

Esta versão corresponde a redação final da Tese de Mestrado, defendida pelo Engº Marcelo Sgarbosa, e aprovada pela Comissão Julgadora em 18/06/93.

Assinatura do Orientador

A handwritten signature in black ink, appearing to be 'Marcelo Sgarbosa', written over a horizontal line.

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA
SISTEMAS DE PROCESSOS QUÍMICOS E INFORMÁTICA

"OTIMIZAÇÃO ON-LINE DE UMA COLUNA DEBUTANIZADORA"

AUTOR : MARCELO SGARBOSA
ORIENTADOR : PROF. DR. MÁRIO DE JESUS MENDES

TESE APRESENTADA À FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA
COMO PARTE DOS REQUISITOS EXIGIDOS PARA A OBTENÇÃO
DO TÍTULO DE MESTRE EM ENGENHARIA QUÍMICA.

JUNHO/1993
CAMPINAS - SP

UNIDADE	BC
N.º CHAMADA:	T/UNICAMP
	Sg 16 e
V.	Es.
TOMO	BC/ 21168
PROC.	286/94
C	☐
D	☒
X	☐
PREÇO	Ce\$ 800,00
DATA	23/03/94

FICHA CATALOGRAFICA ELABORADA PELA
BIBLIOTECA CENTRAL - UNICAMP

CM-00059634-5

Sgarbosa, Marcelo

Sg160 Otimizacao on-line de uma coluna debutanizadora / Marcelo
Sgarbosa. -- Campinas, SP : [s.n.], 1993.

Orientador : Mario de Jesus Mendes.

Dissertacao (mestrado) - Universidade Estadual de Campinas,
Faculdade de Engenharia Quimica.

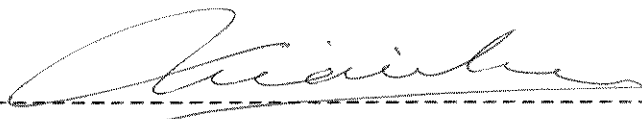
1. Otimizacao. 2. Coluna debutanizadora. I. Mendes,
Mario de Jesus. II. Universidade Estadual de Campinas.
Faculdade de Engenharia Quimica. III. Titulo.

20. CDD -003
-660.2

Indices para Catalogo Sistematico:

1. Otimizacao 003
2. Coluna debutanizadora 660.2

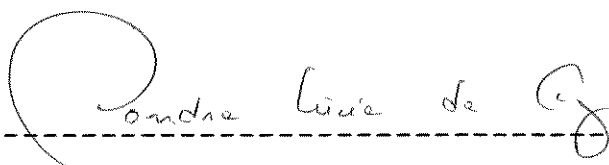
Tese defendida e aprovada, em 18 de Junho de 1993, pela banca
examinadora constituída pelos professores:



Prof. Dr. Mário de Jesus Mendes



Profª Drª Maria Teresa Moreira Rodrigues



Profª Drª Sandra Lúcia da Cruz

AGRADECIMENTOS

Várias foram as pessoas que contribuíram para que a realização desta tese fosse possível.

Agradecimento especial à Petrobrás pela concessão de tempo e recursos para a execução do curso de mestrado.

Ao Engº Renato Spandri pela solicitude quando necessária e também pela gentil concessão do programa de otimização utilizado.

Ao Engº Pedro Pedrosa Neto também pela solicitude no fornecimento de dados, esclarecimento de dúvidas e companheirismo.

À bibliotecária Shirlei pela elaboração de redação da bibliografia do trabalho, ao desenhista Pedro pelo desenho da coluna e à secretária Neuza pela datilografia das figuras.

Ao Prof. Dr. Mário de Jesus Mendes por conceder orientação de tese a um aluno da indústria e dedicar às horas fora do expediente normal para esclarecimentos e orientação.

À Maura, minha noiva, por ceder grande parte do tempo que passaríamos juntos para que eu pudesse me dedicar à tese e também pelo apoio prestado.

Aos meus pais, irmãos, tios e amigos que sempre me incentivaram no prosseguimento dos estudos.

À Deus Pai, Filho e Espírito Santo que nunca me desampararam e estiveram comigo em todos os momentos do curso.

"Eis que estou convosco todos os dias até a consumação dos séculos" *Mat. 28:20*

RESUMO

O presente trabalho tem por objetivo a otimização on-line de uma coluna debutanizadora da unidade de craqueamento catalítico fluido de uma refinaria de petróleo.

