos de entalpias da mistura etanol-água tanto para a fase líquida, designada por $h^l(i)$, quanto para a fase vapor, designada por $h^v(i)$, apresentados no apêndice A. Ainda, os termos ' β_D ' e ' β_{PC} ' indicam a fração que se encontra na fase vapor dada a temperatura, pressão e composição no destilador e no pré-condensador, respectivamente. Estes valores são calculados com o auxílio do pacote termodinâmico *VRTherm*, o qual, além da fração vaporizada, fornece os valores das composições da fase líquida e vapor resultantes. As concentrações molares das frações líquida e vapor são $x(j,i)$ e $y(j,i)$, respectivamente, onde ' j ' refere-se ao componente, e ' i ' refere-se ao estágio de equilíbrio. Da mesma maneira que o modelo I, o componente 1 é o etanol, e o 2 a água, e os estágios de equilíbrio compreendem desde o destilador (1° estágio) até o último prato (estágio NE+1), além do pré-condensador (Estágio NE+2) e do condensador (Estágio NE+3).

O cálculo das vazões molares internas de líquido e de vapor depende das condições do destilador e do pré-condensador, bem como da razão de refluxo de operação. Define-se H_D como sendo o acúmulo molar no destilador. A vazão de vapor (V) é calculada pela equação 3.14 e a vazão de líquido (L) pela equação 3.15, e são consideradas constantes ao longo de todos os estágios internos. Já a vazão de vapor no topo da coluna (V_{TOPO}) é calculada pela equação 3.16, e depende da fração vaporizada nesse estágio. Complementam o cálculo das vazões as equações da vazão destilada (D) (equação 3.17) e da quantidade que retorna por refluxo (L_R) (equação 3.18).

$$V = \beta_D \cdot H_D \quad (3.14)$$

$$L = V + L_R - V_{TOPO} \quad (3.15)$$

$$V_{TOPO} = \beta_{PC} \cdot (V + L_R) \quad (3.16)$$

$$D = \frac{L_R}{R} \quad (3.17)$$

$$L_R = V_{TOPO} - D \quad (3.18)$$

As demais equações do modelo se resumem equações diferenciais de balanço de massa e de energia, bem como a equação global da coluna. As equações 3.19, 3.20 e 3.21 representam o balanço de massa do destilador, o balanço de massa e o balanço de energia no destilador, respectivamente, onde $Q_{FORNECIDO}$ é a quantidade de energia, em kJ/min, adicionada ao destilador.

$$\frac{d(H_D)}{dt} = L - V \quad (3.19)$$

$$\frac{d(x(j, 1) \cdot H_D)}{dt} = L \cdot x(j, 2) - V \cdot y(j, 1) \quad (3.20)$$

$$\frac{d(h^l(1) \cdot H_D)}{dt} = L \cdot h^l(2) - V \cdot h^v(1) + Q_{FORNECIDO} \quad (3.21)$$

A equação 3.22 representa o balanço de massa para os estágios intermediários, onde ‘ H ’ é o acúmulo molar. Uma vez que não é considerado o balanço de energia nestes estágios, suas respectivas temperaturas foram estimadas da mesma maneira que no Modelo I, ou seja, foram calculadas implicitamente por meio do equilíbrio líquido-vapor.

Para os estágios intermediários ($i = 2..NE+1$):

$$\frac{d(x(j, i) \cdot H)}{dt} = L \cdot (x(j, i + 1) - x(j, i)) + V \cdot (y(j, i - 1) - y(j, i)) \quad (3.22)$$

De maneira análoga ao destilador, o balanço de massa e de energia para o pré-condensador são representados pelas equações 3.23 e 3.24, respectivamente, onde H_{PC} é o acúmulo molar e Q_{PC} é a energia trocada no pré-condensador, em kJ/min.

Para o pré-condensador ($i = NE+2$):

$$\begin{aligned} \frac{d(x(j, NE + 2) \cdot H_{PC})}{dt} \\ = V \cdot y(j, NE + 1) + L_R \cdot x(j, NE + 3) - L \cdot x(j, NE + 2) - V_{TOPO} \\ \cdot y(j, NE + 2) \end{aligned} \quad (3.23)$$

$$\begin{aligned} \frac{d(h^l(NE + 2) \cdot H_{PC})}{dt} &= V \cdot h^v(NE + 1) + L_R \cdot h^l(NE + 3) - L \cdot h^l(NE + 2) - V_{TOPO} \\ &\cdot h^v(NE + 2) + Q_{PC} \end{aligned} \quad (3.24)$$

Tendo em vista que o condensador é total, o cálculo da temperatura também é feito a partir do equilíbrio líquido-vapor, pois toda a mistura vaporizada que entra é condensada, sem sub-resfriamento. A equação 3.25 representa o balanço de massa no condensador, onde H_C é o acúmulo molar no condensador.

Para o condensador ($i = NE+3$):

$$\frac{d(x(j, NE + 3) \cdot H_C)}{dt} = V_{TOPO} \cdot (y(j, NE + 2) - x(j, NE + 3)) \quad (3.25)$$

Ainda, as equações 3.26 e 3.27 representam a quantidade destilada (H_D) e a composição (x_D) no acumulador, respectivamente.

$$\frac{d(H_D)}{dt} = D \quad (3.26)$$

$$\frac{d(x_D)}{dt} = \frac{D}{H_D} \cdot (x(1, NE + 3) - x_D) \quad (3.27)$$

As quantidades de energia trocadas no destilador ($Q_{FORNECIDO}$) e no pré-condensador (Q_{PC}) são calculadas pelas equações 3.28 e 3.29, onde $V_{ÁGUA}$ e V_{VAPOR} são as vazões de água no trocador de calor do pré-condensador e de vapor na serpentina de aquecimento do destilador, respectivamente. Considera-se que as áreas de troca de calor sejam suficientes para que, no caso do destilador, todo o vapor seja condensado, e, no caso do pré-condensador, a temperatura de saída da água de resfriamento seja a mesma temperatura da saída da mistura que se está resfriando. Ainda, as variações de energia são calculadas em termos de entalpias, sendo ΔH_{VAPOR} a variação da entalpia no destilador e $\Delta H_{ÁGUA}$ a variação de entalpia da água de resfriamento no pré-condensador.

$$Q_{FORNECIDO} = V_{VAPOR} \cdot \Delta H_{VAPOR} \quad (3.28)$$

$$Q_{COND} = V_{\acute{A}GUA} \cdot \Delta H_{\acute{A}GUA} \quad (3.29)$$

Por fim, o cálculo de equilíbrio entre as fases é feito mediante relação de equilíbrio representada na equação 3.30, onde a fugacidade na fase líquida é estimada a partir do coeficiente de atividade ($\gamma_{(j,i)}$), calculado pelo modelo de *Van Laar*, pela pressão de vapor saturado ($P^{SAT}_{(j,i)}$) e pela pressão do sistema (P). O vapor é considerado gás ideal ($\phi^{vapor}(j,i) = 1$).

$$y(j,i) = x(j,i) \cdot \gamma_{(j,i)} \cdot \frac{P^{SAT}_{(j,i)}}{P} \quad (3.30)$$

A partir da elaboração do modelo II foram feitas algumas simulações, com as os parâmetros especificados e com as condições iniciais indicados na Tabela 3.5 e na Tabela 3.6, respectivamente. As condições iniciais adotadas para a inicialização da simulação do modelo II foram obtidas a partir da simulação do modelo I, operando com uma grande razão de refluxo. Os valores de composição utilizados na inicialização do modelo II são o perfil de composição resultante do modelo I, operando por um grande tempo próximo ao refluxo total. Ainda, as entalpias foram calculadas a partir da composição e da temperatura no destilador e no pré-condensador, resultantes da mesma simulação do modelo I.

Tabela 3.5 – Parâmetros utilizadas no Modelo II

Parâmetro/Variável	Símbolo	Valor/Condições
Pressão	P	1 atm
Acúmulo nos pratos	H	1000 mol
Acúmulo no pré-condensador e no condensador	H_{PC}, H_C	2000 mol
Energia trocada na serpentina de destilador	ΔH_{Vapor}	Temperatura = 416,05 K Pressão = 4 atm
Energia trocada na serpentina da água de resfriamento	$\Delta H_{\acute{A}GUA}$	Temperatura = 308.15 K Pressão = 1 atm

Tabela 3.6 – Condições iniciais utilizadas no modelo II

Variável	Símbolo	Valor
Quantidade no destilador	H_I	31000 mol
Composição de etanol no destilador ($i = 1$)	$x(1,1)$	0,033
Composição de etanol no prato 1 ($i = 2$)	$x(1,2)$	0,249384
Composição de etanol no prato 2 ($i = 3$)	$x(1,3)$	0,518505
Composição de etanol no prato 3 ($i = 4$)	$x(1,4)$	0,636534
Composição de etanol no prato 4 ($i = 5$)	$x(1,5)$	0,699418
Composição de etanol no prato 5 ($i = 6$)	$x(1,6)$	0,738925
Composição de etanol no prato 6 ($i = 7$)	$x(1,7)$	0,766369
Composição de etanol no prato 7 ($i = 8$)	$x(1,8)$	0,786761
Composição de etanol no prato 8 ($i = 9$)	$x(1,9)$	0,802676
Composição de etanol no prato 9 ($i = 10$)	$x(1,10)$	0,815576
Composição de etanol no prato 10 ($i = 11$)	$x(1,11)$	0,826357
Composição de etanol no prato 11 ($i = 12$)	$x(1,12)$	0,835598
Composição de etanol no prato 12 ($i = 13$)	$x(1,13)$	0,843695
Composição de etanol no prato 13 ($i = 14$)	$x(1,14)$	0,850923
Composição de etanol no prato 14 ($i = 15$)	$x(1,15)$	0,857486
Composição de etanol no prato 15 ($i = 16$)	$x(1,16)$	0,863535
Composição de etanol no prato 16 ($i = 17$)	$x(1,17)$	0,869185
Composição de etanol no prato 17 ($i = 18$)	$x(1,18)$	0,874529
Composição de etanol no prato 18 ($i = 19$)	$x(1,19)$	0,87964
Composição de etanol no prato 19 ($i = 20$)	$x(1,20)$	0,884581
Composição de etanol no pré-condensador ($i = 21$)	$x(1,21)$	0,889405
Composição de etanol no condensador ($i = 22$)	$x(1,22)$	0,892945
Entalpia no destilador ($i = 1$)	$h^l(1)$	-38,9 kJ/mol
Entalpia no pré-condensador ($i = 21$)	$h^l(21)$	-36,6 kJ/mol
Quantidade destilada	H_D	1 mol
Composição do destilado	x_D	0,5

Com o objetivo de avaliar a sensibilidade do modelo são realizadas algumas simulações alterando a vazão de água de resfriamento no condensador, a vazão de vapor no destilador e a razão de refluxo, conforme Tabela 3.7.

São avaliadas a temperatura e a composição do topo da coluna para três condições de cada variável manipulada, como pode ser observado na Tabela 3.7. Foram avaliadas as condições V_{vapor1} , V_{vapor2} e V_{vapor3} para a manipulação do vapor saturado de aquecimento no destilador; $V_{água1}$, $V_{água2}$ e $V_{água3}$ para a vazão de água de resfriamento do pré-condensador; e, por fim, $Refluxo1$, $Refluxo2$ e $Refluxo3$ para a razão de refluxo. Os resultados da simulação para a composição e temperatura são apresentados nas figuras 3.8, 3.9 e 3.10, respectivamente.

Tabela 3.7 – Variáveis da análise de sensibilidade do modelo II

	V_{vapor1}	V_{vapor2}	V_{vapor3}
Vazão de vapor (V_{VAPOR})	1 m³/min	2 m³/min	3 m³/min
Vazão de água ($V_{ÁGUA}$)	0,01 m ³ /min	0,01 m ³ /min	0,01 m ³ /min
Razão de refluxo (R)	2	2	2
	$V_{água1}$	$V_{água2}$	$V_{água3}$
Vazão de vapor (V_{VAPOR})	2 m ³ /min	2 m ³ /min	2 m ³ /min
Vazão de água ($V_{ÁGUA}$)	0,005 m³/min	0,01 m³/min	0,02 m³/min
Razão de refluxo (R)	2	2	2
	$Refluxo1$	$Refluxo2$	$Refluxo3$
Vazão de água ($V_{ÁGUA}$)	0,01 m ³ /min	0,01 m ³ /min	0,01 m ³ /min
Vazão de vapor (V_{VAPOR})	2 m ³ /min	2 m ³ /min	2 m ³ /min
Razão de refluxo (R)	1	2	3

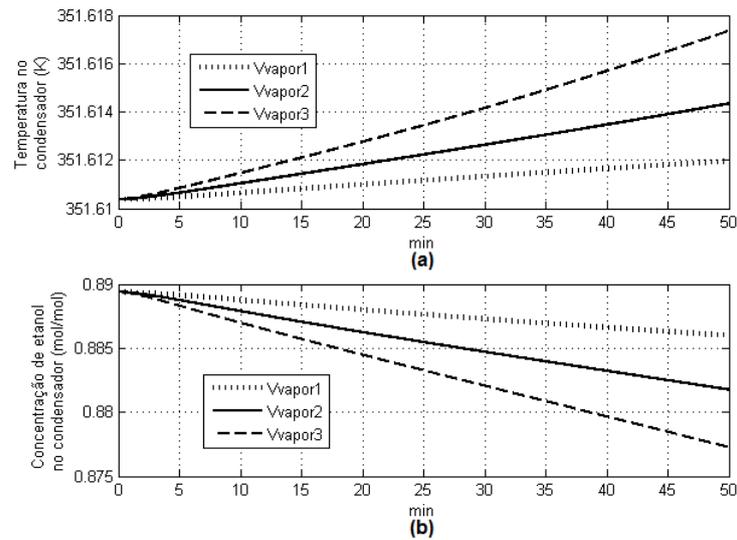


Figura 3.8 – (a) Temperatura e (b) Composição de etanol no condensador (topo) para as simulações V_{vapor1} , V_{vapor2} e V_{vapor3}

A partir da análise da Figura 3.8, pode-se observar que o aumento da vazão de vapor de aquecimento tem influência na temperatura do condensador, pois a energia da base é transferida ao longo dos pratos até o topo da coluna. O caso V_{vapor3} , onde é empregada a maior vazão de vapor, é a situação onde mais se eleva a temperatura do condensador e, por consequência do equilíbrio termodinâmico, o aumento da temperatura acima da temperatura do azeótropo implica diminuição da composição de etanol no topo. Por outro lado, no caso V_{vapor1} houve o menor aumento de temperatura e o menor decréscimo de composição de etanol no topo.

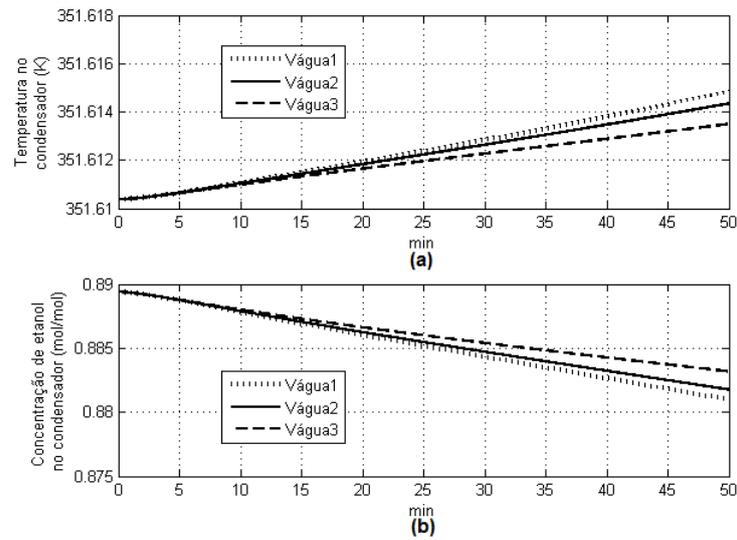


Figura 3.9 – (a) Temperatura e (b) Composição de etanol no condensador para as simulações $V_{\text{água}1}$, $V_{\text{água}2}$ e $V_{\text{água}3}$

A análise da Figura 3.9 mostra que o aumento da temperatura do condensador é atenuado à medida que se aumenta a vazão de água no condensador. Na destilação descontínua, conforme a composição da base da coluna se esgota em etanol e enriquece em água, há o aumento da temperatura. Essa energia é transferida ao longo da coluna, influenciando o topo da coluna. O aumento da vazão de água no pré-condensador implica maior troca térmica com o objetivo de resfriar o produto de topo. Este comportamento pode ser observado na Figura 3.9, onde a vazão de água $V_{\text{água}3}$ teve a menor variação de temperatura do pré-condensador, ao passo que para $V_{\text{água}1}$, obteve-se a maior variação de temperatura.

