

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DE TECNOLOGIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA**

Anderson Rodrigo de Andrade Lino

**Interpoladores multilineares como
metamodelos: Integração à simulação de
biorrefinarias no ambiente EMSO**

São Carlos, 2018

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DE TECNOLOGIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA**

Anderson Rodrigo de Andrade Lino

**Interpoladores multilineares como
metamodelos: Integração à simulação de
biorrefinarias no ambiente EMSO**

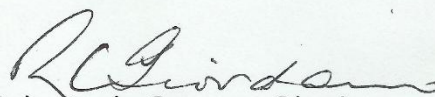
**Dissertação apresentada à Coordenação do
Mestrado em Engenharia Química da Uni-
versidade Federal de São Carlos para ob-
tenção do título de Mestre em Engenharia
Química.**

Orientador: Prof. Dr. Roberto de Campos Giordano
Co-orientador: Prof. Dr. Felipe Fernando Furlan

São Carlos, 2018

MEMBROS DA BANCA EXAMINADORA DA DEFESA DE DISSERTAÇÃO DE ANDERSON RODRIGO DE ANDRADE LINO APRESENTADA AO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA DA UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS, EM 26 DE MARÇO DE 2018.

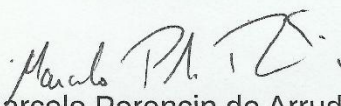
BANCA EXAMINADORA:



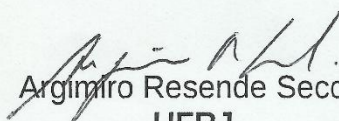
Roberto de Campos Giordano
Orientador, UFSCar



Felipe Fernando Furlan
Coorientador, UFSCar



Marcelo Perencin de Arruda Ribeiro
UFSCar



Argimiro Resende Secchi
UFRJ

Agradecimentos

Agradeço aos meus pais e irmão, pela paciência e orientação.

À minha noiva Daniella Fernanda Nascimento pelo carinho e companheirismo nos tempos difíceis.

Aos orientadores prof. Roberto e prof. Felipe pela orientação e incentivo.

Ao meu amigo Rauber Daniel Pereira pelos conselhos e companheirismo.

Aos amigos do laboratório Kyatera pela ajuda e desenvolvimento no trabalho, em especial a Andrew Milli Elias e a Andreza A. Longati.

Aos funcionários do departamento de Engenharia Química, em especial ao Eudoro Lemos.

À CNPq o apoio financeiro.

*“As nuvens mudam sempre de posição,
mas são sempre nuvens no céu. Assim
devemos ser todo dia, mutantes, porém
leais com o que pensamos e sonhamos:
lembre-se, tudo se desmancha no ar,
menos os pensamentos”.*

Paulo Baleki

Resumo

A utilização de simuladores orientados a equações apresenta diversas vantagens, principalmente por esses separarem o modelo do algoritmo responsável pela resolução do mesmo. Isso permite uma fácil implementação de novos modelos, assim como sua reutilização para diversas aplicações (simulação, otimização, estimativa de parâmetros, etc.). Entretanto, essa mesma característica acaba impossibilitando a utilização de algoritmos específicos para resolução de modelos de difícil convergência. Enquanto algoritmos genéricos e robustos não são alcançados, algumas estratégias que consistem, essencialmente, em substituir modelos não lineares por aproximações lineares são utilizadas. Dentre as opções estão os interpoladores multilineares, que empregam dados obtidos em simulações *off-line* para aproximar o comportamento do modelo. Essa opção apresenta diversas vantagens, como baixa demanda computacional e acuracidade controlada. Recentemente, o uso de interpoladores acoplados a simuladores orientados a equações foi tema de um artigo submetido pelo grupo de pesquisadores do Laboratório de Desenvolvimento e Automação de Bioprocessos (LaDABio) da Universidade Federal de São Carlos (FURLAN *et. al.* 2016). Porém, a criação de um método a fim de facilitar a construção de metamodelos ainda não foi explorada. Desta forma, este trabalho tem como objetivo desenvolver uma metodologia para construção de metamodelos e automação do método, além da avaliação das malhas de inspeção. A metodologia foi aplicada a um trem de evaporadores com dois estágios e à etapa de cogeração, ambos setores de produção de uma biorrefinaria produtora de etanol de primeira e segunda geração. Em ambos os casos, a metodologia proposta foi capaz de aproximar a resposta do modelo rigoroso com a acuracidade especificada.

Palavras-chave: Metamodelos. Interpoladores multilineares. Etanol de primeira e segunda geração.

Abstract

The use of equation oriented simulators presents several advantages, mainly the separation between the mathematical model and the algorithm responsible for its resolution. This allows an easy implementation of new models as well as their reuse for various applications (simulation, optimization, parameter estimation, etc.). However, this same characteristic makes it impossible to use specific algorithms to solve models with difficult convergence. While generic and robust algorithms are not developed yet, some strategies that essentially consist of replacing nonlinear models with linear approximations can be used. Among the options are multilinear interpolators, which use data obtained in off-line simulations to approximate the behavior of the rigorous model. This option has several advantages, such as low computational demand and controlled accuracy. Recently, the use of interpolators coupled to equation oriented simulators was the subject of an article submitted by the group of researchers from the Bioprocess Development and Automation Laboratory (LaDABio) of the Federal University of São Carlos (FURLAN et al., 2016). However, the creation of a method to facilitate the construction of surrogate models has not yet been explored. In this context, this study aims to develop a methodology for construction of surrogate models and automation of the method, besides the evaluation of look-up tables. For this work, the methodology was applied to the train of evaporators with two effects and to the combined heat and power (CHP) stage, both sectors of a sugarcane biorefinery producing first and second generation ethanol. In both cases, the proposed methodology was able to approximate the response of the rigorous models within the accuracy specified.

Keywords: Surrogate models. Multilinear interpolators. First and second generation ethanol.

Lista de Figuras

Figura 1. Rede de funções de base.	5
Figura 2. Exemplo de tabela de inspeção para o caso bidimensional.	10
Figura 3. Simulação em modo texto.	12
Figura 4. Simulação em interface gráfica.	12
Figura 5. Exemplo de malha de interpolação.	13
Figura 6. Diagrama de blocos para o processo 1G.	15
Figura 7. Diagrama de blocos para o processo 2G.	15
Figura 8. Etapa de extração e tratamento do caldo.	19
Figura 9. Integrações energéticas do processo.	22
Figura 10. Etapa de concentração e fermentação do caldo C12/C6.	23
Figura 11. Etapa de destilação.	25
Figura 12. Sistema de cogeração sem turbina de condensação.	27
Figura 13. Sistema de cogeração com turbina de condensação.	27
Figura 14. Etapa de pré-tratamento hidrotérmico do bagaço de cana-de-açúcar.	29
Figura 15. Etapa de hidrólise do bagaço de cana-de-açúcar.	31
Figura 16. Etapa de concentração e fermentação da xilose.	32
Figura 17. Etapa de biodigestão da xilose.	34
Figura 18. Fluxograma da metodologia.	38
Figura 19. Diagrama para o algoritmo “Construção e avaliação das malhas de interpolação” no <i>Matlab</i>	38
Figura 20. Seção da etapa de cogeração com turbina de condensação representada pelo modelo de interpolador.	40
Figura 21. Seção da etapa de cogeração sem turbina de condensação representada pelo modelo de interpolador.	41
Figura 22. Seção da etapa de evaporação representada pelo modelo de interpolador.	42
Figura 23. Gráfico das vazões de vapor adimensionalizadas em função da fração de vapor.	46
Figura 24. Gráfico das temperaturas de operação dos estágios de evaporação em função da fração de vapor.	46
Figura 25. Acesso às bibliotecas do <i>EMSO</i>	95
Figura 26. Acesso à pasta <i>EMSO</i>	96

Figura 27. Acesso aos <i>plug-ins</i> do <i>EMSO</i>	96
Figura 28. Acesso ao <i>plug-in</i> <i>propterm</i>	97
Figura 29. Acesso aos projetos <i>VRTherm</i>	98
Figura 30. Acesso ao arquivo de “chutes iniciais”.	98
Figura 31. Simulação em modo texto.....	99
Figura 32. Simulação em interface gráfica.	99
Figura 33. Acesso ao <i>VRTherm</i>	102
Figura 34. Criação de lista de componentes via <i>EMSO</i>	102
Figura 35. Criação do projeto <i>VRTherm</i>	103
Figura 36. Criação da lista de componentes via <i>VRTherm</i>	104
Figura 37. Procedimento para remover o componente da lista.....	104
Figura 38. Escolha dos modelos termodinâmicos.	105
Figura 39. Chamada dos arquivos de chutes iniciais em modo texto.....	106
Figura 40. Acesso às propriedades da simulação em interface gráfica.	107
Figura 41. Seleção dos arquivos de chutes iniciais na interface gráfica.	107
Figura 42. Acesso aos <i>plug-ins</i> do <i>EMSO</i>	108
Figura 43. Acesso ao <i>plug-in</i> <i>Int</i>	109
Figura 44. Acesso aos projetos <i>VRTherm</i> interface gráfica.	110
Figura 45. Adição do projeto <i>VRTherm</i> extra via “Extra Code”.	111
Figura 46. Especificações via modelo.	112
Figura 47. Especificações via “Extra Code”	112

Lista de Tabelas

Tabela 1. Funções de base mais comuns.....	8
Tabela 2. Composição da cana-de-açúcar.....	17
Tabela 3. Composição da fibra de cana-de-açúcar.....	17
Tabela 4. Composição da palha.....	18
Tabela 5. Principais parâmetros e variáveis das etapas de extração e tratamento do caldo (continua). *	19
Tabela 5. Principais parâmetros e variáveis das etapas de extração e tratamento do caldo (continuação). *	20
Tabela 5. Principais parâmetros e variáveis das etapas de extração e tratamento do caldo (conclusão). *	21
Tabela 6. Principais parâmetros e variáveis das etapas de concentração e fermentação C12/C6.	24
Tabela 7. Reações consideradas na etapa de fermentação.	25
Tabela 8. Reações de combustão consideradas na caldeira.	26
Tabela 9. Principais parâmetros e variáveis da etapa de cogeração para o processo.	28
Tabela 10. Principais variáveis e parâmetros da etapa de pré-tratamento.	30
Tabela 11. Reações consideradas na etapa de pré-tratamento.....	30
Tabela 12. Principais variáveis e parâmetros da etapa de hidrólise.....	31
Tabela 13. Principais parâmetros e variáveis da etapa de concentração e fermentação da xilose.	32
Tabela 14. Reações consideradas na etapa de fermentação da xilose.	33
Tabela 15. Principais variáveis e parâmetros da etapa de biodigestão da xilose/vinhaça.....	34
Tabela 16. Variáveis de entrada da etapa de cogeração com turbina de condensação.....	43
Tabela 17. Variáveis de entrada da etapa de cogeração sem turbina de condensação.....	43
Tabela 18. Variáveis de entrada da etapa de evaporação.	43
Tabela 19. Dados da simulação para E1G_cog e E1G_cog_Int.	45
Tabela 20. Dados da simulação para E1G2G_cog e E1G2G_cog_Int.....	45
Tabela 21. Dados da simulação para E1G2G_evap e E1G2G_evap_Int.....	45

Sumário

1. Introdução e Justificativa.....	1
2. Objetivos.....	3
3. Revisão Bibliográfica.....	4
3.1 Metamodelos.....	4
3.1.1 Funções base.....	5
3.1.2 Regressão linear.....	6
3.1.3 Vetores suporte para regressão.....	7
3.1.4 Funções de base radial e <i>Kriging</i>	8
3.2 Tabelas de inspeção multidimensionais.....	9
4. Metodologia.....	11
4.1 Simulador de processos <i>EMSO</i>	11
4.2 Construção das tabelas de inspeção multidimensionais.....	13
4.3 Integração <i>EMSO-Matlab</i> [®]	13
4.4 Descrição do processo.....	14
4.4.1 Lista de componentes.....	16
4.4.2 Extração e tratamento do caldo.....	17
4.4.3 Concentração e Fermentação C12/C6.....	21
4.4.4 Destilação.....	25
4.4.5 Sistema de cogeração.....	26
4.4.6 Pré-tratamento.....	28
4.4.7 Hidrólise.....	31
4.4.8 Fermentação da xilose.....	32
4.4.9 Biodigestão da xilose e/ou vinhaça.....	33
4.5 Implementação e validação da metodologia.....	35
5. Resultados.....	39
5.1 Estudo de caso.....	39

6.	Conclusões	48
7.	Referências Bibliográficas.....	49
8.	Anexos	53
8.1	Código.....	53
8.2	Modelo-interface para cogeração com turbina de condensação.....	61
8.3	Modelo-interface para cogeração sem turbina de condensação.....	71
8.4	Modelo-interface para evaporação.....	82
8.5	Tutorial	94
8.5.1	Configurações para o uso do <i>EMSO</i>	95
8.5.2	Plataforma de simulação da biorrefinaria	99
8.5.3	<i>Software EMSO</i>	99
8.5.4	Estrutura dos modelos.....	100
8.5.5	Integração dos modelos	100
8.5.6	Modelo <i>main_stream</i>	100
8.5.7	Modelo <i>energy_stream</i>	100
8.5.8	Modelo <i>water_stream</i>	101
8.5.9	Grupos de modelos	101
8.5.10	Criação de listas de componentes	101
8.5.11	Resolução de problemas complexos no <i>EMSO</i>	105
8.5.12	Utilização de dois arquivos de chutes iniciais.....	106
8.5.13	Utilização de interpoladores multilineares	108
8.5.14	Simulações.....	109
8.5.15	Modo texto.....	109
8.5.16	Interface gráfica.....	110
8.6	Convenções de nomenclatura.....	113

1. Introdução e Justificativa

Embora simuladores de processos sejam ferramentas computacionais essenciais para a análise prospectiva da viabilidade técnico-econômica de novas tecnologias e para otimização dos processos industriais que as utilizam, somente nas décadas de 80 e 90 houve uma popularização destas ferramentas. Este fato deve-se a diversos fatores, dentre os quais, destacam-se:

- Desenvolvimento de algoritmos e métodos numéricos mais sofisticados;
- Utilização de novos conceitos de engenharia de *software* para o desenvolvimento de interfaces gráficas mais amigáveis;
- Aumento da capacidade de processamento dos computadores pessoais (SOARES, 2003).

. Dentro deste contexto, simuladores caracterizam-se por representar as operações industriais através de modelos matemáticos de diferentes níveis de complexidade, resultando em sistemas de equações (algébricas ou algébrico-diferenciais) com até várias centenas de milhares de variáveis.

Por esta razão, usualmente classificam-se estas ferramentas quanto à estratégia adotada para a resolução do sistema de equações que caracteriza o processo. Quando estas são resolvidas de forma sequencial, o *software* é denominado sequencial modular. Nesta abordagem, é possível incorporar algoritmos específicos para cada módulo e conseqüentemente acelerar e facilitar o processo de convergência. Em contrapartida, ciclos precisam ser resolvidos iterativamente. Como exemplo, cita-se o Aspen Plus®. Já nos simuladores orientados a equações, também denominados simuladores globais ou simultâneos, as equações são resolvidas simultaneamente, de modo que os ciclos não são problemáticos, porém não é possível incorporar rotinas de cálculo para cada módulo e algoritmos genéricos e robustos são requeridos (FURLAN *et. al.* 2016; MORTON, 2003). Conseqüentemente, dificuldades para a resolução de sistemas de equações não lineares podem ser encontradas para esta segunda estratégia.

A plataforma de simulação adotada neste trabalho, *EMSO (Environment for Modeling, Simulation and Optimization)* enquadra-se nesta segunda classificação. Desta maneira, é necessário encontrar alternativas para resolução de problemas com alto grau de desvio da linearidade. Em um dos trabalhos desenvolvidos pelo

grupo, FURLAN et. al. (2016) criaram e incorporaram ao software *EMSO* um algoritmo capaz de realizar a leitura de tabelas de inspeção multidimensionais, constituídas por interpoladores multilineares (NELLES, 2001). Tal abordagem permite contornar a dificuldade de resolver conjuntos de equações altamente não lineares no bojo de sistemas de grandes dimensões (chegando às centenas de milhar, como já mencionado anteriormente). Assim, modelos matemáticos detalhados de unidades de processos ou mesmo seções do processo podem ser resolvidos à parte e substituídos no simulador global por tais interpoladores, com mínima perda de acurácia, conseqüentemente facilitando significativamente a convergência das simulações.

2. Objetivos

Desenvolver uma metodologia para construção de metamodelos, além da automação do método e avaliação das malhas de inspeção para seções do processo que apresentem dificuldades de convergência.

3. Revisão Bibliográfica

3.1 Metamodelos

A utilização de metamodelos para caracterizar o comportamento de modelos fenomenológicos tem aumentado significativamente nas últimas três décadas (BHOSEKAR; IERAPETRITOU, 2017). Isto deve-se principalmente ao baixo custo computacional para implementação desta ferramenta. Este tipo de abordagem consiste em inicialmente definir um conjunto de pontos obtidos a partir de modelos fenomenológicos e/ou experimentos e em seguida correlacionar os dados de entrada e saída através de funções de fácil resolução numérica. Estes modelos são comumente utilizados para resolver três classes de problemas. No primeiro caso, é possível utilizar esta ferramenta para predição e modelagem simplificadas, sendo esta a classe mais abordada pelos metamodelos. A segunda classe é representada por problemas onde não é possível obter informações das derivadas das funções-objetivo a serem otimizadas. Já a terceira classe é caracterizada pela análise de viabilidade operacional do problema frente a restrições, como demanda do produto, propriedades da matéria-prima, entre outras. Este tipo de problema surge principalmente quando há a necessidade de se estudar diferentes rotas de processo, onde saber as regiões de operação é fundamental (HAN; ZHAN, 2012).

Nas seções seguintes serão apresentadas diferentes técnicas para a criação de metamodelos. Vale destacar que o desempenho desses modelos depende fortemente da quantidade e qualidade dos pontos gerados pelos modelos fenomenológicos e/ou experimentos. Como a geração desses pontos pode ter um alto custo computacional, faz-se necessário utilizar estratégias que minimizem a quantidade de pontos gerados sem perda de acurácia. De maneira geral, essas estratégias podem ser classificadas de dois modos: estacionárias e adaptáveis. No primeiro caso, a geração de pontos é feita a partir de determinados padrões, geralmente geométricos. Como exemplo, existem os métodos *Latin Hypercube Sampling (LHS)* e *Halton Sampling*. No segundo caso, a partir de um número limitado de pontos obtidos geralmente a partir de uma amostragem estacionária, são propostos novos pontos. A ideia neste caso, é minimizar a quantidade de pontos gerados definindo o melhor conjunto de pontos possível para um determinado

problema. Como exemplo, cita-se a *expected improvement function*, que faz uso de análise estatística para definir o conjunto de pontos (BHOSEKAR; IERAPETRITOU, 2017).

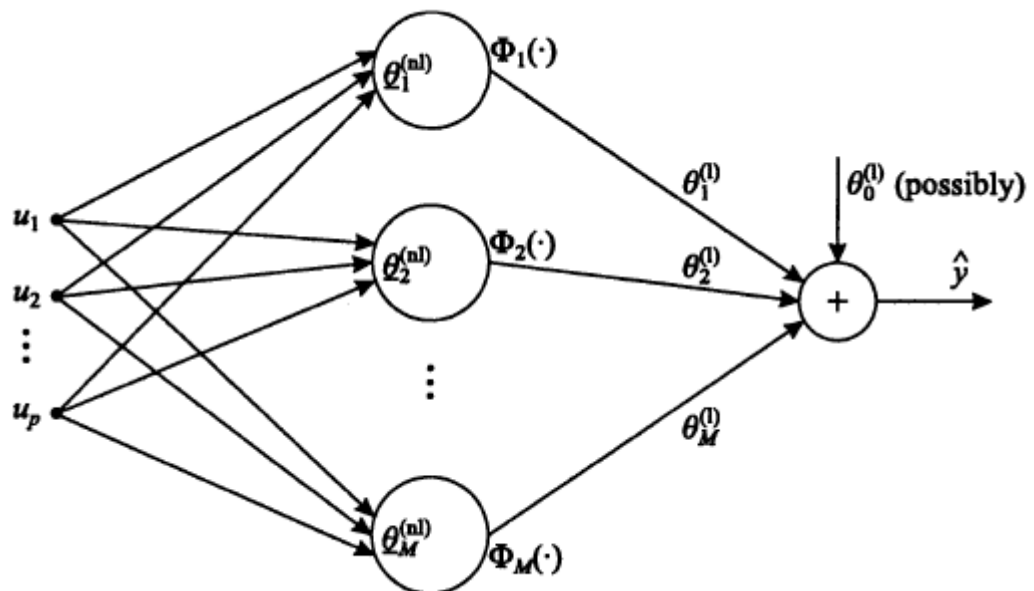
3.1.1 Funções base

Grande número de metamodelos utilizam os conceitos de função de base para a construção dos modelos. A formulação geral das funções de base é descrita conforme a Equação (3.1).

$$y = \sum_{i=1}^M \theta_i^{(l)} \phi_i(\underline{u}, \underline{\theta}_i^{(nl)}) \quad (3.1)$$

A variável y é calculada a partir da somatória de M funções base $\Phi_i(\cdot)$. Cada função base é ponderada pelos parâmetros lineares $\underline{\theta}_i$. Nota-se que as funções de base dependem do vetor de entrada \underline{u} e o conjunto de parâmetros não-lineares $\underline{\theta}_i^{(nl)}$ (NELLES, 2001). A Figura 1 representa uma rede de funções de base.

Figura 1. Rede de funções de base.



Fonte: NELLES, 2001.

No caso em que as funções de base são do mesmo tipo e o que as diferem são os parâmetros, a rede de funções de base é comumente chamada de rede

neuronal e os nós são chamados de neurônios. Dentro deste conceito, ainda é possível classificar as funções de base em globais ou locais. Se a função de base presente no nó tiver influência sobre os demais nós, a função é classificada como global. No caso em que o efeito da função é somente sobre o seu próprio nó, a função de base é classificada como local (NELLES, 2001).

3.1.2 Regressão linear

Para esta técnica, o modelo de regressão é resultado de uma combinação entre as variáveis de entrada, conforme mostrado pela Equação (3.2).

$$\hat{f}(x) = w_0 + \sum_{j=1}^d x_j w_j \quad (3.2)$$

Em que x é o vetor que caracteriza os dados de entrada (um vetor de dimensão d) e w é o vetor que caracteriza os pesos dados a cada variável (dimensão $d+1$). A fim de obter o vetor w , minimiza-se a soma dos quadrados dos erros entre o valor dado pelo modelo rigoroso (ou experimentos) e o valor predito pelo metamodelo. A Equação (3.3) mostra a função objetivo a ser minimizada.

$$\min_w \|Xw - y\|_2^2 \quad (3.3)$$

Para que a resolução do problema seja possível, X precisa ser uma matriz que apresente dimensões n por $d+1$, onde n é a quantidade de pontos gerados a partir do modelo rigoroso. A primeira coluna da matriz X apresenta todos os elementos com valores iguais a 1 e as colunas 2 até $d+1$ correspondem ao vetor de entrada x . Finalmente, y é um vetor de tamanho n que representa os valores de saída obtidos a partir do modelo rigoroso. Nota-se que é possível encontrar a resposta analítica para o problema resolvendo-se a Equação (3.4).

$$w = (X^T X)^{-1} X^T y \quad (3.4)$$

Apesar de haver a possibilidade do problema ser resolvido de forma analítica, para casos onde as variáveis de entrada independentes estão fortemente correlacionadas, a multiplicação das matrizes $X^T X$ pode se tornar singular. Isto

também ocorre quando o número de pontos obtidos a partir do modelo rigoroso é menor que o número de variáveis de entrada. Por esta razão, faz-se necessário utilizar uma estratégia capaz de reduzir o número de variáveis de entrada com a mínima perda de acurácia possível (BHOSEKAR; IERAPETRITOU, 2017).

3.1.3 Vetores suporte para regressão

Esse método consiste em representar metamodelos como a soma ponderada das funções base a um termo constante. A forma geral para este tipo de modelagem é dada pela Equação (3.5).

$$\hat{f}(X) = \mu + \sum_{i=1}^n w_i \sigma(x, X_i) \quad (3.5)$$

Por hipótese, assume-se uma simples função de base $\sigma(.)=X$. Neste caso, a Equação (3.5) pode ser reescrita de acordo com a Equação (3.6).

$$\hat{f}(x) = \mu + w^T X \quad (3.6)$$

Os parâmetros μ e w são obtidos a partir da resolução de um problema de otimização, de forma equivalente ao descrito na regressão linear. Mais detalhes quanto à formulação matemática podem ser encontrados em (SMOLA; SCHÖLKOPF, 2004). A Tabela 1 apresenta as funções de base mais comuns.

Tabela 1. Funções de base mais comuns.

Tipo	Função $\sigma(\cdot)$
Linear	$\sigma(r) = r$
Cúbica	$\sigma(r) = r^3$
<i>Thin plate spine</i>	$\sigma(r) = r^2 \log(r)$
Multi-quadrática	$\sigma(r) = \sqrt{r^2 + \gamma^2}$
Gaussiana	$\sigma(r) = e^{-\gamma r^2}$

Fonte: Adaptado de Bhosekar e Ierapetritou (2017).

Mais informações sobre modelagem matemática para as funções de base citadas na Tabela 1 podem ser encontradas em (FORRESTER; KEANE, 2009).

3.1.4 Funções de base radial e *Kriging*

Para n amostras, a fórmula geral para as funções de base radial é dada pela Equação (3.7).

$$\hat{f}(x) = \sum_{i=1}^n \beta_i \sigma(\|x - x_i\|_2) + p(x) \quad (3.7)$$

Em que, $\beta_1, \dots, \beta_n \in \mathbb{R}$ são os pesos a serem calculados, $\|\cdot\|$ é a norma euclidiana e $\sigma(\cdot)$ é a função base. Como mostrado na Tabela 1, há diversas opções de função de base. O método de *Kriging* consiste na ideia de que o metamodelo seja estocástico. A Equação (3.8) descreve de forma geral um modelo de *Kriging*.

$$\hat{f}(x) = \sum_{i=1}^m \alpha_j \varphi_j(x) + \varepsilon(x) \quad (3.8)$$

Em que $\varphi_j(x)$ são as funções de base independentes conhecidas, responsáveis por caracterizar a tendência da predição média para a localização x , α_j são os parâmetros desconhecidos e $\varepsilon(x)$ é um erro aleatório para a localização x com distribuição normal e média zero. Mais informações sobre modelagem matemática para *kriging surrogate models* podem ser encontradas em Bhosekar e Ierapetritou (2017).

3.2 Tabelas de inspeção multidimensionais

A baixa demanda computacional requerida para efetuar os cálculos quando comparada com outras metodologias utilizadas para a resolução de sistemas algébricos não lineares e a facilidade para implementação fazem com que as tabelas de inspeção multidimensionais tenham grande aplicação industrial. Em contrapartida, a dimensão da tabela cresce significativamente à medida que variáveis de entrada são adicionadas à tabela. Por esta razão, na prática não se recomenda a utilização superior a cinco variáveis de entrada para compor a tabela.

Neste procedimento, utilizam-se as respostas de modelos detalhados, simulados assincronamente, para construir a grade do interpolador multilinear. Essa tabela é composta pelas variáveis de entrada e saída do modelo. A Equação (3.9) descreve a variável interpolada \hat{y} (NELLES, 2001).

$$\hat{y}(\underline{u}, \underline{v}) = \sum_{i=1}^M w_i \phi_i(\underline{u}, \underline{v}) \quad (3.9)$$

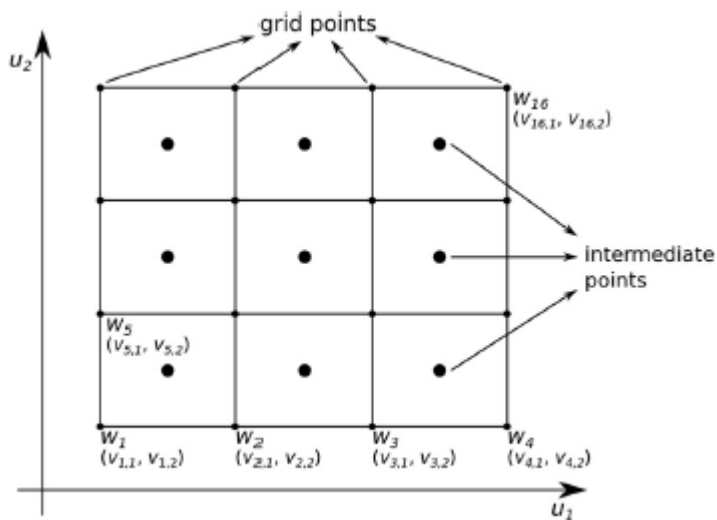
Observa-se que a variável \hat{y} é resultado da somatória de M (número total de pontos) e w_i (dados fornecidos pelos modelos detalhados) ponderados pela variável ϕ_i . A variável de saída é determinada considerando-se o menor n -cubo ou n -paralelepípedo (C) definido a partir dos vértices da malha de inspeção v_i e da variável de entrada u . Nota-se então, que é necessário apresentar equações complementares a fim de definir a região que será utilizada para o cálculo da variável interpolada e também o valor da variável M . A Equação (3.10) é responsável por definir a região, enquanto que a Equação (3.11) fornece o valor da variável M a partir do produtório do número de pontos para cada variável de entrada (M_k). Pela Equação 3.10, percebe-se que as funções base usadas no interpolador são locais (FURLAN *et. al.* 2016).

$$\phi_i(\underline{u}, \underline{v}) = \begin{cases} \frac{\prod_{k=1}^n |u_k - v_{j,k}|}{\prod_{k=1}^n |v_{i,k} - v_{j,k}|}, & \text{quando } i \text{ é um vértice do cubo } C \\ \phi_i(\underline{u}, \underline{v}) = 0, & \text{quando } i \text{ não é um vértice do cubo } C \end{cases} \quad (3.10)$$

$$M = \prod_{k=1}^n M_k \quad (3.11)$$

A Figura 2 ilustra o formato de uma malha de inspeção bidimensional.

Figura 2. Exemplo de tabela de inspeção para o caso bidimensional.



Fonte: FURLAN *et. al.*, 2016.