É utilizado para isto o algoritmo de otimização de Box e o modelo de Smith-Brinkley como simulador da coluna, sendo maximizada uma função objetivo do tipo :

$F.O. = (\text{Valor. Produtos}) - (\text{Custo carga}) - (\text{Custo Utilidades})$,
estando a coluna sujeita à restrições operacionais, tanto do equipamento físico, no que diz respeito às capacidades de vazão, como em relação às especificações dos produtos obtidos.

A principal especificação de produto a ser atendida na coluna é a temperatura correspondente a 95 % em volume evaporados do produto de topo, obtida em teste realizado experimentalmente com amostra do produto. Esta temperatura, definida como intemperismo, tem o seu valor máximo fixado em 2°C.

Estudou-se alguns casos de perturbação na operação da coluna, como a variação de vazão e a variação de carga, realizando-se a otimização da mesma para três composições de cargas diferentes.

Tanto no caso de variação de vazão como nos três casos de variação de composição de carga, para os preços dos produtos e utilidades tomados, o ponto ótimo operacional se situou na intersecção do valor do intemperismo com o valor mínimo da razão de refluxo.

ABSTRACT

The aim of this work is the on-line optimization of the debutanizer column of a Fluid Catalytic Cracking Unit from a Petroleum refinery.

The algorithm for the on-line optimization of a debutanizer column uses the method of Box in connection with the Smith-Brinkley model for the debutanizer.

The objective function,

$$(O.B.) = \text{Products Value} - \text{Feed Costs} - \text{Utility Costs},$$

was maximized, subjected to operational constraints that must be respected. These constraints refer to the hydrodynamic capacity of the column and the specifications of the products.

The most important specification of the products of the debutanizer is the 95 % volume Boiling Point of the headproduct (Liquefied Petroleum Gas - LPG), which is the result of a experimental test with a sample of the product. Its maximum value is fixed in Brazilian territory in 2 °C.

Some cases of disturbances are studied in the column as the variation of feed flow and the variation of feed type.

The results obtained show that in both cases the optimum operational point lies on the intersection of the 95 % Boiling Point of LPG and the minimum operational reflux ratio.

ÍNDICE

	página
Agradecimentos	1
Resumo	2
Abstract.....	3
Índice	4
1 Introdução	6
2 A Otimização on-line de processos químicos	11
2.1 A Otimização na hierarquia dos sistemas de controle	14
2.2 O problema da otimização on-line	16
2.3 Técnicas de otimização	20
2.4 Os benefícios da otimização on-line	21
3 Modelagem e simulação estática da coluna debutanizadora ...	23
3.1 Dados de projeto e operação da coluna	23
3.1.1 Especificações dos produtos	28
3.2 Modelo simplificado da coluna :	
O modelo de Smith-Brinkley	32
3.2.1 - Comparação do método de Smith-Brinkley com um método rigoroso	40
3.3 Carga utilizada para os estudos de simulação-otimização	43
3.4 Restrições à operação da coluna	46

3.4.1	A restrição intemperismo na coluna debutanizadora	47
3.4.1.1	Método dos flashes sucessivos	48
3.4.1.2	Método de destilação em batelada	50
4	Otimização on-line da coluna debutanizadora	54
4.1	Função objetivo	54
4.2	O algoritmo de otimização	61
4.2.1	Otimização para modelos não lineares	61
4.2.2	Métodos geométricos	62
4.2.3	Método de Box	64
4.3	Programa de simulação-otimização com restrições	69
4.4	Otimização on-line para variação de vazão da carga	71
4.5	Otimização on-line para variação do tipo de carga	72
5	Análise dos resultados. Conclusões e sugestões	80
5.1	Análise do caso de variação de vazão de alimentação ...	80
5.2	Análise do caso de variação da composição da alimentação	80
	Bibliografia	83
	Anexos :	
A.1	Dedução da equação do método de Smith-Brinkley	85
A.2	Dados da alimentação - propriedades físicas	94
A.3	Cálculo do intemperismo - destilação em batelada.....	97

CAPÍTULO 1 - INTRODUÇÃO

Neste trabalho objetivou-se a otimização on-line em estado estacionário de uma coluna de destilação, uma coluna debutanizadora, sujeita à restrições operacionais e de produto.

Esta coluna de destilação, em operação atualmente na Unidade de Craqueamento Catalítico Fluido da Refinaria de Paulínia (REPLAN) - PETROBRÁS, destina-se à separação das duas correntes de derivados de petróleo mais nobres, e de elevado valor comercial, a gasolina (nafta craqueada) e o Gás Liquefeito de Petróleo (GLP).