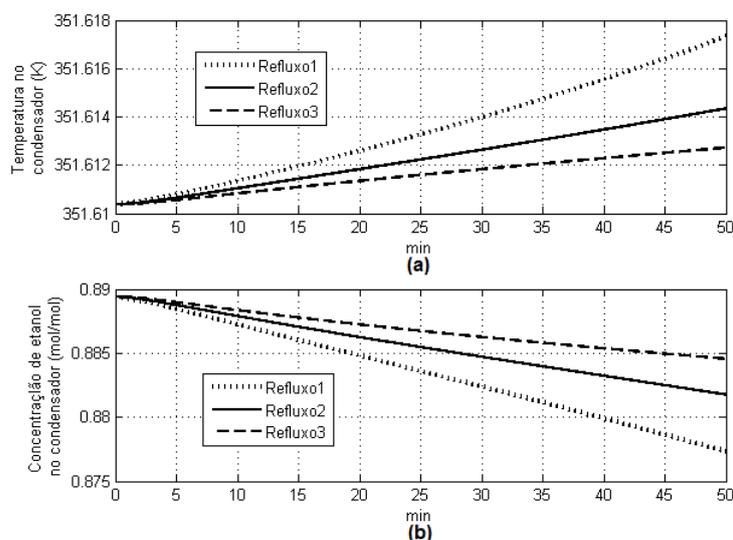


Figura 3.10 – (a) Temperatura e (b) Composição de etanol no condensador (topo) para as simulações *Refluxo1*, *Refluxo2* e *Refluxo3*

Por fim, a Figura 3.10 apresenta a resposta do modelo à variação da razão de refluxo. Assume-se que o líquido que retorna à coluna como refluxo está à temperatura e composição equivalentes a do último estágio de equilíbrio, ou seja, o condensador. Quanto maior for a razão de refluxo, maior a quantidade que retorna à coluna, fazendo com que o produto de topo fique mais concentrado de etanol, e que o decréscimo de temperatura do pré-condensador seja menor. Esta situação pode ser observada na condição de *Refluxo3*, onde a composição é a maior e a temperatura a menor das três situações avaliadas. Já para a condição de *Refluxo1*, obteve-se a maior temperatura e a menor concentração, pois com a menor razão de refluxo de operação menor é a quantidade que retorna a coluna e maior é a quantidade retirada como produto final.

Sendo assim, observa-se que os três parâmetros avaliados - a razão de refluxo, a vazão de vapor no destilador e a vazão de água no pré-condensador - apresentaram efeitos coerentes na concentração e temperatura do topo da coluna, correspondendo de forma condizente com colunas de destilação descontínuas típicas.

4. ESTRATÉGIAS DE CONTROLE

4.1 Estrutura de controle

A Figura 4.1 mostra o esquema da coluna de destilação descontínua usado para a proposta da estrutura de controle deste trabalho. Observa-se que existem três variáveis candidatas a variável manipulada na estrutura de controle: a vazão de vapor no destilador, a vazão de água no condensador e a vazão de destilado. No entanto, de acordo com o modelo II que serviu de base para este estudo, a vazão de destilado não é manipulada diretamente já que esta depende da razão de refluxo da coluna conforme postulado no modelo. Logo, em vez de manipular a vazão de destilado, a terceira variável candidata a variável manipulada foi a razão de refluxo.

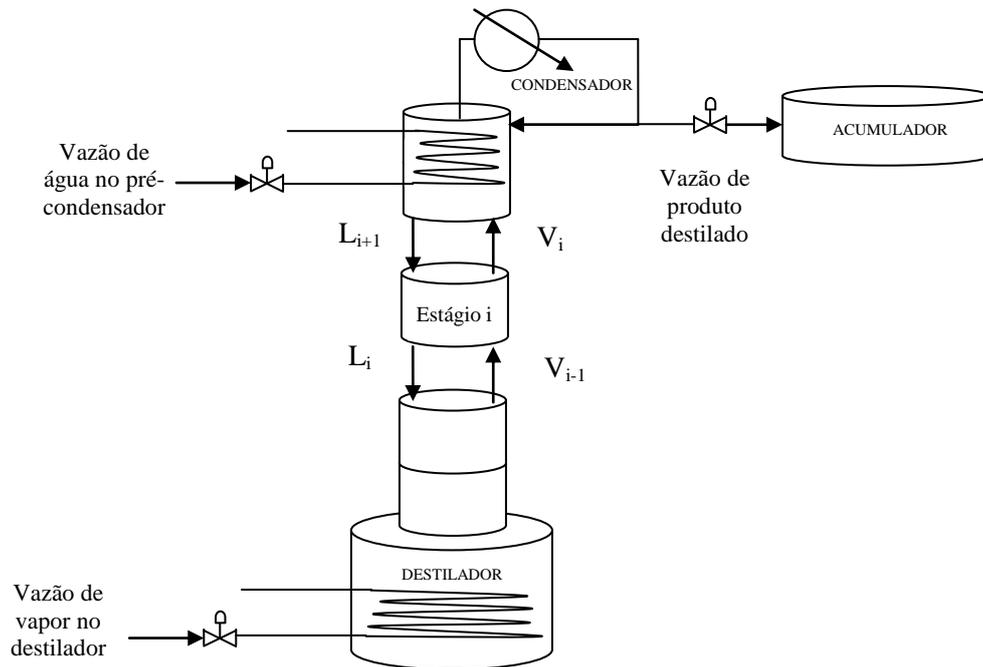


Figura 4.1 – Esquema da coluna de destilação descontínua usado para a proposta da estrutura de controle.

4.2 Análise do processo em malha aberta

A primeira análise do processo consistiu em avaliar a resposta do sistema (Modelo II) a perturbações positivas e negativas nas variáveis manipuladas. Na destilação descontínua da mistura etanol-água, a variável controlada de maior importância é a composição de topo, pois garante que o produto esteja na composição adequada. No entanto, em vez de analisar o efeito das variáveis manipuladas na temperatura do condensador, será analisado o efeito sobre a temperatura do pré-condensador. Esta escolha se deu em função de o controle desta temperatura ter influência tanto na composição do condensador, quanto na vazão de vapor no topo da coluna. Neste caso, além de a temperatura estar diretamente ligada à composição, também está ligada à quantidade de vapor que se condensa e retorna à coluna, e, por consequência, à quantidade que continua na fase vaporizada e é, posteriormente, condensada no condensador total. Sendo assim, temperaturas muito baixas indicam que nenhum produto de topo será formado, pois todo o vapor é condensado, ao passo que temperaturas muito altas indicam que a composição de etanol na fase vaporizada será menor e a vazão de produto de topo será muito alta, diminuindo a composição de etanol no topo da coluna.

Neste trabalho, procura-se obter o etanol combustível hidratado a partir da destilação convencional, o qual possui limite inferior de composição muito próximo da composição de azeótropo da mistura etanol-água (0,894 mol etanol/mol solução). Portanto, as estratégias de controle serão inicialmente direcionadas à manutenção da composição de topo próxima ao azeótropo. Sendo assim, serão avaliadas as respostas da temperatura do pré-condensador mediante variações da vazão de água do pré-condensador, vazão de vapor no destilador e razão de refluxo da coluna. A Tabela 4.1 traz as perturbações na vazão de água de resfriamento, da vazão de vapor de aquecimento e da razão de refluxo no modelo II. A Figura 4.2, a Figura 4.3 e a Figura 4.4 apresentam as respostas da temperatura do pré-condensador mediante perturbações na vazão de vapor saturado no destilador, na vazão de água de resfriamento do pré-condensador e na razão de refluxo.

Tabela 4.1 – Variáveis da análise de sensibilidade do modelo II

	Perturbação negativa	Valor normal	Perturbação positiva
Vazão de água ($V_{\text{ÁGUA}}$)	$0,01/5 \text{ m}^3/\text{min}$	$0,01 \text{ m}^3/\text{min}$	$5 \cdot 0,01 \text{ m}^3/\text{min}$
Vazão de vapor (V_{VAPOR})	$2/5 \text{ m}^3/\text{min}$	$2 \text{ m}^3/\text{min}$	$5 \cdot 2 \text{ m}^3/\text{min}$
Razão de refluxo (R)	$2/5$	2	$5 \cdot 2$

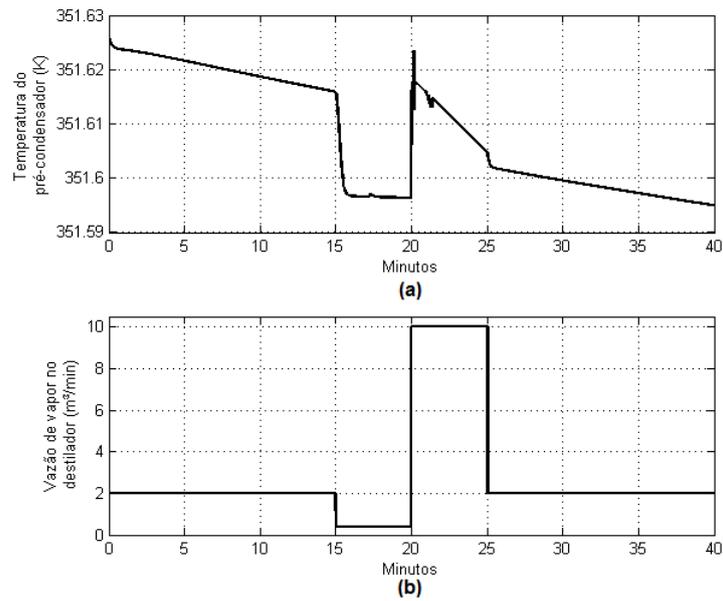


Figura 4.2 – (a) Resposta da temperatura do pré-condensador mediante (b) variação da vazão de vapor de aquecimento no destilador

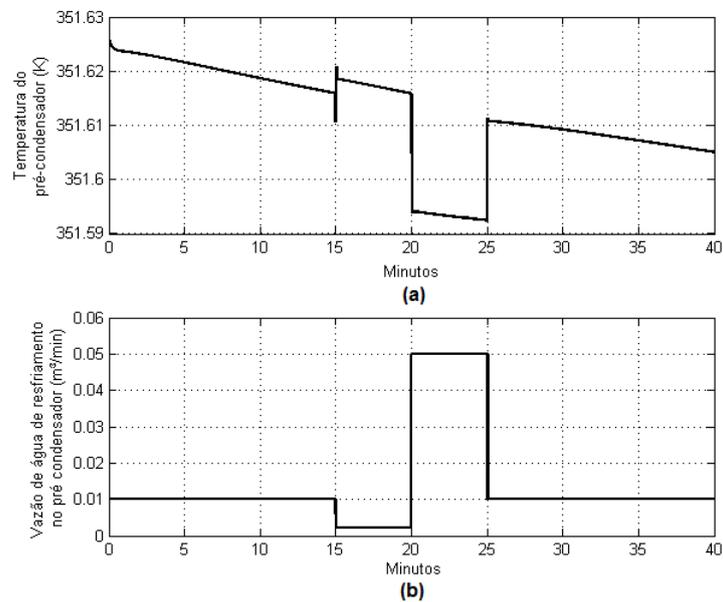


Figura 4.3 – (a) Resposta da temperatura do pré-condensador mediante (b) variação da vazão de água no pré-condensador

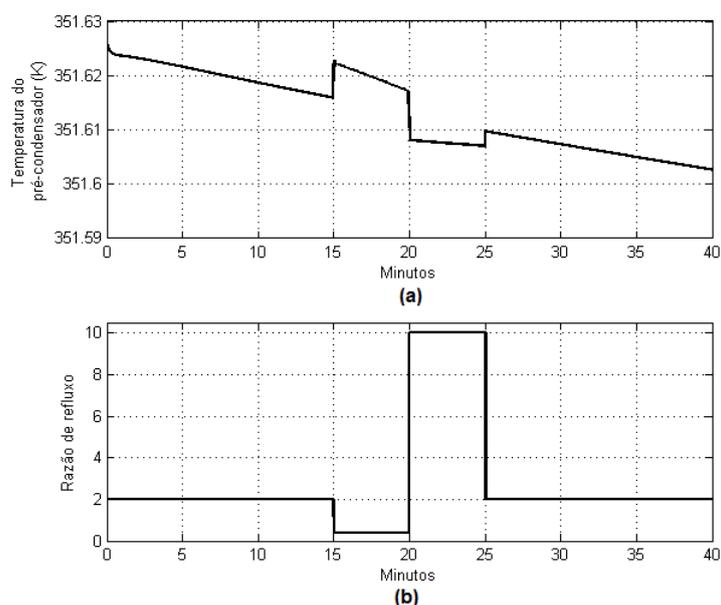


Figura 4.4 – (a) Resposta da temperatura do pré-condensador mediante (b) variação da razão de refluxo da coluna

A partir das figuras 4.2, 4.3 e 4.4 pode-se notar que as três variáveis manipuladas têm efeito na temperatura do pré-condensador. Tendo em vista que a vazão de água de resfriamento no pré-condensador está diretamente relacionada com a variação de energia nesse estágio, esta variável manipulada teve a maior influência na temperatura do pré-condensador. A vazão de vapor de aquecimento no destilador também promoveu alterações significativas na temperatura do pré-condensador, pois está diretamente ligada às vazões internas de produto que entram e saem deste estágio. Por fim, a razão de refluxo foi a variável que teve menor influência, em grande parte por que se considerou que o condensador total não promove o sub-resfriamento do produto de topo, ou seja, a troca de calor no condensador é suficiente apenas para condensar a solução, mantendo-se a mesma temperatura. Com isso, a vazão que retorna por refluxo ao pré-condensador estará nas mesmas condições de temperatura e composição do topo da coluna, não promovendo grandes alterações na temperatura do pré-condensador.

4.3 Identificação

A identificação de sistemas é uma etapa de grande importância na análise de processos. Tem como finalidade a obtenção de modelos de plantas complexas, onde a utilização de leis da física, por vezes, não é suficiente para representar a dinâmica do processo, como no caso de sistemas fortemente não lineares, por exemplo.

Em geral, os processos reais estão sempre sujeitos a perturbações. Os efeitos do ambiente e os erros de aproximação podem ser modelados como perturbações do processo. A primeira etapa do processo de identificação de modelos é a escolha da estrutura do modelo a ser identificado. A etapa seguinte é o ajuste dos parâmetros dessa estrutura de forma que a saída do modelo reproduza da melhor maneira as saídas do sistema real. Os critérios mais utilizados para a avaliação dos modelos são o ajuste do modelo, a resposta transiente e os zeros e polos gerados pelo modelo ajustado.

Neste trabalho, a identificação foi utilizada para representação do modelo II mediante perturbações nas variáveis manipuladas. Para tanto, foi utilizada a caixa de ferramentas de identificação de sistemas (*System Identification Toolbox*) do *software Matlab*, a qual permite a criação do modelo matemático de um sistema dinâmico por meio de dados gerados por modelos ou também por dados medidos experimentalmente. Esta caixa de ferramentas possui quatro estruturas básicas de modelos discretos utilizadas para a identificação de modelos dinâmicos, sendo eles o modelo OE (*Output Error*), o ARX (*Autoregressive with Exogenous input*), o ARMAX (*Autoregressive Moving Average Exogenous input*) e o BJ (*Box-Jenkins*). Ainda, é possível remover média e tendência e utilizar filtro para dados ruidosos, sendo ferramentas auxiliares de grande importância para o pré-processamento de dados. Uma vez realizada a identificação do modelo por meio do conjunto de dados de entrada e saída do sistema, é possível encontrar a função de transferência correspondente e, assim, compreender o comportamento de entrada e saída do processo, prever respostas da planta, desenvolver sistemas de controle e ajustar controladores, e, também, filtrar e suavizar os sinais da planta (IKONEN e NAJIM, 2002).