4. Metodologia

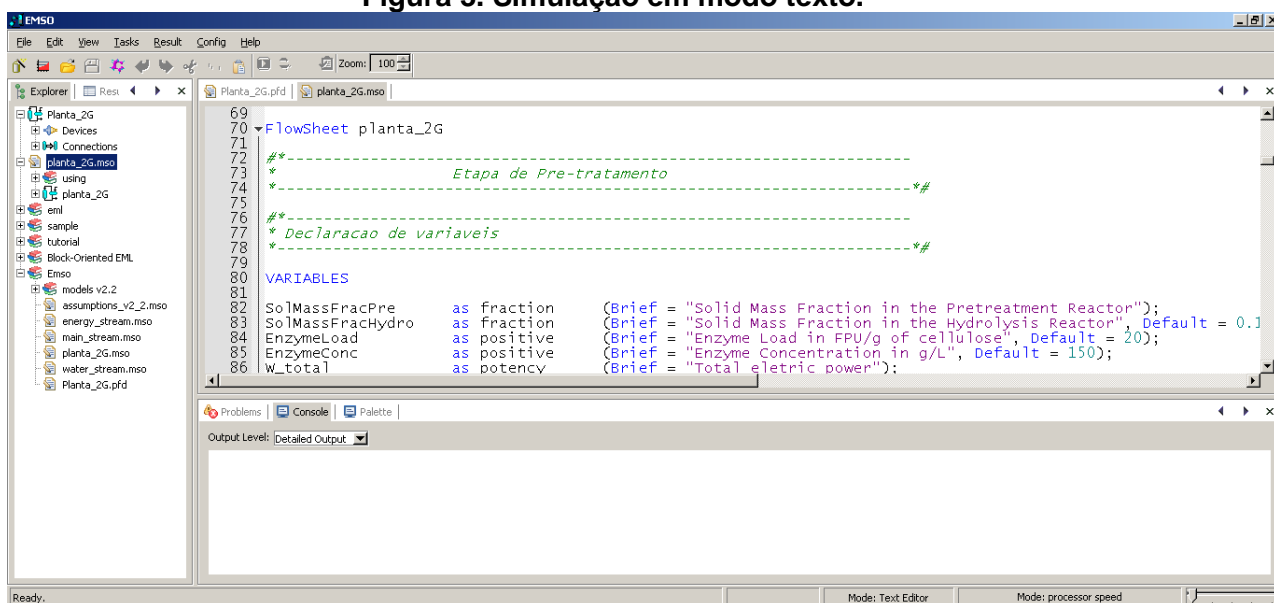
4.1 Simulador de processos *EMSO*

Para a execução dos objetivos deste trabalho foi empregado o ambiente de simulação *EMSO*. Este programa é um simulador de processos, tanto em regime estacionário como dinâmico, além de permitir a otimização estacionária. O *software* foi desenvolvido e vem sendo mantido pelo Projeto ALSOC (Ambiente Livre para Simulação, Otimização e Controle de Processos). Sua origem foi resultado de um esforço colaborativo de desenvolvimento de um simulador de processos nacional iniciado em 2003 na Universidade Federal do Rio Grande do Sul (UFRGS) (ALSOC, 2010).

Uma das características deste *software* é a acessibilidade aos modelos matemáticos desenvolvidos e a possibilidade de inserção de novos modelos ou aprimoramento daqueles já existentes. Além disso, é possível adicionar também *plug-ins* na forma de biblioteca dinâmicas (*dll's*), novos *solvers* e rotinas de otimização para realizar cálculos não usuais dentro da plataforma de simulação (SOARES, 2003).

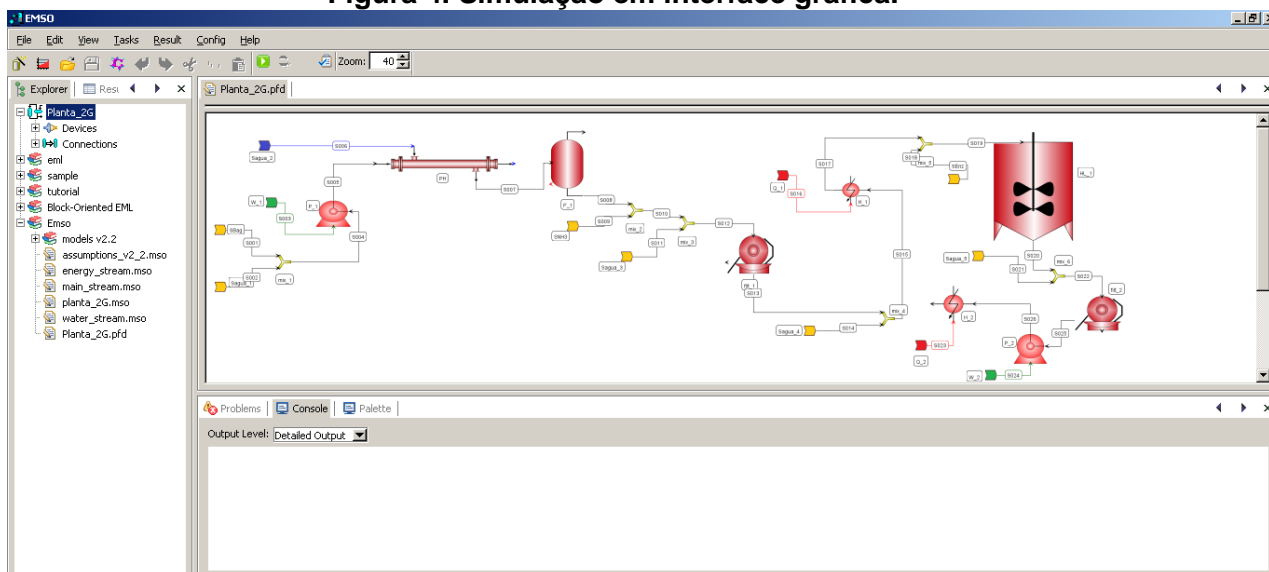
O *EMSO* utiliza uma linguagem de modelagem orientada a objetos, o que permite a organização estruturada das unidades que compõem o processo (RODRIGUES et al., 2008). Desta forma, as simulações são efetuadas pela simples seleção e conexão de modelos de cada equipamento. O usuário pode optar por realizar as simulações em modo texto, como descrito na Figura 3 ou utilizar a interface gráfica do *software*, como descrito na Figura 4.

Figura 3. Simulação em modo texto.



Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 4. Simulação em interface gráfica.



Fonte: Elaborada pelo autor.

4.2 Construção das tabelas de inspeção multidimensionais

Foi desenvolvido um algoritmo como *plug-in* ao simulador *EMSO* capaz de ler malhas de inspeção, além de fazer os cálculos de interpolação. É possível encontrar mais informações em FURLAN (*et. al.* 2016). É importante ressaltar que, para uma nova aplicação, não é necessário alterar o algoritmo, somente a tabela de inspeção deve ser alterada. O usuário deve informar o número de variáveis de entrada, os valores mínimos das variáveis de entrada, o incremento para cada variável, as unidades das variáveis de entrada, o número de variáveis de saída e as unidades das variáveis de saída, além dos valores das variáveis de saída. Este conjunto de informações deve ser especificados em um arquivo txt, conforme a Figura 5.

Figura 5. Exemplo de malha de interpolação.

```

Nofinputs: 3
Lowerbounds: 0.35 0.00 0.80
Increments: 0.350000 0.059999 0.500000
Nofpoints: 2 2 3
InputUnits: , ,
Nofoutputs: 6
OutputUnits: , , , , ,

Output:
0.00000029 0.22442518 0.49636509 0.27298432 0.00671864 0.28214392
0.00000028 0.21877732 0.48500223 0.28969998 0.00700129 0.30119832
0.00000028 0.21507994 0.47724360 0.30095098 0.00719818 0.31466987
0.01718483 0.20817340 0.49636509 0.27199151 0.00678366 0.28113429
0.01678899 0.20288690 0.48500223 0.28874287 0.00706495 0.30022493
0.01652906 0.19942704 0.47724360 0.30001707 0.00726895 0.31372803
0.08008857 0.54578436 0.22909158 0.21828805 0.08811564 0.22631512
0.08008856 0.53332486 0.22384718 0.23563968 0.08836851 0.24609888
0.08008855 0.52514258 0.22026627 0.24721556 0.08852985 0.25998145
0.03436967 0.51328080 0.22909158 0.21622243 0.08824569 0.22429586
0.03357797 0.50154402 0.22384718 0.23372547 0.08848784 0.24415210
0.03305813 0.49383678 0.22026627 0.24534774 0.08865538 0.25800178

```

Fonte: Elaborada pelo autor.

4.3 Integração *EMSO-Matlab*[®]

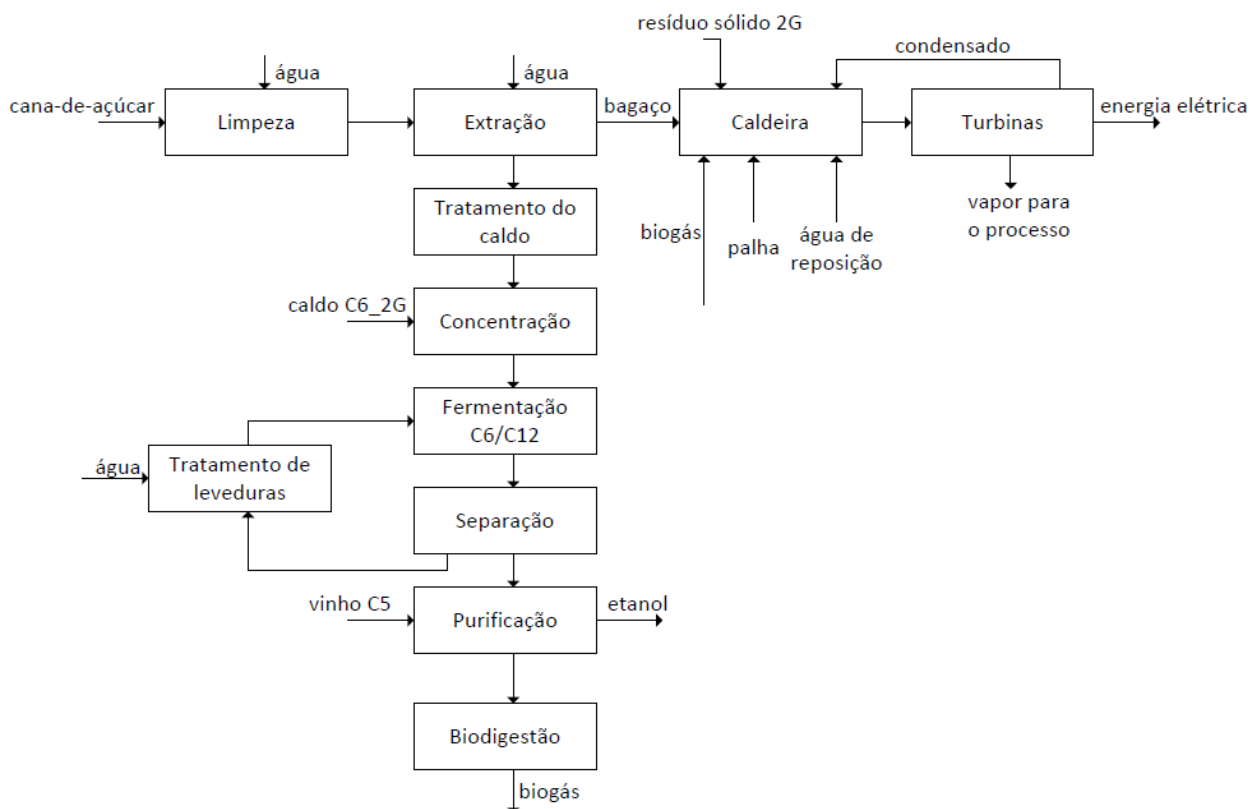
Além das funcionalidades citadas na seção 4.1, é possível integrar o simulador de processos *EMSO* ao *software Matlab*[®]. *Matlab*[®] é um *software* comercial capaz de realizar cálculos numéricos com alto grau de complexidade. O programa possui interface e linguagem amigável e também diversas extensões, conhecidas como *toolboxes*. Estas funcionalidades tornam esta ferramenta extremamente atrativa. Tendo em vista estes aspectos, foram desenvolvidos

algoritmos capazes de criar e avaliar as malhas de forma iterativa, dada uma acurácia requerida.

4.4 Descrição do processo

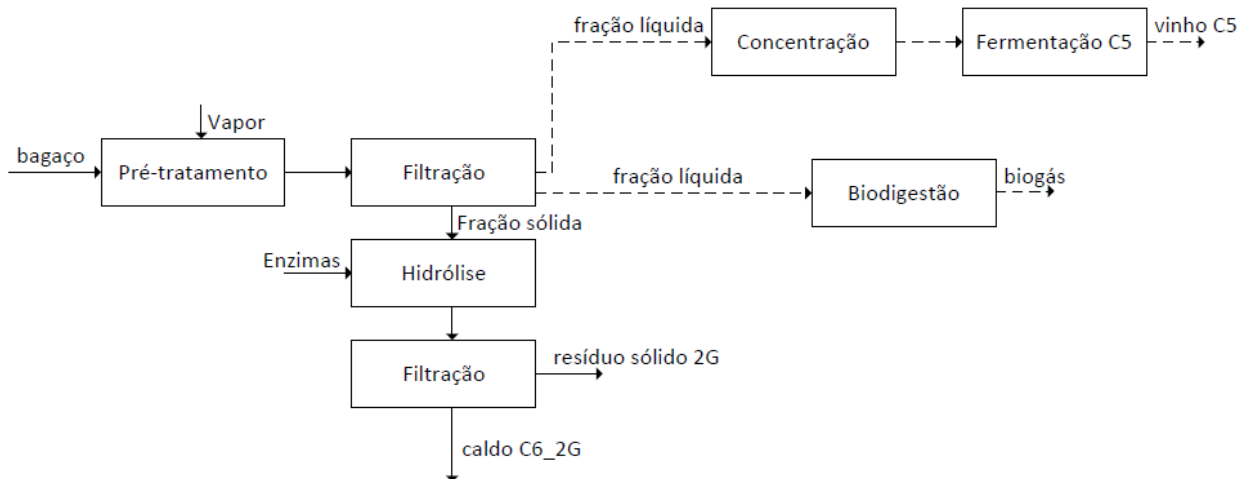
A biorrefinaria foi elaborada para ser capaz de produzir etanol de primeira e segunda geração (hidratado ou anidro), além de energia elétrica. O *layout* do processo foi desenvolvido a partir de dados industriais e da literatura, além da colaboração de pesquisadores do Laboratório Nacional de Ciência e Tecnologia do Bioetanol (CTBE), centro de pesquisa com diversos projetos com o setor sucroalcooleiro. A capacidade de moagem da planta simulada é de 833,33 t/h. O bagaço produzido é queimado na caldeira para garantir a autossuficiência energética da planta, enquanto que o excedente pode ser destinado à produção de etanol 2G. Também é garantida uma reserva de segurança de bagaço para eventuais imprevistos operacionais da unidade e para a partida da próxima safra. A palha produzida no campo também é alimentada à caldeira para permitir que uma maior quantidade de bagaço possa ser destinada à produção de etanol 2G. É possível também utilizar biogás como combustível para caldeira, sendo este subproduto obtido através da biodigestão da vinhaça e/ou da xilose, subprodutos do processo. As frações C12 (sacarose) e C6 (glicose) são co-fermentadas, enquanto que a fração C5 (xilose) é fermentada separadamente. Adicionalmente, vale lembrar que foi utilizado o pré-tratamento hidrotérmico para o bagaço, seguido pela hidrólise enzimática. As Figuras 6 e 7 representam o processo de produção de etanol 1G e 2G respectivamente. As linhas tracejadas (Figura 7) caracterizam diferentes rotas de processo.

Figura 6. Diagrama de blocos para o processo 1G.



Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 7. Diagrama de blocos para o processo 2G.



Fonte: Elaborada pelo autor.

4.4.1 Lista de componentes

Cada componente é representado na simulação por um *Index number*. Todos os componentes listados participam do processo em algum momento com exceção da celobiose e o hidróxido de amônio. Abaixo segue o *Index number* para cada componente:

→ fase fluida

- * 1 - água
- * 2 - sacarose
- * 3 - glicose
- * 4 - xilose
- * 5 - etanol
- * 6 - dióxido de carbono
- * 7 - monóxido de carbono
- * 8 - oxigênio
- * 9 - nitrogênio
- * 10 - hidrogênio
- * 11 - metano
- * 12 - amônia
- * 13 - lignina
- * 14 - xilana
- * 15 - ácido acético
- * 16 - furfural
- * 17 - hidróximetilfurfural (HMF)
- * 18 - glicerol
- * 19 - açúcares desconhecidos
- * 20 - MEG (monoetilenoglicol)
- * 21 - ácido sulfúrico
- * 22 - ácido fosfórico
- * 23 - impurezas
- * 24 - celobiose
- * 25 - hidróxido de amônia

→ fase sólida

- * 1(26) - celulose
- * 2(27) - xilana (hemicelulose)
- * 3(28) - lignina
- * 4(29) - cinzas
- * 5(30) - enzima
- * 6(31) - levedura
- * 7(32) - hidróxido de cálcio
- * 8(33) - fosfato de cálcio
- * 9(34) - impurezas

4.4.2 Extração e tratamento do caldo

As Tabelas 2 e 3 mostram a composição da cana-de-açúcar e da fibra respectivamente, enquanto que a Tabela 4 apresenta a composição da palha de cana-de-açúcar.

Tabela 2. Composição da cana-de-açúcar.

Componente	Composição mássica (%)
Água	69,864
Sacarose	14,033
Glicose	1,303
Fibras	13,653
Terra/Cinza	1,147

Fonte: Rocha et al. (2012).

Tabela 3. Composição da fibra de cana-de-açúcar.

Componente	Composição mássica (%)
Celulose	43,38
Hemicelulose	25,63
Lignina	23,24
Cinzas	2,94

Fonte: Rocha et al. (2012).

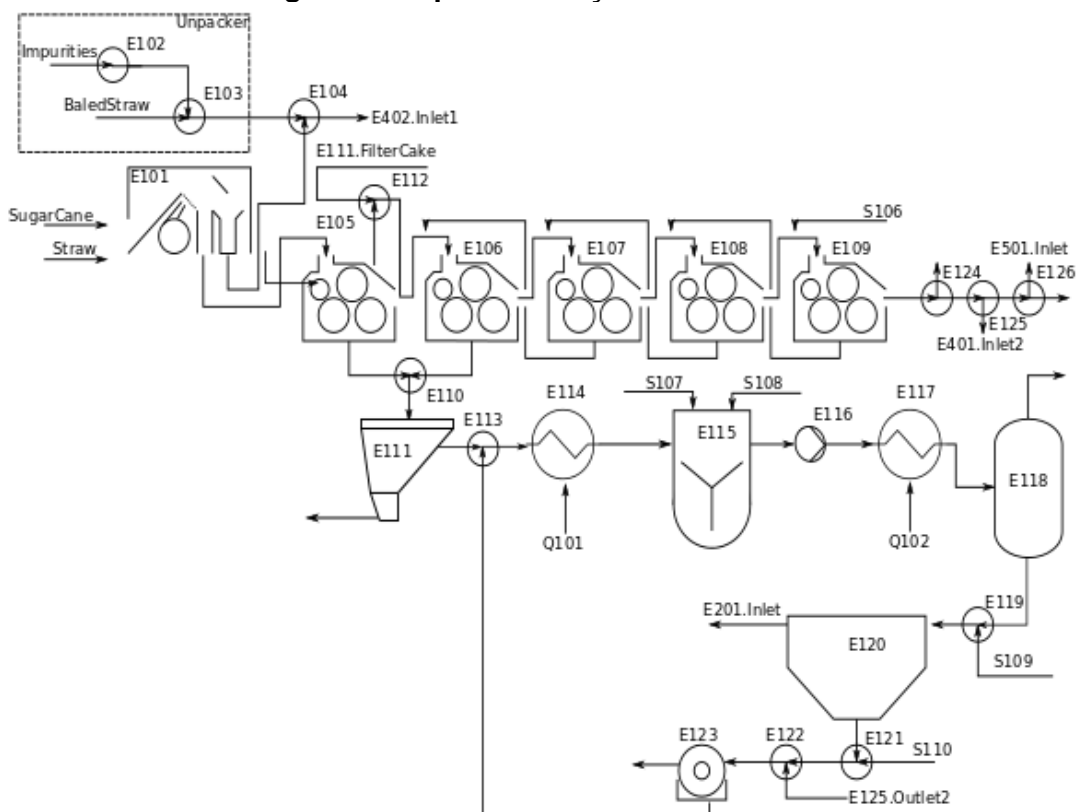
Tabela 4. Composição da palha.

Componente	Composição mássica (%)
Celulose	46,05
Hemicelulose	27,20
Lignina	24,67
Cinzas	2,08

Fonte: Bonomi et al. (2012).

Inicialmente a cana-de-açúcar e palha enfardada passam por um processo de limpeza a seco. A palha enfardada limpa é enviada a um misturador e em seguida a mistura é destinada à caldeira enquanto que a cana-de-açúcar limpa passa por 5 ternos de extração (E105-E109). Para aumentar o rendimento do processo, água de embebição (S106) é adicionada no último terno. Parte do bagaço resultante é destinada a uma reserva de segurança (5% do total de bagaço produzido-base mássica), enquanto que o restante é destinado à caldeira e ao pré-tratamento (E501), podendo ou não haver sobra. Os separadores E124, E125 e E126 são os equipamentos responsáveis pelo direcionamento do bagaço. Já os materiais combustíveis da caldeira são enviados inicialmente aos misturadores E401 e E402 e em seguida a mistura resultante é destinada à caldeira. Os caldos primário e secundário são misturados e enviados à peneira (E111). Posteriormente, o caldo filtrado do tambor rotativo (E123) se junta ao caldo filtrado da peneira e passa por um processo de aquecimento (E114). O caldo aquecido é então enviado ao tanque de calagem, onde ácido fosfórico (S107) e cal (S108) são adicionados. A mistura resultante é bombeada para o segundo aquecedor (E117) e posterior flasheamento (E118). Antes da entrada do caldo no decantador (E120), é feita a adição de polímeros (S109) na proporção de 6 ppm em relação à vazão de caldo. Neste caso, a corrente S109 contém somente água, pois a quantidade de polímero é ínfima, não impactando de forma significativa no balanço de massa. Água (S110) e bagacilho (E125.Outlet2) são adicionados ao lodo que deixa o decantador para aumentar o rendimento da filtração no tambor rotativo. A Figura 8 descreve as etapas de extração e tratamento do caldo e os principais parâmetros e variáveis destas etapas são apresentados na Tabela 5.

Figura 8. Etapa de extração e tratamento do caldo.



Fonte: Elaborada pelo autor.

Tabela 5. Principais parâmetros e variáveis das etapas de extração e tratamento do caldo (continua). *

Equipamento	Variável/Parâmetro	Valores	Referência
Limpeza a seco (E101)	Perdas de açúcares	0,5%	Fernandes (2011)
	Eficiência de remoção de impurezas minerais	60%-80%	Empral (2015)
	Eficiência de remoção de impurezas vegetais	65%	Jornal da Cana (2015)
Moendas (E105 a E109)	Consumo de energia	16 kW*h/t cana	Macedo et al. (2001)
	Recuperação de açúcares	96%	Walter et al.(2014)

Tabela 5. Principais parâmetros e variáveis das etapas de extração e tratamento do caldo (continuação). *

Equipamento	Variável/Parâmetro	Valores	Referência
1º aquecedor (E114)	Temperatura de saída do caldo diluído	70°C	Bonomi et al. (2012)
	Coeficiente global de troca térmica	0,85 kW/m ² /K	Ensinas (2008)
Tanque de calagem (E115)	Razão entre a vazão de óxido de cálcio	0,5-0,8 kg/t cana	Ribeiro (2015) Honig (1953)
	Concentração de ácido fosfórico	85%	Bonomi et al. (2012)
2º aquecedor (E117)	Temperatura de saída do caldo	105°C	Ribeiro (2015)
	Coeficiente global de troca térmica	0,69 kW/m ² /K	Ensinas (2008)
Decantador (E120)	Temperatura de operação	97°C	Ensinas (2008)
	Concentração de sólidos no lodo (sólidos solúveis e insolúveis)	9,0%	Bonomi et al. (2012)
	Eficiência da decantação dos sólidos insolúveis	99,7%	Bonomi et al. (2012)
Tambor rotativo (E123)	Retenção de sólidos (eficiência)	70% (média) 90% (máximo)	Ribeiro (2015)
	Umidade da torta	75-80%	Castro e Andrade (2006)
	Perda de açúcar na torta em relação ao lodo	1,8-2,0%	Castro e Andrade (2006)

Tabela 5. Principais parâmetros e variáveis das etapas de extração e tratamento do caldo (conclusão). *

Equipamento	Variável/Parâmetro	Valores	Referência
	Adição de bagacilho no lodo	6-8 kg/t cana	Castro e Andrade (2006)
	Adição de água no filtro	30 kg/t cana	ANA (2012)

* Todos os dados de porcentagem estão em base mássica.

4.4.3 Concentração e Fermentação C12/C6

O caldo clarificado do decantador passa por uma bomba (E201) e em seguida é misturado ao licor de hexoses resultante do processo de hidrólise. O caldo C6 é concentrado no evaporador (E202) e o vapor vegetal gerado é utilizado como fonte de aquecimento para o refeedor da coluna AA1. O restante é utilizado como fonte de aquecimento para o primeiro e segundo aquecedor das etapas de extração e tratamento. De modo a simplificar a integração de vapor e a integração energética da planta simulada, o cálculo da demanda de calor do processo é feito pelos trocadores de calor e assim o "fluxo" de calor é integrado aos demais equipamentos do processo. Este tipo de abordagem facilita a construção do processo e posterior convergência, conforme exemplificado na Figura 9.

Figura 9. Integrações energéticas do processo.

```

#----- integracoes -----#
EQUATIONS
#Vapor de 2.5 consumido
E202.Q = E414.Outlet_q.Q;

#Vapor de 6 bar consumido
E407.Outlet_q.Q = E304.QREXT.Q + E304.QRREC.Q;

#Vapor vegetal para reboiler AA1
E303.QAA1.Q = E216.Outlet_q.Q;

#Vapor vegetal para reboiler BB1
E303.QBB1.Q = E707.Outlet_q.Q;

#Vapor vegetal para segundo aquecedor do caldo
E117.Inlet_q.Q = E217.Outlet_q.Q;

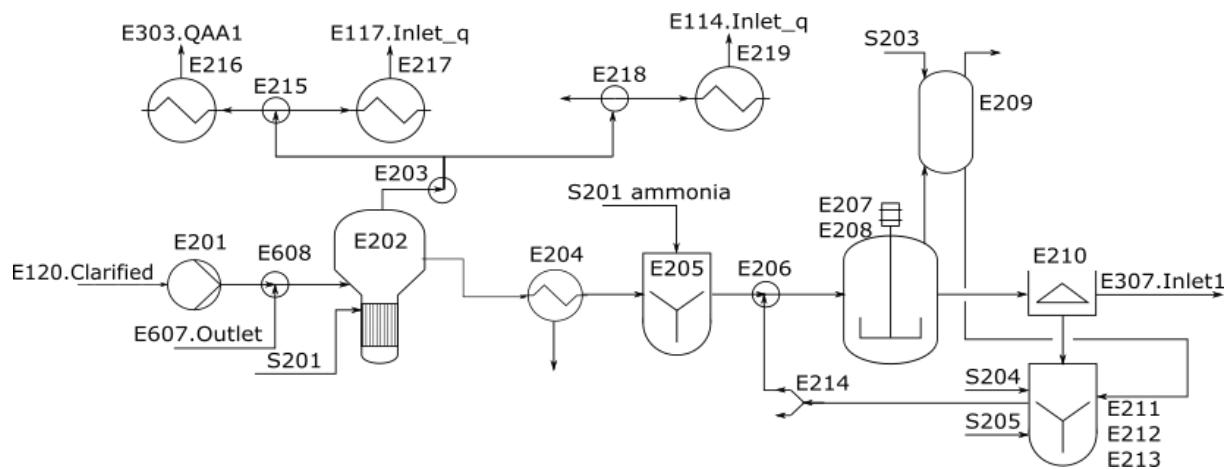
#Vapor vegetal para primeiro aquecedor
E114.Inlet_q.Q = E219.Outlet_q.Q;

```

Fonte: Elaborada pelo autor.

O caldo concentrado segue então para posterior resfriamento (E204). Antes do caldo concentrado entrar no fermentador, ele é misturado a uma solução de amônia e também ao reciclo de leveduras com o auxílio dos misturadores E205 e E206. O dióxido de carbono contendo etanol passa então por uma coluna de absorção e o etanol recuperado retorna à dorna de tratamento da levedura. Já o vinho resultante passa por uma centrífuga, onde as leveduras seguem para o tratamento, enquanto que o vinho deslevedurado segue para o trem de colunas de destilação. Os equipamentos E211, E212 e E213 representam os misturadores que fazem o retorno do etanol recuperado e da levedura centrifugada. S201, S202, S203, S204 e S205 representam a fonte de água para o evaporador, fonte de amônia, água para torre de absorção, água para diluição de levedura e ácido sulfúrico, respectivamente. Vale ressaltar também que o fermentador é representado pelos equipamentos E207 e E208, onde no reator E207 a sacarose é toda convertida em glicose e no reator E208 ocorrem as demais reações que compõem o processo de fermentação. A Figura 10 descreve a etapa de concentração e fermentação do caldo e os principais parâmetros e variáveis destas etapas são apresentados na Tabela 6.

Figura 10. Etapa de concentração e fermentação do caldo C12/C6.



Fonte: Elaborada pelo autor.

Tabela 6. Principais parâmetros e variáveis das etapas de concentração e fermentação C12/C6.