As unidades de craqueamento catalítico são sem dúvida as mais rentáveis de todo o processamento de petróleo. O processo de craqueamento catalítico consiste no envio de uma fração pesada proveniente da destilação direta do petróleo, denominada gasóleo, a um reator catalítico de leito fluidizado, onde se processam reações químicas de ruptura de ligações (cracking) na presença de catalisador, formando compostos de menor peso molecular e menor cadeia carbônica, além de estruturas moleculares diferentes : olefinas, normais e iso parafinas, naftênicos e aromáticos.

Depois de ocorrerem as reações no reator catalítico, os gases efluentes deste são destinados à uma série de fracionamentos, para a separação das frações craqueadas.

A Figura 1.1 mostra um diagrama de blocos simplificado da unidade de craqueamento catalítico.

Em uma primeira coluna de fracionamento, são separadas três correntes : uma de leves, retirada pelo topo, contendo hidrocarbonetos da faixa de 1 a 12 carbonos; uma intermediária, denominada LCD (light cycle oil) e uma corrente de fundo denominada óleo clarificado ou óleo decantado.

A corrente de leves é enviada a uma coluna absorvedora e a uma coluna deetanizadora, onde os hidrocarbonetos da faixa de 1 e 2 átomos de carbono são separados dos restantes. Esta corrente de leves é denominada gás combustível, tendo uso para queima nos fornos e caldeiras da refinaria, por se tratar de uma mistura de gases incondensável e de difícil armazenamento.

A corrente de fundo da deetanizadora, contendo hidrocarbonetos na faixa de 3 a 12 átomos de carbono, é enviada à uma coluna debutanizadora, separando-se em duas correntes, uma de 3 e 4 átomos de carbono e a outra, de fundo, com a faixa restante.

Nas Figuras 1.2 e 1.3 estão mostrados os fluxogramas da seção de separação dos produtos do FCC, aparecendo circunscrita em linha pontilhada, na Figura 1.3, a torre debutanizadora, objeto de estudo deste trabalho.

Há um grande incentivo à otimização on-line da torre debutanizadora, por ser esta o equipamento separador das correntes de maior preço do processo de craqueamento, havendo ganhos em sua operação otimizada.

Pretendeu-se desta forma otimizar a operação da coluna, levando-se em conta as restrições referentes às especificações dos produtos, assim como as referentes às capacidades do equipamento.

Utilizou-se para a simulação da coluna, o método short-cut de SMITH-BRINKLEY^[5]. Como método de otimização^[12], utilizou-se o método de BOX^[19], também conhecido como SIMPLEX triangular. A linguagem computacional utilizada nos programas foi o FORTRAN, versão 5.0.