Os modelos discretos identificados para o controle da temperatura do pré-condensador mediante manipulação da vazão de vapor de aquecimento na base da coluna, da água de resfriamento no pré-condensador e da razão de refluxo são apresentados na Tabela 4.2. Em

todos os casos foram removidas a média e a tendência dos dados gerados pelo modelo para possibilitar a identificação.

Tabela 4.2 – Funções de transferência e modelos discretos usados na identificação da resposta da temperatura do pré-condensador mediante manipulação da vazão de vapor de aquecimento, da vazão de água de resfriamento, e da razão de refluxo

Variável manipulada	Função de transferência	Modelo discreto	Ajuste (%)
Vazão de água	$G_A(s) = \frac{-1.266 s^3 - 9.229 s^2 - 20.4 s - 74.26}{s^4 + 6.451 s^3 + 33.7 s^2 + 75.13 s + 168.1}$	OE 221	78,89
Vazão de vapor	$G_V(s) = \frac{0.0004657 s + 1.361 \cdot 10^{-7}}{s^2 + 0.3096 s + 8.013 \times 10^{-10}}$	OE 221	74,53
Razão de refluxo	$G_R(s) = \frac{-0.0009891 s^3 - 0.007051 s^2 - 0.01278 s - 0.05351}{s^4 + 9.497 s^3 + 47.06 s^2 + 116.4 s + 278.5}$	OE 221	44,65

Modelo discreto (OE nmk , onde n e m são as ordens do modelo em relação às saídas e entradas, respectivamente, e k é o tempo morto).

A avaliação dos modelos discretos pode ser feita de forma geral para as três variáveis controladas, sendo o modelo de ajuste ARX o que apresentou os piores resultados de ajuste (*fit*), e os modelos OE, BJ e ARMAX apresentaram resultados satisfatórios, sendo esses últimos idênticos uns aos outros. O ajuste das funções se deu pela equação 4.1 presente no *software* MatLab, onde y é a saída medida e \hat{y} é a saída do modelo identificado. Ainda, *norm* indica que os valores são normalizados, e *mean* indica que o valor é a média. Quanto mais próximo de 100%, maior é a qualidade do ajuste. Optou-se pela escolha do modelo OE de ordem 2, com tempo morto, para representar o modelo.

$$fit = 100 \cdot \left[\frac{1 - norm(y - \hat{y})}{norm(y - mean(y))} \right] \quad (4.1)$$

4.4 Métodos de sintonia de controladores

O controlador do tipo proporcional integral derivativo (PID) é o algoritmo mais utilizado em processos de controle de plantas químicas, principalmente devido a sua relativa simplicidade e amplo conhecimento já desenvolvido em relação aos seus métodos de sintonia. A equação do controlador PID (Equação 4.2) contém três termos, como sugere o nome: o termo proporcional, o termo integral e o termo derivativo em relação ao erro da variável controlada. O termo K_P faz referência ao ganho proporcional, e os termos T_I e T_D aos tempos integral e derivativo, respectivamente.

$$G_c(s) = K_P \cdot \left(1 + \frac{1}{T_I s} + T_D s\right) \quad (4.2)$$

Embora a consideração do termo derivativo implique menor sobre-elevação e menor tempo de assentamento, neste trabalho serão desenvolvidos controladores proporcionais integrais (PI), eliminando-se o termo derivativo ($T_D s$) da equação 4.4.1, pois a ação derivativa tende a tornar o sistema mais instável e sensível a alterações reais. Portanto, o controlador PI possui ação mais branda, facilitando o avanço do método integrador. Sendo assim, são sintonizados três controladores diferentes: para a manipulação da vazão de vapor de aquecimento na base da coluna; para a vazão de água de resfriamento no pré-condensador; e, por fim, para a razão de refluxo. O objetivo, nos três casos, é controlar a temperatura do pré-condensador, identificada como principal variável do controle da qualidade de produto de topo.

Em muitos casos a sintonia de controladores ainda é feita de forma manual, ou seja, de maneira que os parâmetros são ajustados independentemente por tentativa e erro, ou por meio de um procedimento básico para cada caso específico. Nesses procedimentos, a ação derivativa geralmente não é utilizada, sendo mais indicado para sistemas não muito complexos, onde não é necessário um controle muito rigoroso.

De outra maneira, a sintonia de controladores pode ser efetuada por métodos sistemáticos de ajuste dos parâmetros do controlador. O primeiro método sistemático foi proposto por Ziegler-Nichols (1942) onde, com base em alguns dados experimentais do processo, tornou possível determinar um conjunto de parâmetros iniciais K_P , τ_I e τ_D de

controladores do tipo PID. Este trabalho foi um marco na história do controlador PID, servindo de base para inúmeros métodos, baseados em dados experimentais (*step testes*, curvas de reação do processo ou obtenção dos parâmetros por meio de tabelas ou fórmulas deduzidas em função das características dinâmicas estimadas), baseados na minimização de índices de erro (IAE, ISE, ITAE), ou metodologias baseadas em modelos (Internal Model Control, IMC) (MARTINS, 2009). Uma série de métodos de ajuste de controladores PID pode ser encontrada em livros como Åstrom e Hägglung (1995) e O'DWYER (2003).

Neste trabalho são avaliados cinco métodos distintos: Ziegler Nichols, ITAE, Kappa-Tau, IMC e Cohen-Coon. Estes métodos podem ser divididos em duas categorias: métodos de ajuste baseados em funções de primeira ordem com tempo morto (conhecidos como métodos K, Tau e teta); e métodos de ajuste baseados em ganho ultimate (K_u) e período ultimate (P_u).

Os métodos baseados em funções de primeira ordem com tempo morto são métodos simplificados, de grande aplicabilidade e de satisfatória qualidade ao aproximar sistemas reais compostos por dinâmicas de primeira ordem em série. Foram especialmente desenvolvidos para ajustar controladores PID a partir do ganho (K), tempo morto (τ) e constante de tempo (θ), por isso chamados de métodos K, Tau e teta.

Por outro lado, por darem informações sobre as características dinâmicas justamente na região onde a maioria dos controladores *feedback* normalmente trabalham, ou seja, a região de corte, os métodos baseados em ganho ultimate (K_u) e o período ultimate (P_u) fornecem informações extremamente importantes sobre a dinâmica dos sistemas. Esses valores podem ser facilmente calculados para qualquer função de transferência e poderão ser então aplicados para projetar controladores para sistemas com uma dinâmica de elevada ordem, não necessitando que se faça nenhuma aproximação como feita nos métodos anteriores.

Os métodos ITAE, Cohen-Coon e IMC são métodos baseados em funções de primeira ordem com tempo morto. Já o método de Ziegler Nichols possui as duas formas: a baseada em funções de primeira ordem com tempo morto e a baseada no ganho e no período ultimate. Da mesma maneira, o método de Kappa-Tau possui as duas formas, sendo a forma com parametrização Tau baseada em funções de primeira ordem com tempo morto, e a forma com parametrização Kappa baseada no ganho e no período ultimate. Os métodos de sintonia de controladores PI são apresentados no apêndice D.

Os critérios de avaliação de controladores podem ser divididos em critérios de robustez e critérios de desempenho. Critérios de robustez são avaliados por indicadores como

máxima sensibilidade (*Maximum Sensitivity*, MS), margem de ganho (*Gain Margin*, GM), reserva de fase (*Phase Margin*, PM). Por outro lado, os critérios de desempenho são identificados por meio da avaliação de indicadores de erro, como a Integral do Erro Quadrático (*Integrated Square Error*, ISE), da Integral do Erro Absoluto (*Integrated Absolute Error*, IAE) e da Integral do Erro Absoluto Ponderado no Tempo (*Integral Time-weighted Absolute Error*, ITAE), bem como pelo tempo de assentamento (*Settlement Time*, ST) e a sobre-elevação (*overshoot*, OV). Os critérios de avaliação dos controladores são apresentados no apêndice E.

4.4.1. Controlador da vazão de vapor na base da coluna

A Tabela 4.3 mostra os critérios de desempenho e robustez para o controlador da vazão de vapor na base da coluna. O método de sintonia Kappa-Tau com parametrização Kappa não foi capaz de sintonizar o controlador, sendo apresentados apenas os resultados para a sintonia Kappa-Tau com parametrização Tau e os demais métodos.

Considerando o critério de máxima sensibilidade, os métodos Kappa-Tau para desempenho (D) e para robustez (R), o método ITAE regulatório e o método Cohen-Coon ficaram dentro dos limites de robustez (entre 1,3 e 2), no entanto o método de Cohen-Coon possui margem de ganho inferior a 1,7. Considerando os critérios de desempenho como a Integral do Erro Quadrático (ISE), a Integral do Erro Absoluto (IAE) e a Integral do Erro Absoluto Ponderado no Tempo (ITAE), o método ITAE regulatório foi o que apresentou os menores valores, sendo este, portanto, o método de sintonia com os melhores resultados. A Tabela 4.4 mostra os valores do ganho proporcional (K_P) e do tempo integral (T_I) obtidos pelo método de sintonia ITAE regulatório quando a vazão de vapor no destilador foi considerada a variável manipulada. A Figura 4.5 apresenta a performance deste controlador no caso de uma mudança no *setpoint*.

Tabela 4.3 – Critérios de desempenho e robustez do controlador da vazão de vapor na base da coluna projetado com o modelo linear

	<i>Zigler- Nichols</i>	<i>Kappa- Tau (R)</i>	<i>Kappa- Tau (D)</i>	ITAE (Servo)	ITAE (Regulatório)	IMC	<i>Cohen- Coon</i>
MS	3,2732	1,3233	1,9289	5,5213	1,9138	4,8934	1,5801
GM	1,5085	5,3145	2,3731	1,2169	2,2351	1,2687	0,0411
PM (°)	30,7609	65,6591	46,8352	12,1273	53,6831	20,6546	36,7494
ISE	0,0175	0,0228	0,0165	0,0325	0,0154	0,0213	1,7101
IAE	0,3274	0,3467	0,2449	0,6251	0,2338	0,4695	17,2988
ITAE	12,1351	10,7495	7,2876	20,8507	7,9222	22,8522	1939,9
ST (min)	2,8289	7,5826	3,6482	2,7557	3,0425	2,7710	166,5474
OV (%)	-84,8753	-89,5146	-87,644	-80,9363	-88,4553	-84,0638	-99,7658

Tabela 4.4 – Ganho proporcional e Tempo integral para o controlador da manipulação da vazão de vapor gerados pelo método ITAE regulatório

K_P	1538,2
T_I	3,9449

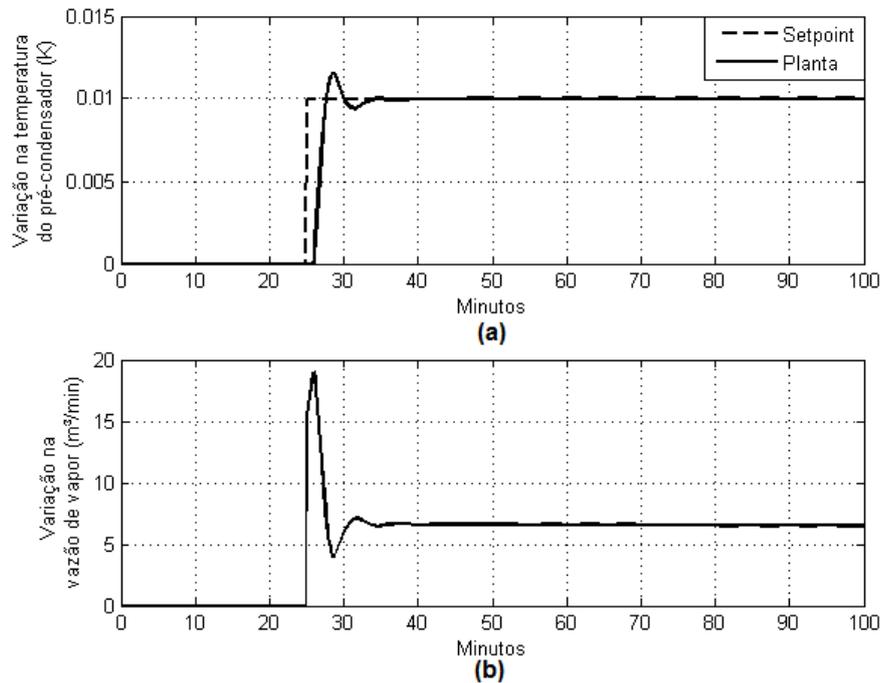


Figura 4.5 – Resposta da temperatura do pré-condensador para uma mudança em seu *setpoint*, utilizando a função de transferência G_V .

4.4.2. Controlador da vazão de água no pré-condensador

A Tabela 4.5 mostra os critérios de desempenho e robustez para o controlador da vazão de água no pré-condensador. O método de sintonia Kappa-Tau com parametrização Kappa não foi capaz de sintonizar o controlador, sendo apresentados apenas os resultados para a sintonia Kappa-Tau com parametrização Tau e os demais métodos.

Analisando a máxima sensibilidade do sistema gerada em cada método, os métodos de sintonia IMC, Kappa-Tau para robustez e Cohen-Coon não ficaram entre os limites de robustez (1,3 e 2). Ainda, o método de sintonia Cohen-Coon forneceu valor de reserva de fase (PM) menor que 30° recomendados para que os sistemas sejam menos sensíveis a incertezas. A análise dos demais métodos de sintonia pelos critérios de desempenho indica que o método de sintonia Kappa-Tau para desempenho (D) apresentou os menores valores para a Integral do Erro Quadrático (ISE), a Integral do Erro Absoluto (IAE) e a Integral do Erro Absoluto Ponderado no Tempo (ITAE). Sendo assim, este método foi escolhido para sintonizar o controlador para a manipulação da vazão de água no pré-condensador. A Tabela 4.6 mostra os valores do ganho proporcional (K_P) e do tempo integral (T_I) obtidos pelo método de sintonia

Kappa-Tau para desempenho (D) quando a vazão de água no pré-condensador foi considerada a variável manipulada. A Figura 4.6 apresenta a performance deste controlador no caso de uma mudança no *setpoint*.