Equipamento	Variável/Parâmetro	Valores	Referência
Evaporador (E202)	Temperatura de operação	115°C	Chieppe Junior (2012)
	Brix de saída do caldo	20°Brix	Chieppe Junior (2012)
Resfriador (E204)	Temperatura de saída do caldo	33 °C	Bonomi et al. (2012)
Fermentador (E207 e E208)	Temperatura de operação	30 °C	Vasconcelos (2011)
Coluna de absorção (E209)	Fator de recuperação de etanol (base mássica)	0,9996	CTBE (2016)
	Razão entre a vazão molar de líquido e a vazão molar de gás	1,5	CTBE (2016)
	Temperatura de operação	30 °C	Paternina (2011)
	Pressão de operação	1 atm	Paternina (2011)
Centrífuga (E210)	Umidade do creme de levedura (base mássica)	30 %	Bonomi et al. (2012)
	Razão entre a vazão mássica de creme de levedura e a vazão de sólidos que entra no processo	0,99	Bonomi et al. (2012)

As reações envolvidas nos equipamentos E207 e E208 são apresentadas na Tabela 7. Vale lembrar que a solução de amônia foi adicionada ao processo para que fosse possível caracterizar o crescimento celular.

Tabela 7. Reações consideradas na etapa de fermentação.

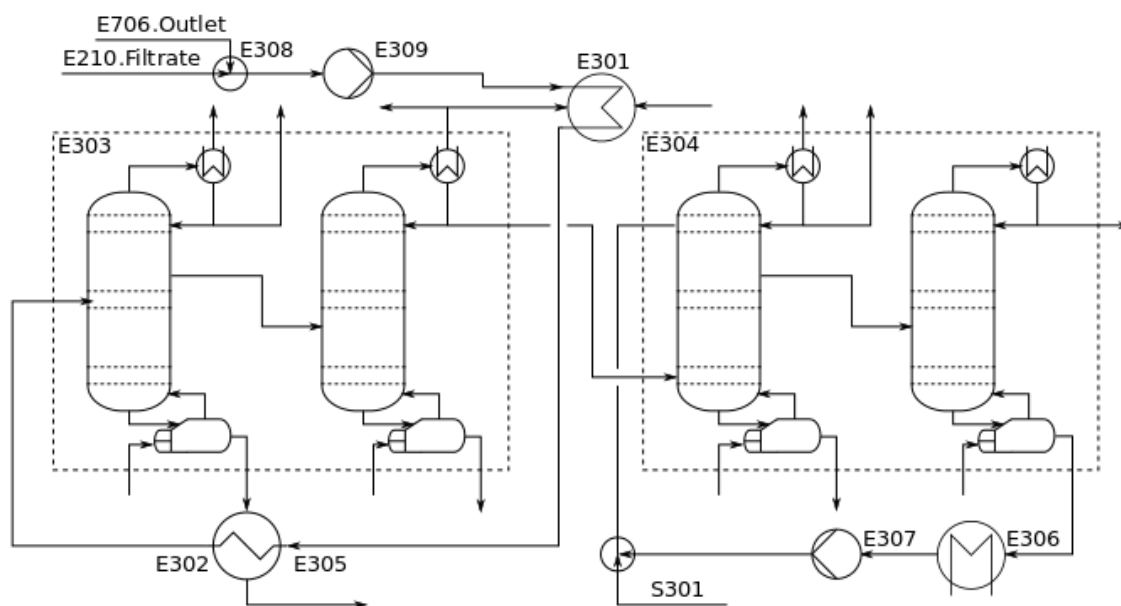
Reação	Conversão(%)
$C_{12}H_{22}O_{11}(\text{sacarose}) + H_2O(\text{água}) \rightarrow 2C_6H_{12}O_6(\text{glicose})$	100,00
$C_6H_{12}O_6(\text{glicose}) \rightarrow 2C_2H_6O(\text{etanol}) + 2CO_2(\text{gás carbônico})$	90,48
$C_6H_{12}O_6(\text{glicose}) + 2H_2O(\text{água}) \rightarrow 2C_2H_4O_2(\text{ácido acético}) + 2CO_2(\text{gás carbônico}) + 4H_2(\text{hidrogênio})$	1,19
$C_6H_{12}O_6(\text{glicose}) + 2H_2(\text{hidrogênio}) \rightarrow 2C_3H_8O_3(\text{glicerol})$	2,67
$0,174C_6H_{12}O_6(\text{glicose}) + 0,12NH_3(\text{amônia}) \rightarrow CH_{1,74}O_{0,6}N_{0,12}(\text{levedura})$	1,37

Fonte: Dias (2008).

4.4.4 Destilação

O vinho deslevedurado C6/C12 é misturado ao vinho C5 e posteriormente enviado ao trem de colunas de destilação responsável pela produção de etanol hidratado. O etanol hidratado é enviado então para uma coluna extrativa, onde o solvente monoetilenoglicol (S301) é adicionado e é produzido etanol anidro. As colunas de destilação são configuradas de modo que as frações mássicas de etanol no álcool hidratado e no álcool anidro sejam 0,935 e 0,993, respectivamente. Vale destacar que devido à complexidade do sistema de equações para esta etapa, foi utilizado o metamodelo desenvolvido por FURLAN et. al. (2016). A Figura 11 representa a etapa de destilação.

Figura 11. Etapa de destilação.



Fonte: Elaborada pelo autor.

4.4.5 Sistema de cogeração

A caldeira pode operar com diferentes fontes de combustíveis. No presente caso, duas fontes foram utilizadas: bagaço e palha. Considera-se que em todos os casos as reações de combustão são totais, de modo que somente dióxido de carbono e água são os produtos obtidos. A Tabela 8 mostra as reações de combustão que podem ser especificadas pelo usuário e os valores de variação de entalpia para cada reação.

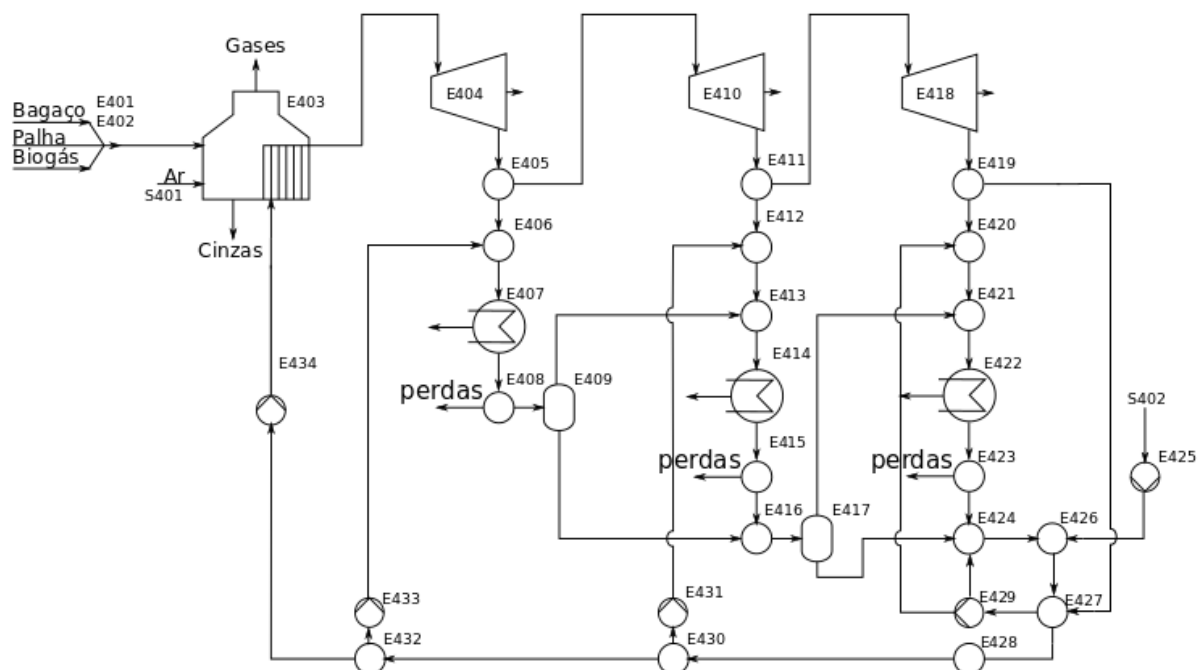
Tabela 8. Reações de combustão consideradas na caldeira.

Reação	Entalpia(kJ/kg)	Entalpia(kJ/mol)
$C_6H_{10}O_5(\text{celulose}) + 6O_2(\text{oxigênio}) \rightarrow 5H_2O(\text{água}) + 6CO_2(\text{gás carbônico})$	-17299,1	-2804,2
$C_5H_8O_4(\text{hemicelulose}) + 5O_2(\text{oxigênio}) \rightarrow 4H_2O(\text{água}) + 5CO_2(\text{gás carbônico})$	-16446,0	-2170,9
$C_{10}H_{11,6}O_{3,9}(\text{lignina}) + 10,95O_2(\text{oxigênio}) \rightarrow 5,8H_2O(\text{água}) + 10CO_2(\text{gás carbônico})$	-27000,0	-5243,4

Fonte: Dias (2011).

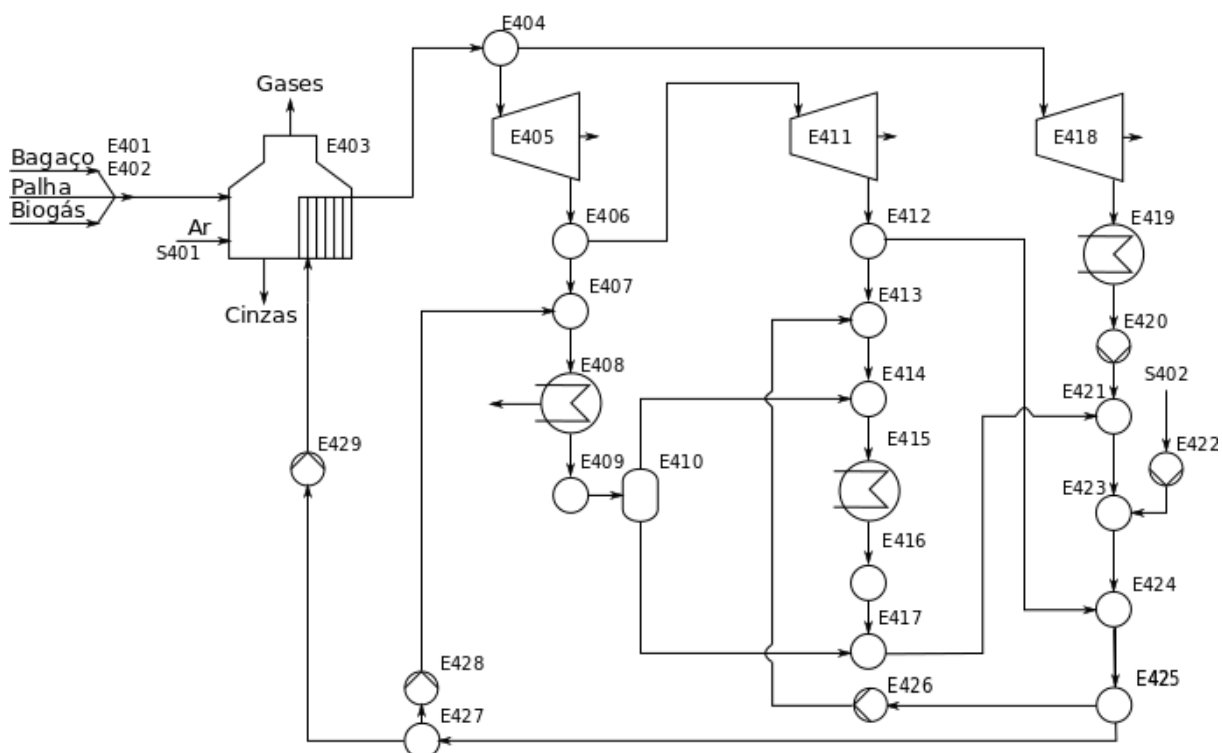
As Figuras 12 e 13 representam o sistema de cogeração sem turbina de condensação e com turbina de condensação, respectivamente. No primeiro caso, opta-se pela não utilização da turbina de condensação, pois o objetivo da planta é a produção de etanol (hidratado ou anidro). Já no segundo caso, o objetivo da planta é aumentar o excedente de energia elétrica, logo a turbina de condensação é indispensável. Por concisão, é feita somente a descrição do processo representada pela Figura 12 e seus respectivos parâmetros e variáveis são apresentados na Tabela 9.

Figura 12. Sistema de cogeração sem turbina de condensação.



Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 13. Sistema de cogeração com turbina de condensação.



Fonte: Elaborada pelo autor.

O vapor gerado na caldeira é direcionado para três turbinas de contrapressão. Na turbina E404, vapor a 17,4 bar é produzido para a etapa de pré-tratamento, já na

E410, vapor a 6 bar é produzido como fonte de calor para as colunas de desidratação, enquanto que na E418, vapor de escape a 2,5 bar é produzido para o restante do processo. Como dito anteriormente, com os trocadores de calor E407, E414 e E422 é possível calcular a demanda de calor necessária para cada linha de vapor e inclusive simular as perdas de carga nas linhas. A reposição de água é feita através da corrente S402.

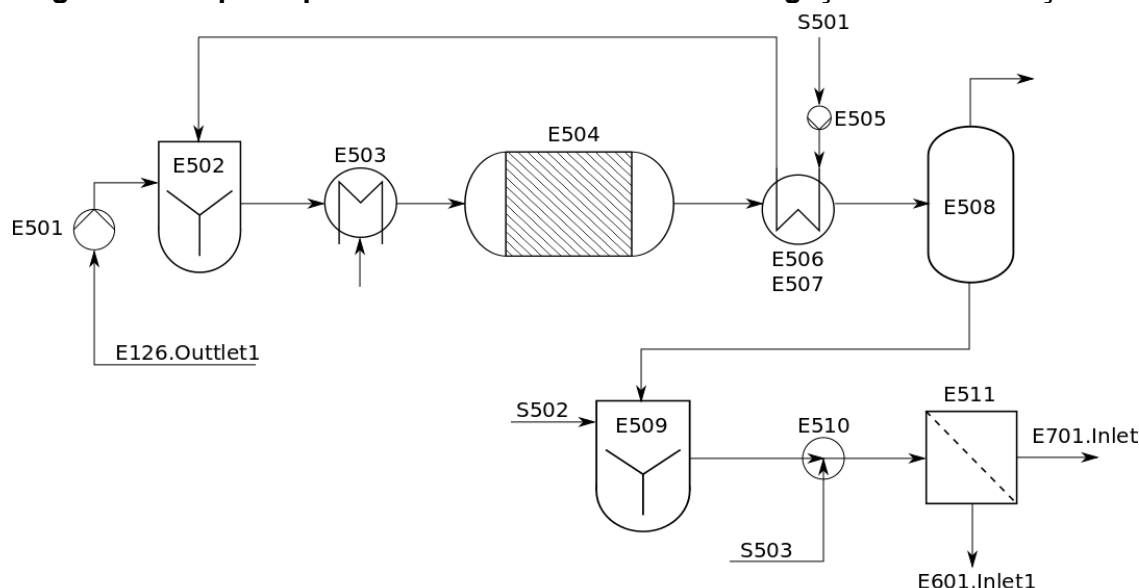
Tabela 9. Principais parâmetros e variáveis da etapa de cogeração para o processo.

Equipamento	Variável/Parâmetro	Valores	Referência
Caldeira (E403)	Temperatura do vapor	485 °C	BVC (2016)
	Pressão do vapor	65 bar	BVC (2016)
	Excesso de ar	30%	BVC (2016)
	Temperatura do gás de escape	170 °C	Bonomi et al. (2012)
Turbinas	Eficiência isoentrópica	80%	Bereche (2011)
	Eficiência mecânica	95,8%	Bereche (2011)
Perdas do processo (E408) (E415) (E423)	Fração mássica de perda	4 %	Alves (2011)
Desaerador (E427)	Título	0	Alves (2011)

4.4.6 Pré-tratamento

O pré-tratamento escolhido para o bagaço de cana-de-açúcar foi o hidrotérmico. Este foi escolhido por apresentar resultados promissores em escala laboratorial e, ao mesmo tempo, não utilizar nenhuma matéria-prima, exceto a água. Além disso, o pré-tratamento, se realizado de forma contínua como é suposto neste trabalho, possibilita o reaproveitamento da energia térmica contida na corrente de bagaço pré-tratado, diminuindo o consumo de vapor de alta pressão. A Figura 14 apresenta o diagrama da etapa de pré-tratamento hidrotérmico como foi implementado no *EMSO*.

Figura 14. Etapa de pré-tratamento hidrotérmico do bagaço de cana-de-açúcar.



Fonte: Elaborada pelo autor.

No processo descrito na Figura 14, inicialmente o bagaço (E126.Outlet1) sofre um aumento de pressão, para posteriormente ser misturado com a água de diluição (S501), previamente aquecida e pressurizada. Na sequência, a mistura é aquecida até a temperatura do pré-tratamento (195 °C) utilizando vapor de alta pressão (17,4 bar) e segue para o reator de pré-tratamento (E504). As principais variáveis e parâmetros dessa etapa estão apresentados na Tabela 10, enquanto a Tabela 11 apresenta as principais reações que ocorrem nessa etapa. Após o pré-tratamento, a mistura troca calor com a água de embebição previamente pressurizada, sendo resfriada até 80 °C, e segue para um tanque flash (E508). Neste equipamento ocorre o abaixamento da pressão até 1 atm. Os ácidos gerados durante o pré-tratamento, principalmente o ácido acético, são neutralizados empregando-se amônia (S502). Como o pKa do ácido acético é 4,75 a 25 °C e o pH ideal para a hidrólise é 5,0, considerou-se que somente é adicionada uma quantidade de amônia suficiente para neutralizar 50% (base mássica) do ácido acético produzido. A mistura neutralizada é enviada para um filtro (*belt filter*—E511), podendo haver adição de água de embebição (S503). A fração líquida resultante, rica em produtos da hidrólise da hemicelulose, é enviada para a etapa de fermentação (E701.Inlet) ou biodigestão da xilose, enquanto a fração sólida segue para a etapa de hidrólise da celulose (E601.Inlet1).

Tabela 10. Principais variáveis e parâmetros da etapa de pré-tratamento.

Equipamento	Variável/Parâmetro	Valores	Referência
Misturador (E502)	Fração de sólidos	10% (m/m)	Silva (2015)
Trocador de calor (E503)	Temperatura de saída do fluido frio	>180 °C	Mori (2015)
Reator (E504)	Tempo de residência	10-15 min	BVC (2016)
Trocador de calor (E506 e E507)	Temperatura final do pré-tratamento	80 °C	BVC (2016)
Filtro (E511)	Eficiência do filtro (retenção de insolúveis em base mássica)	99,5%	BVC (2016)
	Umidade do bagaço tratado após filtração (base mássica)	50%	BVC (2016)
	Temperatura de saída	80 °C	BVC (2016)

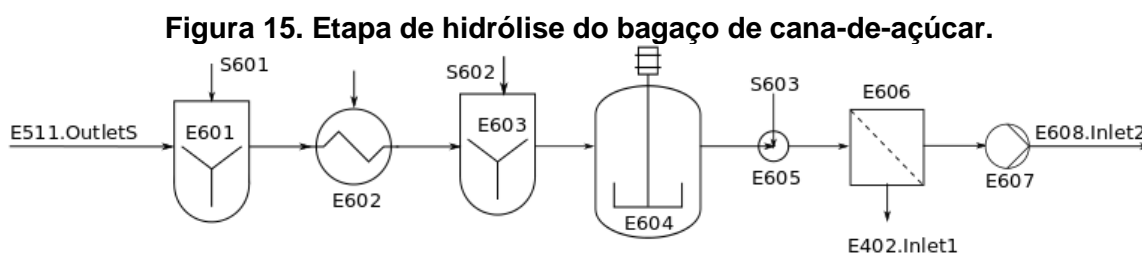
Tabela 11. Reações consideradas na etapa de pré-tratamento.

Reação	Conversão (%)
$C_6H_{10}O_5(\text{celulose}) + H_2O(\text{água}) \rightarrow C_6H_{12}O_6(\text{glicose})$	8,12
$C_6H_{10}O_5(\text{celulose}) \rightarrow C_6H_6O_3(\text{hidróximetilfurfural}) + 2H_2O(\text{água})$	0,07
$C_6H_{10}O_5(\text{celulose}) + H_2O(\text{água}) \rightarrow 12C_{0,5}HO_{0,5}(\text{sólidos desconhecidos})$	5,28
$C_5H_8O_4(\text{hemicelulose}) + H_2O(\text{água}) \rightarrow C_5H_{10}O_5(\text{xilose})$	46,53
$C_5H_8O_4(\text{hemicelulose}) + H_2O(\text{água}) \rightarrow 10C_{0,5}HO_{0,5}(\text{sólidos desconhecidos})$	25,77
$C_5H_8O_4(\text{hemicelulose}) \rightarrow C_5H_4O_2(\text{furfural}) + 2H_2O(\text{água})$	3,89
$C_5H_8O_4(\text{hemicelulose}) + H_2O(\text{água}) \rightarrow 2.5 C_2H_4O_2(\text{ác. acético})$	7,39

Fonte: Silva (2015).

4.4.7 Hidrólise

A fração sólida proveniente do filtro (E511) é enviada para a etapa de hidrólise onde a celulose é convertida a glicose. A Figura 15 apresenta o diagrama desta etapa do processo. Inicialmente água (S601) é adicionada ao bagaço tratado para que a razão sólido/líquido seja alcançada. Na sequência ocorre o aquecimento (ou resfriamento, dependendo dos parâmetros de processo escolhidos) da corrente (E602) e adição das enzimas (S602). No reator de hidrólise (E604) considera-se que somente a reação de hidrólise da celulose ocorre. Após o processo, é possível adicionar água à mistura (S603). Finalmente, a mistura resultante é filtrada, sendo a fração líquida enviada para a etapa de concentração (E608.Inlet2), juntamente com o caldo da cana-de-açúcar, enquanto a fração sólida, constituída principalmente por lignina, é enviada para a caldeira (E402.Inlet1). Os principais parâmetros e variáveis de processo dessa etapa são apresentados na Tabela 12.



Fonte: Elaborada pelo autor.

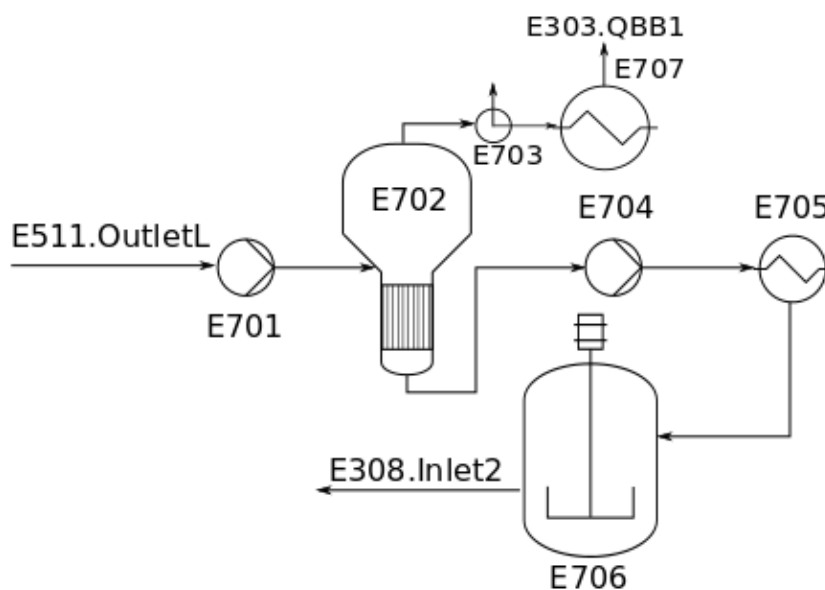
Tabela 12. Principais variáveis e parâmetros da etapa de hidrólise.

Equipamento	Variável/Parâmetro	Valores	Referência
Misturador (E601)	Fração de sólidos	15-25 % (m/m)	BVC (2016)
Trocador de calor (E602)	Temperatura	50 °C	BVC (2016)
Misturador (E603)	Carga enzimática	15 FPU/g de celulose	Angarita (2015)
Reator (E604)	Tempo de batelada	36-48 h	BVC (2016)
	Conversão da hemicelulose	60-80%	BVC (2016)
Filtro (E606)	Eficiência (base mássica)	92-99%	BVC (2016)
	Umidade do sólido (base mássica)	50%	BVC (2016)

4.4.8 Fermentação da xilose

Uma das opções para a utilização da fração líquida que deixa o filtro E511 é a fermentação da xilose em um processo SIF (Isomerização e fermentação simultâneas). Inicialmente, a corrente é pressurizada (E701) e enviada para o evaporador (E702) para concentração. Posteriormente, a pressão do caldo concentrado é novamente ajustada (E704) e a temperatura é reduzida à temperatura de operação (E705) do reator de fermentação (E706). A Figura 16 apresenta esta etapa do processo. Já a Tabela 13 apresenta os principais parâmetros e variáveis desta etapa do processo, enquanto na Tabela 14 são apresentadas as reações consideradas.

Figura 16. Etapa de concentração e fermentação da xilose.



Fonte: Elaborada pelo autor.

Tabela 13. Principais parâmetros e variáveis da etapa de concentração e fermentação da xilose.

Equipamento	Variável/Parâmetro	Valores	Referência
Evaporador (E702)	Concentração final de xilose	50 g/l	NREL (1993)
Trocador de calor (E705)	Temperatura final	33 °C	BVC (2016)
Reator (E706)	Tempo de residência	24 -48 h	BVC (2016)

Tabela 14. Reações consideradas na etapa de fermentação da xilose.

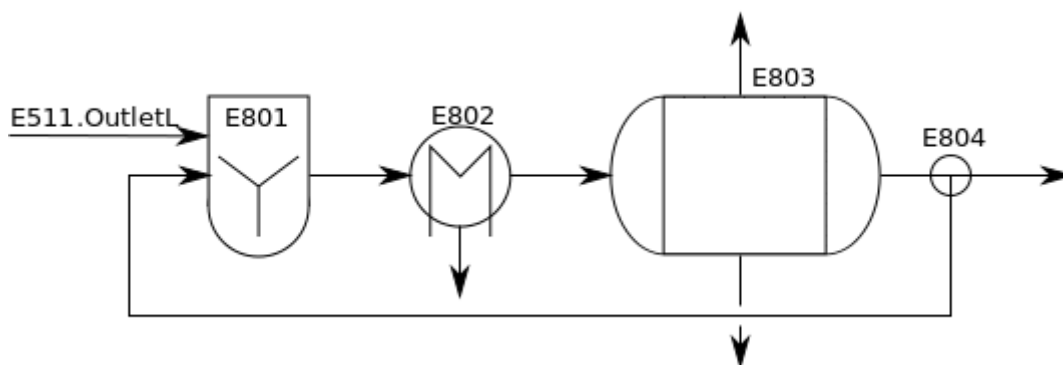
Reação	Conversão (%)
$C_6H_{12}O_6$ (glicose) \rightarrow $2C_2H_6O$ (etanol) + $2CO_2$ (gás carbônico)	90,48
$C_6H_{12}O_6$ (glicose) + $2H_2O$ (água) \rightarrow $2C_2H_4O$ (etanal) + $2CO_2$ (gás carbônico) + $4H_2$ (hidrogênio)	1,19
$C_6H_{12}O_6$ (glicose) + H_2 (hidrogênio) \rightarrow $2C_3H_8O_3$ (glicerol)	2,67
$3C_5H_{10}O_5$ (xilose) \rightarrow $5C_2H_6O$ (etanol) + $5CO_2$ (gás carbônico)	66,50
$C_5H_{10}O_5$ (xilose) + H_2 (hidrogênio) \rightarrow $C_5H_{12}O_5$ (xilitol)	18,70
$2C_5H_{10}O_5$ (xilose) \rightarrow $5C_2H_4O_2$ (ác. acético)	1,50
$3C_5H_{10}O_5$ (xilose) + $5H_2$ (hidrogênio) \rightarrow $5C_3H_8O_3$ (glicerol)	2,80

Fonte: Silva (2013).

4.4.9 Biodigestão da xilose e/ou vinhaça

Outra opção para a utilização da fração líquida proveniente do filtro E511 é a biodigestão anaeróbica. É possível também realizar o mesmo procedimento utilizando como matéria-prima a vinhaça. Como simplificação, considera-se que todos os compostos orgânicos solúveis são igualmente convertidos a metano e dióxido de carbono. Neste processo, inicialmente a fração líquida é misturada com uma parte da corrente saída do reator, para ajustar a carga de DQO (demanda química de oxigênio) que é inserida no reator. Posteriormente, a corrente é aquecida (E802) e enviada para o reator (E803). Deste saem três correntes, uma gasosa, sendo uma mistura de dióxido de carbono e metano, uma líquida, com os compostos orgânicos solúveis que não foram convertidos e uma de lodo, contendo a biomassa produzida. A Figura 17 apresenta o diagrama do processo enquanto a Tabela 15 apresenta os principais parâmetros e variáveis envolvidos nesse processo. Vale ressaltar que para ambas as matérias-primas o processo e os respectivos dados operacionais são os mesmos.

Figura 17. Etapa de biodigestão da xilose.



Fonte: Elaborada pelo autor.

Tabela 15. Principais variáveis e parâmetros da etapa de biodigestão da xilose/vinhaça.

Equipamento	Variável/parâmetro	Valores	Referência
Misturador (E801)	Carga de DQO no biodigestor	20 - 60 kg/m ³ /dia	Baez-Smith (2006)
Trocador de calor (E802)	Temperatura	40 °C	Baez-Smith (2006)
Biodigestor (E803)	Tempo de retenção hídrica	10,8 h	Souza (1992)
	Umidade do lodo (base mássica)	96,5 -98,5 %	Medonça e Campos (2016)

4.5 Implementação e validação da metodologia

Inicialmente foi desenvolvida e implementada uma biblioteca de modelos matemáticos que representam as operações unitárias que compõem o processo na plataforma de simulação *EMSO*. Para que houvesse uma padronização desses modelos, foram adotados os seguintes critérios:

- Abordagem genérica;
- Diferenciação entre a fase fluida e sólida da corrente mássica;
- Verificação do modelo;
- Fácil integração com o *VRTherm*;
- Etapas do processo implementadas separadamente.

A abordagem genérica consiste em compor os modelos matemáticos com balanços de massa e energia e parâmetros de eficiência. Esta técnica permitiu uma maior reprodutibilidade dos modelos e conseqüentemente facilitou a criação de novos modelos. Apenas em modelos em que havia a necessidade de um maior detalhamento do consumo energético, como evaporadores e caldeiras, equações constitutivas foram utilizadas. Para a etapa de destilação em específico, foi utilizado o metamodelo desenvolvido por FURLAN et. al. (2016), como descrito na seção 4.4.4. Vale destacar que para o desenvolvimento do metamodelo foi feito o uso das malhas de inspeção, mesma técnica empregada neste trabalho.