Tabela 4.5 – Critérios de desempenho e robustez do controlador da vazão de água no pré-condensador projetado com o modelo linear

	<i>Zigler-Nichols</i>	<i>Kappa-Tau (R)</i>	<i>Kappa-Tau (D)</i>	ITAE (Servo)	ITAE (Regulatório)	IMC	<i>Cohen-Coon</i>
MS	1,6192	1,2590	1,9890	1,6335	1,5522	3,0351	1,0355
GM	2,5805	5,2096	1,9843	2,4268	2,8834	0,9793	26,3738
PM	105,5990	78,0570	55,9910	88,1134	77,0761	-5,3616	-90,0767
ISE	0,0346	0,0235	0,0141	0,0168	0,0162	$6,33 \times 10^4$	$8,2 \times 10^4$
IAE	0,9671	0,4408	0,0177	0,3483	0,2890	2027,3	2073,6
ITAE	47,2454	18,3606	0,4662	14,4981	11,7532	527770	360790
ST (min)	28,2134	9,4068	2,4644	9,0194	6,2643	274,3745	-25
OV (%)	-90,0001	-90,0000	-98,843	-90,0000	-90,0000	7713,6	-100

Tabela 4.6 – Ganho proporcional e Tempo integral para o controlador da manipulação da vazão de água gerados pelo método Kappa-Tau para desempenho

K_P	-0,7134
T_I	0,4332

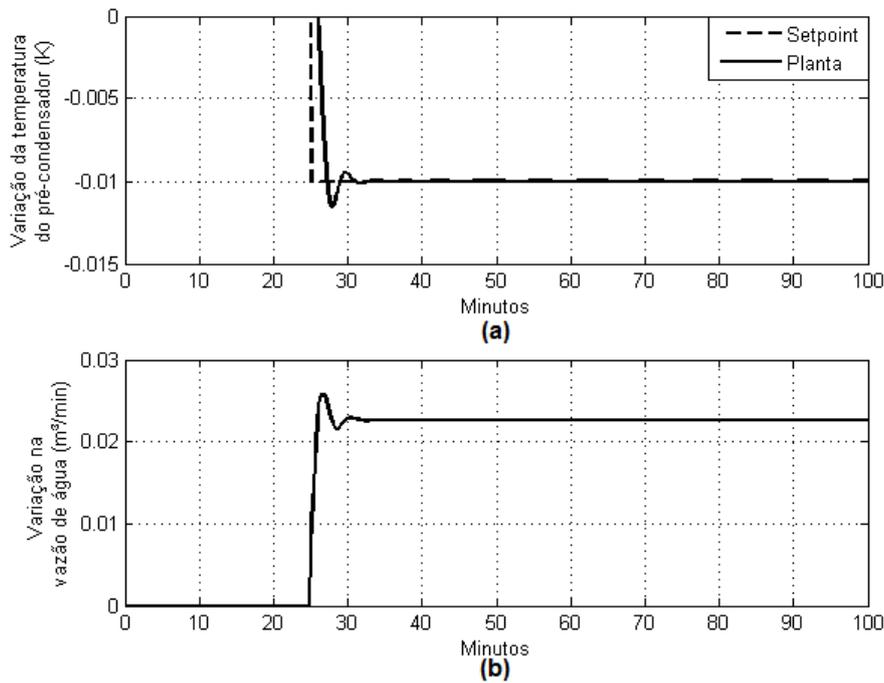


Figura 4.6 – Resposta da temperatura do pré-condensador para uma mudança em seu *setpoint*, utilizando a função de transferência G_A .

4.4.3. Controlador da razão de refluxo

A Tabela 4.7 mostra os critérios de desempenho e robustez para o controlador da razão de refluxo da coluna. O método de sintonia Kappa-Tau com parametrização Kappa não foi capaz de sintonizar o controlador, sendo apresentados apenas os resultados para a sintonia Kappa-Tau com parametrização Tau e os demais métodos.

Analisando o critério robustez pode-se observar que apenas o método de sintonia Kappa-Tau robusto (R) apresentou a máxima sensibilidade dentro dos limites desejáveis (entre 1,3 e 2). Ainda, o ajuste Kappa-Tau para robustez (R) foi o que apresentou os menores valores para a Integral do Erro Quadrático (ISE), a Integral do Erro Absoluto (IAE) e a Integral do Erro Absoluto Ponderado no Tempo (ITAE). Sendo assim, este método foi o escolhido para sintonizar o controlador para a manipulação da razão de refluxo da coluna. A Tabela 4.8 mostra os valores do ganho proporcional (K_P) e do tempo integral (T_I) obtidos pelo método de sintonia Kappa-Tau para robustez (R) quando a razão de refluxo foi considerada a variável manipulada. A Figura 4.7 apresenta a performance deste controlador no caso de uma mudança no *setpoint*.

Tabela 4.7 – Critérios de desempenho e robustez do controlador da razão de refluxo projetado com o modelo linear

	<i>Zigler- Nichols</i>	<i>Kappa- Tau (R)</i>	<i>Kappa- Tau (D)</i>	ITAE (Servo)	ITAE (Regulatório)	IMC	<i>Cohen- Coon</i>
MS	2,0491	1,7041	3,9200	3,8404	4,8002	3,2312	1,0000
GM	2,4670	2,7058	1,2726	0,9268	1,3112	1,4796	51417
PM	109,2100	60,4367	21,2031	-5,9413	25,5280	41,7342	∞
ISE	0,0260	0,0138	0,0194	$2,38 \times 10^{14}$	0,0171	0,0136	1,7553
IAE	0,6339	0,1754	0,0383	$6,013 \times 10^7$	3,3879	0,2445	17,5264
ITAE	21,2336	4,5771	1,1410	$1,1464 \times 10^{10}$	99,9928	6,9222	1972,5
ST (min)	2,32801	2,9098	2,0886	173,1638	1,9623	1,9342	-25
OV (%)	-90,0000	-89,2078	-98,322	$8,13 \times 10^8$	72,7222	-84,6240	-100

Tabela 4.8 – Ganho proporcional e Tempo integral para o controlador da manipulação da razão de refluxo gerados pelo método Kappa-Tau para robustez

K_P	-1285,8
T_I	0,3916

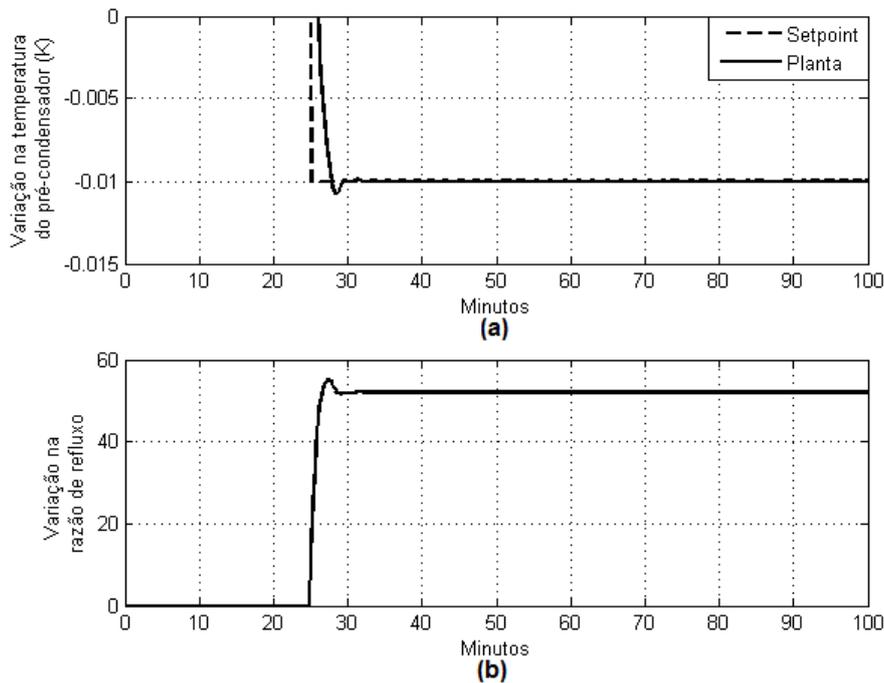


Figura 4.7 – Resposta da temperatura do pré-condensador para uma mudança em seu *setpoint*, utilizando a função de transferência G_R .

4.5 Análise do processo em malha fechada

A análise do processo em malha fechada consiste em utilizar o controlador Proporcional Integral (PI) para a manipulação da variável com o intuito de controlar a temperatura do pré-condensador da coluna. Para isso, é testado o controlador para a manipulação da razão de refluxo, o controlador para a manipulação da vazão de água de resfriamento no pré-condensador e o controlador para a manipulação da vazão de vapor saturado na base da coluna.

4.5.1. Controlador para a manipulação da vazão de vapor saturado no destilador

O controlador para a manipulação do vapor saturado no destilador tem o objetivo de manter a temperatura do pré-condensador no *setpoint* desejado. A Figura 4.8 apresenta os

resultados de temperatura e de concentração de etanol no pré-condensador para o *setpoint* de 351,5993 K, comparando os resultados com a operação da coluna sem nenhuma ação de controle.

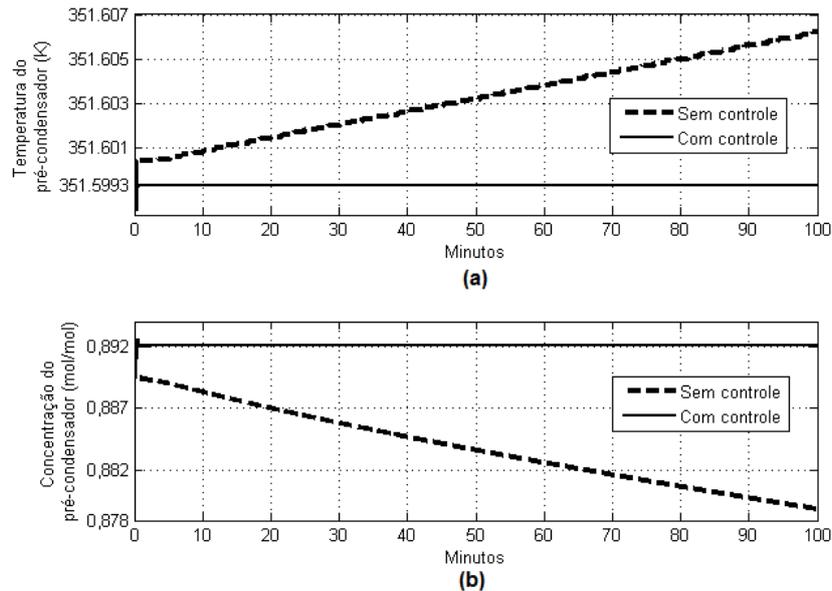


Figura 4.8 – (a) Temperatura e (b) Concentração no pré-condensador para o controle por meio da manipulação da vazão de vapor saturado para o *setpoint* de 351,5993 K

Observa-se que a temperatura do 301,5993 K estabilizou-se a partir de 0,5 minuto, se mantendo constante até o final dos 100 minutos da batelada. Pela análise da figura 4.8 (b), é possível avaliar que a concentração do pré-condensador foi superior à situação em que nenhuma ação de controle esteve envolvida. Esta condição implica maior qualidade do produto formado, que é o objetivo principal da estratégia de controle.

A Figura 4.9 apresenta a manipulação da vazão de vapor saturado fornecida ao destilador ao longo da operação da coluna para o *setpoint* de 351,5993 K. Nota-se que, até o tempo de 0,2 minutos, a coluna de destilação foi operada com a vazão de vapor em seu valor padrão de 2 m³/min, utilizada quando não há nenhuma ação de controle. A partir do momento em que foi acionado o controlador, a vazão de vapor, inicialmente, passou a valores próximos a 0,5 m³/min, e, ao final da batelada, ao valor de 1,6 m³/min. Sendo assim, à medida que a concentração de etanol na base diminui, maior deve ser a energia fornecida ao destilador para

que a temperatura de topo se mantenha constante, tendo em vista que a base se torna mais concentrada em água, que é o componente menos volátil.

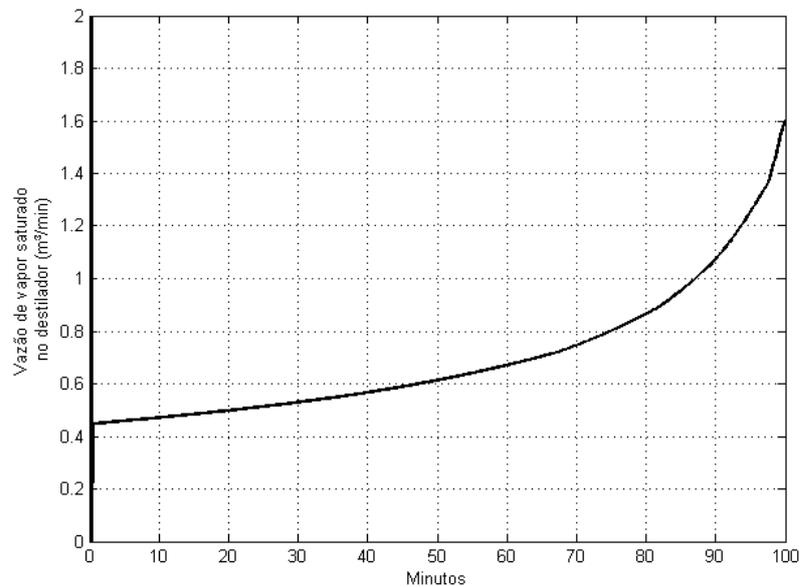


Figura 4.9 – Manipulação da vazão de vapor saturado ao longo da destilação para o *setpoint* de 351,5993 K

4.5.2. Controlador para a manipulação da vazão de água de resfriamento no pré-condensador

O controlador para a manipulação de água de resfriamento no pré-condensador, assim como o controlador da vazão de vapor saturado no destilador, também tem o objetivo de manter a temperatura do pré-condensador no *setpoint* desejado. A Figura 4.10 apresenta os resultados de temperatura e de concentração de etanol no pré-condensador para o *setpoint* de 351,5993 K, comparando os resultados com a operação da coluna sem nenhuma ação de controle.

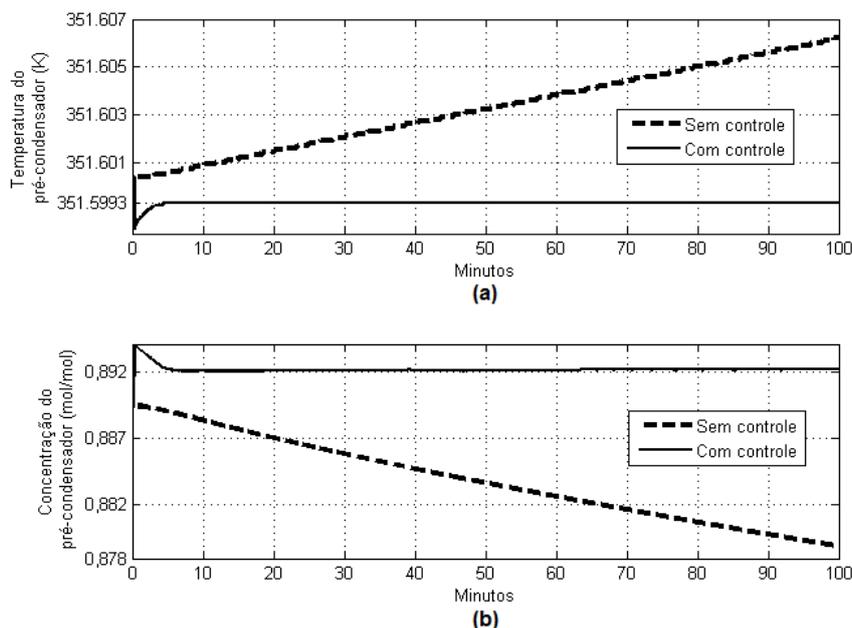


Figura 4.10 – (a) Temperatura e (b) Concentração no pré-condensador para o controle por meio da manipulação da vazão de água de resfriamento do pré-condensador para o *setpoint* de 351,5993 K

Observa-se que o objetivo de controlar a temperatura do *setpoint* em 351,5993 K foi alcançado no instante de 4,4 minutos, e, a partir deste momento, se manteve constante até o final da batelada de 100 minutos. Pela análise da figura 4.10 (b), assim como na figura 4.8 (b), foi possível avaliar que a concentração de topo com a temperatura do pré-condensador controlada foi superior à situação em que nenhuma ação de controle esteve envolvida. Esta condição implica maior qualidade do produto formado, que é o objetivo principal da estratégia de controle.

A Figura 4.11 apresenta a manipulação da vazão água de resfriamento no pré-condensador ao longo da destilação para o *setpoint* de 351,5993 K. Nota-se que, até o tempo de 0,2 minutos, a coluna de destilação foi operada com a vazão de água em seu valor padrão de 0,01 m³/min, utilizada quando não há nenhuma ação de controle. A partir do momento em que foi acionado o controlador, a vazão de vapor passou a valores maiores que o valor padrão, chegando a pouco superiores a 0,042 m³/min no início da ação de controle e próxima a 0,03 m³/min no final da destilação. Sendo assim, mantendo-se constante a energia fornecida à base da coluna, a energia removida no topo deve ser decrescente ao longo da batelada quando se deseja manter a temperatura de topo no *setpoint* desejado.

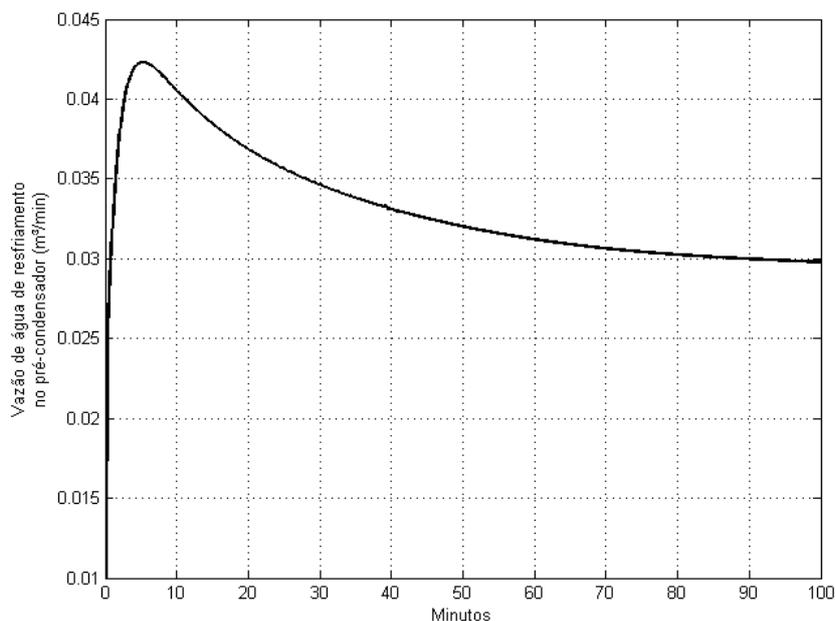


Figura 4.11 – Manipulação da vazão de vapor saturado ao longo da destilação para o *setpoint* de 351,5993 K

4.5.3. Controlador para a manipulação da razão de refluxo

O controlador para a manipulação da razão de refluxo, como nos casos anteriores, também tem o objetivo de manter a temperatura do pré-condensador no *setpoint* desejado. A Figura 4.12 apresenta os resultados de temperatura e de concentração de etanol no pré-condensador para o *setpoint* de 351,5993 K, comparando os resultados com a operação da coluna sem nenhuma ação de controle.

Observa-se que o objetivo de controlar a temperatura do *setpoint* em 351,5993 K não foi alcançado em nenhum momento da batelada de 100 minutos. Mesmo assim, pela análise da Figura 4.12 (b), é possível avaliar que a concentração de topo é superior à situação em que nenhuma ação de controle esteve envolvida, porém deve-se, principalmente, ao fato de a razão de refluxo ser muito alta, fazendo com que a vazão de produto formado seja mínima.

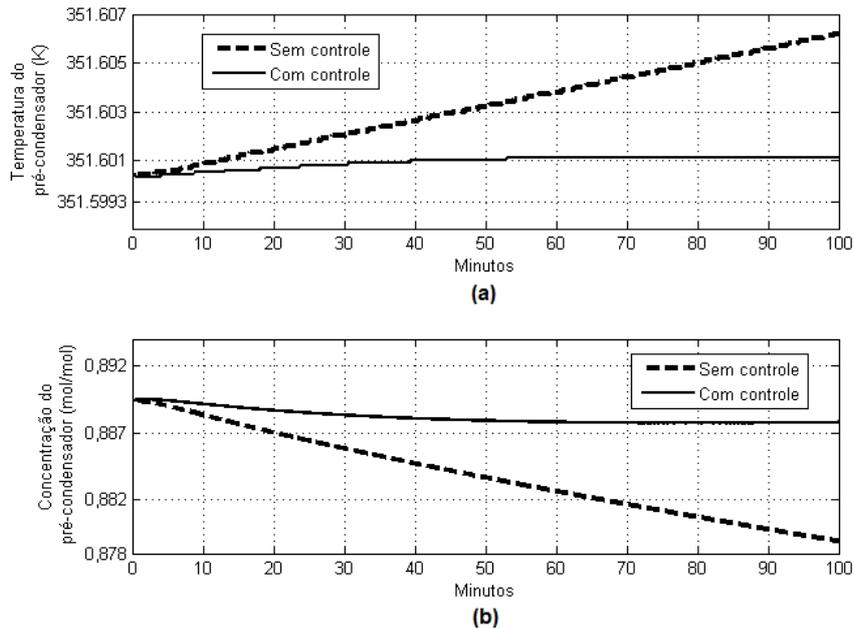


Figura 4.12 – (a) Temperatura e (b) Concentração no pré-condensador para o controle por meio da manipulação da razão de refluxo para o *setpoint* de 351,5993 K

A Figura 4.13 apresenta a manipulação da razão de refluxo ao longo da destilação para o *setpoint* de 351,5993 K. Nota-se que, até o tempo de 0,2 minutos, a coluna de destilação foi operada com a vazão de vapor em seu valor padrão igual a 2, utilizada quando não há nenhuma ação de controle. A partir do momento em que foi acionado o controlador, a razão de refluxo passou a valores muito altos, chegando próxima a 65000 no final da batelada. Sendo assim, o controle da temperatura do pré-condensador pela manipulação da razão de refluxo não foi eficaz, não sendo uma estratégia de controle apropriada para o modelo de coluna de destilação descontínua em estudo.

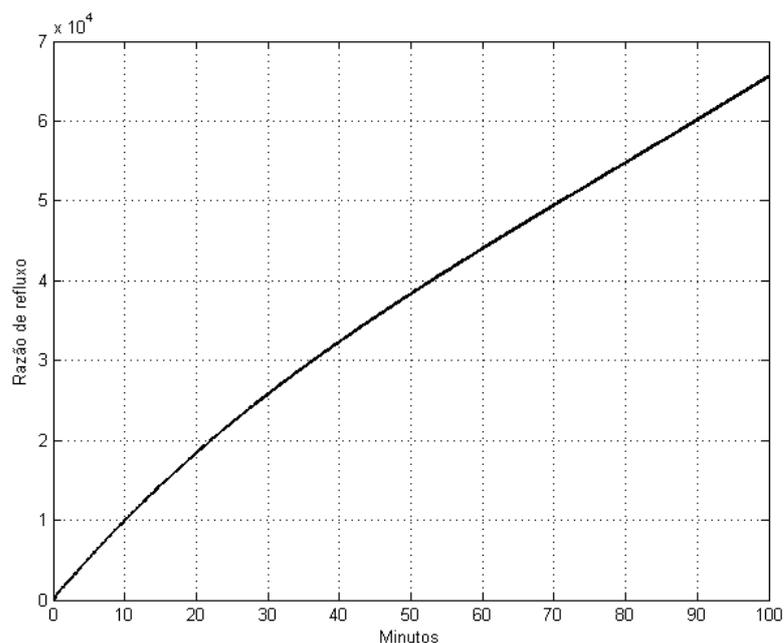


Figura 4.13 – Manipulação da vazão da razão de refluxo ao longo da destilação para o *setpoint* de 351,5993 K

4.5.4. Comparação entre as estratégias de controle

Conclui-se que, das três estratégias, apenas o controle feito a partir da manipulação da razão de refluxo não foi eficaz ao controlar a temperatura do pré-condensador. A Tabela 4.9 apresenta a concentração e a quantidade destilada armazenada no acumulador para todos os casos. Observa-se que em todas as situações onde a temperatura do pré-condensador controlada, a concentração foi superior à situação sem nenhuma ação de controle, ainda que o controle por meio da manipulação da razão de refluxo não tenha sido eficiente. Por outro lado, a quantidade destilada foi maior na situação onde não houve nenhuma ação de controle.

Tabela 4.9 – Comparação entre a composição e a quantidade destilada para as situações estudadas

Estratégia	Concentração molar	Quantidade destilada
Sem controle	0,88723	4455,91 mol
Manipulação da vazão de vapor no destilador	0,89226	973,265 mol
Manipulação da vazão de água no pré-condensador	0,89232	2225,06 mol
Manipulação da razão de refluxo	0,8726	19,4609 mol

As quantidades destiladas e as concentrações acumuladas como produto final da destilação podem ser avaliadas pelas figuras 4.14, 4.15 e 4.16, as quais apresentam as vazões de produto destilado e a concentração de topo (condensador) para a manipulação por meio da vazão de vapor saturado, por meio da vazão de água de resfriamento e por meio da razão de refluxo, respectivamente.

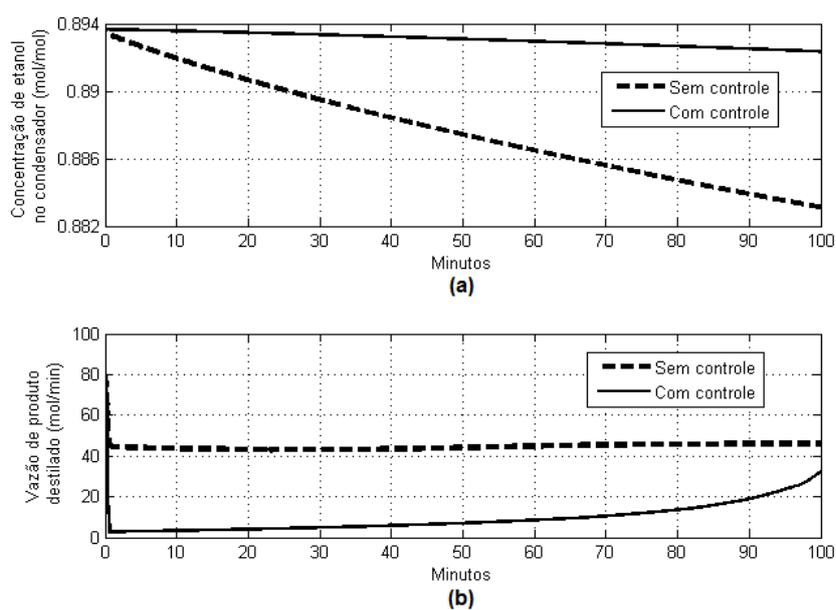


Figura 4.14 – (a) Concentração de topo e (b) Vazão de produto destilado pela manipulação da vazão de vapor saturado no destilador

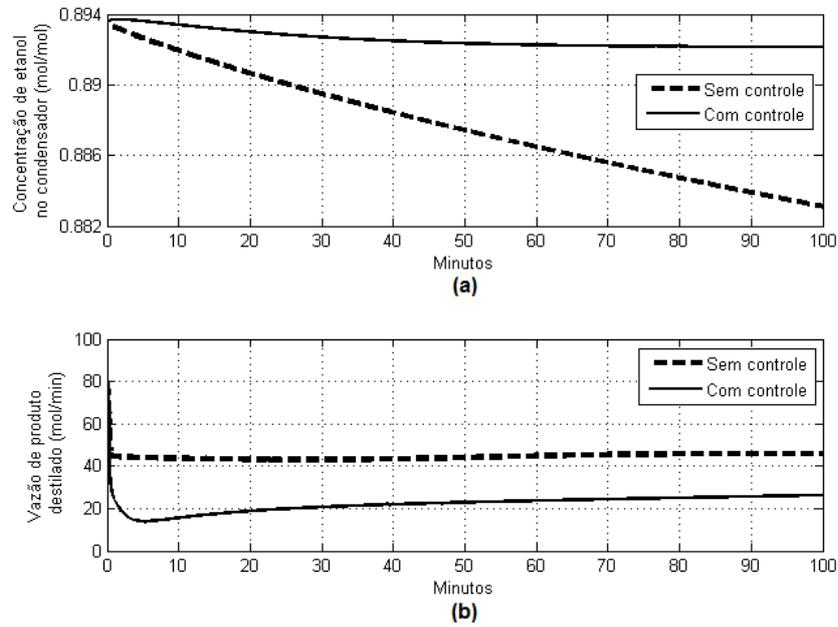


Figura 4.15 – (a) Concentração de topo e (b) Vazão de produto destilado pela manipulação da vazão água de resfriamento no pré-condensador

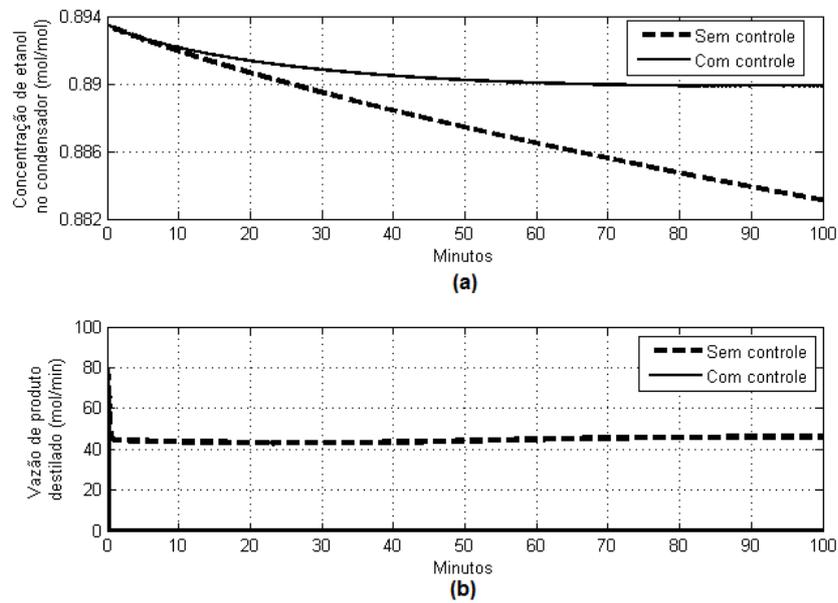


Figura 4.16 – (a) Concentração de topo e (b) Vazão de produto destilado pela manipulação da razão de refluxo

Observa-se que em todos os casos a operação da coluna sem nenhuma ação de controle gerou um produto de topo em menor concentração e em maior quantidade, justificando a quantidade acumulada e a composição do produto final apresentados na Tabela 4.9. Por outro lado, o controle pela manipulação da razão de refluxo foi a pior estratégia de controle, pois, como pode ser observado na figura 4.16 (b), teve a menor quantidade de produto destilado, sendo muito próxima a 0 mol/min durante praticamente toda a destilação, tendo em vista os altos valores para a razão de refluxo. Ainda, o controle da temperatura pela manipulação da vazão de vapor saturado no destilador formou um produto com alta pureza, em quantidade razoável. Porém, a melhor estratégia de controle foi a que manipulou a vazão de água de resfriamento no pré-condensador, formando o produto com a maior concentração e com a maior quantidade destilada, chegando próxima à metade da quantidade na situação onde nenhuma ação de controle foi empregada. Esta situação é explicada a partir da análise da figura 4.15, onde, em comparação com as demais estratégias de controle, foi a que registrou os melhores resultados, mantendo a vazão de produto destilado e a concentração de topo nos valores mais altos ao longo da destilação.

5. CONCLUSÕES

O foco deste trabalho foi estudar a etapa de purificação do etanol até as especificações de etanol combustível hidratado. Para tanto, optou-se pela construção de modelos de colunas de destilação, baseados em uma coluna de destilação descontínua localizada no colégio politécnico da Universidade Federal de Santa Maria.

Os modelos de colunas de destilação descontínua são modelos de relativa complexidade, envolvendo um conjunto de equações diferenciais referentes aos balanços de massa e de energia em cada estágio de equilíbrio, além das demais equações algébricas do sistema. Para a solução do sistema dinâmico de equações algébrico-diferenciais resultante da modelagem da coluna de destilação, o método integrador DASSL foi utilizado, se mostrando eficiente. O primeiro modelo proposto visou avaliar a dinâmica da destilação descontínua, bem como o modelo de equilíbrio da mistura líquida e vapor. Já o segundo modelo foi proposto com o intuito de avaliar as quantidades de energia trocadas na base e no topo da coluna com o objetivo de desenvolver estratégias de controle para a coluna de destilação descontínua.