Já a diferenciação entre a fase fluida e sólida para a corrente mássica facilitou a implementação dos balanços de massa nos modelos.

No simulador de processos *EMSO* é possível trabalhar com diversos ambientes dentro de um mesmo arquivo, ou seja, é possível implementar o modelo matemático da operação unitária e fazer a simulação do modelo no mesmo arquivo, por exemplo. Conseqüentemente, foi possível avaliar a consistência e robustez do modelo antes de integrá-lo a outros equipamentos.

Outro problema recorrente na simulação de processos diz respeito ao cálculo de propriedades termodinâmicas, que são de difícil resolução. Uma alternativa geralmente usada é utilizar polinômios para realizar o cálculo das propriedades. Porém esta técnica apresenta algumas limitações, como faixa operacional restrita e também podem ser necessárias diversas correções do estado de referência para o cálculo de propriedades termodinâmicas ao integrar modelos que apresentam

polinômios distintos para o cálculo da mesma propriedade. Por essas razões, optou-se por utilizar o *VRTherm*. Este *software* é disponibilizado junto com o *EMSO* e é capaz de prever inúmeras propriedades termodinâmicas, além de possuir em seu banco de dados milhares de substâncias e permitir também que o usuário insira outras substâncias de seu interesse.

Para que se pudesse fazer diversos estudos de caso de uma forma mais eficiente, as etapas que compõem a biorrefinaria foram simuladas separadamente. Assim, o usuário pode constituir um *layout* de processo integrando diferentes etapas a sua escolha ao invés de compor o processo integrando modelo à modelo.

Além da padronização dos modelos, foi feito também um tutorial sobre o simulador de processos *EMSO* e um documento com as normas para a nomenclatura dos modelos que podem ser encontrados em Anexos 8.

A padronização aliada à documentação teve como objetivo facilitar a aprendizagem de novos pesquisadores do LaDABio e permitir o compartilhamento dos modelos desenvolvidos.

A partir das dificuldades de convergência encontradas nas simulações, foram determinados os modelos e etapas que fariam uso das malhas de inspeção e também as variáveis de entrada.

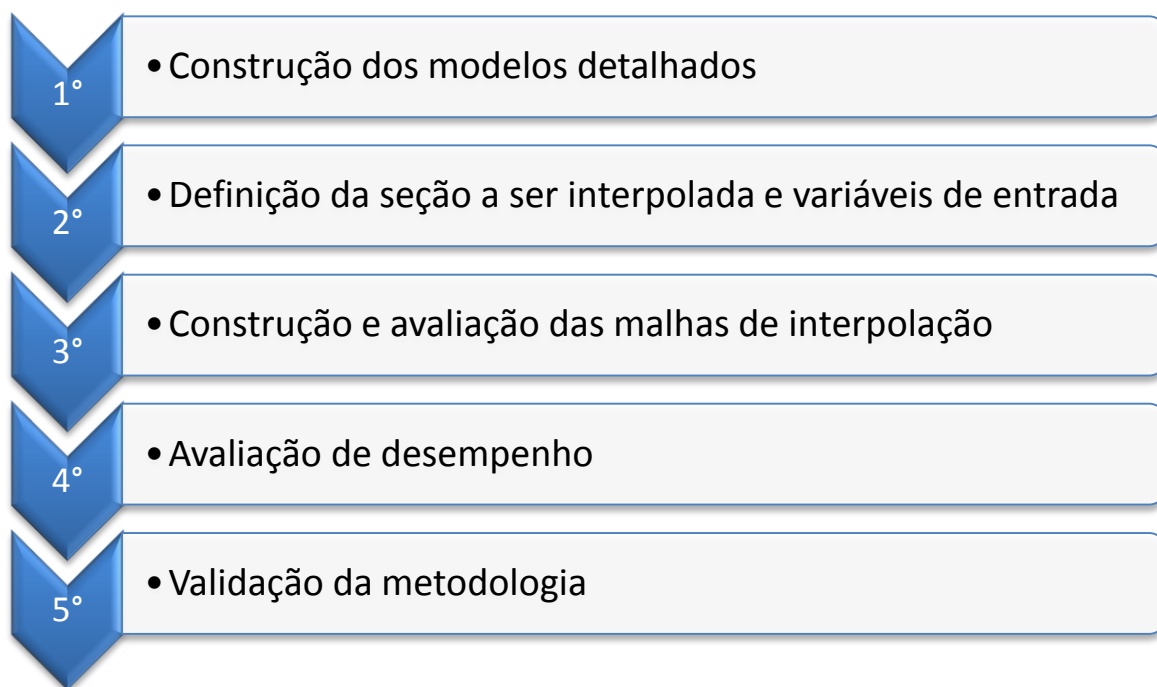
Em seguida, para a construção dos metamodelos foram incorporadas inicialmente as equações de balanço de massa e energia, além das equações necessárias para manter o mesmo nível de informações do modelo detalhado, havendo somente perda de acurácia em relação ao mesmo. Por exemplo, os valores do brix de entrada e saída dos evaporadores não são essenciais para a resolução do modelo, porém apresentam informações úteis ao usuário, permitindo avaliar rapidamente a eficiência do processo. Consequentemente é imprescindível que a equação responsável por calcular esta variável esteja presente tanto no modelo detalhado quanto no metamodelo. Posteriormente, as variáveis de saída do interpolador foram definidas de modo que o grau de liberdade do sistema de equações fosse zero e consequentemente o sistema apresentasse uma solução. Vale destacar que se as variáveis de saída do interpolador não forem escolhidas de forma adequada, o sistema de equações pode se tornar singular. Por esta razão, é necessário fazer algumas combinações especificando as possíveis variáveis de saída do interpolador a fim de definir o conjunto de variáveis de saída ideal. Ressalta-se ainda que as variáveis de entrada e saída do metamodelo devem ser

intensivas para que os dados da malha de inspeção sejam independente da escala. Definido o conjunto ideal de variáveis de saída do metamodelo, são adicionadas as equações responsáveis por fazer o cálculo de interpolação e conseqüentemente as variáveis de saída do interpolador deixam de ser especificadas para que o sistema tenha grau de liberdade zero e solução.

No *software Matlab®*, a construção e avaliação das malhas de inspeção foram feitas para as seções definidas, comparando-se as previsões do interpolador em pontos fora da grade com os resultados obtidos com a simulação rigorosa. A partir do menor valor de erro calculado e uma acurácia requerida, foi escolhida a malha de inspeção. Por fim, foi feita a análise de desempenho substituindo os modelos rigorosos pelos modelos de interpoladores nas simulações no *software EMSO* e verificando-se o tempo de simulação.

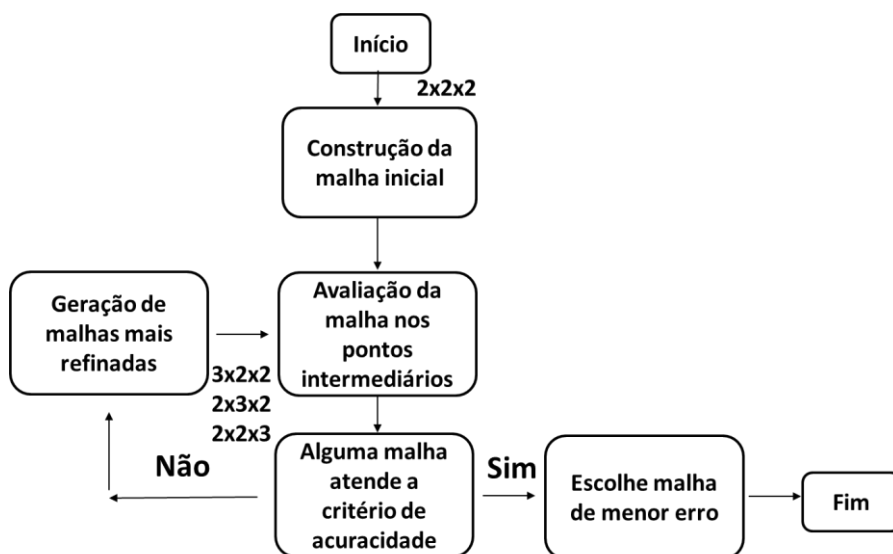
Como foi ilustrado na seção 4.4, os principais dados operacionais dos equipamentos são dados da literatura. As Figuras 18 e 19 demonstram o fluxograma para a metodologia e o diagrama para o algoritmo desenvolvido em *Matlab®*. É importante destacar que na Figura 19 é ilustrado um caso em que há três variáveis de entrada. Sempre o algoritmo inicia com dois pontos para interpolação em cada variável e depois é adicionado 1 ponto a cada variável gerando o número de combinações idêntico ao número de variáveis de entrada em cada iteração. Cada combinação é avaliada individualmente até que uma atinja um critério de acurácia requerido. O algoritmo para a construção e avaliação das malhas é apresentado no Anexos 8.

Figura 18. Fluxograma da metodologia.



Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 19. Diagrama para o algoritmo “Construção e avaliação das malhas de interpolação” no *Matlab*.



Fonte: Elaborada pelo autor.

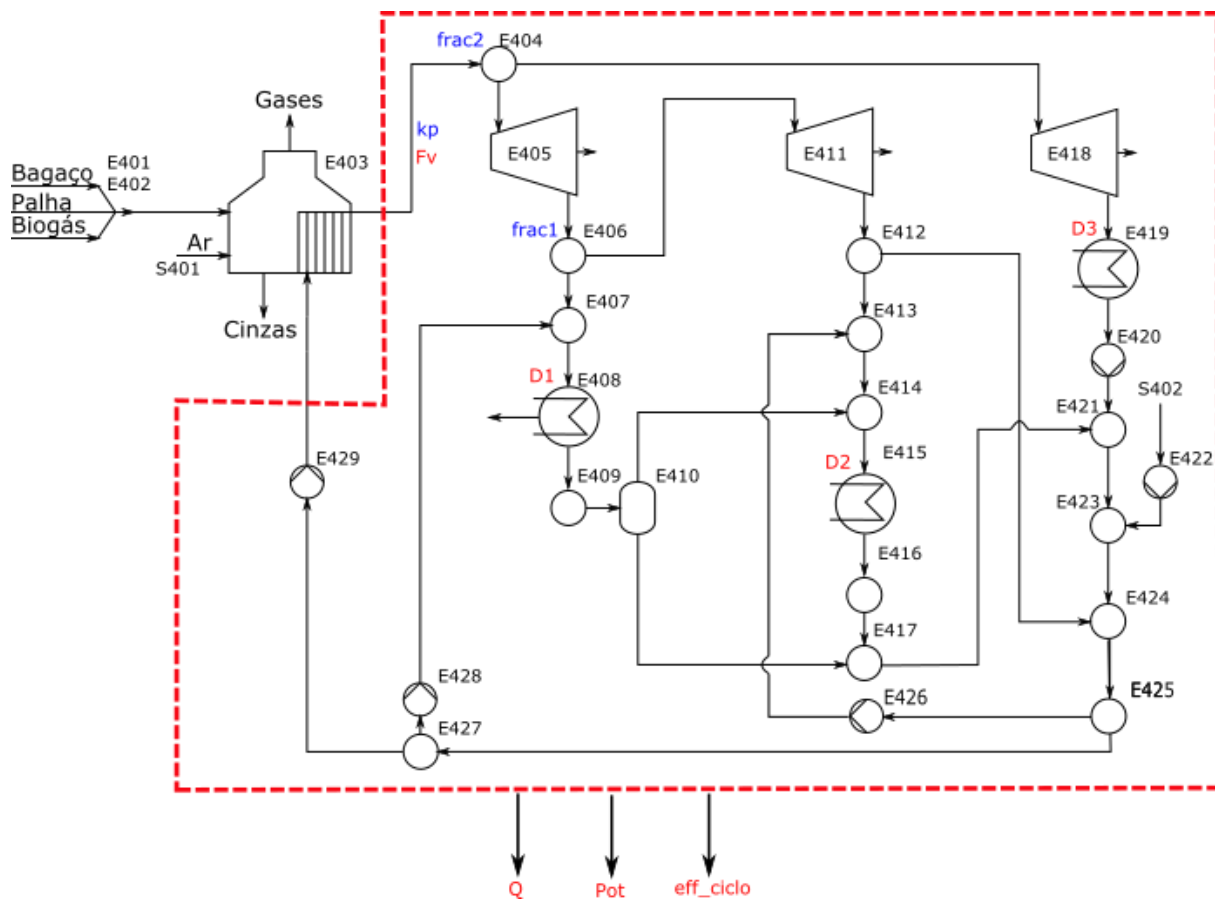
5. Resultados

5.1 Estudo de caso

Como estudo de caso, considerou-se uma planta de produção de etanol de primeira e segunda geração. Neste processo, há etapas e modelos que impactam significativamente no tempo de simulação. Com o objetivo de minimizar este impacto, foram definidas duas regiões para serem interpoladas: etapas de cogeração e evaporação múltiplo-efeito com 2 estágios de evaporação.

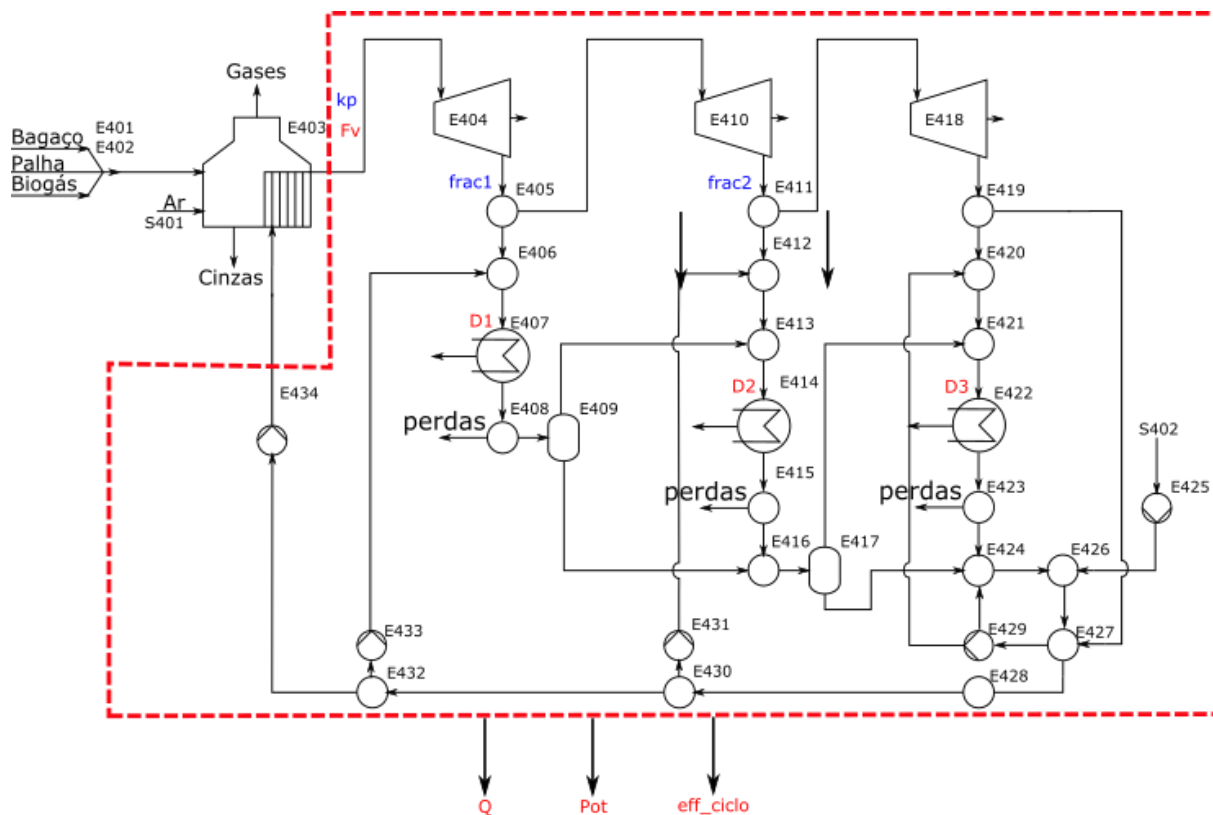
É importante ressaltar que caso a etapa de cogeração seja adicionada a uma planta produtora somente de etanol de primeira geração, a etapa apresentará uma turbina de condensação e caso a seção seja adicionada a uma unidade produtora de etanol de primeira e segunda geração, este equipamento não é necessário. Sendo assim, foi necessário criar duas malhas de inspeção distintas para as variações da etapa de cogeração. Para ambas, foram definidas as seguintes variáveis de entrada: duas frações de separadores de vapor (frac1 e frac2) que definem a vazão de cada linha de vapor do processo e a pressão de operação da caldeira adimensional (kp). As variáveis de saída do modelo de cogeração com turbina de condensação foram: os calores fornecidos pelos vapores de média e baixa pressão (D1 e D2), a demanda de calor para a turbina de condensação (D3), a produção líquida de energia elétrica (Pot) e o calor perdido nas linhas de vapor do processo (Q). Para a outra variação, as variáveis de saída foram: os calores fornecidos pelos vapores de alta, média e baixa (D1, D2 e D3), a produção líquida de energia elétrica (Pot) e o calor perdido nas linhas de vapor do processo (Q). As seções definidas para representar as variações da etapa de cogeração (com e sem turbina de condensação) com as variáveis de entrada e saída destacadas em azul e vermelho, respectivamente, são apresentadas nas Figuras 20 e 21.

Figura 20. Seção da etapa de cogeração com turbina de condensação representada pelo modelo de interpolador.



Fonte: Elaborada pelo autor.

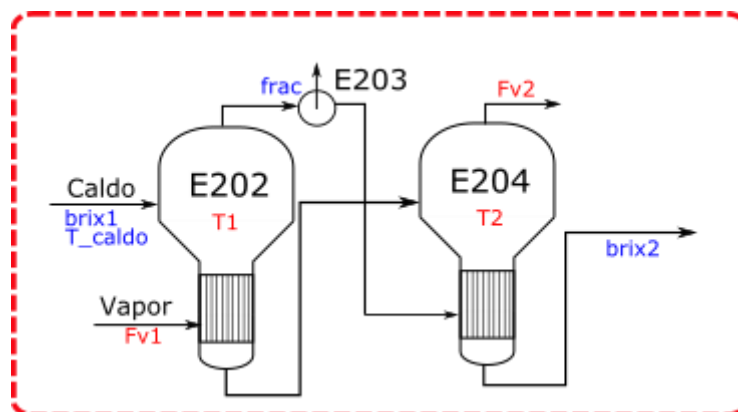
Figura 21. Seção da etapa de cogeração sem turbina de condensação representada pelo modelo de interpolador.



Fonte: Elaborada pelo autor.

Já para a etapa de evaporação, foram escolhidas como variáveis de entrada, os brix do caldo antes e depois da concentração (brix_1 e brix_2), fração do vapor sangrado (frac) e a temperatura do caldo de entrada (T_caldo). As variáveis de saída definidas foram: as temperaturas do primeiro e segundo estágio de evaporação (T1 e T2), a vazão de vapor requerida para a etapa de evaporação (Fv1) e a vazão de vapor vegetal produzida no segundo estágio (Fv2). A seção definida para representar a etapa de evaporação com as variáveis de entrada e saída destacadas em azul e vermelho, respectivamente, são apresentadas na Figura 22.

Figura 22. Seção da etapa de evaporação representada pelo modelo de interpolador.



Fonte: Elaborada pelo autor.

As Tabelas 16, 17 e 18 apresentam os limites inferior e superior para cada variável de entrada e suas respectivas unidades para as etapas escolhidas. Esses intervalos foram escolhidos de modo a garantir que o modelo simplificado atendesse a todas as condições operacionais do processo completo, além de promover a integração da seção a ser representada pelo modelo simplificado com as demais etapas da biorrefinaria. Nota-se também que as variáveis de entrada e saída foram definidas de forma a serem intensivas ou adimensionais para que as malhas de inspeção pudessem ser independentes da escala de processo, como destacado na seção 4.5.

Tabela 16. Variáveis de entrada da etapa de cogeração com turbina de condensação.

Variáveis	Limite inferior	Limite superior	Unidades
frac1	0,35	0,7	-
frac2	1e-6	0,06	-
kp	0	1	-

Fonte: Elaborada pelo autor.

Tabela 17. Variáveis de entrada da etapa de cogeração sem turbina de condensação.

Variáveis	Limite inferior	Limite superior	Unidades
frac1	1e-6	0,7	-
frac2	0,03	0,2	-
kp	0	1	-

Fonte: Elaborada pelo autor.

Tabela 18. Variáveis de entrada da etapa de evaporação.

Variáveis	Limite inferior	Limite superior	Unidades
brix1	0,08	0,15	-
brix2	0,2	0,22	-
T_caldo	323,15	373,15	K
frac	0	1	-

Fonte: Elaborada pelo autor.

A integração entre o interpolador e o *EMSO* é feita através de um modelo-interface. Trata-se de um modelo simplificado no qual são considerados os balanços de massa e energia aplicados ao volume de controle englobando toda a região aproximada pelo interpolador. Dessa forma, a interface se dá com o interpolador fornecendo informação suficiente ao modelo de modo que os balanços possam ser calculados. Assim, garante-se que na simulação do processo completo, tais balanços sejam respeitados, em detrimento de uma possível perda de acurácia do modelo. Os modelos-interface desenvolvidos são apresentados em Anexos 8.

No *software Matlab®*, a construção e avaliação das malhas de inspeção foram feitas para as seções definidas. Foram adotados dois critérios distintos para a definição da malha de interpolação para cada etapa. Para as variações da etapa de

cogeração foi definido que o erro relativo entre a variável interpolada e a variável calculada pelo modelo detalhado fosse menor que 0,01. Enquanto que para a etapa de evaporação foi requerido que o valor fosse menor que 0,02. A ideia inicial era que os erros relativos tivessem valores iguais 0,01 para todas as seções, porém para a etapa de evaporação, observou-se um problema de memória durante o processo de construção e análise das malhas de inspeção para erros relativos inferiores a 0,02.

No simulador de processos *EMSO*, a etapa de cogeração com turbina de condensação foi adicionada a uma planta 1G produtora de etanol anidro sem biodigestão (E1G_cog), enquanto que a etapa de cogeração sem turbina de condensação e a etapa de evaporação foram adicionadas a uma planta 1G-2G sem biodigestão e fração C5 descartada (E1G2G_cog e E1G2G_evap). Todas as simulações rigorosas foram comparadas com as simulações com as malhas de interpolação (E1G_cog_Int, E1G2G_cog_Int e E1G2G_evap_Int).

A malha requerida para a etapa de cogeração com turbina de condensação, apresentou as dimensões 2x2x3, enquanto que para o caso em que não há turbina de condensação, as dimensões encontradas foram 2x2x2. É importante ressaltar que as dimensões representam as variáveis frac1, frac2 e kp para ambos os casos, respectivamente. Nota-se que apesar da etapa de cogeração ser complexa, com diversos ciclos, *by-pass* e interconexões entre trechos distintos, o comportamento das variáveis de saída que se conectam ao restante do processo é praticamente linear, como pode ser visto pela dimensão da malha de interpolação. Isto demonstra que para estes casos, a escolha da etapa a ser aproximada pelo interpolador foi correta. Para a construção e avaliação da malha que representa a etapa de cogeração com turbina de condensação, foram gastos cerca de 4 minutos. Já para a outra variação, foram necessários cerca de 50 segundos. As Tabelas 19 e 20 apresentam informações sobre o número de equações, variáveis e especificações e os tempos de simulação para as simulações rigorosas e com as malhas de interpolação para as variações da etapa de cogeração.

Tabela 19. Dados da simulação para E1G_cog e E1G_cog_Int.

Dados	E1G_cog	E1G_cog_Int
N° de equações	18482	18150
N° de variáveis	17716	17422
N° de especificações	766	728
Tempo de simulação	7,09 s	3,08 s

Fonte: Elaborada pelo autor.

Tabela 20. Dados da simulação para E1G2G_cog e E1G2G_cog_Int.

Dados	E1G2G_cog	E1G2G_cog_Int
N° de equações	25592	25194
N° de variáveis	24554	24198
N° de especificações	1038	996
Tempo de simulação	10,38 s	5,34 s

Fonte: Elaborada pelo autor.

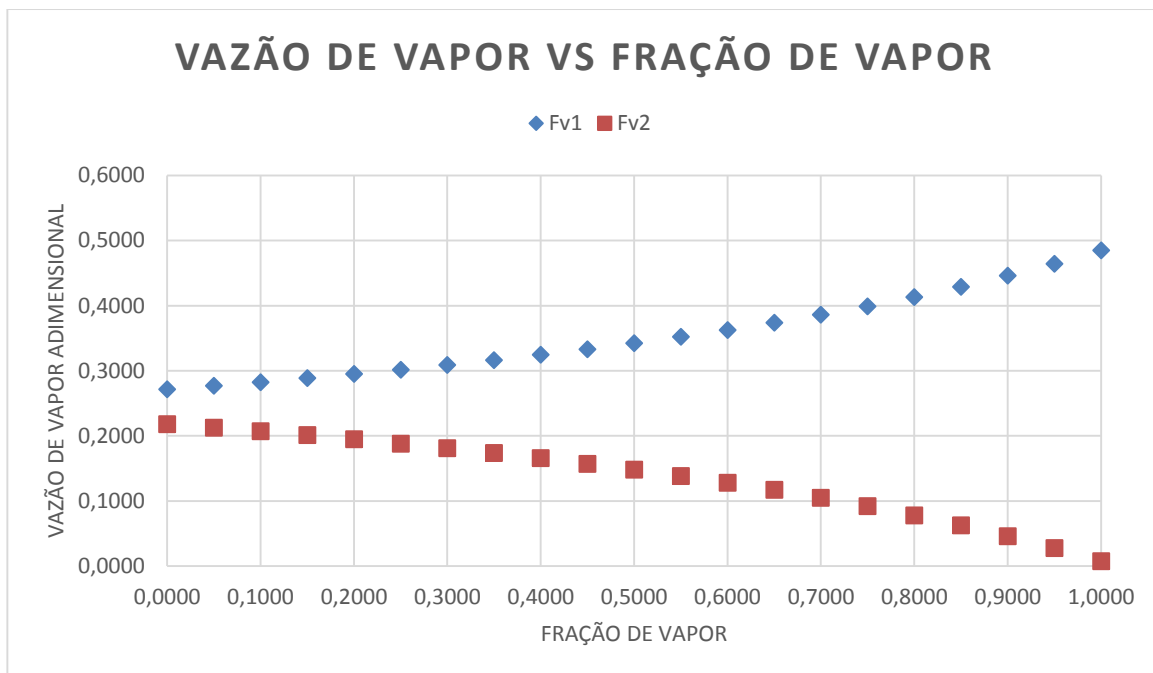
A malha requerida para a etapa de evaporação apresentou as dimensões 2x2x19x5 (variáveis brix1, T_caldo, frac e brix2, respectivamente). Diferente do caso anterior, observa-se um efeito pronunciado para a variável frac e moderado para a variável brix2. Isto indica que há um alto grau de não-linearidade das variáveis resposta em relação à variável frac e um grau menor em relação à variável brix2. A fim de verificar este efeito, as variáveis resposta foram plotadas em função da variável frac. Para que não houvesse problemas com a escala de gráficos, as vazões de vapor adimensionais foram plotadas em único gráfico (Figura 23), enquanto que as temperaturas de operação foram plotadas em outro gráfico (Figura 24).

Tabela 21. Dados da simulação para E1G2G_evap e E1G2G_evap_Int.

Dados	E1G2G_evap	E1G2G_evap_Int
N° de equações	25790	25615
N° de variáveis	24750	24577
N° de especificações	1040	1038
Tempo de simulação	10,40 s	10,25 s

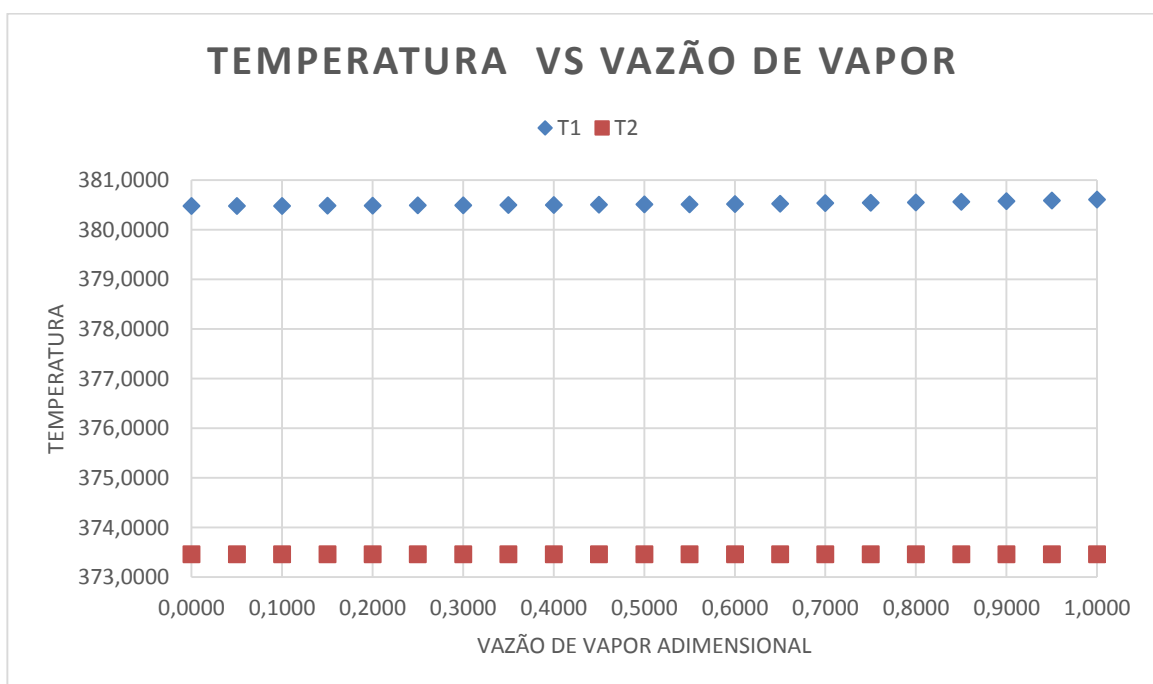
Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 23. Gráfico das vazões de vapor adimensionalizadas em função da fração de vapor.



Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 24. Gráfico das temperaturas de operação dos estágios de evaporação em função da fração de vapor.



Fonte: Elaborada pelo autor.

Ao analisar-se as Figuras 23 e 24, nota-se que ocorre um desvio da linearidade somente em relação às vazões. Portanto, conclui-se que a não-linearidade não precisa ser em relação a todas as variáveis resposta para que haja um grande número de pontos para a respectiva variável de entrada.

Em relação aos dados de simulação, observou-se que a adição da etapa de cogeração fazendo uso da malha de inspeção provocou uma redução de cerca de 56% no tempo de simulação para o caso com a turbina de condensação presente e 49% no segundo caso, enquanto que para a etapa de evaporação não houve uma redução significativa. Provavelmente, isto deve-se ao fato da redução do número de equações para as variações da etapa de cogeração (cerca de 1,8% para o primeiro caso e 1,5% para o segundo caso) ser mais significativa do que para a etapa de evaporação (cerca de 0,7%). Além disso, a malha requerida para interpolação apresenta um número de pontos relativamente pequeno (12 pontos para o primeiro caso e 8 pontos para o segundo caso) quando comparada à etapa de evaporação (380 pontos), o que também influi de maneira positiva na redução do tempo de simulação. Vale destacar que todas as simulações foram realizadas em um computador com processador 8x Intel®Core™i7-7700K CPU @ 4,20GHz e memória RAM de 32904MB, utilizando somente um dos oito núcleos desse computador, pois o *EMSO* não permite processamento paralelo em sua atual versão.

6. Conclusões

A metodologia desenvolvida para a automação da criação e avaliação da malha de interpolação iterativamente no *Matlab*[®] funcionou com sucesso. Para o estudo de caso escolhido, observou-se que, apesar da etapa de cogeração apresentar grande número de ciclos e interconexões entre os equipamentos, o comportamento das variáveis que conectam essa etapa com o restante do processo é praticamente linear. Dessa forma, foi possível aproximar as duas variações da etapa de cogeração por interpoladores com poucos pontos (8 e 12, respectivamente) o que levou a grandes diminuições no tempo de simulação dos processos (56% e 49%, respectivamente). Por outro lado, o comportamento não linear das vazões de vapor do trem de evaporadores frente a mudanças na fração de sangria fez com que a malha de interpolação necessária fosse maior (380 pontos) e a melhoria no desempenho da simulação menos pronunciada. Porém é necessário ainda estabelecer estratégias para definir quais são as variáveis de entrada mais importantes para uma dada seção do processo e ainda determinar uma estratégia para identificar quais modelos e/ou regiões do processo são as mais adequadas para fazer uso da malha de interpolação.

7. Referências Bibliográficas

- ALSOC (2010), <<http://www.eng.ufrgs.br/trac/alsoc/wiki/EMSO>>. Acesso em: Março de 2016.
- ALVES, M. **Estudo de sistemas de cogeração em usinas de açúcar e álcool, com utilização do bagaço e palha da cana**. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) - Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas. Campinas, 2011.
- ANA – AGÊNCIA NACIONAL DE ÁGUAS. **Manual de conservação e reúso de água na agroindústria sucroenergética**. Brasília, 2009, 292 p.
- ANGARITA, J. D.; SOUZA, R. B. A.; CRUZ, A. J. G.; BISCAIA E. C.; SECCHI A.R. Kinetic modeling for enzymatic hydrolysis of pretreated sugarcane straw. **Biochemical Engineering Journal**, v. 104, 10-19, 2015.
- BAEZ-SMITH, C. Anaerobic digestion of vinasse for the production of methane in the sugar cane distillery. In: SPRI Conference on Sugar Processing, Águas de São Pedro, SP. **Proceedings**. pg 268-287.
- BONOMI, A.; MARIANO, A.P.; JESUS, C.D.F.; FRANCO, H.C.J.; CUNHA, M.P.; DIAS, M.O.S.; CHAGAS, M.F., CAVALETT, O., MANTELATTO, P.E., MACIEL FILHO, R., JUNQUEIRA, T.L, CARDOSO, T.F., 2012. **The Virtual Sugarcane Biorefinery (VSB): 2011 Report**. Campinas, Sao Paulo: Brazilian Bioethanol Science and Technology Laboratory (CTBE), Technological Assessment Program (PAT), Internal Report. Disponível em; <<http://ctbe.wpengine.com/wp-content/uploads/2014/07/vsb-report-2011.pdf>>. Acesso em: Maio de 2015.
- BERECHE, R. P., **Modelagem e integração energética do processo de produção de etanol a partir da biomassa de cana-de-açúcar**, Universidade Estadual de Campinas, Tese de Doutorado, 2011.
- BHOSEKAR, A.; IERAPETRITOU, M. Advances in surrogate based modeling, feasibility analysis and optimization: A review. **Computers & Chemical Engineering**, 2017.
- BVC – Biorrefinaria Virtual de Cana; CTBE – LABORATÓRIO NACIONAL DE CIÊNCIA E TECNOLOGIA DO BIOETANOL. **Simulações Aspen Plus**. 2016.
- CASTRO, S. B.; ANDRADE, S. A. C. **Engenharia e tecnologia açucareira**. Departamento Engenharia Química, CTG (Centro de Tecnologia e Geociências) – UFPE, 2006.

CHIEPPE JÚNIOR, J. B. **Tecnologia e fabricação do álcool**. Inhumas: Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de Goiás/IFG; Santa Maria: Universidade Federal de Santa Maria, 2012.

DIAS, M. O. S., **Simulação do processo de produção de etanol a partir do açúcar e do bagaço, visando a integração do processo e a maximização da produção de energia e excedentes do bagaço**. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) - Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas. Campinas, 2008.

DIAS, M. O. S. **Desenvolvimento e otimização de processos de produção de etanol de primeira e segunda geração e eletricidade a partir da cana-de-açúcar**. Tese (Doutorado em Engenharia Química) - Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas. Campinas, 2011.

EMPRAL. **Limpeza da cana a seco e aproveitamento da palha**. Disponível on line em: < <http://www.empral.com.br/jaboticabal/downloads/06.pdf>>. Acesso em: Abril de 2015.

ENSINAS, A. V. **Integração térmica e otimização termoeconômica aplicadas ao processo industrial de produção de açúcar e etanol a partir da cana-de-açúcar**. Tese (Doutorado em Engenharia Mecânica) - Faculdade de Engenharia Mecânica, Universidade Estadual de Campinas. Campinas, 2008.

FERNANDES, A. C. **Cálculos na agroindústria da cana-de-açúcar**. 3.ed. Piracicaba, SP: STAB, 2011. 416 p.

FORRESTER, A. I. J.; KEANE, A.J. Recent advances in surrogate-based optimization. **Progress in Aerospace Sciences**. v. 45 n. 1-3, p. 50–79, 2009.

FURLAN, F. F.; LINO, A. R. A.; MATUGI, K.; CRUZ, A. J. G.; GIORDANO R. C. A simple approach to improve the robustness of equation-oriented simulators: Multilinear look-up table interpolators. **Computers & Chemical Engineering**, v. 86, p. 1-4, 2016.

HAN, Z.; ZHAN, K. Surrogate-based optimization. In: **Real-World Applications of Genetic Algorithms**. InTech, 2012.

HONIG, P. **Principles of sugar technology**. New York: Elsevier Publishing Company, v. 1, 1953.

HUGOT, E. **Handbook of cane sugar engineering**. 3° ed. Nova Iorque: Elsevier Science Publishing Company, 1986.

JORNALCANA. Angélica (usina) aprimora sistema de limpeza de cana de açúcar. **Jornalcana**, série 02, n. 254, março de 2015.

MACEDO, I. C.; LEAL, M. R. L. V.; HASSUANI, S. Sugar cane residues for power generation in the sugar/ethanol mills in Brazil. **Energy for Sustainable Development**, v. 05, n. 01, pp. 77-82. 2001.

MORI, N. R. **Etanol celulósico a partir da palha e do bagaço de cana-de-açúcar: pré-tratamentos e conversão biotecnológica não convencionais**. Tese (Doutorado em Ciências) – Escola de Engenharia de Lorena, Universidade de São Paulo. Lorena, 2015.

MORTON, W. Equation-oriented simulation and optimization. **PROCEEDINGS-INDIAN NATIONAL SCIENCE ACADEMY PART A**, v. 69, n. 3/4, p. 317-358, 2003.

NELLES, O. Linear, polynomial, and look-up table models. In: **Nonlinear System Identification**. Springer Berlin Heidelberg, 2001. p. 209-238.

NREL – NATIONAL RENEWABLE ENERGY LABORATORY. Division of Midwest Research Institute. **Xylose fermentation to ethanol: a review**. Golden, Colorado, 1993.

PATERNINA, L. M. C. **Modelagem e simulação do processo de fermentação extrativa a vácuo com uma câmara de flash e separação do CO₂ utilizando uma coluna de absorção**. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) - Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas. Campinas, 2011.

ROCHA, G. J. M., GONÇALVES, A. R., OLIVEIRA, B. R., OLIVARES, E. G., ROSSELL, C. E. V. **Steam explosion pretreatment reproduction and alkaline delignification reactions performed on a pilot scale with sugarcane bagasse for bioethanol production**. **Industrial Crops and Products**, 35, 274-279, 2012.

RODRIGUES, R.; SOARES, R. P.; SECCHI, A. R. Coleção de 10 problemas numéricos típicos em engenharia química resolvidos com o simulador EMSO. In: **XVII Congresso Brasileiro de Engenharia Química. Recife, Brasil:[sn]**. 2008.

SILVA, C. R. **Produção de etanol a partir da fração hemicelulósica do bagaço de cana usando glicose isomerase coimobilizada com *Saccharomyces cerevisiae***. Tese (Doutorado em Engenharia Química), Universidade Federal de São Carlos. São Carlos, 2013.

- SILVA, G. M. **Avaliação de diferentes configurações de hidrólise enzimática e fermentação utilizando bagaço de cana-de-açúcar para a produção de etanol 2G**. Tese (Doutorado em Engenharia Química), Universidade Federal de São Carlos. São Carlos, 2015.
- SMOLA, A. J.; SCHÖLKOPF, B. A tutorial on support vector regression. **Statistics and Computing**. v.14, n.3, p.199–222, 2004.
- SOARES, R. P. **Desenvolvimento de um simulador genérico de processos dinâmicos**. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) -UFRGS, Porto Alegre, 2003.
- SOUZA, M. E.; FUZARO, G.; POLEGATO, A. R. Thermophilic anaerobic digestion of vinasse in pilot plant UASB reactor. **Water Science and Technology**, v. 25, n. 7, p. 213-222, 1992.
- VASCONCELOS, J. N. **Fermentação etanólica**. In: SANTOS, F.; BORÉM, A.; CALDAS, C. Cana-de-açúcar: bioenergia, açúcar e etanol, tecnologias e perspectivas. - 2. ed. rev. e ampl. - Viçosa: UFV, 2011. 637p
- WALTER, A.; DOLZAN, P.; QUILODRÁN, O.; GARCIA, J.; SILVA, C.; PIACENTE, F.; SEGERSTEDT, A. **A sustainability analysis of the Brazilian ethanol**. A report supported by UK Embassy and DEFRA. Disponível em: <http://www.globalbioenergy.org/uploads/media/0811_Unicamp_-_A_sustainability_analysis_of_the_Brazilian_ethanol.pdf>. Acesso em: Abril de 2015.

8. Anexos

Nesta seção é descrito o código em *Matlab*[®] responsável por criar e avaliar as malhas de interpolação e também os modelos-interface.

8.1 Código

```

clc
clear all
close all
global entrada
global saida1
global saida2
tic
%% Construção da malha de interpolação

% Observações gerais: O usuário deve especificar os limites inferior
% e superior para as variáveis selecionadas e também as unidades
% de entrada e saída conforme o exemplo ilustrado. Além disso,
% o usuário deve informar corretamente os nomes dos arquivos
% utilizados para a conexão com o EMSO e o erro admitido
% para os pontos da malha

%vetor com o limite superior e inferior das variáveis selecionadas
% wSP404.frac wSP406.frac kp
%Verificar se as unidades estão em SI.

%% Especificações de entrada
li=[0.35 0.000001 0];
ls=[0.7 0.06 1];
InputUnits='InputUnits: , , \r\n';
OutputUnits='OutputUnits: , , , , \r\n';
malha='malha_cog.txt';
sim1='cog';
sim2='cog2';
tol=0.01;

%% Número de variáveis de entrada
n=length(ls);

% Matriz dos pontos de entrada
mpe=ones(1,n);

% Pontos para cada variável de entrada
for j=1:n
    if mpe(1,j)==1
        m(1,j)=mpe(1,j)+1;
    else
        m(1,j)=mpe(1,j)*2-1;
    end
end

% Total de número de pontos
p=prod(m);

```

```

% Definição da dimensão do fator de partição
f=zeros(1,n);

%% Cálculo do fator de partição
for j=1:n
    f(1,j)=(ls(1,j)-li(1,j))/(m(1,j)-1);
end

%% Cálculo dos fatores de concatenação
z=ones(1,n-1);
for j=1:n-1
    z(j)=prod(m(j+1:n));
end

%% Definição da matriz de entrada de valores
me=[];
for i=1:n
    m_=[];
    for j=1:m(i)
        m_(j,1)=f(i)*(j-1)+li(i);
    end
    if i==n
        p_=p/m(n);
        me_=repmat(m_,p_,1);
    else
        me_=kron(m_,ones(z(i),1));
        lth=length(me_);
        p_=p/lth;
        me_=repmat(me_,p_,1);
    end
    me(:,i)=me_(:);
end

%% Utilizando o EMSO como Plug-in de Cálculo
entrada=[];
saida1=[];
for i=1:p
    entrada=me(i,:);
    sim(sim1);
    resposta(i,:)=saida1;
    clear entrada
    clear saida1
    % [user sys]= memory
end
clear saida1
clc

% Número de variáveis de saída
Nofoutputs=size(resposta,2);

%% Criando o arquivo txt
fileID = fopen(malha,'w');
fprintf(fileID,'Nofinputs: %d\r\n', n);
for i=1:n
    if i==1
        fprintf(fileID,'Lowerbounds: % 3.2f ',li(1));
    elseif i==n
        fprintf(fileID,'% 3.2f\r\n',li(n));
    else

```

```

        fprintf(fileID, '% 3.2f ', li(i));
    end
end
for i=1:n
    if i==1
        fprintf(fileID, 'Increments:% 3.6f ', f(1));
    elseif i==n
        fprintf(fileID, '% 3.6f\r\n', f(n));
    else
        fprintf(fileID, '% 3.6f ', f(i));
    end
end
for i=1:n
    if i==1
        fprintf(fileID, 'Nofpoints:% d ', m(1));
    elseif i==n
        fprintf(fileID, '% d\r\n', m(n));
    else
        fprintf(fileID, '% d ', m(i));
    end
end
fprintf(fileID, InputUnits);
fprintf(fileID, 'Nofoutputs: %d\r\n', Nofoutputs);
fprintf(fileID, OutputUnits);
fprintf(fileID, '\r\n');
fprintf(fileID, 'Output:\r\n');
for i=1:p
    for j=1:Nofoutputs
        if j==Nofoutputs
            fprintf(fileID, '% 3.8f\r', resposta(i, Nofoutputs));
        else
            fprintf(fileID, '% 3.8f ', resposta(i, j));
        end
    end
end
end
fclose(fileID);
type (malha)

%% Avaliação da malha de interpolação

% Matriz dos pontos de entrada
m2=[];
for i=1:n
    if m(i)==2
        %vetor com o limite superior das variáveis selecionadas
        % wSP404.frac wSP406.frac kp
        %Verificar se as unidades estão em SI.
        li2=li+f/4;
        ls2=ls-f/4;
        m2(i)=m(i);
    else
        %vetor com o limite superior das variáveis selecionadas
        % wSP404.frac wSP406.frac kp
        %Verificar se as unidades estão em SI.
        li2=li+f/2;
        ls2=ls-f/2;
        m2(i)=m(i)-1;
    end
end
end

% Total de número de pontos

```

```

p2=prod(m2);

% Definição da dimensão do fator de partição
f2=zeros(1,n);

%% Cálculo do fator de partição
for j=1:n
    f2(1,j)=(ls2(1,j)-li2(1,j))/(m2(1,j)-1);
end

%% Cálculo dos fatores de concatenação
z2=ones(1,n-1);
for j=1:n-1
    z2(j)=prod(m2(j+1:n));
end

%% Definição da matriz de entrada de valores
me2=[];
for i=1:n
    m_=[];
    for j=1:m2(i)
        m2_(j,1)=f2(i)*(j-1)+li2(i);
    end
    if i==n
        p2_=p2/m2(n);
        me2_=repmat(m2_,p2_,1);
    else
        me2_=kron(m2_,ones(z2(i),1));
        lth2=length(me2_);
        p2_=p2/lth2;
        me2_=repmat(me2_,p2_,1);
    end
    me2(:,i)=me2_(:);
end

%% Utilizando o EMSO como Plug-in de Cálculo
entrada=[];
saida2=[];
for i=1:p2
    entrada=me2(i,:);
    sim(sim2);
    erro(i,:)=saida2;
    clear entrada
    clear saida2
    % [user sys]= memory
end
clear saida2

clc

%Cálculo do erro máximo para cada variável
erro_var=[];
for i=1:Nofoutputs
    erro_var(1,i)=max(erro(:,i));
end

% Tamanho do vetor de erros
size_erro_var=size(erro_var,2);

%Inicializando a matriz de combinações

```

```

mpe_comb=ones(n,n);

clc

%% Estrutura de repetição
for ii=1:size_erro_var
    while erro_var(ii)>tol
        %Matriz de combinações para identificar o erro
        for i=1:n
            for j=1:n
                if i==j
                    mpe_comb(i,j)=mpe(1,j)+1;
                else
                    mpe_comb(i,j)=mpe(1,j);
                end
            end
        end
    end

    for kk=1:n
        %% Refinamento da malha

        % Matriz de pontos de teste
        mpe=mpe_comb(kk,:);

        % Pontos para cada variável de entrada
        for j=1:n
            if mpe(1,j)==1
                m(1,j)=mpe(1,j)+1;
            else
                m(1,j)=mpe(1,j)*2-1;
            end
        end

        % Total de número de pontos
        p=prod(m);

        % Definição da dimensão do fator de partição
        f=zeros(1,n);

        %% Cálculo do fator de partição
        for j=1:n
            f(1,j)=(ls(1,j)-li(1,j))/(m(1,j)-1);
        end

        %% Cálculo dos fatores de concatenação
        z=ones(1,n-1);
        for j=1:n-1
            z(j)=prod(m(j+1:n));
        end

        %% Definição da matriz de entrada de valores
        me=[];
        for i=1:n
            m_=[];
            for j=1:m(i)
                m_(j,1)=f(i)*(j-1)+li(i);
            end
            if i==n
                p_=p/m(n);
            end
        end
    end
end

```

```

        me_=repmat(m_,p_,1);
    else
        me_=kron(m_,ones(z(i),1));
        lth=length(me_);
        p_=p/lth;
        me_=repmat(me_,p_,1);
    end
    me(:,i)=me_(:);
end

% Limpando a matriz resposta
resposta=[];

%% Utilizando o EMSO como Plug-in de Cálculo
entrada=[];
saida1=[];
for i=1:p
    entrada=me(i,:);
    sim(sim1);
    resposta(i,:)=saida1;
    clear entrada
    clear saida1
    % [user sys]= memory
end
clear saida1
clc

% Número de variáveis de saída
Nofoutputs=size(resposta,2);

%% Criando o arquivo txt
fileID = fopen(malha,'w');
fprintf(fileID,'Nofinputs: %d\r\n', n);
for i=1:n
    if i==1
        fprintf(fileID,'Lowerbounds:% 3.2f ',li(1));
    elseif i==n
        fprintf(fileID,'% 3.2f\r\n',li(n));
    else
        fprintf(fileID,'% 3.2f ',li(i));
    end
end
for i=1:n
    if i==1
        fprintf(fileID,'Increments:% 3.6f ',f(1));
    elseif i==n
        fprintf(fileID,'% 3.6f\r\n',f(n));
    else
        fprintf(fileID,'% 3.6f ',f(i));
    end
end
for i=1:n
    if i==1
        fprintf(fileID,'Nofpoints:% d ',m(1));
    elseif i==n
        fprintf(fileID,'% d\r\n',m(n));
    else
        fprintf(fileID,'% d ',m(i));
    end
end
fprintf(fileID,InputUnits);

```

```

fprintf(fileID, 'Nofoutputs: %d\r\n', Nofoutputs);
fprintf(fileID, OutputUnits);
fprintf(fileID, '\r\n');
fprintf(fileID, 'Output:\r\n');
for i=1:p
    for j=1:Nofoutputs
        if j==Nofoutputs
            fprintf(fileID, '%
3.8f\r', resposta(i, Nofoutputs));
        else
            fprintf(fileID, '% 3.8f ', resposta(i, j));
        end
    end
end
fclose(fileID);
type (malha)

%% Avaliação da malha de interpolação

% Matriz dos pontos de entrada
m2=[];
for i=1:n
    if m(i)==2
        %vetor com o limite superior das variáveis
selecionadas
        % wSP404.frac wSP406.frac kp
        %Verificar se as unidades estão em SI.
        li2=li+f/4;
        ls2=ls-f/4;
        m2(i)=m(i);
    else
        %vetor com o limite superior das variáveis
selecionadas
        % wSP404.frac wSP406.frac kp
        %Verificar se as unidades estão em SI.
        li2=li+f/2;
        ls2=ls-f/2;
        m2(i)=m(i)-1;
    end
end

% Total de número de pontos
p2=prod(m2);

% Definição da dimensão do fator de partição
f2=zeros(1, n);

%% Cálculo do fator de partição
for j=1:n
    f2(1, j)=(ls2(1, j)-li2(1, j))/(m2(1, j)-1);
end

%% Cálculo dos fatores de concatenação
z2=ones(1, n-1);
for j=1:n-1
    z2(j)=prod(m2(j+1:n));
end

%% Definição da matriz de entrada de valores
me2=[];

```



```

for i=1:n
    m2_=[];
    for j=1:m2(i)
        m2_(j,1)=f2(i)*(j-1)+li2(i);
    end
    if i==n
        p2_=p2/m2(n);
        me2_=repmat(m2_,p2_,1);
    else
        me2_=kron(m2_,ones(z2(i),1));
        lth2=length(me2_);
        p2_=p2/lth2;
        me2_=repmat(me2_,p2_,1);
    end
    me2(:,i)=me2_(:);
end

% Limpando a matriz erro
erro=[];

%% Utilizando o EMSO como Plug-in de Cálculo
entrada=[];
saida2=[];
for i=1:p2
    entrada=me2(i,:);
    sim(sim2);
    erro(i,:)=saida2;
    clear entrada
    clear saida2
    % [user sys]= memory
end
clear saida2

clc

% Cálculo do erro máximo para cada variável
for i=1:Nofoutputs
    erro_var(1,i)=max(erro(:,i));
end

% Cálculo da média dos erros em cada iteração
val(kk)=mean(erro_var);
end

% Melhor combinação
for jj=1:n
    if val(jj)==min(val)
        kmin=jj;
    end
end
mpe=mpe_comb(kmin,:);
end
end

clc

toc

```

8.2 Modelo-interface para cogeração com turbina de condensação

```

#*-----
* Biorrefinaria Virtual
*-----
* Nome do arquivo: CHP_Int.mso
* Projeto: producao de etanol 1G e 2G
* Conteudo: Etapa de cogeracao com turbina de condensacao
*-----*#

#*-----
*
* versao 2.2
* Data: 03/2016
* Autores: Anderson R. A. Lino
* Utiliza a versao 2.2 da biorrefinaria
*
*-----
*Descricao: simulacao da etapa de cogeracao com turbina de condensacao
*fazendo uso das tabelas de inspecao
*-----*

*-----
*Notas: Cada componente eh representado na simulacao por um Index number
* Abaixo segue o Index number para cada componente
-- fase fluida
* 1 - agua
* 2 - sacarose
* 3 - glicose
* 4 - xilose
* 5 - etanol
* 6 - CO2
* 7 - CO

```

- * 8 - O2
- * 9 - N2
- * 10 - H2
- * 11 - CH4
- * 12 - amonia
- * 13 - lignina
- * 14 - xilana
- * 15 - acido acetico
- * 16 - furfural
- * 17 - hidroximetilfurfural (HMF)
- * 18 - glicerol
- * 19 - Solunkn (acucares desconhecidos)
- * 20 - MEG (monoetilenoglicol)
- * 21 - H2SO4
- * 22 - acido fosforico
- * 23 - impurezas
- * 24 - celbiose
- * 25 - hidroxido de amonia

-- fase solida

- * 1(26) - celulose
- * 2(27) - xilana (hemicelulose)
- * 3(28) - lignina
- * 4(29) - cinzas
- * 5(30) - enzima
- * 6(31) - levedura
- * 7(32) - hidroxido de calcio
- * 8(33) - fosfato de calcio
- * 9(34) - impurities

-----#

using "assumptions";

using "separators/dry_cleaning";

using "mixers_and_splitters/mixer_and_splitter_m";

```

using "separators/mill";
using "separators/sieve";
using "heat_exchangers/heater_m";
using "reactors/liming_tank";
using "pressure_changers/pump_m";
using "separators/flash_m";
using "separators/decanter";
using "separators/filter";
using "separators/evaporator";
using "mixers_and_splitters/mixer_and_splitter_w";
using "reactors/stoic_reactor";
using "reactors/fermenter";
using "separators/absorption_tower";
using "separators/centrifuge";
using "heat_exchangers/heater_w";
using "separators/column";
using "separators/separator";
using "reactors/enz_hydrolysis";
using "reactors/boiler";
using "pressure_changers/turbine_w";
using "separators/flash_w";
using "pressure_changers/pump_w";

```

Model CHP_Int

ATTRIBUTES

Pallette = true;

Icon = "icon/CHP_NC";

Brief = "Combined Heating Power with condensing turbine Based on a Look-Up Table";

Info =

"== GENERAL ==

Model of the process of cogeneration responsible for producing

steam and electric power for the plant. The model uses a look-up table containing the main information to describe the operation. This information is obtained from rigorous simulations of the set of cogeneration process.

== ASSUMPTIONS ==

* Steady-state.

== SPECIFY ==

* Two variables that participate of the interpolation calculation.

Look at equation chamada do interpolador.