A dinâmica do modelo da coluna de destilação descontínua mostrou-se coerente, tendo em vista que no início e no fim a destilação se dá no estado transiente, e, entre estes dois períodos, no estado pseudoestacionário. Ainda que o modelo da coluna de destilação descontínua conseguiu representar a dinâmica característica do processo, houve a necessidade de um modelo termodinâmico para o equilíbrio líquido-vapor em cada estágio que fosse capaz de prever a composição do azeótropo da para a mistura etanol-água, pois se trata de uma mistura não ideal. A análise dos modelos de *Van Laar*, *Margules*, *Wilson* e UNIFAC

modificado (Dortmund) para o cálculo do coeficiente de atividade da mistura líquida, e dos modelos de *Peng-Robinson e Redlich-Kwong* para o cálculo dos coeficientes de fugacidade da mistura vapor mostrou que a combinação do modelo de *Van Laar* para a atividade do líquido aliado ao modelo ideal para mistura vapor foi o que apresentou os melhores resultados para o modelo da coluna de destilação batelada proposto neste trabalho, chegando muito próximo à composição e a temperatura do azeótropo previstas na literatura.

A fim de tornar possível a elaboração de estratégias de controle foi proposto um segundo modelo, tendo como referência a coluna de destilação descontínua do Colégio Politécnico da Universidade Federal de Santa Maria. Este modelo previu a manipulação de variáveis como a vazão de vapor saturado adicionado ao destilador, a vazão de água utilizada no pré-condensador no topo da coluna e também a razão de refluxo da coluna.

A análise do processo em malha aberta avaliou, separadamente, a vazão de vapor saturado, a vazão de água no pré-condensador e a razão de refluxo como variáveis de entrada, e a temperatura do pré-condensador como variável de saída. Isto se deve ao fato de o pré-condensador controlar, além da composição, a vazão de produto no topo da coluna de destilação. Além disso, o condensador, acoplado em série com o pré-condensador, devido à simplificação do modelo, tem apenas a função de condensar o produto final, ou seja, a troca de energia neste estágio não foi avaliada em função da limitação do modelo em considerar que não ocorre sub-resfriamento do produto de topo. O processo de identificação de modelos discretos escolhido para representar a resposta da temperatura do pré-condensador mediante a perturbação em todas as variáveis manipuladas foi o modelo OE (*Output Error*), apesar do modelo BJ (*Box-Jenkins*) e do modelo ARMAX (*Autoregressive Moving Average Exogenous input*) apresentarem desempenho semelhante.

O algoritmo de controle utilizado para controlar a coluna de destilação a partir das variáveis manipuladas foi o controlador Proporcional Integral (PI), e os métodos de sintonia avaliados foram: Ziegler Nichols, ITAE, Kappa-Tau, IMC e Cohen-Coon. Os métodos de sintonia que apresentaram os melhores resultados foram o método ITAE regulatório para a manipulação da vazão de vapor saturado; o método de Kappa-Tau para desempenho, com parametrização Tau, para a manipulação da vazão de água no pré-condensador; e o método de Kappa-Tau para robustez, com parametrização Tau, para a manipulação da razão de refluxo.

A avaliação dos controladores em malha fechada atuando no modelo proposto mostrou que o controle feito apenas com a manipulação da razão de refluxo não é eficiente para controlar a temperatura de topo num *setpoint* estabelecido. Já os controladores da vazão de

vapor saturado no destilador e da vazão de água no pré-condensador conseguem manter a temperatura no *setpoint* desejado. A manipulação da vazão de vapor para o controle da temperatura do pré-condensador formou um produto, embora com boa qualidade, em pouca quantidade, produzindo apenas pouco mais de um quinto do que se forma quando a coluna opera sem nenhuma ação de controle. Já o controle por meio da manipulação da vazão da água do pré-condensador se mostrou mais eficiente, tendo em vista que forma em torno da metade da quantidade de produto, porém com composição próxima ao azeótropo, quando comparada em relação à operação sem nenhuma ação de controle, que, apesar da maior quantidade formada, possui qualidade inferior.

Como sugestão de trabalhos futuros cita-se o desenvolvimento de um modelo mais rigoroso, com a inclusão dos balanços de energia nos demais estágios de equilíbrio. Visando uma aplicação prática deste estudo, sugere-se a instrumentação da coluna de destilação descontínua do Colégio Politécnico da Universidade Federal de Santa Maria. Isto possibilitaria a validação do modelo proposto e a implementação da estrutura de controle proposta. Por fim, poderiam ser estudados outros algoritmos de controle, a fim de testar a eficiência e compará-los com o algoritmo PI abordado neste trabalho.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ADEL, I.M. ELAMVAZUTHI, I., HANIF, N.H.H.B.M. **Monitoring and Controlling System for Binary Distillation Column.** Student Conference on Research and Development, p. 453- 456, 2009;

AJANOVIC, A. **Biofuels versus food production: Does biofuels production increase food prices?** Energy 36, p. 2070-2076, 2011;

ALMEIDA, I.R. de; SILVA, S.D.A. **Paralelo 30: futuro eixo para produção de etanol no RS?** 2011. Artigo em Hypertexto. Disponível em: <http://www.infobibos.com/Artigos/20113/paralelo30/index.htm> Acesso em: julho de 2012;

ANP - Agência Nacional de Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis. **Resolução ANP nº 7,** 2011. Disponível em: http://nxt.anp.gov.br/NXT/gateway.dll/leg/resolucoes_anp/2011/fevereiro/ranp%207%20-%202011.xml Acessado em: setembro de 2012;

ANP - Agência Nacional de Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis. **BIOCOMBUSTÍVEIS,** 2012. Disponível em: <http://www.anp.gov.br/?pg=60467&m=mundial&t1=&t2=mundial&t3=&t4=&ar=0&ps=1&cachebust=1348594259163> Acessado em: setembro de 2012.

ÅSTRÖM, K. J., HÄGGLUND, T. **PID Controllers: Theory, Design, and Tuning.** Instrument Society of America. 1995.

- ASTROM, K.J., HAGGLUND, T. **The future of PID control.** Control Engineering Practice 9, p. 1163–1175, 2001;
- BALAT, M.; BALAT, H. **Recent trends in global production and utilization of bio-ethanol fuel.** Applied Energy, 86, p. 2273–2282, 2009.
- BARROZO-MUÑOZ, F.O., HERNÁNDEZ, S., OGUNNAIKE, B. **Analysis of Design and Control of Reactive Thermally Coupled Distillation Sequences.** 17th European Symposium on Computer Aided Process Engineering, p. 877-882, 2007;
- BAUR, R. *et al.* **Comparison of equilibrium stage and nonequilibrium stage models for reactive distillation.** Chemical Engineering Journal 76, p. 33–47, 2000;
- BEHROOZSARAND, A., SHAFIEI, S. **Optimal control of distillation column using Non-Dominated Sorting Genetic Algorithm-II.** Journal of Loss Prevention in the Process Industries 24, p. 25-33, 2011;
- BISCAIA JR., E. C., VIEIRA, R.C. **Heuristic optimization for consistent initialization of DAEs.** Computers & Chemical Engineering, 24, p. 2183-2191, 2000;
- BNDES – Banco Nacional do Desenvolvimento. **O déficit de produção de etanol no Brasil entre 2012 e 2015: determinantes, consequências e sugestões de política.** BNDES setorial 35 p. 277-302, 2012;
- BEQUETTE, B. W. **Process Control: Modeling, Design and Simulation.** Prentice Hall PTR., 2010;
- BEQUETTE, B. W. **Process Dynamics: Modeling, Analysis and Simulation.** Prentice Hall PTR., 1998;
- CAMPOS, M. C. M. M.; TEIXEIRA, H. C. G. **Controles Típicos de equipamentos e processos industriais.** Editora Blucher. 396 p., 2010;
- CHAISINBOON, O., CHONTANAWAT, J., **Factors Determining the Competing Use of Thailand's Cassava for Food and Fuel.** Energy Procedia 9, p. 216–229, 2011;
- CHOE, Y.S., LUYBEN, W.L. **Rigorous Dynamic Models of Distillation Columns.** Industrial & Engineering Chemistry Research 26, p.2158-2161, 1987;

COHEN, G. H.; COON, G. A. **Theoretical Consideration of Retarded Control**. Trans. A.S.M.E., 76, p. 827-834, 1953.

CONAB – Companhia Nacional de Abastecimento. **Acompanhamento da safra brasileira: cana-de-açúcar. Segundo levantamento**, 2012. Disponível em: http://www.conab.gov.br/OlalaCMS/uploads/arquivos/12_08_09_15_07_05_boletim_cana_portugues_-_agosto_2012_2o_lev.pdf Acessado em: setembro de 2012;

CRAGO, C.L. *et al.* **Competitiveness of Brazilian sugarcane ethanol compared to US corn ethanol**. Energy Policy 38, p. 7404–7415, 2008;

DISTEFANO, G.P. **Mathematical modeling and numerical integration of multicomponent batch distillation equations**. AIChE Journal 14, p. 190–199, 1968;

DIWEKAR, U.M. **Batch distillation: simulation, optimal design and control**. Washington, DC: Taylor & Francis, 1995.

DODIC, J. M. *et al.* **Kinetic modelling of batch ethanol production from sugar beet raw juice**. Applied Energy 99, p. 192–197, 2012;

DOMINGUES, T.L., **Avaliação da eficiência de pratos valvulados com *downcomer* e pratos *dualflow* em colunas de destilação industriais**. Dissertação de mestrado – PPGEQ/UFRGS. Porto Alegre, 2005;

EMBRAPA – Empresa Brasileira de Pesquisa Agropecuária. **Zoneamento Agroecológico da cana-de-açúcar**, 2009. Disponível em: http://www.cnps.embrapa.br/zoneamento_cana_de_acucar/ZonCana.pdf Acessado em: setembro de 2012;

ENWEREMADU, C., WAHEED, A., OJEDIRAN, J. **Parametric study of an ethanol–water distillation column with direct vapour recompression heat pump**. Energy for Sustainable Development 13, p. 96-105, 2009;

FABRO, J.A., ARRUDA, L.V.R, NEVES Jr, F. **Startup of a distillation column using intelligent control techniques**. Computers and Chemical Engineering 30, p. 309–320, 2005;

- FACCIN, F. **Abordagem inovadora no projeto de controladores PID**. Dissertação de mestrado – UFRGS, 2004;
- FARRELL, A. E. *et al.* **Ethanol can contribute to energy and environmental goals**. Science 311, p. 506–508, 2006;
- FONSECA, M.O., SEIXAS, C., TORRES, B.S. **Avaliação de Desempenho e Auditoria de Malhas de Controle**. Intech Brasil 63, p. 32-35, 2004;
- GARCIA, C.E; MORARI, M. **Internal Model Control – 1. Unifying Review and some new results**. Industrial & Engineering Chemistry Process Design and Development, 21. p. 308-323, 1982;
- GEAR, C.W. **Simultaneous Numerical Solution of Differential-Algebraic Equations**. IEEE Transactions on Circuit Theory 18 (1), 1971;
- GOLDEMBERG, J. COELHO, S.T., GUARDABASSI, P. **The sustainability of ethanol production from sugarcane**. Energy Policy 36, p. 2086– 2097, 2008;
- HAELSSIG, J.B. *et al.* **Membrane Dephlegmation: A hybrid membrane separation process for efficient ethanol recovery**. Journal of Membrane Science 381, p. 226–236, 2011;
- HENLEY E.J., SEADER, J.D. **Equilibrium-stage separation operations in chemical engineering**. EUA, John Wiley & Sons, Inc., 1981;
- HINDMARSH, A.C. **LSODE and LSODI, two new initial value ordinary differential equation solvers**. Livermore, California 94550, 1980;
- HIRSCHBERG, S., WIJN, E.F., WEHRLI, M. **Simulating the two phase flow on column trays**. Chemical Engineering Research and Design 83, p. 1410-1424, 2005;
- HOLLAND, C.D., LIAPIS, A.I. **Computer methods for solving dynamic separation problems**. McGraw-Hill Book Company, 1983;
- IEA – International Energy Agency. **Technology Roadmap – Biofuels for Transport**. 2011;
- IKONEN, E.; NAJIM, K. **Advanced process identification and control**. New York. Editora Marcel Dekker, Inc., 2002;

- JAIN, S., KIM, J., SMITH, R. **Operational Optimization of Batch Distillation Systems.** Industrial & Engineering Chemistry Research, 51, p. 5749–5761, 2012;
- JIN, Y. *et al.* **Comparison of ethanol production performance in 10 varieties of sweet potato at different growth stages.** Acta Oecologica xxx, p. 1-5, 2012;
- KELLER, T., GORAK, A. **Modelling of homogeneously catalysed reactive distillation processes in packed columns: Experimental model validation.** Computers and Chemical Engineering 48, p. 74–88, 2013;
- KISTER, H.Z. **Distillation Operation.** California – EUA. Editora McGraw-Hill, Inc., 1990;
- KISTER, H.Z. **Distillation design.** California – EUA. Editora McGraw-Hill, Inc., 1992;
- KOOIJMAN, H.A. **Dynamic nonequilibrium column simulation.** Tese de doutorado - Clarkson University, 1995;
- KUMAR, S., SINGH, N., PRASAD, R. **Anhydrous ethanol: A renewable source of energy.** Renewable and Sustainable Energy Reviews 14, p. 1830–1844, 2010;
- LEE, F., PAHL, R.H. **Solvent Screening Study and Conceptual Extractive Distillation Process To Produce Anhydrous Ethanol from Fermentation Broth.** Industrial & Engineering Chemistry Process Design and Development 24, p. 168-172, 1985;
- LEITE, R.C.C. *et al.* **Can Brazil replace 5% of the 2025 gasoline world demand with ethanol?** Energy 34, p. 655–661, 2009;
- LIMANA POLISERVIÇOS. **Manual de operação: Modelo DBL-600,** 2008;
- LINTON, J.A. *et al.* **Economic feasibility of producing sweet sorghum as an ethanol feedstock in the southeastern United States.** Biomass and Bioenergy 35, p. 3050-3057, 2011;
- LLANO-RESTREPO, M., AGUILAR-ARIAS, J. **Modeling and simulation of saline extractive distillation columns for the production of absolute ethanol.** Computers and Chemical engineering 27, p. 527-549, 2003;

- LONGHI, L.G.S. **Solução do problema de controle \mathcal{H}_∞ não-linear**. Rio de Janeiro. UFRJ – COPPE, 2001;
- LOPEZ, A. M. et al. **Tuning Controllers wit error-Integral Criteria**. Instrumentation Technology, 14. P. 57-62, 1967;
- LOPEZ, A. M.; MURRIL, P.; SMITH, C. L. **Tuning PI and PID Digital Controllers**. Instruments and Control Systems, 42, p. 89-95, 1969;
- LUYBEN, W.L. **Inherent Dynamic Problems with On-Demand Control Structures**. Industrial & Engineering Chemistry Research 38, p. 2315-2329, 1999;
- LUZ Jr. L.F.L. **Modelagem e simulação da destilação multicomponente em batelada**. Dissertação de mestrado – UNICAMP, 1993;
- MARTINS; A. T. **Projeto de um controlador PI-MIMO para uma planta de produção de poliestireno**. Dissertação de mestrado – UFRGS, 2009;
- MICHEL Jr, R.J.S. **Obtenção do álcool etílico hidratado, com graduação alcoólica para uso automotivo: validação de um processo em batelada**. Dissertação de mestrado – PPGEPro/UFSM. Santa Maria, 2010;
- MME - Ministério de Minas e Energia - Secretaria de Planejamento e Desenvolvimento Energético. **Plano Decenal de expansão de energia 2021**. MME/EPE. Brasília, 2012. Disponível em: http://www.epe.gov.br/PDEE/20120924_1.pdf Acessado em: Setembro de 2012.
- MOSER, B. VAUGHN, S.F. **Efficacy of fatty acid profile as a tool for screening feedstocks for biodiesel production**. Biomass and Bioenergy 37, p. 31-41, 2012;
- MUJTABA, I.M. **Batch distillation: design and operation**. University of Bradford, UK. Imperial College Press, 2004;
- NIGAN, P.S., SINGH, A. **Production of liquid biofuels from renewable resources**. Progress in Energy and Combustion Science 37, p. 52-68, 2011;

- NOERES, C., KENIG, E.Y., GORAK, A. **Modelling of reactive separation processes: reactive absorption and reactive distillation.** Chemical Engineering and Processing 42, p. 157-178, 2003;
- NOORAI, A., FIGUEROA, J., ROMAGNOLI, J.A. **Robustness analysis and control of a pilot-scale distillation column.** Computers and Chemical Engineering 21 (7), p. 703-717, 1997;
- O'DWYER, A. **Handbook of PI and PID Controller Tuning Rules.** London: World Scientific, 2003
- OGATA, K. **Modern Control Engineering.** 3^a Ed. Prentice Hall, Inc. 2000;
- PETZOLD, L.A. **A description of DASSL: a differential/algebraic equation system solver,** STR, SAND 82-8637, Livermore, 1982;
- PERRY, R. H. **Manual do Engenheiro Químico.** 7th ed. Nova York: McGraw-Hill, 1999.
- RANZI, E. *et al.* **Role of energy balances in dynamic simulation of multicomponent distillation columns.** Computer and Chemical Engineering 12 (8), p. 783-786, 1988;
- RATHMANN, R., SZKLO, A., SCHAEFFER, R. **Land use competition for production of food and liquid biofuels: An analysis of the arguments in the current debate.** Renewable Energy 35, p. 14-22, 2010;
- RAYLEIGH, L., Philos. Magazine (VI), 521, 1902.
- REIS, M.H.M. *et al.* **Application of Plate and Component Efficiency Correlations in Homogeneous Azeotropic Distillation Processes.** Industrial & Engineering Chemistry Research 45, p. 5755-5760, 2006;
- REN21 – Renewable Energy Policy Network for the 21st century. **Renewables 2012 – Global Status Report.** 2012.
- RIVERA, D. E., MORARI, M., SKOGESTAD, S. **Internal Model Control. 4. PID Controller Design.** Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev., 25, p. 252-265, 1986.