";

##-----

#Parametros

-----#

PARAMETERS

```

                propterm                                as Plugin
                (Brief = "IAPWS 97 properties of water",Type = "water");
outer PP                                                as Plugin
                (Brief = "External Physical Properties (Fluid Phase)", Type="PP");
outer PPS                                                as Plugin                                (Brief
= "External Physical Properties (Solid Phase)", Type="PP");
outer NComp                                              as Integer
                (Brief = "Number Of Chemical Components");
outer NCompS                                             as Integer
                (Brief = "Number Of Chemical Components for the Solid Phase");
                M(NComp)                                as molweight
                (Brief = "Component Mol Weight", Protected=true);
                MS(NCompS)                              as molweight
                (Brief = "Component Mol Weight", Protected=true);

```

```

outer flu as ConstituentFluid(Symbol = " ", Protected = true);
outer sol as ConstituentSolid(Symbol = " ", Protected = true);

```

```

    Int as Plugin (Type = "Int", file = "malha_cog.txt");

```

```

#*-----
* Define o valor dos parametros declarados no modelo
*-----*#

```

```

SET

```

```

    M = PP.MolecularWeight();
    MS = PPS.MolecularWeight();

```

```

#*-----
* Declaracao de variaveis
*-----*#

```

```

VARIABLES

```

```

    in Steam                as water_stream                (Brief = "Vapour
Flow", PosX=1.0, PosY=0.5, Symbol="_{Steam}", Protected = false);
    in Spare_Water          as water_stream                (Brief="Spare    Water",
PosX=1.0, PosY=0.6, Protected = false, Symbol="_{Spare_Water}");
    out Water                as water_stream_vapfrac (Brief = "Outlet Water
Mass Flow", PosX=0.9, PosY=1.0, Symbol="_{Water}", Protected = false);
    Water_Losses_Flow        as flow_mass                (Brief = "Outlet
Water Losses");
    out Q6                    as heat_stream                (Brief =
"Outlet Heat Stream 6 bar", PosX=0.5, PosY=1.0, Symbol="_{q17.4}");
    out Q2_5                  as heat_stream                (Brief = "Outlet
Heat Stream 2.5 bar", PosX=0.6, PosY=1.0, Symbol="_{q6}");
    out Qcond                 as heat_stream                (Brief = "Outlet
Heat Stream condensation", PosX=0.7, PosY=1.0, Symbol="_{q2.5}");

```

```

    out  qlosses          as heat_stream          (Brief =
"Outlet Heat Stream q_losses", PosX=0.8, PosY=1.0, Symbol="_{qlosses}");
    out Wnet             as power_stream         (Brief = "Electric
Power Generated", PosX=1.0, PosY=1.0, Symbol="_{Wnet}");
    Tsat_Steam          as temperature          (Brief = "Saturation
Temperature", Symbol = "T_{sat}", Protected = true);
    Tsat_C_Steam        as temp_delta           (Brief =
"Saturation Temperature in Celsius Degree", Symbol = "TC_{sat}", Protected = true);
    Tsuper_Steam        as temp_delta           (Brief =
"Overheating Temperature", Symbol = "T_{super}", Protected = true);
    efficiency_cycle    as fraction             (Brief = "E2G Mass Fraction for
the Process", Default = 0.4);
    q_ex                as heat_rate            (Brief = "Heat
Exchanged", Symbol = "q_{ex}", Protected = true);
    q_in                as heat_rate            (Brief = "Heat In",
Symbol = "q_{in}", Protected = true);
    q_out               as heat_rate            (Brief = "Heat Out",
Symbol = "q_{out}", Protected = true);
    frac1               as fraction             (Brief = "fraction of
steam for condensing turbine", Lower = 0.35, Upper = 0.7);
    frac2               as fraction             (Brief = "fraction of
steam for 2.5 turbine ", Lower = 1e-6, Upper = 0.06);
    k1                  as fraction             (Brief = "partition
coefficient 1");
    k2                  as fraction             (Brief = "partition
coefficient 2");
    k3                  as fraction             (Brief = "partition
coefficient 3");
    k4                  as fraction             (Brief = "partition
coefficient 4");
    k5                  as fraction             (Brief = "partition
coefficient 5");
    k6                  as fraction             (Brief = "partition
coefficient 6");

```

kt as fraction (Brief =
 "partition coefficient temperature");

kp as fraction (Brief =
 "partition coefficient pressure");

##-----

* Equacoes do modelo

-----#

EQUATIONS

"Equality Constraints"

Steam.Fw = Water.Fw;

Water.P = Steam.P;

"Mass Balance"

Steam.Fw + Spare_Water.Fw = Water.Fw + Water_Losses_Flow;

"Temperature of Water , array = [Water.S, Water.H]"

[Water.S, Water.T] = propterm.propPH(Water.P, Water.H);

"Heat Input"

q_in = q_ex + Spare_Water.Fw * Spare_Water.H;

"Heat Output"

q_out = Q6.Q + Q2_5.Q + Qcond.Q + Wnet.W + qlosses.Q;

"Energy Balance"

q_in = q_out;

"Heat Exchanged"

(Steam.H - Water.H) * Steam.Fw = q_ex;

"Steam Saturation Temperature"

Tsat_Steam = propterm.Tsat(Steam.P);

"Steam Saturation Temperature (degrees Celsius)"

Tsat_C_Steam = Tsat_Steam - 273.15 * 'K';

"Steam Overheating"

Tsuper_Steam = Steam.T - Tsat_Steam;

"Partition Coefficient 1"

k1 = Q6.Q/q_ex;

"Partition Coefficient 2"

k2 = Q2_5.Q/q_ex;

"Partition Coefficient 3"

k3 = Qcond.Q/q_ex;

"Partition Coefficient 4"

k4 = Spare_Water.Fw/Steam.Fw;

"Partition Coefficient 5"

k5 = Wnet.W/q_ex;

"Partition Coefficient 6"

k6 = qlosses.Q/q_ex;

"Partition Coefficient Pressure"

kp = (Steam.P - 45 * 'bar')/((90 - 45) * 'bar');

"Partition Coefficient Temperature"

kt = (Tsuper_Steam - 150 * 'K')/((300 - 150) * 'K');

"Call to the Interpolator"

[k1, k2, k3, k5, k6, efficiency_cycle] = Int.interpola(frac1, frac2, kp);

end

FlowSheet CHP_Int_simplified

#----- Parte comum -----#

PARAMETERS

PP as Plugin (Brief = "External Physical Properties",

Type="PP",

Project = "../v2_2/Fluid_v2_2.vrtherm"

);

PPS as Plugin (Brief = "External Physical Properties",

Type="PP",

Project = "../v2_2/Solid_v2_2.vrtherm"

);

NComp as Integer;

NCompS as Integer;

ProPar as Assumptions (Brief = "Model With All the Assumptions Made");

flu as ConstituentFluid (Brief = "Indexes of All Compounds in the Fluid Phase", Symbol = " ", Protected = true);

sol as ConstituentSolid (Brief = "Indexes of All Compounds in the Solid Phase", Symbol = " ", Protected = true);

SET

#number of components in the liquid and solid phase

NComp = PP.NumberOfComponents();

NCompS = PPS.NumberOfComponents();

#*-----

* Declaracao de dispositivos (ou blocos contendo o modelo)

-----#

DEVICES

wSS401 as water_sourceR; #fonte de vapor para a cogeraçao
 wSS402 as water_sourceR; #agua de reposicao
 CHP101 as CHP_Int; #interpolador cogeraçao

##-----
 * Especifica as conexoes entre os modelos
 -----#

CONNECTIONS

wSS401.Outlet to CHP101.Steam; #vapor de alta para a cogeraçao
 wSS402.Outlet to CHP101.Spare_Water; #agua de reposicao para a
 cogeraçao

##-----
 * Define o valor dos parametros declarados no modelo
 -----#

SET

#Fonte de vapor
 wSS401.ValidPhases = "Vapour-Only";

#agua de reposicao
 wSS402.ValidPhases = "Liquid-Only";

##-----
 * Especifica variaveis definidas no modelo
 -----#

SPECIFY

#Calculo de frac1
 CHP101.frac1 = 0.7;

```

#Calculo de frac2
CHP101.frac2 = 1e-6;

#Vazao de vapor
wSS401.Fw = 750 * 't/h';
#wSS401.T = 876.497 * 'K';
#wSS401.P = 90 * 'bar';

#coeficiente de particao temperatura
CHP101.kt = 1;

#coeficiente de particao pressao
CHP101.kp = 1;

#agua de reposicao
wSS402.T = ProPar.roomT;
wSS402.P = 1 * 'atm';
CHP101.Spare_Water.Fw = 21620 * 'kg/h';

OPTIONS
Dynamic = false;
GuessFile = "CHP_Int.rlt";

```

End

8.3 Modelo-interface para cogeração sem turbina de condensação

```

#*-----
* Biorrefinaria Virtual
*-----
* Nome do arquivo: CHP_NC.mso

```

* Projeto: producao de etanol 1G e 2G

* Conteudo: Etapa de cogerao sem turbina de condensacao

-----#

#*-----

*

* versao 2.2

* Data: 03/2016

* Autores: Anderson R. A. Lino

* Utiliza a versao 2.2 da biorrefinaria

*

*-----

*Descricao: simulacao da etapa de cogerao sem turbina de condensacao

*-----

*Notas: Cada componente eh representado na simulacao por um Index number

* Abaixo segue o Index number para cada componente

-- fase fluida

* 1 - agua

* 2 - sacarose

* 3 - glicose

* 4 - xilose

* 5 - etanol

* 6 - CO₂

* 7 - CO

* 8 - O₂

* 9 - N₂

* 10 - H₂

* 11 - CH₄

* 12 - amonia

* 13 - lignina

* 14 - xilana

* 15 - acido acetico

- * 16 - furfural
- * 17 - hidroximetilfurfural (HMF)
- * 18 - glicerol
- * 19 - Solunkn (acucares desconhecidos)
- * 20 - MEG (monoetilenoglicol)
- * 21 - H2SO4
- * 22 - acido fosforico
- * 23 - impurezas
- * 24 - celobiose
- * 25 - hidroxido de amonia

-- fase solida

- * 1(26) - celulose
- * 2(27) - xilana (hemicelulose)
- * 3(28) - lignina
- * 4(29) - cinzas
- * 5(30) - enzima
- * 6(31) - levedura
- * 7(32) - hidroxido de calcio
- * 8(33) - fosfato de calcio
- * 9(34) - impurities

-----#

```
using "assumptions";
using "separators/dry_cleaning";
using "mixers_and_splitters/mixer_and_splitter_m";
using "separators/mill";
using "separators/sieve";
using "heat_exchangers/heater_m";
using "reactors/liming_tank";
using "pressure_changers/pump_m";
using "separators/flash_m";
using "separators/decanter";
using "separators/filter";
```

```

using "separators/evaporator";
using "mixers_and_splitters/mixer_and_splitter_w";
using "reactors/stoic_reactor";
using "reactors/fermenter";
using "separators/absorption_tower";
using "separators/centrifuge";
using "heat_exchangers/heater_w";
using "separators/column";
using "separators/separator";
using "reactors/enz_hydrolysis";
using "reactors/boiler";
using "pressure_changers/turbine_w";
using "separators/flash_w";
using "pressure_changers/pump_w";

```

Model CHP_NC_Int

ATTRIBUTES

Pallette = true;

Icon = "icon/CHP_NC";

Brief = "Combined Heating Power without condensing turbine Based on a
Look-Up Table";

Info =

"== GENERAL ==

Model of the process of cogeneration responsible for producing
steam and electric power for the plant. The model uses a look-up table
containing the

main information to describe the operation. This

information is obtained from rigorous simulations of the set of cogeneration
process.

== ASSUMPTIONS ==

* Steady-state.

== SPECIFY ==

* Two variables that participate of the interpolation calculation.

Look at equation chamada do interpolador.

";

##*-----

#Parametros

-----#

PARAMETERS

```

                propterm                                as Plugin
                (Brief = "IAPWS 97 properties of water",Type = "water");
outer PP                                                as Plugin
                (Brief = "External Physical Properties (Fluid Phase)", Type="PP");
outer PPS                                                as Plugin                                (Brief
= "External Physical Properties (Solid Phase)", Type="PP");
outer NComp                                              as Integer
                (Brief = "Number Of Chemical Components");
outer NCompS                                             as Integer
                (Brief = "Number Of Chemical Components for the Solid Phase");
                M(NComp)                                as molweight
                (Brief = "Component Mol Weight", Protected=true);
                MS(NCompS)                              as molweight
                (Brief = "Component Mol Weight", Protected=true);
outer flu as ConstituentFluid
                (Symbol = " ", Protected = true);
outer sol as ConstituentSolid
                (Symbol = " ", Protected = true);
                Int                                      as Plugin
                (Type = "Int", file = "malha_cog_NC.txt");

```

##*-----

* Define o valor dos parametros declarados no modelo

-----#

SET

M = PP.MolecularWeight();

MS = PPS.MolecularWeight();

#*-----

* Declaracao de variaveis

-----#

VARIABLES

in Steam as water_stream (Brief = "Vapour Flow", PosX=1.0, PosY=0.5, Symbol="_{Steam}", Protected = false);

in Spare_Water as water_stream (Brief="Spare Water", PosX=1.0, PosY=0.6, Protected = false, Symbol="_{Spare_Water}");

out Water as water_stream_vapfrac (Brief = "Outlet Water Mass Flow", PosX=0.9, PosY=1.0, Symbol="_{Water}", Protected = false);

Water_Losses_Flow as flow_mass (Brief = "Outlet Water Losses");

out Q17_4 as heat_stream (Brief = "Outlet Heat Stream 17.4 bar", PosX=0.5, PosY=1.0, Symbol="_{q17.4}");

out Q6 as heat_stream (Brief = "Outlet Heat Stream 6 bar", PosX=0.6, PosY=1.0, Symbol="_{q6}");

out Q2_5 as heat_stream (Brief = "Outlet Heat Stream 2.5 bar", PosX=0.7, PosY=1.0, Symbol="_{q2.5}");

out qlosses as heat_stream (Brief = "Outlet Heat Stream q_loss", PosX=0.8, PosY=1.0, Symbol="_{qlosses}");

out Wnet as power_stream (Brief = "Electric Power Generated", PosX=1.0, PosY=1.0, Symbol="_{Wnet}");

Tsat_Steam as temperature (Brief = "Saturation Temperature", Symbol = "T_{sat}", Protected = true);

Tsat_C_Steam as temp_delta (Brief = "Saturation Temperature in Celsius Degree", Symbol = "TC_{sat}", Protected = true);

```

    Tsuper_Steam          as temp_delta          (Brief =
"Overheating Temperature", Symbol = "T_{super}", Protected = true);
    efficiency_cycle      as fraction            (Brief = "E2G Mass Fraction for
the Process", Default = 0.4);
    q_ex                  as heat_rate          (Brief = "Heat
Exchanged", Symbol = "q_{ex}", Protected = true);
    q_in                  as heat_rate          (Brief = "Heat In",
Symbol = "q_{in}", Protected = true);
    q_out                 as heat_rate          (Brief = "Heat Out",
Symbol = "q_{out}", Protected = true);
    frac1                 as fraction            (Brief = "fraction of
steam for 17.4 turbine", Lower = 1e-6, Upper = 0.1);
    frac2                 as fraction            (Brief = "fraction of
steam for 6.0 turbine ", Lower = 0.03, Upper = 0.04);
    k1                    as fraction            (Brief = "partition
coefficient 1");
    k2                    as fraction            (Brief = "partition
coefficient 2");
    k3                    as fraction            (Brief = "partition
coefficient 3");
    k4                    as fraction            (Brief = "partition
coefficient 4");
    k5                    as fraction            (Brief = "partition
coefficient 5");
    k6                    as fraction            (Brief = "partition
coefficient 6");
    kt                    as fraction            (Brief =
"partition coefficient temperature");
    kp                    as fraction            (Brief =
"partition coefficient pressure");

```

```

##-----

```

```

* Equacoes do modelo

```

```

*-----*#

```

EQUATIONS

"Equality Constraints"

$$\text{Steam.Fw} = \text{Water.Fw};$$

$$\text{Water.P} = \text{Steam.P};$$

"Mass Balance"

$$\text{Steam.Fw} + \text{Spare_Water.Fw} = \text{Water.Fw} + \text{Water_Losses_Flow};$$

"Temperature of Water , array = [Water.S, Water.H]"

$$[\text{Water.S}, \text{Water.T}] = \text{propterm.propPH}(\text{Water.P}, \text{Water.H});$$

"Heat Input"

$$q_{in} = q_{ex} + \text{Spare_Water.Fw} * \text{Spare_Water.H};$$

"Heat Output"

$$q_{out} = Q_{17_4}.Q + Q_6.Q + Q_{2_5}.Q + W_{net}.W + q_{losses}.Q;$$

"Energy Balance"

$$q_{in} = q_{out};$$

"Heat Exchanged"

$$(\text{Steam.H} - \text{Water.H}) * \text{Steam.Fw} = q_{ex};$$

"Steam Saturation Temperature"

$$T_{sat_Steam} = \text{propterm.Tsat}(\text{Steam.P});$$

"Steam Saturation Temperature (degrees Celsius)"

$$T_{sat_C_Steam} = T_{sat_Steam} - 273.15 * 'K';$$

"Steam Overheating"

$$T_{super_Steam} = \text{Steam.T} - T_{sat_Steam};$$

"Partition Coefficient 1"

$$k1 = Q17_4.Q/q_ex;$$

"Partition Coefficient 2"

$$k2 = Q6.Q/q_ex;$$

"Partition Coefficient 3"

$$k3 = Q2_5.Q/q_ex;$$

"Partition Coefficient 4"

$$k4 = Spare_Water.Fw/Steam.Fw;$$

"Partition Coefficient 5"

$$k5 = Wnet.W/q_ex;$$

"Partition Coefficient 6"

$$k6 = qlosses.Q/q_ex;$$

"Partition Coefficient Pressure"

$$kp = (Steam.P - 45 * 'bar')/((65 - 45) * 'bar');$$

"Partition Coefficient Temperature"

$$kt = (Tsuper_Steam - 150 * 'K')/((300 - 150) * 'K');$$

"Call to the Interpolator"

$$[k1, k2, k3, k5, k6, efficiency_cycle] = Int.interpola(frac1, frac2, kp);$$

end

FlowSheet CHP_NC_Int_sim

#----- Parte comum -----#

PARAMETERS

PP as Plugin (Brief = "External Physical Properties",

```

        Type="PP",
        Project = "../v2_2/Fluid_v2_2.vrtherm"
    );
    PPS as Plugin      (Brief = "External Physical Properties",
        Type="PP",
        Project = "../v2_2/Solid_v2_2.vrtherm"
    );
    NComp as Integer;
    NCompS as Integer;

    ProPar as Assumptions  (Brief = "Model With All the Assumptions Made");
    flu as ConstituentFluid  (Brief = "Indexes of All Compounds in the Fluid
Phase", Symbol = " ", Protected = true);
    sol as ConstituentSolid  (Brief = "Indexes of All Compounds in the Solid
Phase", Symbol = " ", Protected = true);

```

SET

```

#number of components in the liquid and solid phase
NComp = PP.NumberOfComponents();
NCompS = PPS.NumberOfComponents();

```

```

##-----
* Declaracao de dispositivos (ou blocos contendo o modelo)
*-----*#

```

DEVICES

```

wSS401 as water_sourceR; #fonte de vapor para a cogeraçao
wSS402 as water_sourceR; #agua de reposicao
CHP101 as CHP_NC_Int; #interpolador evaporador

```

```

##-----
* Especifica as conexoes entre os modelos
*-----*#

```

CONNECTIONS

wSS401.Outlet to CHP101.Steam; #vapor de alta para a cogeraçao

wSS402.Outlet to CHP101.Spare_Water; #agua de reposicao para a cogeraçao

#*-----

* Define o valor dos parametros declarados no modelo

-----#

SET

#Fonte de vapor

wSS401.ValidPhases = "Vapour-Only";

#agua de reposicao

wSS402.ValidPhases = "Liquid-Only";

#*-----

* Especifica variaveis definidas no modelo

-----#

SPECIFY

#Calculo de frac1

CHP101.frac1 = 0.087;

#Calculo de frac2

CHP101.frac2 = 0.038;

#Vazao de vapor

wSS401.Fw = 730 * 't/h';

#wSS401.T = 876.497 * 'K';

```

#wSS401.P = 90 * 'bar';

#coeficiente de particao temperatura
CHP101.kt = 0.360955;

#coeficiente de particao pressao
CHP101.kp = 0.4444;

#agua de reposicao
wSS402.T = ProPar.roomT;
wSS402.P = 1 * 'atm';
CHP101.Water.T = 396.446 * 'K';

OPTIONS
Dynamic = false;
GuessFile = "CHP_NC_Int_sim.rlt";

end

```

8.4 Modelo-interface para evaporação

```

#*-----
* Biorrefinaria Virtual
*-----
* Nome do arquivo: evaporator.mso
* Projeto: Modelo integrado de producao de etanol 1G/2G
* Conteudo: evaporador
*-----*#

#*-----
*
* Versao 2.2
* Data: 03/2016

```

* Autores: Anderson R. A. Lino e Gabriel C. Fonseca

*

*-----

*Descricao: modelo do evaporador que sera empregado na biorrefinaria

*-----

*-----

*Hipoteses assumidas: 1 - mistura perfeita

* 2 - sem perdas de calor para o ambiente

* 3 - modelo estacionario

*Bibliografia:

[1] JESUS, C. D. F. Desenvolvimento de simulador dinamico do processo de acucar.

Sao Carlos, SP, UFSCar, 2000 (Dissertacao). 131p.

*-----

*-----

*Notas: Foram feitos 2 flowsheets para averiguar os modelos

-----#

using "main_stream";

using "water_stream";

using "assumptions";

Model evaporator_Int

ATTRIBUTES

Pallete = true;

Icon = "icon/evaporator";

Brief = "Model of an Evaporator";

Info =

"== GENERAL =="

Model of an evaporator, with calculated boiling point elevation and supposing that only water leaves the system as vapour.

The boiling point elevation is given by:

$$\text{BPE} * 0.355 * (1.036 - \text{Brix}) = \text{Brix} * (0.3 + \text{Brix}) * (0.22 * 'K' + 0.0078 * \text{Tsat}[C]).$$

With BPE being the boiling point elevation, Outlet_Brix the mass fraction of soluble solids inside the evaporator and Tsat is the saturation temperature of pure water at the internal pressure.

== ASSUMPTIONS ==

- * Steady-state;
- * Only water leaves the system as vapour;
- * The heating steam leaves the system as saturated water;
- * Adiabatic.

== SPECIFY ==

- * The inlet stream;
- * The inlet steam stream (except the mass flow);
- * The evaporator pressure;
- * The outlet brix.

== SET ==

- * The position in the compound vector of the water (NWater);
- * The compounds that participate in the Brix calculation
(1 if participates, 0 if not);
- * The maximum brix in the inlet stream (Brix_max).

== REFERENCES ==

[1] JESUS, C. D. F. Desenvolvimento de simulador dinamico do processo de acucar.

Sao Carlos, SP, UFSCar, 2000 (Dissertacao). 131p.

".
,"

#*-----

* Parametros

-----#

PARAMETERS

```

        propterm      as Plugin          (Brief = "IAPWS 97 properties of
water",Type = "water");
outer PP            as Plugin          (Brief = "External Physical Properties
(Fluid Phase)", Type="PP");
outer PPS          as Plugin          (Brief = "External Physical Properties (Solid
Phase)", Type="PP");
outer NComp        as Integer          (Brief = "Number of Chemical
Components for the Fluid Phase", Lower = 1);
outer NCompS       as Integer          (Brief = "Number of Chemical
Components for the Solid Phase", Lower = 1);
        M(NComp)    as molweight       (Brief = "Component Mol Weight (Fluid
Phase), Vector Size = NComp", Protected=true);
        MS(NCompS) as molweight       (Brief = "Component Mol Weight
(Solid Phase), Vector Size = NCompS", Protected=true);
outer flu as ConstituentFluid(Symbol = " ", Protected = true);
        Brix(NComp)as Integer          (Brief = "Flag for the Compound that
Enters the Brix Calculation");
        OutletP    as pressure        (Brief = "Outlet Pressure", Default = 1);
        P1         as pressure        (Brief = "Pressure Inside the
Evaporator 1");
        Int        as Plugin          (Type = "Int",      file =
"arquivos_rlt/malha_3_3_33_3/Malha_3_3_33_3.txt");

```

#*-----

* Define o valor dos parametros declarados no modelo

-----#

SET

```
M = PP.MolecularWeight();
```

```

MS = PPS.MolecularWeight();
OutletL.Phase = "Liquid";
OutletV1.ValidPhases = "Vapour-Only";
OutletV2.ValidPhases = "Vapour-Only";

```

```

#*-----
* Declaracao de variaveis
*-----*#

```

VARIABLES

```

in  Inlet      as main_stream      (Brief = "Feed Stream",
PosX=1, PosY=0.3, Protected = false, Symbol="{in}");
in  InletS     as water_stream      (Brief = "Steam Inlet", PosX=1, PosY=0.63,
Protected = true, Symbol = "{in_S}");
out  OutletL   as main_stream_eq    (Brief = "Liquid Outlet Stream",
PosX=0, PosY=0.85, Protected = false, Symbol="{out Liquid}");
out  OutletS1  as water_stream_vapfrac (Brief = "Condensed Steam Outlet
1",PosX=0,PosY=0.63, Protected = false, Symbol = "{out_S}");
out  OutletS2  as water_stream_vapfrac (Brief = "Condensed Steam Outlet
2",PosX=0,PosY=0.63, Protected = false, Symbol = "{out_S}");
out  OutletV1  as water_stream_eq    (Brief = "Vapour Outlet Stream 1",
PosX=0, PosY=0.15, Protected =false, Symbol="{outVapour}");
out  OutletV2  as water_stream_eq    (Brief = "Vapour Outlet Stream 2",
PosX=0, PosY=0.15, Protected =false, Symbol="{outVapour}");
      Q1        as power            (Brief = "Heat Duty",
PosX=0.5, PosY=1, Protected = true, Symbol="{in}");
      #Q2       as power            (Brief = "Heat Duty",
PosX=0.5, PosY=1, Protected = true, Symbol="{in}");

      Tsat1     as temperature      (Brief = "Saturation Temperature 1", Symbol
= "T_{sat}", Protected = true);
      Tsat2     as temperature      (Brief = "Saturation Temperature 2", Symbol
= "T_{sat}", Protected = true);

```

```

k2          as fraction          (Brief = "partition coefficient 2");
k3          as Real              (Brief = "partition
coefficient 3");
T1          as temperature       (Brief = "Temperature Inside the
Evaporator 1", Symbol = "T1", Protected = true);
T2          as temperature       (Brief = "Temperature Inside the
Evaporator 2", Symbol = "T2", Protected = true);
Inlet_Brix as fraction          (Brief = "Total Soluble Solids-Inlet",
Symbol = "Brix_{in}");
Outlet_Brix as fraction         (Brief = "Total Soluble Solids-Outlet",
Symbol = "Brix_{out}");
vfrac      as fraction          (Brief = "Vaporization Fraction",
Symbol="\phi", Protected = true);

Hv          as enth_mass        (Brief = "Mass Enthalpy for the
Vapour Phase in the Reference State", Hidden = true);
Sv          as entr_mass        (Brief = "Mass Entropy for the
Vapour Phase in the Reference State", Hidden = true);
hl1         as enth_mol         (Brief = "Molar Enthalpy for the
Liquid Phase in the Reference State (Fluid Phase)", Hidden = true);
hlsol1     as enth_mol         (Brief = "Molar Enthalpy for the Liquid
Phase in the Reference State (Solid Phase)", Hidden = true);
hl2         as enth_mol         (Brief = "Molar Enthalpy for the
Liquid Phase in the Reference State (Fluid Phase)", Hidden = true);
hlsol2     as enth_mol         (Brief = "Molar Enthalpy for the Liquid
Phase in the Reference State (Solid Phase)", Hidden = true);

```

```

#*-----
* Equacoes do modelo
*-----*#

```

EQUATIONS

"Global Mass Balance (Fluid Phase)"

Inlet.Fluid.Fw = OutletV1.Fw + OutletV2.Fw + OutletL.Fluid.Fw + OutletS2.Fw;

#"Global Mass Balance (Second Evaporator)"

#OutletS2.Fw = OutletV2.Fw + OutletL.Fluid.Fw;

"Mass Balance (Steam 1)"

InletS.Fw = OutletS1.Fw;

"Mass Balance (Steam 2)"

OutletS2.Fw * vfrac = OutletV1.Fw * (1 - vfrac);

for i in [1:NComp] do

 if i equal flu.Water then

 "Component Mass Balance (Fluid Phase)"

 Inlet.Fluid.Fw * Inlet.Fluid.zw(i) = OutletL.Fluid.Fw *
OutletL.Fluid.zw(i) + OutletV1.Fw + OutletV2.Fw + OutletS2.Fw;

 else

 "Component Mass Balance (Fluid Phase)"

 Inlet.Fluid.Fw * Inlet.Fluid.zw(i) = OutletL.Fluid.Fw *
OutletL.Fluid.zw(i);

 end

end

"Heat Required"

Q1 = InletS.Fw * (InletS.H - OutletS1.H);

"Saturation Temperature for Pure Water at Pressure P"

Tsat1 = propterm.Tsat(InletS.P);

"Saturation Temperature for Pure Water at Pressure P"

Tsat2 = propterm.Tsat(P1);

"Thermal Equilibrium 1"

OutletL.T = T2;

"Thermal Equilibrium 2"

$$\text{OutletV1.T} = T1;$$

"Thermal Equilibrium 1"

$$\text{OutletV2.T} = T2;$$

"Global Molar Balance (Solid Phase)"

$$\text{Inlet.Solid.F} = \text{OutletL.Solid.F};$$

"Component Molar Balance (Solid Phase)"

$$\text{Inlet.Solid.z} = \text{OutletL.Solid.z};$$

"Total Soluble Solids-Outlet"

$$\text{Outlet_Brix} = \text{sum}(\text{OutletL.Fluid.zw} * \text{Brix});$$

"Total Soluble Solids-Inlet"

$$\text{Inlet_Brix} = \text{sum}(\text{Inlet.Fluid.zw} * \text{Brix});$$

"Enthalpy of Steam, array = [OutletS1.S, OutletS1.H]"

$$[\text{OutletS1.S}, \quad \text{OutletS1.H}] = \text{propterm.propPTI}(\text{OutletS1.P}, \text{propterm.Tsat}(\text{OutletS1.P}));$$

"Enthalpy of Steam, array = [OutletS2.S, OutletS2.H]"

$$[\text{OutletS2.S}, \quad \text{OutletS2.H}] = \text{propterm.propPTI}(\text{OutletS2.P}, \text{propterm.Tsat}(\text{OutletS2.P}));$$

"Outlet Vapour Mass Entropy and Enthalpy at the Reference State, array = [Sv, Hv]"

$$[\text{Sv}, \text{Hv}] = \text{propterm.propPTI}(\text{Inlet.P}, 300 * 'K');$$

"Inlet Molar Enthalpy at the Reference State (Fluid Phase)"

$$\text{h1} = \text{PP.LiquidEnthalpy}(300 * 'K', \text{Inlet.P}, \text{Inlet.Fluid.z});$$

"Inlet Molar Enthalpy at the Reference State (Solid Phase)"

hlsol1 = PPS.VapourEnthalpy(300 * 'K', Inlet.P, Inlet.Solid.z);

"Outlet Liquid Molar Enthalpy at the Reference State (Fluid Phase)"

hl2 = PP.LiquidEnthalpy(300 * 'K', Inlet.P, OutletL.Fluid.z);

"Outlet Liquid Molar Enthalpy at the Reference State (Solid Phase)"

hlsol2 = PPS.VapourEnthalpy(300 * 'K', Inlet.P, OutletL.Solid.z);

"Outlet Condensed Steam Temperature 1"

OutletS1.T = propterm.Tsat1(InletS.P);

"Outlet Condensed Steam Temperature 1"

OutletS2.T = propterm.Tsat2(P1);

"Mechanical Equilibrium 1"

OutletV1.P = P1;

"Mechanical Equilibrium 2"

OutletV2.P = OutletP;

"Mechanical Equilibrium 3"

OutletL.P = OutletP;

"Mechanical Equilibrium 4"

OutletS1.P = InletS.P;

"Mechanical Equilibrium 5"

OutletS2.P = P1;

#Calculo do coeficiente de particao 2

k2 = InletS.Fw/Inlet.Total.Fw;

#Calculo do coeficiente de particao 3

```
k3 = OutletV2.Fw/Inlet.Total.Fw;
```

```
#Chamada do Interpolador
```

```
[k2, k3, T1, T2] = Int.interpola(Inlet_Brix, Inlet.T, vfrac, Outlet_Brix);
```

```
end
```

```
FlowSheet teste_evaporator
```

```
##-----
```

```
* Declaracao de dispositivos (ou blocos contendo o modelo)
```

```
*-----*#
```

```
DEVICES
```

```
S101 as main_sourceR;
```

```
S102 as water_sourceL;
```

```
Ev101 as evaporator_Int;
```

```
##-----
```

```
* Especifica as conexoes entre os modelos
```

```
*-----*#
```

```
CONNECTIONS
```

```
S101.Outlet to Ev101.Inlet;
```

```
S102.Outlet to Ev101.InletS;
```

```
##-----
```

```
* Define o valor dos parametros declarados no modelo
```

```
*-----*#
```

```
SET
```

```
S101.ValidPhases = "Vapour-Liquid";
```

```
S102.ValidPhases = "Vapour-Liquid";
```

```
NComp = PP.NumberOfComponents();
```


#Parametros

-----#

PARAMETERS

PP as Plugin (Brief = "External Physical Properties",
 Type="PP",
 Project = "../Flowsheets/v2_2/Fluid_v2_2.vrtherm"

);

PPS as Plugin (Brief = "External Physical Properties",
 Type="PP",
 Project = "../Flowsheets/v2_2/Solid_v2_2.vrtherm"

);

NComp as Integer (Brief = "Number of chemical components in the fluid
 phase");

NCompS as Integer (Brief = "Number of chemical components in the solid
 phase");

flu as ConstituentFluid(Symbol = " ", Protected = true);

sol as ConstituentSolid(Symbol = " ", Protected = true);

##-----

* Define o valor dos parametros declarados no modelo

-----#

SET

NComp = PP.NumberOfComponents();

NCompS = PPS.NumberOfComponents();

S101.CompositionBasis = "Mass";

Ev101.Brix = [0, 1, 1, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0];

##-----

* Condições iniciais e opções de Solver

-----#

```
OPTIONS
Dynamic = false;
GuessFile = "evaporator_Int.rlt";
NLASolver(
    File = "sundials",
    RelativeAccuracy = 1e-3,
    AbsoluteAccuracy = 1e-6,
    MaxIterations = 100
);
end
```

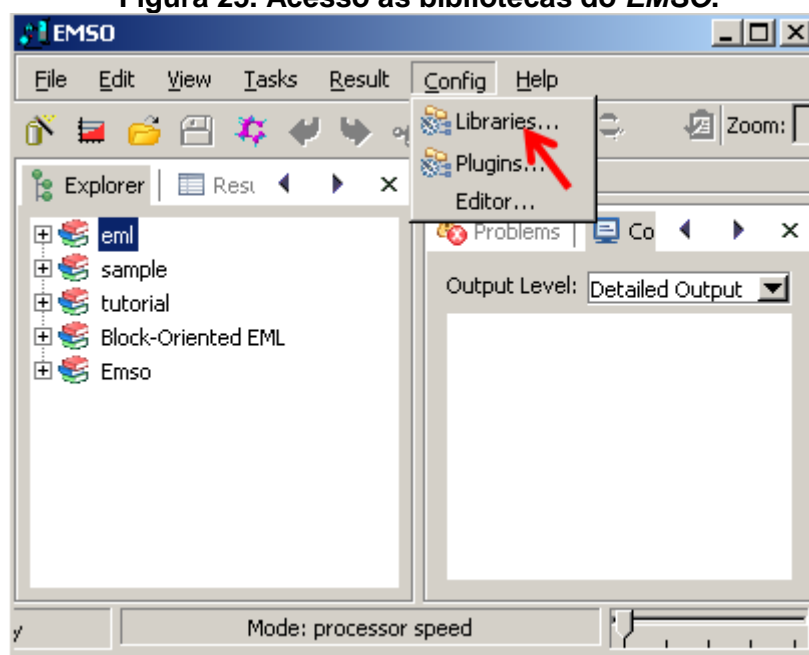
8.5 Tutorial

8.5.1 Configurações para o uso do *EMSO*

Os seguintes passos precisam ser efetuados:

- 1) Na aba superior, clique em “Config” → “Libraries” (Figura 25).