- ROVIRA, A. A., MURRIL, P. W., SMITH, C. L. **Tuning Controllers for setpoint changes.** Instruments and Control Systems, 42, p. 67-69, 1969.
- RUIZ, C.A., CAMERON, I.T., GANI, R. **A generalized dynamic model for distillation columns-III. Study of startup operations.** Computers and Chemical Engineering 12 (1), p. 1-14, 1988;
- SALAU; N.P.G. **Controle de temperatura em reatores de polimerização em fase gasosa.** Dissertação de mestrado – UFRGS, 2004;
- SHULTES, M. **Raschig super-ring: a New Fourth Generation Packing Offers New Advantages.** Trans IChemE 81, Part A, 2003;
- SIMONS, S.J.R. **Concepts of Chemical Engineering for Chemists.** Department of Chemical Engineering, University College London, London, UK. Editora RCS Publishing, 2007;
- SKJELLUM, A., MORARI, M. **Concurrent DASSL Applied to Dynamic Distillation Column Simulation.** Distributed Memory Computing Conference - DMCC, 1990;
- STAUDT, P.B., **Modelagem e simulação dinâmica de colunas de destilação.** Dissertação de mestrado – PPGEQ/UFRGS. Porto Alegre, 2007;
- SEADER, J.D., HENLEY, E.J. **Separation process principles.** 2° edition. John Wiley & Sons, Inc., 2006;
- SMITH, C. A.; CORRIPIO, A. B. **Principles and practice of automatic process control.** New York: John Wiley & Sons. 1985.
- SMITH, J. M.; VAN NESS, H. C.; ABBOTT, M. M. **Introdução à Termodinâmica da Engenharia Química.** Rio de Janeiro: Editora LTC, 5° edição, 2000;
- SOARES, R. de P. **Desenvolvimento de um simulador genérico de processos dinâmicos.** Dissertação (Mestrado) – PPGEQ-UFRGS, 2003;
- STENZ, R., KUHN, U. Automation of a Batch Distillation Column Using Fuzzy and Conventional Control. Transactions on Control Systems Technology 3 (2), p. 171-176, 1995;

- TABRIZI, M.H.N., EDWARDS, J.B. **Modelling short packed and tray-type distillation columns for controller design**. Mathematical and Computer Modelling 16, p. 131-146, 1992;
- THOMAS, P. **Simulation of Industrial Processes for control engineers**. Department of Electrical, Electronic and Information Engineering, City University, London, UK. Butterworth Heinemann, 1999;
- TRUONG, H.S., ISMAIL, I., RAZALI, R. **Fundamental Modeling and Simulation of a Binary Continuous Distillation Column**. International Conference Intelligent and Advanced Systems (ICIAS), p. 1-5, 2010;
- UE - União Europeia. **More Sustainable Energy in Road Transport Targets**. PARLAMENTO EUROPEU, 2008. Disponível em: <http://www.europarl.europa.eu/sides/getDoc.do?type=IM-PRESS&reference=20080909IPR36658&language=NL> Acessado em: setembro de 2012;
- UNICA – União da Agroindústria Canavieira. **Guia do etanol**. 07 de novembro de 2010. Disponível em: <http://www.unica.com.br/documentos/publicacoes/etanol/> Acessado em: fevereiro de 2013;
- VRTECH. VRTherm, **A software to predict thermodynamic and physical properties of complex mixtures and pure substances**. www.vrthec.com.br. 2005;
- WANG, G.Q., YUAN, X.G., YU, K.T. **A method for calculating effective interfacial area of structured packed distillation columns under elevated pressures**. Chemical Engineering and Processing 45, p. 691–697, 2006;
- WANG, L. *et al.* **A startup model for simulation of batch distillation starting from a cold state**. Computers and Chemical Engineering 27, p. 1485-1497, 2003;
- WARTER, M., DEMICOLI, D., STICHLMAIR, J. **Operation of a batch distillation column with a middle vessel: experimental results for the separation of zeotropic and azeotropic mixtures**. Chemical Engineering and Processing 43, p. 263–272, 2004;
- WOZNY, G., LI, P. **Optimisation and experimental verification of startup policies for distillation columns**. Computers and Chemical Engineering 28, p. 253-265, 2004;

YAMADA, R; *et al.* **Direct and efficient ethanol production from high-yielding rice using a *Saccharomyces cerevisiae* strain that express amylases.** *Enzyme and Microbial Technology* 48, p. 393-396, 2011;

YANG, H. *et al.* **Emergy analysis of cassava-based fuel ethanol in China.** *Biomass and Bioenergy* 35, p. 581-589, 2011;

ZHU, X. **Rigorous dynamic model of a distillation process and its application.** *Control and Automation (ICCA)*, 8th IEEE International Conference, p. 1076-1080, 2010;

ZIEGLER, J. G. & NICHOLS, N. B. **Optimum setting for automatic controllers.** *Tran. ASME*, p. 64, 759-768. 1942.

APÊNDICES

APÊNDICE A – Entalpias da mistura etanol-água nas fases líquida e vapor

De acordo com Llano-Restrepo e Aguilar-Arias (2003), a entalpia de gás ideal para cada componente é calculada pela equação A1 e a entalpia de vaporização pelas equações A2 e A3. Em todos os casos as entalpias são dependentes da temperatura do sistema (T) e da temperatura de referência (T_0).

$$h_i^{gi}(T) = h_i^{gi}(T_0) + A_1 \cdot (T - T_0) + B_1 \cdot C_1 \cdot \left[\coth\left(\frac{C_1}{T}\right) - \coth\left(\frac{C_1}{T_0}\right) \right] - D_1 \cdot E_1 \cdot \left[\tanh\left(\frac{E_1}{T}\right) - \tanh\left(\frac{E_1}{T_0}\right) \right] \quad (A1)$$

$$\Delta h_i^{vap} = A_2 \cdot (1 - T_r)^{F_2} \quad (A2)$$

$$F_2 = B_2 + C_2 \cdot T_R + D_2 \cdot T_R^2 + E_2 \cdot T_R^3 \quad (A3)$$

onde h^{gi} é a entalpia do vapor considerando comportamento de gás ideal, Δh^{vap} é entalpia de vaporização e T_r é a temperatura reduzida, calculada pela razão entre a temperatura do sistema (T) e a temperatura crítica (T_C) do componente. Ainda, os coeficientes A_1 , B_1 , C_1 , D_1 e E_1 são os coeficientes referentes aos componentes etanol e água para o cálculo da entalpia de gás ideal, ao passo que os coeficientes A_2 , B_2 , C_2 , D_2 , E_2 e T_C são referentes ao etanol e a água para o cálculo da entalpia de vaporização, apresentados na tabela 1.

O cálculo da entalpia da fase líquida (h^{liq}) é feito por meio da diferença entre a entalpia da fase vaporizada e a entalpia de vaporização (equação 4). Já as entalpias da mistura etanol e água para a fase vaporizada (h^v) e para a fase líquida (h^l) são calculadas pelas equações 5 e 6, respectivamente, onde $x_{água}$, x_{etanol} , $y_{água}$ e y_{etanol} são as composições de água e de etanol, na fase líquida e na fase vapor, respectivamente.

Tabela 1. Coeficientes o cálculo das entalpias de gás ideal e de vaporização para etanol e água

	Entalpia de gás ideal			Entalpia de vaporização	
	Etanol	Água		Etanol	Água
A₁	4,39x10 ⁴	3,3363x10 ⁴	A₂	5,69x10 ⁷	5,2053x10 ⁷
B₁	1,463x10 ⁵	2,679x10 ⁴	B₂	0,3359	0,3199
C₁	1,404x10 ³	2,6105x10 ³	C₂	0	-0,212
D₁	7,82x10 ⁴	8,896x10 ³	D₂	0	0,25795
E₁	6,135x10 ²	1,169x10 ³	E₂	0	0
			T_C	516,25 K	647,13 K

$$h_i^{liq}(T) = h_i^{gi}(T) - \Delta h_i^{vap} \quad (A4)$$

$$h^v(T, x_{etanol}, x_{agua}) = x_{etanol} \cdot h_{etanol}^{gi}(T) + x_{agua} \cdot h_{agua}^{gi}(T) \quad (A5)$$

$$h^l(T, y_{etanol}, y_{agua}) = y_{etanol} \cdot h_{etanol}^{liq}(T) + x_{agua} \cdot h_{agua}^{liq}(T) \quad (A6)$$

A fim de simplificar o cálculo das entalpias as equações A1, A2, A3, A4, A5 e A6 foram aproximadas para polinômios com a utilização do Microsoft Office Excel, com a utilização de adição de linha de tendência, fornecendo a equação polinomial correspondente e o ajuste da equação. As equações A7 e A8 apresentam as aproximações para o cálculo da entalpia de gás ideal para o etanol e água, respectivamente; enquanto que a equação 9 apresenta a aproximação polinomial para o cálculo da entalpia do etanol na fase líquida e a equação 10 para a entalpia de água na fase líquida.

$$h_{etanol}^{gi}(T) = (1,11462 \cdot 10^{-7} \cdot T^3 - 9,68961 \cdot 10^{-5} \cdot T^2 + 7,6185 \cdot 10^{-2} \cdot T - 17,0553) \quad (A7)$$

$$h_{agua}^{gi}(T) = (7,733644 \cdot 10^{-9} \cdot T^3 - 4,773107 \cdot 10^{-6} \cdot T^2 + 3,436112 \cdot 10^{-2} \cdot T - 10,02544) \quad (A8)$$

$$h_{etanol}^{liq}(T) = h_{etanol}^{gás\ ideal}(T) - (-4,34395 \cdot 10^{-7} \cdot T^3 + 2,985557 \cdot 10^{-4} \cdot T^2 - 1,279973 \cdot 10^{-1} \cdot T + 65,7334) \quad (A9)$$

$$h_{água}^{liq}(T) = h_{água}^{gás\ ideal}(T) - (-1,526024 \cdot 10^{-7} \cdot T^3 + 8,103438 \cdot 10^{-5} \cdot T^2 - 4,354331 \cdot 10^{-2} \cdot T + 53,69305) \quad (A10)$$

A partir das aproximações polinomiais apresentadas nas equações A7-A10, e com o auxílio das equações A5 e A6 é possível calcular a entalpia das fases líquida e vapor para a mistura de etanol e água a partir da temperatura do sistema (T) e da composição em cada fase ($x_{água}$, x_{etanol} , $y_{água}$ e y_{etanol}). Os valores das entalpias são dados em kJ/mol, as temperaturas em K, e as composições em termos de frações molares.

APÊNDICE B – Modelos para o cálculo do coeficiente de atividade

Modelo de *Van Laar*

De acordo com Smith e colaboradores (2000), os coeficientes de atividade do etanol (γ_1) e da água (γ_2) na mistura binária etanol-água a partir da equação de *Van Laar* são calculados pela equação B1 e pela equação B2, respectivamente.

$$\ln(\gamma_1) = A'_{12} \cdot \left(1 + \frac{A'_{12}x_1}{A'_{21}x_2}\right)^{-2} \quad (\text{B1})$$

$$\ln(\gamma_2) = A'_{21} \cdot \left(1 + \frac{A'_{21}x_2}{A'_{12}x_1}\right)^{-2} \quad (\text{B2})$$

onde x_1 e x_2 são as composições do etanol e da água, respectivamente, e os coeficientes A'_{12} e A'_{21} estão na tabela B1.

Tabela B1. Parâmetros para o cálculo dos coeficientes de atividade pela equação de *Van Laar* para o sistema etanol (1) – água (2)

A'_{12}	1,6798
A'_{21}	0,9227

Fonte: PERRY e colaboradores (1999)

Modelo de *Margules*

De acordo com Smith e colaboradores (2000), os coeficientes de atividade do etanol (γ_1) e da água (γ_2) na mistura binária etanol-água a partir da equação de *Margules* são calculados pela equação B3 e pela equação B4, respectivamente.

$$\ln(\gamma_1) = x_2^2 \cdot (A_{12} + 2 \cdot (A_{21} - A_{12}) \cdot x_1) \quad (\text{B3})$$

$$\ln(\gamma_2) = x_1^2 \cdot (A_{21} + 2 \cdot (A_{12} - A_{21}) \cdot x_2) \quad (\text{B4})$$

onde x_1 e x_2 são as composições do etanol e da água, respectivamente, e os coeficientes A_{12} e A_{21} estão na tabela B2.

Tabela B2. Parâmetros para o cálculo dos coeficientes de atividade pela equação de *Margules* para o sistema etanol (1) – água (2)

A_{12}	1,6022
A_{21}	0,7947

Fonte: PERRY e colaboradores (1999)

Modelo de *Wilson*

De acordo com Smith e colaboradores (2000), os coeficientes de atividade do etanol (γ_1) e da água (γ_2) na mistura binária etanol-água a partir da equação de *Wilson* são calculados pela equação B5 e pela equação B6, respectivamente.

$$\ln(\gamma_1) = -\ln(x_1 + x_2\Lambda_{12}) + x_2 \cdot \left(\frac{\Lambda_{12}}{x_1 + x_2 \cdot \Lambda_{12}} - \frac{\Lambda_{21}}{x_2 + x_1 \cdot \Lambda_{21}} \right) \quad (\text{B5})$$

$$\ln(\gamma_2) = -\ln(x_2 + x_1\Lambda_{21}) + x_1 \cdot \left(\frac{\Lambda_{12}}{x_1 + x_2 \cdot \Lambda_{12}} - \frac{\Lambda_{21}}{x_2 + x_1 \cdot \Lambda_{21}} \right) \quad (\text{B6})$$

onde x_1 e x_2 são as composições do etanol e da água, respectivamente, e os coeficientes Λ_{12} e Λ_{21} estão na tabela B3.

Tabela B3. Parâmetros para o cálculo dos coeficientes de atividade pela equação de *Wilson* para o sistema etanol (1) – água (2)

Λ_{12}	325,075
Λ_{21}	953,279

Fonte: PERRY e colaboradores (1999)

APÊNDICE C – Cálculo da pressão de saturação

O cálculo da pressão de saturação para o etanol e para a água são representados pelas equações C1 e C2, respectivamente.

$$P_{\text{etanol}}^{\text{Saturação}}(T) = 10^{\left[A(1) - \frac{B(1)}{C(1)+T}\right]} \quad (\text{C1})$$

$$P_{\text{Água}}^{\text{Saturação}}(T) = 10^{\left[A(2) - \frac{B(2)}{C(2)+T}\right]} \quad (\text{C2})$$

onde a temperatura (T) é dada em K, a pressão de saturação é dada em mmHg e os coeficientes A, B e C são indicados na tabela C1.

Tabela C1. Coeficientes do etanol e da água para o cálculo da pressão de saturação

	Etanol		Água
A(1)	7,5867	A(2)	8,07131
B(1)	1281,59	B(2)	1730,63
C(1)	193,768	C(2)	233,426

Fonte: PERRY e colaboradores (1999)

APÊNDICE D – Métodos de sintonia de controladores PI

Método Ziegler-Nichols

Desenvolvido por J. G. Ziegler e N. B. Nichols, ambos da *Taylor Instrument Companies*, foi o primeiro método de ajuste sistemático dos parâmetros de um controlador (Ziegler-Nichols, 1942). Ainda é largamente usado, quer em sua forma original ou em suas formas modificadas (Åström e Hägglund, 1995). No trabalho publicado por Ziegler-Nichols (1942), os autores desenvolveram métodos empíricos para o ajuste dos parâmetros do controlador baseado em testes práticos manuais realizados em determinados processos, utilizando o controlador comercial *Fulscope* da *Taylor Instrument Companies*. São dois métodos de ajuste: um baseado nas características do sistema em malha fechada (ganho e período ultimativo); e outro baseado na curva de reação do processo, modelada por meio de dois parâmetros (tempo morto efetivo e declividade da curva no ponto de maior inclinação). Os métodos de projeto diferem em relação ao conhecimento sobre a dinâmica do processo requerida. Por exemplo, o método de ajuste de Ziegler-Nichols baseado em ganho ultimativo (K_u) e período ultimativo (P_u) é caracterizado por esses dois parâmetros, sendo um relacionado ao ganho do processo (ganho ultimativo, K_u) e outro que descreve a sua rapidez (período ultimativo, P_u). Já o outro método baseia-se em parâmetros que são simplesmente obtidos da aproximação da dinâmica do sistema através de uma função de primeira ordem com tempo morto.

SMITH e CORRIPIO (1985) provaram a equivalência destes dois métodos de ajuste para uma função de primeira ordem com tempo morto. O método Ziegler-Nichols visa atingir uma resposta em malha fechada com razão de decaimento de $\frac{1}{4}$ para um sistema de primeira ordem com tempo morto. As regras de Ziegler-Nichols baseadas em uma função de primeira ordem com tempo morto são mostradas da Tabela D1.

Método Cohen Coon

Em 1953 foi proposto pelo engenheiro G. H. Cohen e pelo matemático G. A. Coon outro método baseado na razão de decaimento de $\frac{1}{4}$ em resposta a um distúrbio na carga, como o método Ziegler-Nichols (COHEN e COON, 1953). O método Cohen-Coon considera o processo com maior tempo morto, ou seja, com fator de incontrolabilidade (θ/τ) maior que

0,3. As regras de ajuste desse método são geralmente bastante agressivas, dando um bom desempenho para a rejeição de distúrbios, mas podendo apresentar respostas muito oscilatórias para mudanças no valor da variável de referência e ainda de gerar um controlador pouco robusto. As regras do método de Cohen-Coon para sintonia de controladores PI são mostradas na Tabela D1.

Método ITAE

O método de sintonia da integral do erro absoluto ponderado no tempo (ITAE) foi desenvolvido por um grupo de pesquisadores da *Louisiana State University* na década de 60, Este método busca minimizar critérios de desempenho baseados nas integrais de erro IAE (*Integral Absolute Error*), ISE, (*Integral Square Error*) e ITAE (*Integral Time weighted Absolute Error*). Este critério que melhor concilia propriedades de desempenho e robustez.

Por meio da resolução de um problema de otimização multiobjetivo, foram obtidas regras ótimas de ajuste dos parâmetros do controlador PID para diferentes conjuntos de parâmetros de um modelo de primeira ordem com tempo morto. Os resultados ótimos para características regulatórias foram apresentados por Lopez e colaboradores (1967), enquanto os resultados ótimos para características servo foram apresentadas por Rovira e colaboradores (1969). Um terceiro trabalho foi realizado por Lopez e colaboradores (1969), onde um estudo mais detalhado dos resultados ótimos pra controladores digitais discretos foi feito, e recomendou o uso dos resultados ótimos para o critério ITAE, por apresentar melhor desempenho do que outros critérios. As regras baseadas no critério ITAE para característica servo (distúrbio na carga) e característica regulatória (*setpoint*) para controladores PI são apresentadas na Tabela D1.

Método IMC

O Método IMC (*Internal Model Control*) foi proposto por D. E. Rivera, M. Morari e S. Skogestad em 1986 no *California Institute of Technology*, e demonstrou analiticamente que a estrutura IMC, inicialmente proposta por Garcia e Morari (1982), quando utilizada para projetos de controladores, conduz naturalmente a um algoritmo de controle do tipo PID, para um grande número de modelos típicos de processos industriais (RIVERA *et al.*, 1986).

De acordo com Faccin (2004), este método apresenta uma base teórica bastante fundamentada, analisando aspectos de desempenho, robustez e alguns fatores limitantes no desempenho do sistema de controle. Para o caso de modelos de primeira ordem com tempo morto, é proposta uma análise mais detalhada com uma regra de ajuste para os parâmetros do controlador na forma paralela com e sem filtro. Em ambos os casos, as regras são dadas em função de um parâmetro ajustável λ , que determina a velocidade da resposta. Quanto menor o valor de λ , mais rápida a resposta e melhor o desempenho, no entanto, a resposta será mais sensível a incertezas. As regras IMC para sintonia de controladores PI são apresentadas na Tabela D1.

Tabela D1– Regras de sintonia de controladores PI paralelo

Método	K_c	τ_i
Ziegler e Nichols	$\frac{0,9}{K} \left(\frac{\tau}{\theta} \right)$	$3.33 \times \theta$
Cohen e Coon	$\frac{1}{K} \left[0,9 + \frac{1}{12} \left(\frac{\theta}{\tau} \right) \right] \frac{\tau}{\theta}$	$\left[\frac{30 + 3 \left(\frac{\theta}{\tau} \right)}{9 + 20 \left(\frac{\theta}{\tau} \right)} \right] \times \theta$
ITAE-regulatório	$\frac{0,859}{K} \left(\frac{\tau}{\theta} \right)^{0,977}$	$\frac{\tau}{0,674} \left(\frac{\theta}{\tau} \right)^{0,68}$
ITAE-servo	$\frac{0,586}{K} \left(\frac{\tau}{\theta} \right)^{0,916}$	$\frac{\tau}{1,03 - 0,165 \cdot \frac{\theta}{\tau}}$
IMC	$\frac{2\tau + \theta}{2\lambda K}$	$\tau + \frac{\theta}{2}$

Método Kappa-Tau com parametrização Tau

Método proposto por Astrom e Hagglund (1995), o qual foi denominado pelos autores de método de Kappa-Tau. O nome se deve a parametrização adicional definida que é utilizada

para ajustar o resultado do projeto dos controladores obtido por métodos mais sofisticados de ajuste, os quais utilizam a máxima sensibilidade como critério de ajuste. Quando a parametrização Tau é utilizada, as características da resposta degrau são tomadas como base de ajuste dos parâmetros do controlador. Nesse caso utiliza-se como parâmetro adicional de ajuste o tempo morto normalizado, chamado pelos autores de Tau, definido pela equação D1.

$$Tau = \frac{\tau}{\theta + \tau} \quad (D1)$$

A Tabela D2 apresenta o ajuste para o caso de um controlador PI e sistemas estáveis. São dois casos distintos: projeto priorizando a robustez, onde a máxima sensibilidade é $M_s = 1,4$; e projeto priorizando o desempenho, onde a máxima sensibilidade é $M_s = 2$.

Tabela D2 – Fórmulas para o ajuste de controladores PI baseadas no método Kappa-Tau utilizando-se a parametrização Tau. A Tabela apresenta os parâmetros da função:

$$f(\tau) = a_0 \cdot \exp(a_1\tau + a_2\tau^2)$$

Tau = $\theta/(\theta+\tau)$	$M_s = 1,4$ (Robustez)			$M_s = 2,0$ (Desempenho)		
$f(\tau) = a_0 \cdot e^{(a_1 \cdot \tau + a_2 \cdot \tau^2)}$	a_0	a_1	a_2	a_0	a_1	a_2
$K_p \cdot K(\theta/\tau)$	0,29	-2,7	3,7	0,78	-4,1	5,7
T_I/θ	8,9	-6,6	3,0	8,9	-6,6	3,0
T_I/τ	0,79	-1,4	2,4	0,79	-1,4	2,4
b	0,81	0,73	1,9	0,44	0,78	-0,45

Fonte: Astrom e Hagglund (1995)

Método *Kappa-Tau* com parametrização *Kappa*

O método *Kappa-Tau* com parametrização *Kappa* foi proposto por Astrom e Hagglund (1995) com a proposta de melhorar o método originalmente proposto por Ziegler-Nichols baseado no ganho e no período ultimate. O ganho ultimate é o maior valor que um controlador puramente proporcional poderá ter antes de instabilizar a malha de controle,

ou seja, é o ganho que leva os pólos em malha fechada do sistema até a fronteira de estabilidade transformando o sistema em marginalmente estável. Ziegler–Nichols tiveram a visão de utilizar esse valor de ganho (K_u), juntamente com o período a ele associado (P_u), como base para um método de ajuste de controlador que revolucionou a sua época. Ziegler–Nichols relacionaram o ganho do controlador com uma fração e K_u e as constantes τ_I e τ_D com uma fração de P_u . A fração foi determinada de tal forma que a resposta em malha fechada tivesse uma razão de decaimento de $1/4$. A versão baseada em K_u e P_u foi parametrizada pelos autores através do parâmetro *Kappa* definida pela equação D2.

$$Tau = \frac{1}{K_U \cdot K} \quad (D2)$$

A Tabela A3 apresenta o ajuste para o caso de um controlador PI e sistemas estáveis. São dois casos distintos: projeto priorizando a robustez, onde a máxima sensibilidade é $M_s = 1,4$; e projeto priorizando o desempenho, onde a máxima sensibilidade é $M_s = 2$.

Tabela D3 – Fórmulas para o ajuste de controladores PI baseadas no método Kappa-Tau utilizando-se a parametrização Kappa. A Tabela apresenta os parâmetros da função: $f(\kappa) = a_0 \cdot \exp(a_1\kappa + a_2\kappa^2)$

	$M_s = 1,4$ (Robustez)			$M_s = 2,0$ (Desempenho)		
	a_0	a_1	a_2	a_0	a_1	a_2
K_P/K_U	0,053	2,9	-2,6	0,13	1,9	-1,3
T_I/P_U	0,9	-4,4	2,7	0,9	-4,4	2,7
b	1,1	-0,0061	1,8	0,48	0,40	-0,17

Fonte: Astrom e Hagglund (1995)

APÊNDICE E – Critérios de avaliação dos controladores

Os controladores podem ser avaliados quanto aos critérios de robustez e de desempenho. Um controlador pouco robusto significa dizer que sua ação está mais próxima do limite de estabilidade do sistema, porém seu desempenho é mais satisfatório. Por outro lado, um controlador muito robusto implica limitações no desempenho do sistema de controle, devido a seu comportamento oscilatório.

Critérios de Robustez

Praticamente todos os processos industriais são não lineares e dinâmicas rápidas são normalmente desconsideradas durante o projeto do controlador. Esses e outros fatores fazem com que os modelos lineares invariantes no tempo (LTI) representem uma aproximação da realidade. Essa aproximação normalmente é suficiente para o projeto do controlador, se certa margem de segurança for garantida durante o projeto. A margem de ganho (GM), a reserva de fase (RF) e a máxima sensibilidade (MS) são típicas medidas dessa margem de segurança. Essas grandezas podem ser determinadas por meio do diagrama de Nyquist, representado pela Figura E1.

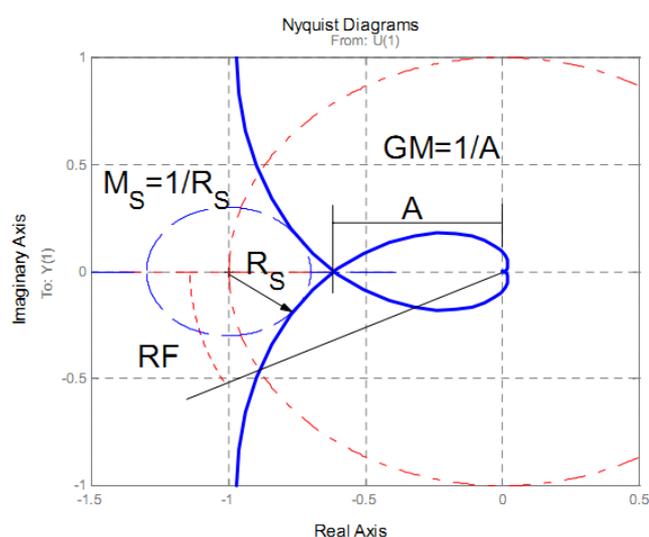


Figura E1 – Representação da reserva de fase (RF), margem de ganho (GM) e máxima sensibilidade (MS) em um diagrama de Nyquist

Reserva de fase (PM) e margem de ganho (GM) inferiores a 30° e 1,7, respectivamente, são indicadores de que o projeto é muito sensível a incertezas, portanto, pouco robusto. A margem de ganho é uma medida de quanto o sistema (controlador + planta) suportaria uma variação no ganho estático, enquanto que a reserva de fase pode ser interpretada como tempo morto suportável pela malha antes de instabilizar. Esse tempo morto pode ser interpretado em termos práticos como sendo uma medida das implicações, em termos de estabilidade, em se desconsiderar dinâmicas rápidas, tais como a dinâmica das válvulas e dos medidores durante o projeto do controlador. Embora PM e GM sejam boas medidas da robustez do projeto, não são suficientes para uma completa análise, uma vez que valores de PM e GM, dentro da faixa recomendável, não garantem que o diagrama de Nyquist do controlador + planta não passe perto do ponto -1 . Pontos próximos a -1 indicam elevada tendência a instabilização. Portanto, a medida mais conclusiva da robustez é a Máxima Sensibilidade (MS), a qual é definida como sendo o inverso da menor das distâncias do ponto -1 , ou seja, o ponto mais sensível e fácil de ser instabilizado. O método de Kappa-Tau faz uso de MS como critério de projeto. Duas são as versões disponíveis: $MS = 1,4$ recomendado para projetos mais robustos e $MS = 2$ para projetos com maior desempenho. Um bom projeto de controlador terá de ter valores de MS entre 1,3 e 2 (ÅSTROM e HÄGGLUND, 1995).

Crítérios de desempenho

Um bom projeto de controlador deve conciliar boas características de robustez com bom desempenho. Naturalmente, o desempenho pode ser inferido através da simples visualização gráfica das simulações geradas para distúrbios específicos, dos quais se destacam: a mudança de *setpoint* (características servo) e distúrbios na carga (características regulatórias). O acompanhamento do desempenho dos controladores pode ser feito por meio da avaliação de índices como Integral do Erro Quadrático (*Integrated Square Error*, ISE), da Integral do Erro Absoluto (*Integrated Absolute Error*, IAE) e da Integral do Erro Absoluto Ponderado no Tempo (*Integral Time-weighted Absolute Error*, ITAE), representados pelas equações E1, E2 e E3, respectivamente.

$$ISE = \int_0^t e^2(t) dt \quad (E1)$$

$$IAE = \int_0^t e(t)dt \quad (E2)$$

$$ITAE = \int_0^t t|e(t)|dt \quad (E3)$$

Pode-se observar que o limite 't' das integrais corresponde ao tempo de simulação. Quanto menores forem os valores ISE e IAE maior será o desempenho do sistema. Outros indicadores de desempenho são o tempo de assentamento (ST) e a sobre-elevação (overshoot, OV). Tempo de assentamento (ST – 5%), é o tempo que a resposta degrau entra em uma faixa menor que 5% do valor do ganho estacionário, e a sobre-elevação é o valor máximo que a função excede seu valor final.