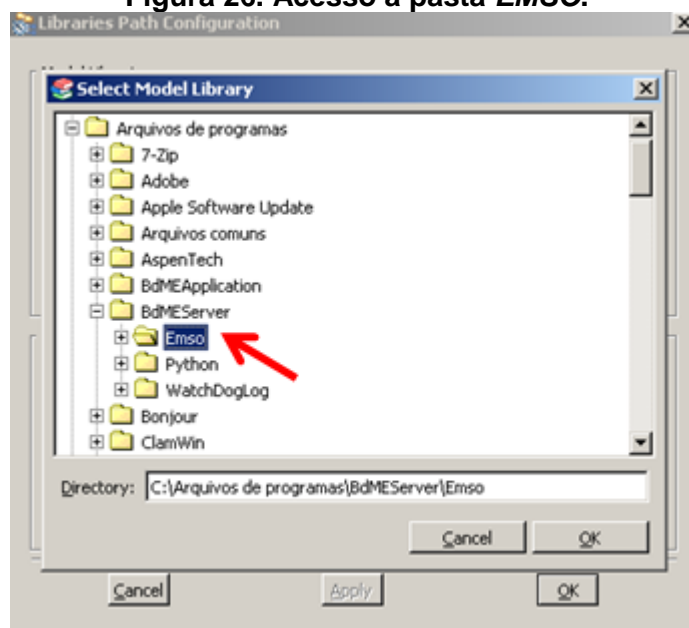
Figura 25. Acesso às bibliotecas do *EMSO*.



Fonte: Elaborada pelo autor.

- 2) Clique em “AddLibrary” e escolha o diretório desejado (Figura 26).

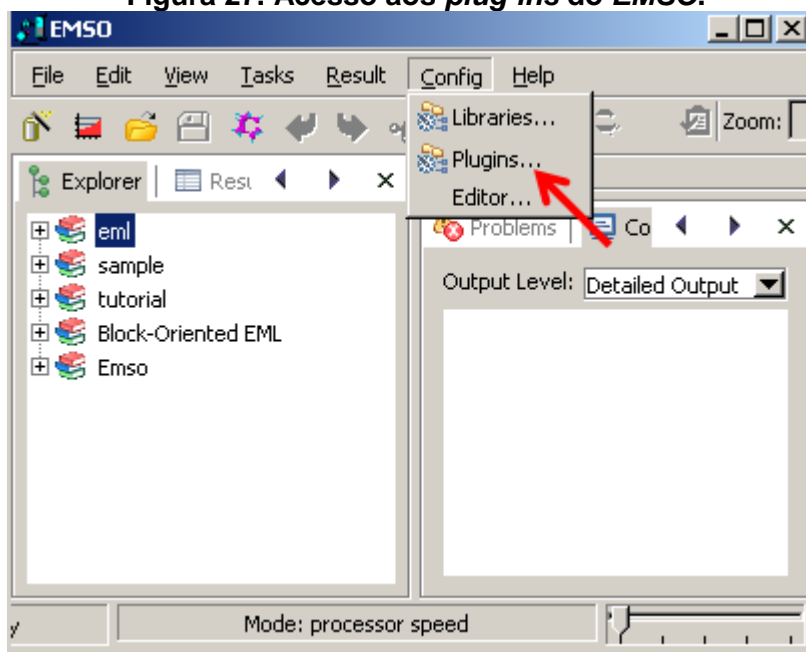
Figura 26. Acesso à pasta EMSO.



Fonte: Elaborada pelo autor.

3) Clique em “Config” → “Plugins”(Figura 27).

Figura 27. Acesso aos *plug-ins* do EMSO.

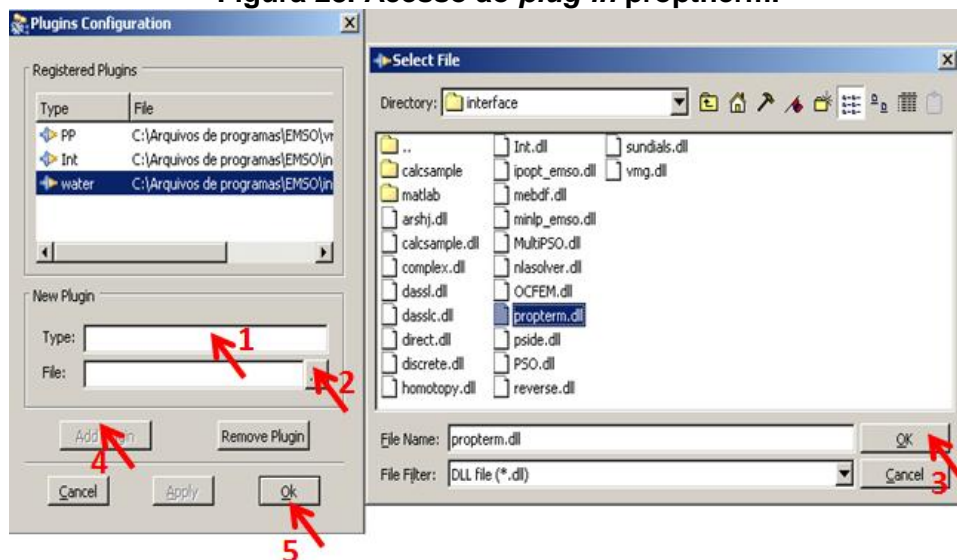


Fonte: Elaborada pelo autor.

4) Na aba “Type” (1), digite “water” e posteriormente clique em “...” (2) para encontrar o arquivo “propterm.dll”. Em seguida clique em “OK” (3),

posteriormente em “AddPlugin” (4) e por fim em “OK” (5) novamente (Figura 28).

Figura 28. Acesso ao *plug-in* proptherm.



Fonte: Elaborada pelo autor.

Finalize o aplicativo. Em seguida abra o *EMSO* novamente para que as configurações salvas passem a ser carregadas. Esta ação permitirá que os modelos acessem o respectivo *plug-in*.

- 5) Por fim, nas simulações (“flowsheets”), é necessário que o usuário configure os diretórios corretamente para acessar os projetos VRTherm e também os arquivos de “chutes iniciais” (“guessfiles”). No ambiente “PARAMETERS” da simulação, configure o diretório. Como os arquivos devem estar localizados na pasta “Emso”, os diretórios devem ser similares ao exemplificado na Figura 29. Vale lembrar que para os modelos em questão, está sendo utilizado um projeto para a fase fluida (“Fluid”) e outro para a fase sólida (“Solid”). Já no ambiente “OPTIONS”, o usuário deve especificar o diretório para o arquivo de “chutes iniciais”, como exemplificado na Figura 30.

Figura 29. Acesso aos projetos VRTherm.

```

310
311 PARAMETERS
312 PP as Plugin (Brief = "External Physical Properties",
313 Type="pp",
314 Project = "C:\Arquivos de programas\BdMEServer\Ems\Fluid_v2_2.vrtherm" ← Fluid
315 );
316 PPS as Plugin (Brief = "External Physical Properties",
317 Type="PP",
318 Project = "C:\Arquivos de programas\BdMEServer\Ems\Solid_v2_2.vrtherm" ← Solid
319 );
320
321 NComp as Integer (Brief = "Number of chemical components in the fluid phase");
322 NCompS as Integer (Brief = "Number of chemical components in the solid phase");
323
324
325 /*-----
326 * Define o valor dos parametros declarados no modelo
327 *-----*/
  
```

Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 30. Acesso ao arquivo de “chutes iniciais”.

```

430
431 OPTIONS
432 Dynamic = false;
433 Integration = "original";
434 GuessFile = "planta_2G.rlt" ← Arquivo de
435                               chutes
436                               iniciais
437 NLSolver(
438   File = "sundials",
439   RelativeAccuracy = 1e-3,
440   AbsoluteAccuracy = 1e-6,
441   MaxIterations = 100
442 );
443 DAEsolver(
444   File = "dassl",
445   RelativeAccuracy = 1e-3,
446   AbsoluteAccuracy = 1e-6,
447   EventAccuracy = 1e-2
448 );
  
```

Fonte: Elaborada pelo autor.

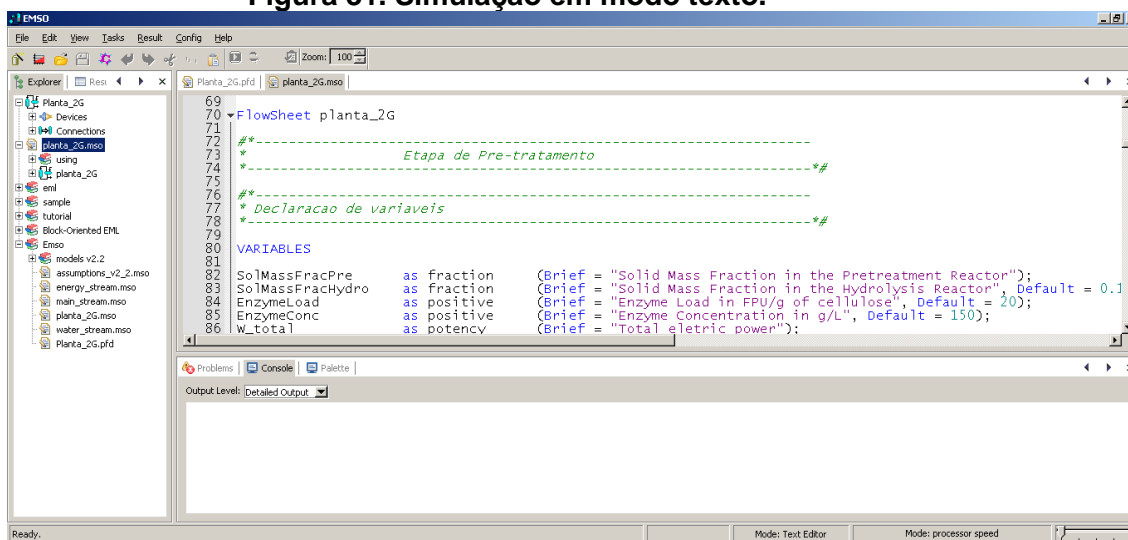
8.5.2 Plataforma de simulação da biorrefinaria

A seguir são apresentados os principais aspectos da ferramenta desenvolvida.

8.5.3 Software EMSO

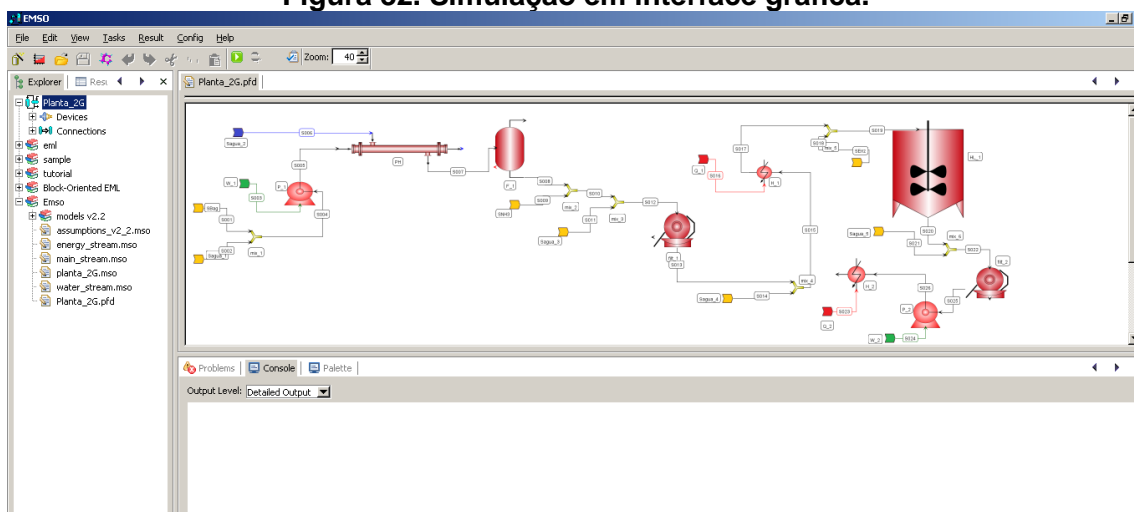
Devido a uma linguagem orientada a objetos, é possível realizar a organização estruturada das unidades que compõem o processo. Tendo em vista este aspecto, o usuário pode optar por fazer as simulações em modo texto (Figura 31) ou utilizar a interface gráfica (Figura 32).

Figura 31. Simulação em modo texto.



Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 32. Simulação em interface gráfica.



Fonte: Elaborada pelo autor.

8.5.4 Estrutura dos modelos

Foram desenvolvidos modelos simplificados das operações unitárias que constituem a biorrefinaria de produção de etanol de primeira e segunda geração no *software EMSO*. Os modelos foram estruturados no *EMSO* de acordo com quatro critérios:

- 1) Abordagem genérica;
- 2) Diferenciação entre a corrente de sólidos e a corrente líquida/gasosa;
- 3) Fácil integração com o *VRTherm*;
- 4) Simulação na interface gráfica.

A abordagem genérica permite que se tenha um maior reaproveitamento do conjunto de equações na construção de novos modelos, o que minimiza o tempo de modelagem.

Para facilitar os cálculos de equilíbrio termodinâmico, foi criado um modelo de corrente capaz de diferenciar os estados físicos dos componentes ao longo do processo. Para que isso fosse possível, foram criados dois projetos no *VRTherm*, um para sólidos (*Solid.vrtherm*) e outro para líquidos e gases (*Fluid.vrtherm*).

Os modelos também foram configurados de maneira que o usuário possa optar por realizar a simulação em modo texto ou utilizar a interface gráfica.

8.5.5 Integração dos modelos

A integração entre os modelos pode ser feita por três correntes: *main_stream*, *energy_stream* e *water_stream*.

8.5.6 Modelo *main_stream*

A corrente *main_stream* é a principal responsável pela conexão entre os diversos modelos de equipamentos envolvidos na biorrefinaria. Este modelo de corrente é capaz de contabilizar variáveis e propriedades de forma separada para sólidos e líquidos/gases. O usuário também pode optar por especificar as variáveis de entrada em base mássica ou molar.

8.5.7 Modelo *energy_stream*

A corrente *energy_stream* é responsável por contabilizar o calor e o trabalho trocado ao longo do processo. A criação deste modelo visa facilitar a integração energética do processo e consequentemente reduzir a complexidade do problema, uma vez que ao invés de se realizar a integração utilizando a corrente *main_stream*,

opta-se por utilizar a o modelo *energy_stream* e conseqüentemente reduzir o número de variáveis a serem calculadas.

8.5.8 Modelo *water_stream*

O modelo *water_stream* foi criado exclusivamente para o componente água. Como elucidado na seção 8.5.7, devido à redução do número de variáveis da simulação, há uma redução na complexidade do problema.

Além disso, este modelo utiliza o *plug-in* *proptherm.dll* que possibilita o cálculo de diversas propriedades específicas para água, como entalpia do vapor saturado, título do vapor, entre outras.

8.5.9 Grupos de modelos

Os modelos foram separados em grupos para facilitar a identificação para os usuários. Os seguintes grupos foram formados:

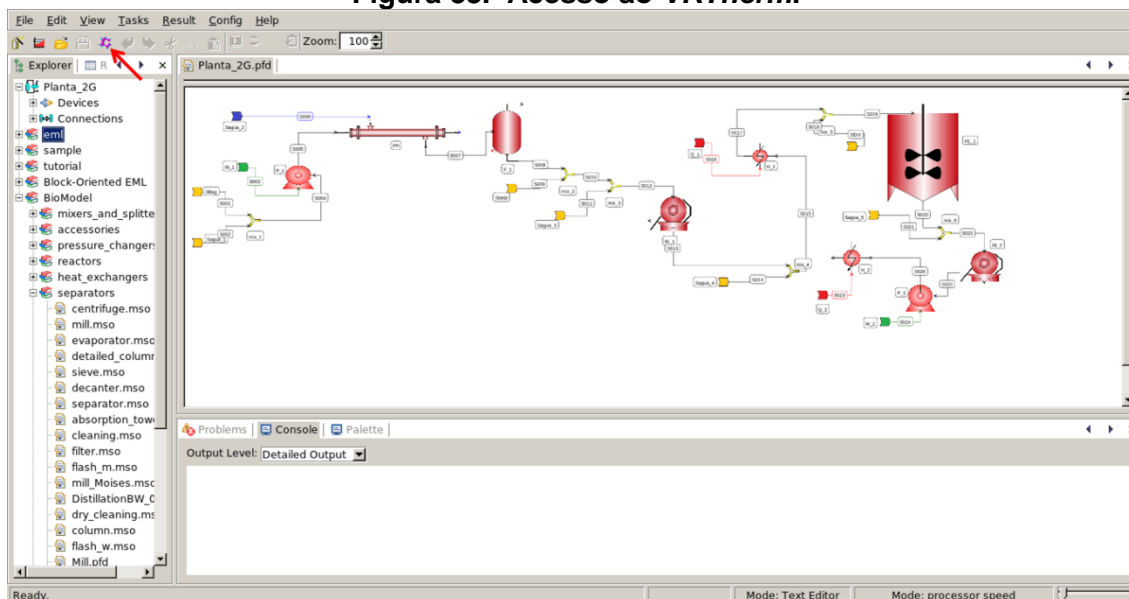
- Misturadores e separadores simplificados (*mixers_and_splitters*);
- Alternadores de pressão (*pressure_changers*);
- Reatores (*reactors*);
- Trocadores de calor (*heat_exchangers*);
- Separadores (*separators*).

Cabe ressaltar que em alguns os casos, o que difere os modelos é o tipo de corrente utilizada. Para estes casos, são adicionados os sufixos *m* (modelo utiliza *main_stream*) ou *w* (modelo utiliza *water_stream*). Exemplos: *compressor_m*, *compressor_w*, *pump_m*, *pump_w*. Além disso, alguns modelos são rotacionados para facilitar a manipulação dos modelos e correntes na interface gráfica. Nestes casos, são acrescentados também os sufixos *R* (*right*), *U* (*upper*), *L* (*left*), *D* (*down*). Os sufixos correspondem em que posição da figura será alocada a entrada. Exemplos: *pump_wR*, *pump_wL*.

8.5.10 Criação de listas de componentes

O *software EMSO* pode funcionar de maneira integrada ao *software VRTherm*, permitindo ao usuário acesso a milhares de componentes e suas respectivas propriedades termodinâmicas. Além disso, é possível também adicionar novos componentes e propriedades no *VRTherm*. Para acessar ao *VRTherm*, basta o usuário clicar no ícone conforme mostrado na Figura 33.

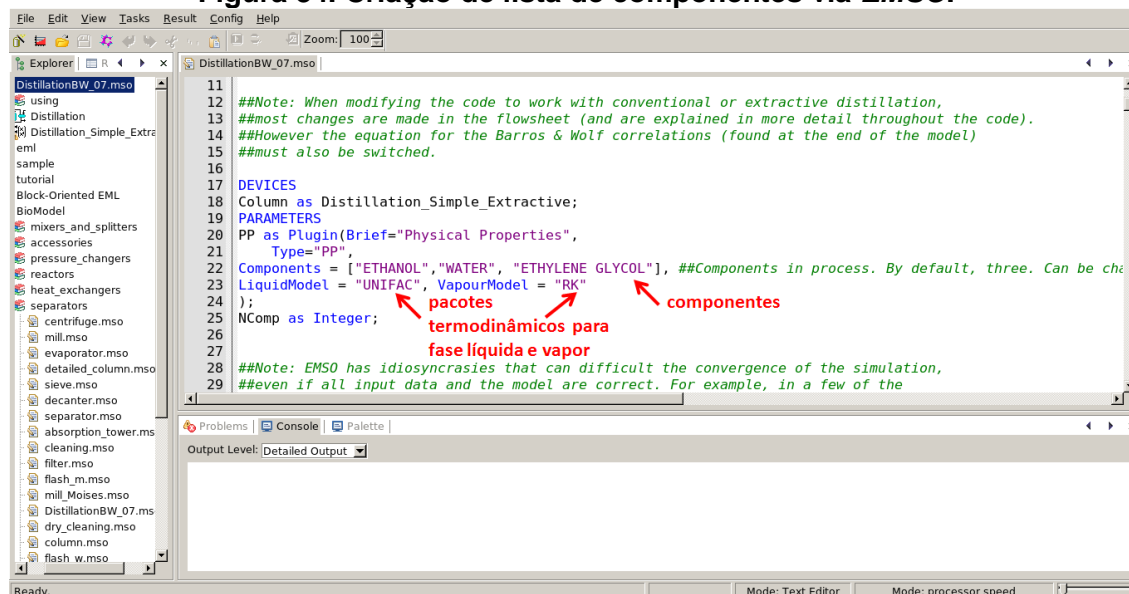
Figura 33. Acesso ao VRTherm.



Fonte: Elaborada pelo autor.

Porém, não necessariamente o usuário precisa abrir o *VRTherm* para criar sua lista de componentes. Ele pode definir os componentes a serem usados na simulação e também os pacotes termodinâmicos dentro do próprio *EMSO*. A Figura 34 exemplifica a sintaxe que deve ser utilizada.

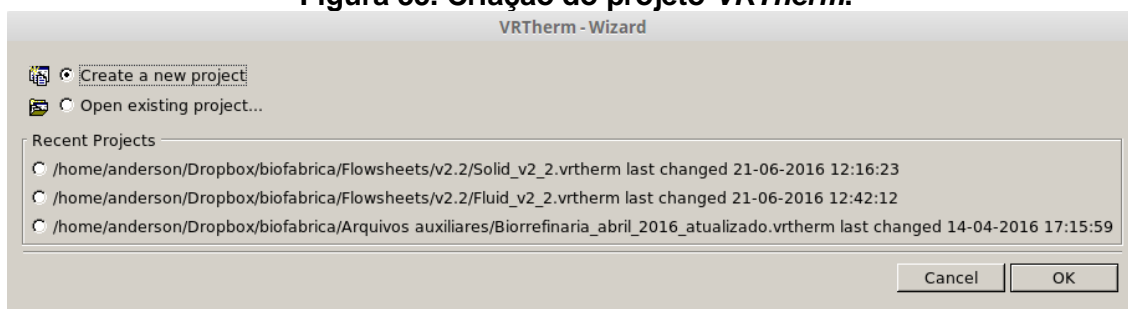
Figura 34. Criação de lista de componentes via EMSO.



Fonte: Elaborada pelo autor.

Outra maneira de criar a lista de componentes, é fazer isso de dentro do *VRTherm*. Inicialmente o usuário deve prosseguir conforme a Figura 33 e clicar no ícone destacado. Ao fazer isso, o usuário deve selecionar a opção “Create a new project”, conforme ilustrado na Figura 35 e posteriormente clicar em “OK”.

Figura 35. Criação do projeto *VRTherm*.



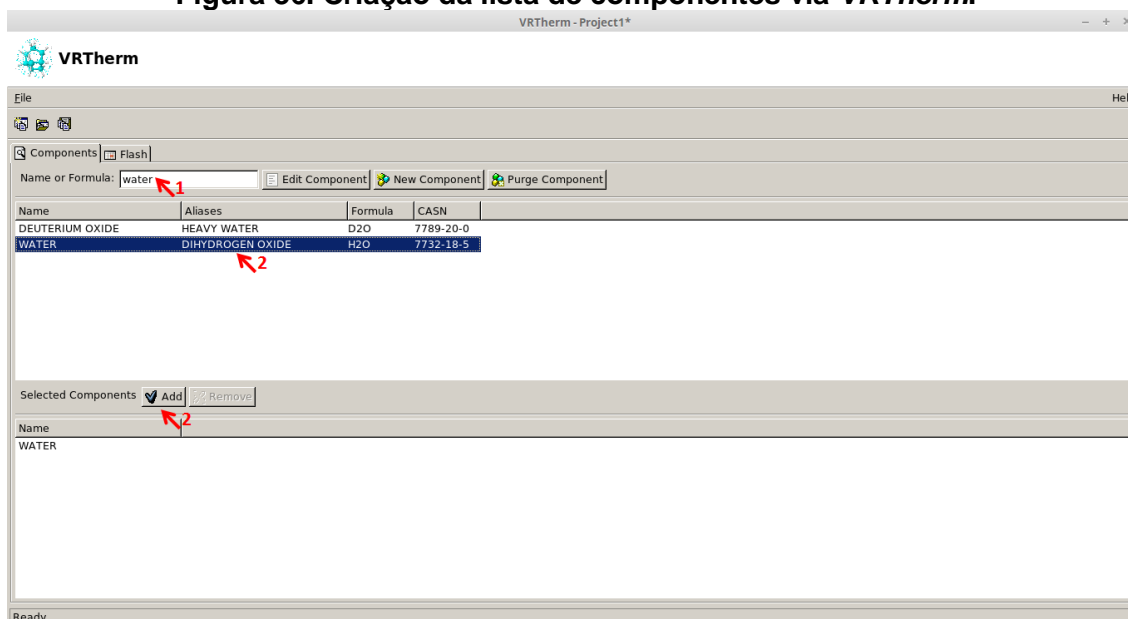
Fonte: Elaborada pelo autor.

Posteriormente, abrirá uma tela conforme ilustra a Figura 36. O usuário deve executar os seguintes passos para a adição de um novo componente.

- 1) Digitar o nome ou fórmula do componente desejado. Se o componente desejado estiver na base de dados, ele será selecionado em azul;
- 2) Posteriormente o usuário pode dar duplo clique no componente selecionado em azul ou clicar em “Add”;

Se o procedimento for efetuado da maneira correta, o componente selecionado aparecerá na aba “Selected Components”.

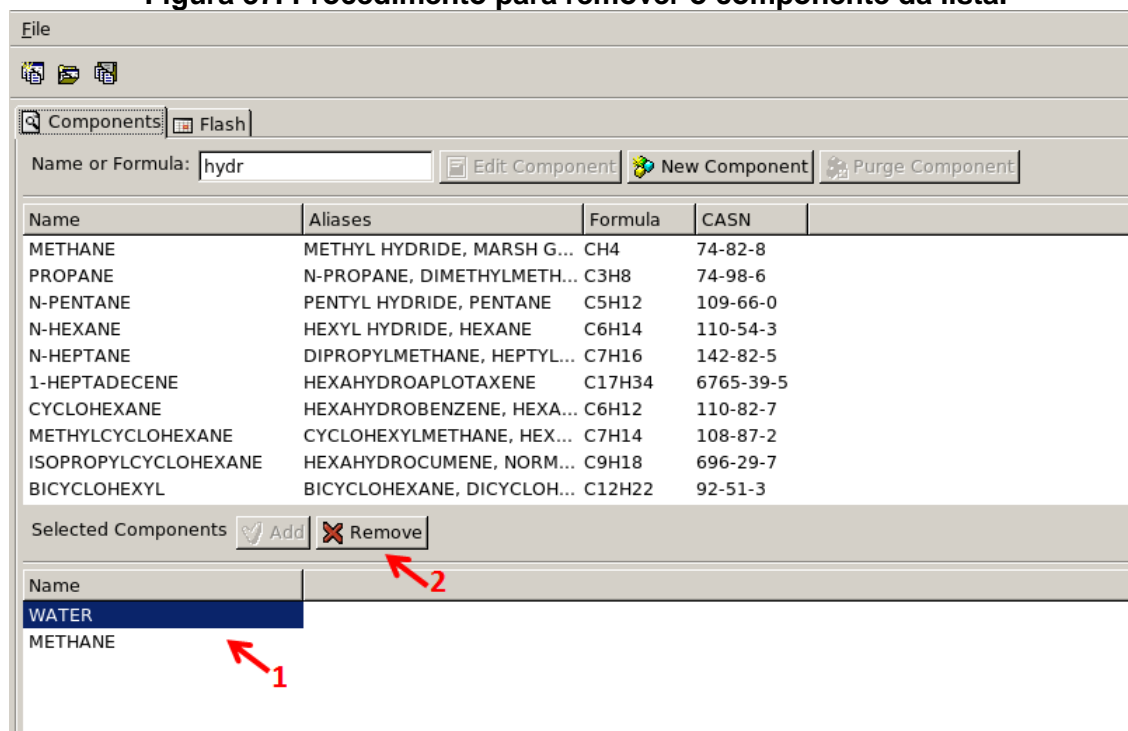
Figura 36. Criação da lista de componentes via VRTherm.



Fonte: Elaborada pelo autor.

Para remover o componente, basta selecioná-lo na lista e posteriormente clicar no botão “Remove”, conforme ilustrado na Figura 37.

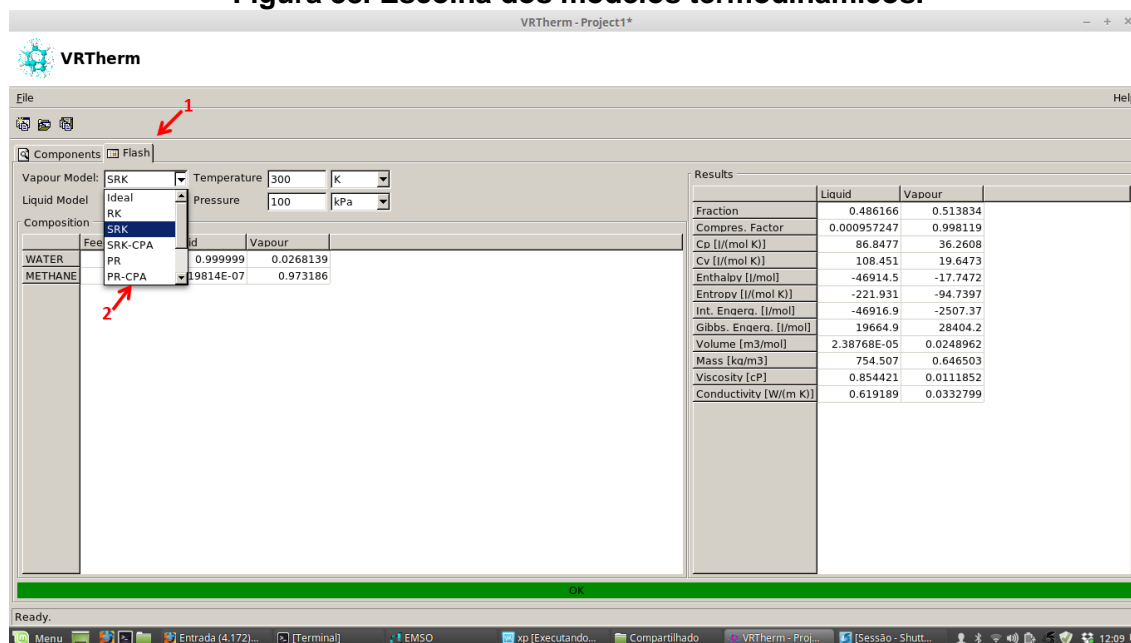
Figura 37. Procedimento para remover o componente da lista.



Fonte: Elaborada pelo autor.

Por fim, o usuário deve definir qual o modelo termodinâmico ele usará para a fase líquida e vapor. Inicialmente o usuário deve selecionar a aba “Flash” e posteriormente definir os pacotes para cada fase. Vale ressaltar, que para cada pacote termodinâmico, uma quantidade mínima de propriedades é requerida a depender da complexidade do modelo termodinâmico. Se tudo estiver correto, uma aba verde na parte inferior da tela aparecerá escrito “OK”. Os passos para realizar este procedimento são ilustrados na Figura 38.

Figura 38. Escolha dos modelos termodinâmicos.



Fonte: Elaborada pelo autor.

8.5.11 Resolução de problemas complexos no EMSO

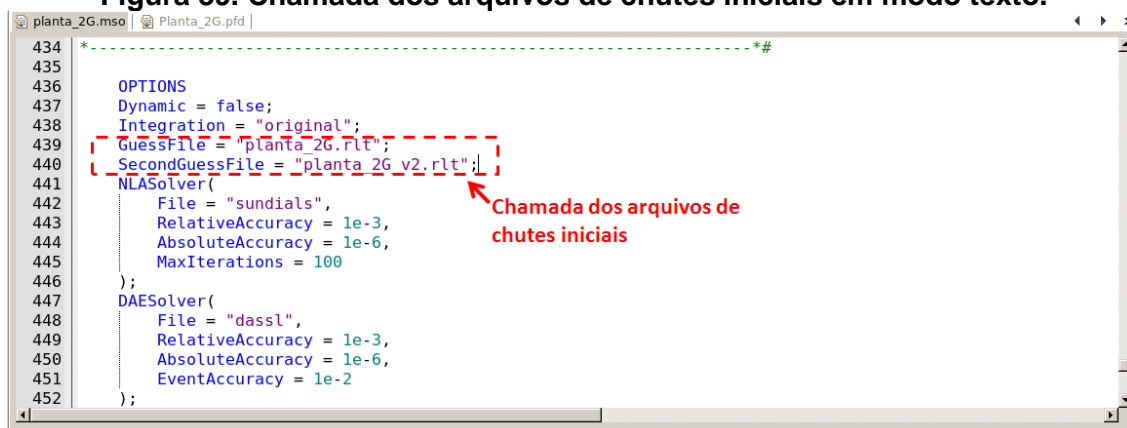
Em simuladores sequenciais, a resolução de problemas algébricos não-lineares pode ser facilitada pela inserção de algoritmos específicos para cada modelo matemático, porém em simuladores orientados a equações, classe que o simulador de processos EMSO se insere, são necessários algoritmos mais genéricos, pois todas as equações são resolvidas simultaneamente, o que pode dificultar a resolução deste tipo de problema. Tendo em vista este aspecto, a plataforma de simulação desenvolvida conta com alguns recursos adicionais para melhorar o processo de convergência, como a possibilidade de trabalhar com dois arquivos de chutes iniciais e também a inserção de interpoladores multilíneares. Nos itens 8.5.12 e 8.5.13 será descrito como o usuário deve proceder para utilizar estes recursos.

8.5.12 Utilização de dois arquivos de chutes iniciais

Para fluxogramas de processos complexos, o usuário pode optar por rodar as etapas do processo separadamente e posteriormente juntá-las. O usuário pode fazer isso em modo texto ou na interface gráfica. Para gerar os arquivos de chutes iniciais, os seguintes passos devem ser executados:

- 1) “Realizar a simulação de uma seção do fluxograma de processo e salvar os resultados gerados com extensão “.rlt” (será o primeiro “guessfile”);
- 2) “Realizar a simulação de outra seção do fluxograma de processo e salvar os resultados gerados com extensão “.rlt” (será o segundo “guessfile”);
- 3) Colocar os modelos dos equipamentos do segundo fluxograma dentro do primeiro mantendo os mesmos nomes, fazer as conexões necessárias para unir os fluxogramas e acrescentar o segundo arquivo de chutes iniciais como “SecondGuessFile”. A Figura 39 mostra a sintaxe para utilizar os dois arquivos de chutes iniciais em modo texto.

Figura 39. Chamada dos arquivos de chutes iniciais em modo texto.



```

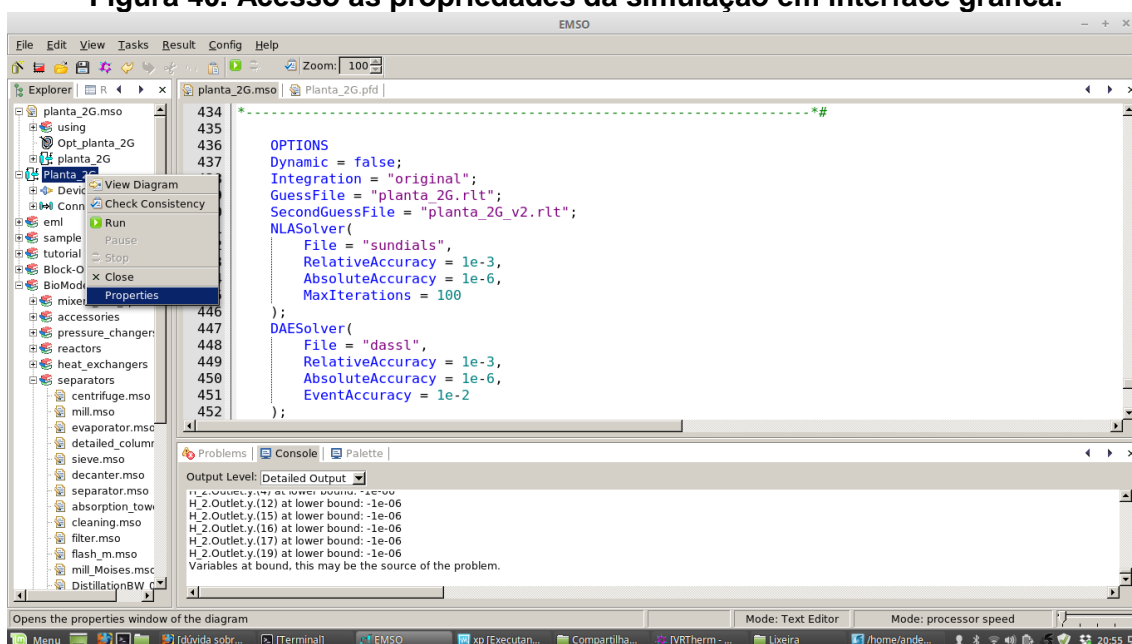
434 *-----*#
435
436 OPTIONS
437 Dynamic = false;
438 Integration = "original";
439 GuessFile = "planta_2G.rlt";
440 SecondGuessFile = "planta_2G_v2.rlt";
441 NLSolver(
442     File = "sundials",
443     RelativeAccuracy = 1e-3,
444     AbsoluteAccuracy = 1e-6,
445     MaxIterations = 100
446 );
447 DAEsolver(
448     File = "dassl",
449     RelativeAccuracy = 1e-3,
450     AbsoluteAccuracy = 1e-6,
451     EventAccuracy = 1e-2
452 );

```

Fonte: Elaborada pelo autor.

Para repetir o procedimento na interface gráfica, inicialmente o usuário deve clicar com o botão direito no ícone que representa o *flowsheet* e posteriormente clicar em “Properties”. Os passos são ilustrados na Figura 40.

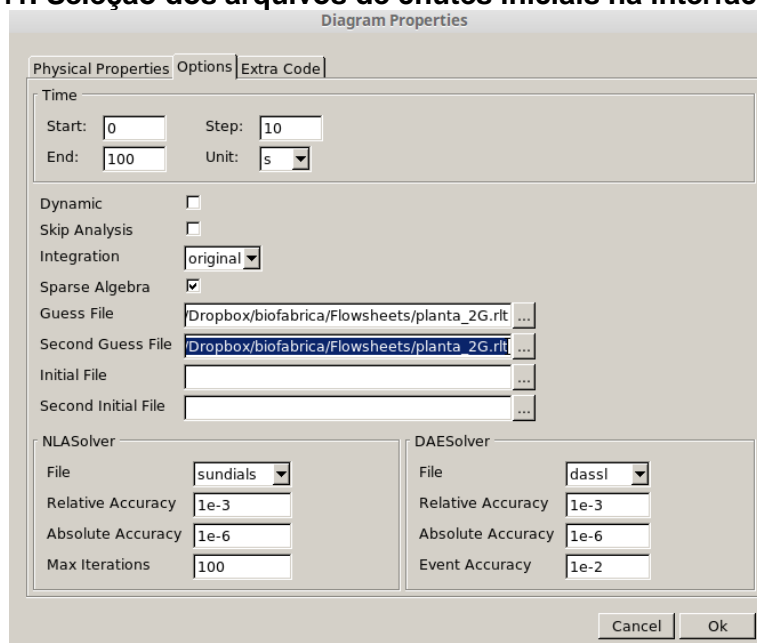
Figura 40. Acesso às propriedades da simulação em interface gráfica.



Fonte: Elaborada pelo autor.

Posteriormente o usuário terá acesso a uma tela similar à Figura 41. Inicialmente será necessário selecionar a aba “Options”. Depois o usuário deve clicar no ícone “...” localizado à frente dos nomes “Guess File” e “Second Guess File” para selecionar os arquivos a serem usados como chutes iniciais.

Figura 41. Seleção dos arquivos de chutes iniciais na interface gráfica.



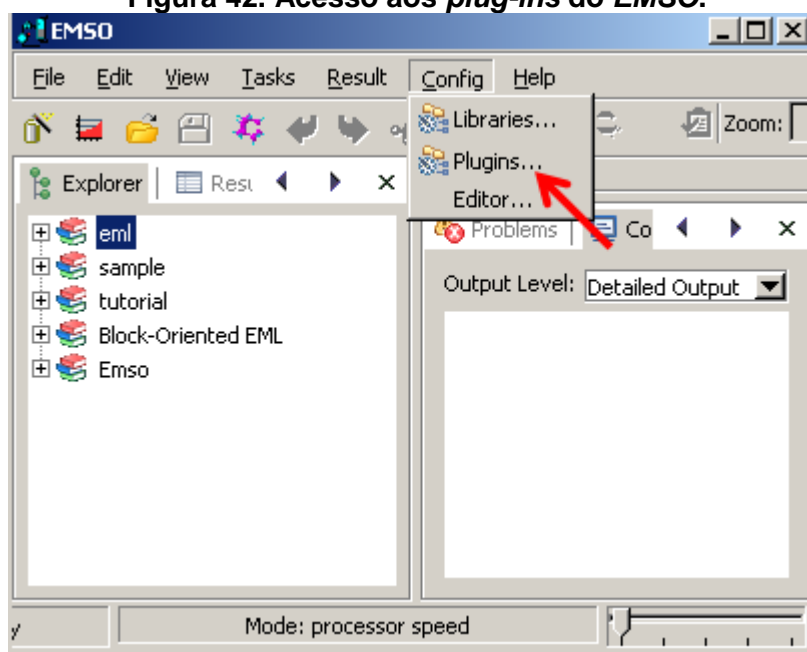
Fonte: Elaborada pelo autor.

8.5.13 Utilização de interpoladores multilineares

Interpoladores multilineares podem ser usados para representar um sistema de equações algébricas não-lineares de uma seção do processo ou mesmo de um modelo de equipamento. Para usufruir desta ferramenta, o usuário deve executar os seguintes passos:

- 1) Clique em “Config” → “Plugins” (Figura 42).

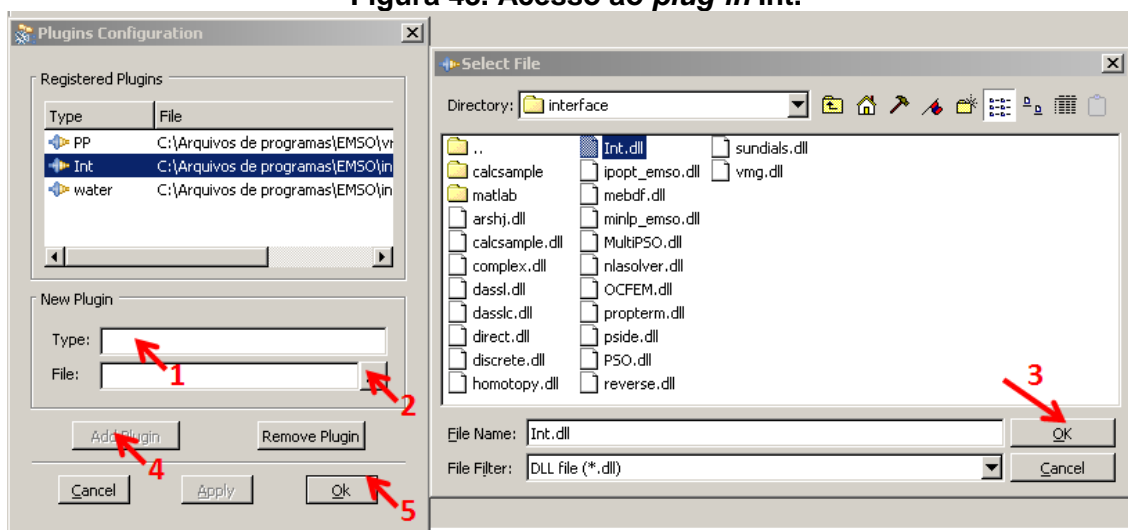
Figura 42. Acesso aos *plug-ins* do EMSO.



Fonte: Elaborada pelo autor.

- 2) Na aba “Type”, digite “Int” e posteriormente clique em “...” para encontrar o arquivo “Int.dll”. Em seguida clique em “OK”, posteriormente em “AddPlugin” e por fim em “OK” novamente (Figura 43).

Figura 43. Acesso ao *plug-in* Int.



Fonte: Elaborada pelo autor.

Feche e abra o *EMSO* novamente para que as configurações sejam salvas. Esta ação permitirá que os modelos acessem o respectivo *plug-in*.

8.5.14 Simulações

8.5.15 Modo texto

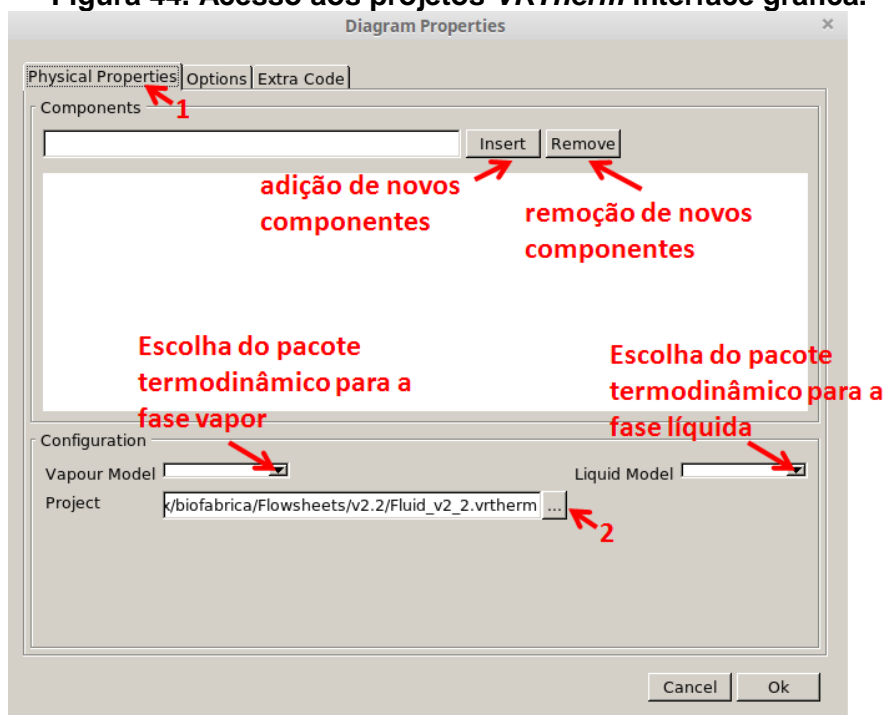
Para efetuar as simulações em modo texto, basta que o usuário siga as instruções mostradas na seção 8.5.1. Vale lembrar que o usuário pode optar por

colocar os arquivos na pasta que desejar (isto significar dizer que o usuário pode escolher qualquer nome para pasta contendo os arquivos de modelos, além de poder escolher o local onde esta pasta vai ser localizada).

8.5.16 Interface gráfica

Para efetuar as simulações em modo gráfico, o usuário deve inicialmente acessar as propriedades da interface gráfica, como destacado na Figura 40. Posteriormente o usuário deve selecionar os projetos *VRTherm*. Se a simulação requerer somente um projeto *VRTherm*, basta o usuário selecionar a aba “Physical Properties”, clicar no ícone “...” e selecionar o projeto. Ainda na aba “Physical Properties”, o usuário pode adicionar componentes ou mesmo escolher os pacotes termodinâmicos para as fases líquida e vapor. Porém, vale ressaltar que este procedimento somente é necessário se não houver um projeto *VRTherm*. Estas informações são mostradas na Figura 44.

Figura 44. Acesso aos projetos *VRTherm* interface gráfica.

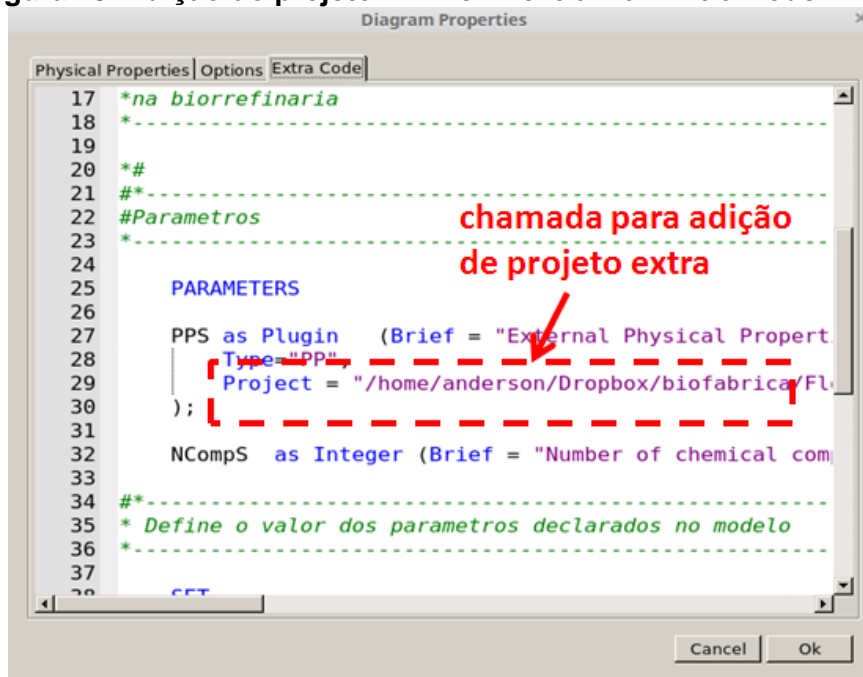


Fonte: Elaborada pelo autor.

Caso a simulação necessite de arquivos de chutes iniciais, o usuário deve proceder como descrito na secção 8.5.12. Se a simulação requerer mais de um

projeto *VRTherm*, o usuário deve selecionar a aba “Extra Code” e fazer a chamada do projeto *VRTherm* adicional conforme demonstrado na Figura 45.

Figura 45. Adição do projeto VRTherm extra via “Extra Code”.



Fonte: Elaborada pelo autor.

Quanto às especificações das variáveis e parâmetros, o usuário pode optar por realizá-las no próprio modelo e/ou utilizar a aba “Extra Code”, como representado nas Figuras 46 e 47, respectivamente. Para especificar as variáveis via modelo, o usuário precisa somente dar duplo clique na figura que representa o modelo e uma tela similar a Figura 46 abrir-se-á.

8.6 Convenções de nomenclatura

Convenções de nomenclatura para modelos, equipamentos e flowsheets.

Este documento trata das convenções usadas pelo grupo para nomear modelos, equipamentos e flowsheets no âmbito da biorrefinaria.

1.) Modelos

1.1 – Identificadores de corrente:

Identificadores de corrente são elementos presentes nos nomes de modelos que tem a função de informar o tipo de corrente de entrada com a qual o equipamento modelado trabalha. Geralmente esses identificadores correspondem a uma palavra ou a uma única letra acoplada no início ou no final do nome do modelo. A seguir é feita uma descrição detalhada:

- Modelos que usam somente correntes do tipo main_stream recebem o identificador _m quando podem ser confundidos com modelos semelhantes que trabalham com a corrente water_stream. *Exemplos: heater_m, mixer_and_splitter_m.* Não recebem nenhum identificador quando não há possibilidade de confusão. *Exemplos: stoic_reactor, column.*
- Modelos que usam somente correntes do tipo water_stream recebem o identificador _w. *Exemplos: heater_w, mixer_and_splitter_w.*
- Trocadores de calor têm duas correntes de entrada. Essas correntes podem ser do mesmo tipo ou de tipos diferentes. Usa-se combinações de m e w após um caractere de sublinhado para representar as correntes de entrada utilizadas. *Exemplos: heatex_mm, heatex_mw, heatex_ww.*
- Usa-se as palavras _heat e _power para identificar entradas de calor e de potência respectivamente. *Exemplos: splitter_power, splitter_heat.*

1.2 – Identificadores de posição da corrente:

O EMSO não possui ferramentas de rotação ou espelhamento de ícones de equipamentos usados com as simulações em modo gráfico (Diagrams, arquivos .pfd). Por isso é necessário criar cópias de modelos com as posições de suas entradas e saídas rotacionadas ou espelhadas. Esses identificadores são as letras

maiúsculas U, D, R e L, posicionadas no final do nome do modelo. A depender do modelo, essas letras indicam a posição da entrada ou da saída.

- Usa-se U (*up*) quando a corrente de referência está no alto do ícone.
- Usa-se D (*down*) quando a corrente de referência está na base do ícone.
- Usa-se R (*right*) quando a corrente de referência está à direita do ícone.
- Usa-se L (*left*) quando a corrente de referência está à esquerda do ícone.
- Usa-se combinações dessas letras quando há mais de uma corrente de referência em posições diferentes do ícone.
- Exemplos: mixerR, mixerL, SWheatexUL (versões 1.0 a 2.0)
mixer_mR, mixer_mL, heatex_mwUL (versão 2.1 em diante).

2.) Equipamentos

2.1 – Identificador de subprocesso

Ao nomear um equipamento em um *flowsheet*, um identificador numérico com três algarismos é acoplado ao final do nome do equipamento para designar o subprocesso do qual ele faz parte. O algarismo na posição das centenas informa o subprocesso.

- 1xx – Extração e tratamento
- 2xx – Fermentação
- 3xx – Purificação (destilaria)
- 4xx – Cogeração
- 5xx – Pré-tratamento
- 6xx – Hidrólise
- 7xx – Fermentação de pentoses
- 8xx – Biodigestão
- 9xx – BIGCC

2.2 – Identificador de tipo de equipamento

Caracteres alfabéticos são usados para representar o tipo de equipamento. Nas versões 1.0 a 2.0, esses identificadores eram sempre um S, caso o equipamento seja uma fonte de corrente (*source*) ou um E, caso fosse um equipamento. Na versão 2.1 em diante, os equipamentos têm um código de três letras que informa o tipo do equipamento.

2.2.a – Fontes e sumidouros de corrente

- MSS – main_stream source
- WSS – water_stream source
- PSS – power_stream source
- QSS – heat_stream source
- MSK – main_stream sink
- WSK – water_stream sink

2.2.b – Trocadores de calor

- Hmq – heater main x heat
- Hwq – heater water x heat
- Cm q – cooler main x heat
- Cwq – cooler main x heat
- Xmm – heat exchanger main x main
- Xmw – heat exchanger main x water
- Xww – heat exchanger water x water

2.2.c – Mixers e splitters

- qST – heat_stream splitter
- pST – power_stream splitter
- mSP – main_stream splitter
- wSP – water_stream splitter
- mMX – main_stream mixer
- wMX – water_stream mixer
- mwM – main_water_mixer

2.2.d – Trocadores de pressão

- mCP – main_stream compressor (compressor a gás)
- wCP – water_stream compressor (compressor a vapor)
- mTB – main_stream turbine (turbina a gás)
- wTB – water_stream turbine (turbina a vapor)
- mIV – main_stream isenthalpic valve
- wIV – water_stream isenthalpic valve
- mPP – main_stream pump
- wPP – water_stream pump

2.2.e – Reatores

- ADG – anaerobic digester
- BLR – boiler
- DIG – digester
- GAS – gasifier
- HLE – empiric hydrolysis
- HLS – stoichiometric hydrolysis
- HLI – interpolated hydrolysis
- LTS – stoichiometric liming tank
- LTM – liming tank (mixer)
- PTT – Pre-treatment
- FMS – stoichiometric fermenter
- FMB – fed-batch fermenter
- FMC – continuous fermenter
- FXB – xylose fed-batch fermenter

- FXC – xylose continuous fermenter
- RTS – stoichiometric reactor
- STX – steam explosion

2.2.f – Separadores

- ABT – absorption tower
- DRB – bagasse dryer
- CFG – centrifuge
- DEH – dehydration column
- COL – distillation column
- WCL – cleaning
- DCL – dry cleaning
- DEC – decanter
- EVP – evaporator
- FLT – filter
- mFL – main_stream flash drum
- wFL – water_stream flash drum
- MLL – mill
- SEP – separator
- SIE – sieve

2.2.g – Accessories

- TNK – tank
- VLV – valve
- DUP – duplicator
- SEL – selector

3.) Flowsheets

Alguns *flowsheets* são nomeados de acordo com o cenário avaliado seguindo a convenção explicada nesta seção.

Algumas premissas gerais são válidas em todos os cenários, a saber:

- Vinhaça 2G não biodigerível.
- Organismo geneticamente modificado (OGM) queimado na caldeira (sem reciclo).
- Coluna de destilação é integrada (1G e 2G juntos), a interpolação vai de 8,5°GL a 13,0°GL e 75 °C a 95 °C.
- Queima de 50% da palha.

Nomenclatura:

- Ref – Caso base (referência), sempre 1G.
 - Ref1 – Queimando toda palha e todo bagaço, produzindo etanol anidro sem biodigestão.
 - Ref2 – Queima toda palha e todo bagaço com biodigestão, produzindo etanol anidro.
 - Ref3 – Queima todo bagaço e toda palha sem biodigestão, produzindo

etanol hidratado.

- Var – Variações do cenário Ref1 incluindo 2G.
 - Var1 – Fermentar C6 e C12 juntos, sem biodigestão e C5 descartado.
 - Var1_2 – Fermentar C6 e C12 juntos e C5 separado, sem biodigestão.
 - Var2 – Fermentar C6 e C12 juntos e biodigestão do C5.
 - Var3 – Fermentar C6 e C12 juntos com biodigestão da vinhaça e C5 é descartado.
 - Var3_2 – Fermentar C6 e C12 juntos e C5 separado, com biodigestão da vinhaça.
 - Var4 – Fermentar C6 e C12 juntos, biodigestão do C5 e da vinhaça juntos.
 - _v – versão da biorrefinaria anexada ao nome do arquivo.
- Exemplos: Var2_v1_2 (variação 2, versão 1.2), Ref3_v2_1 (referência 3, versão 2.1).*