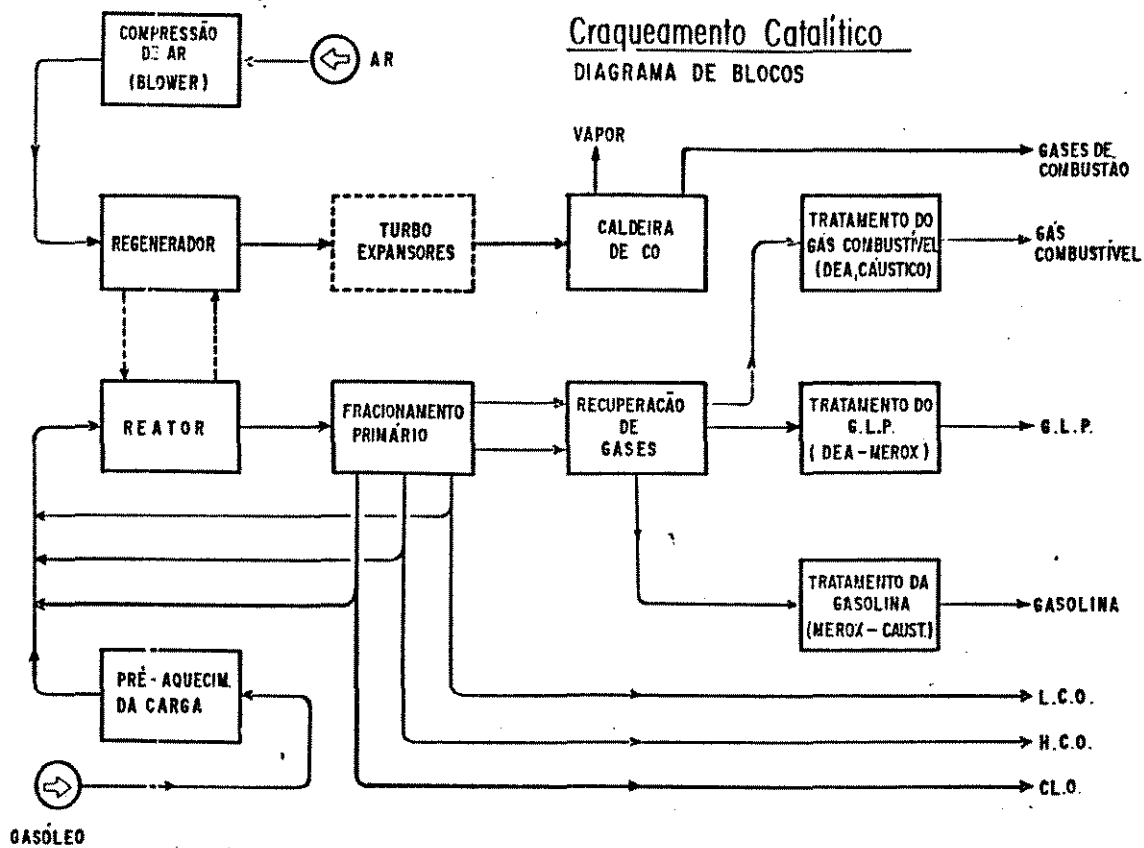


Figura 1.1 - Diagrama de blocos - Unidade de Craqueamento Catalítico

FGG = Seção de Fracionamento

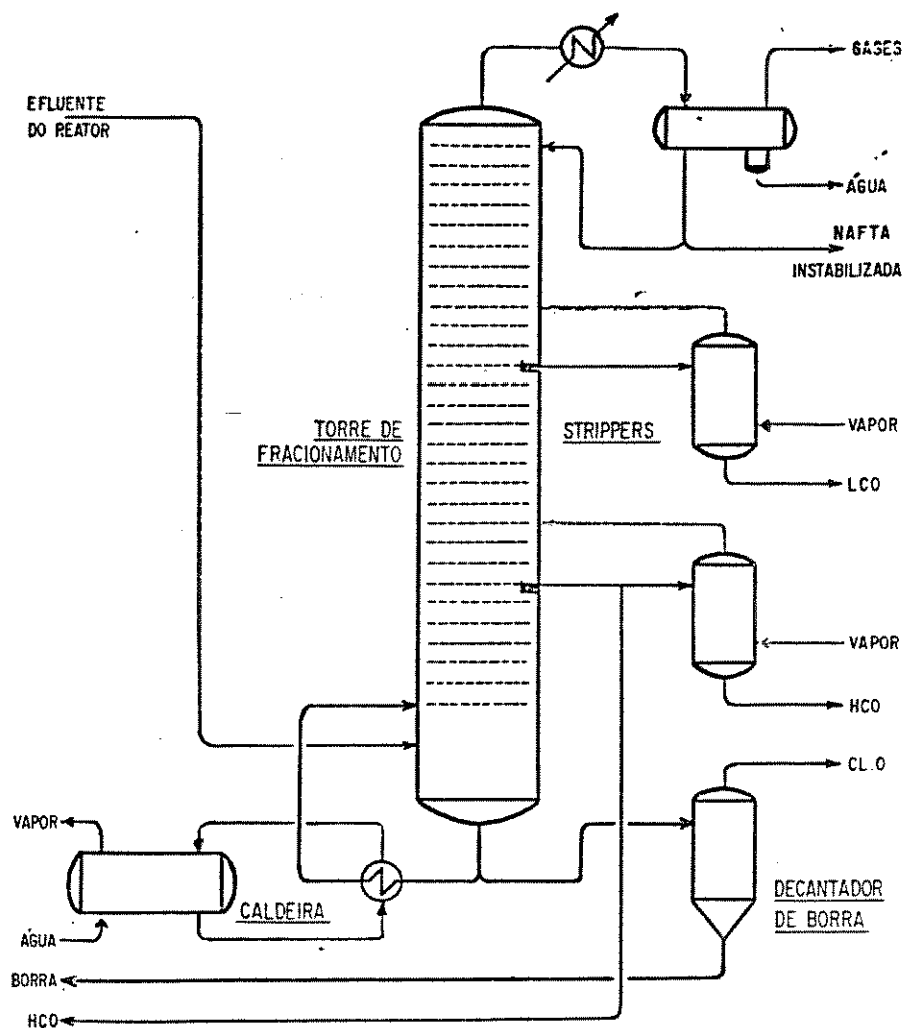


Figura 1.2 - Seção de fracionamento - Unidade de Craqueamento Catalítico

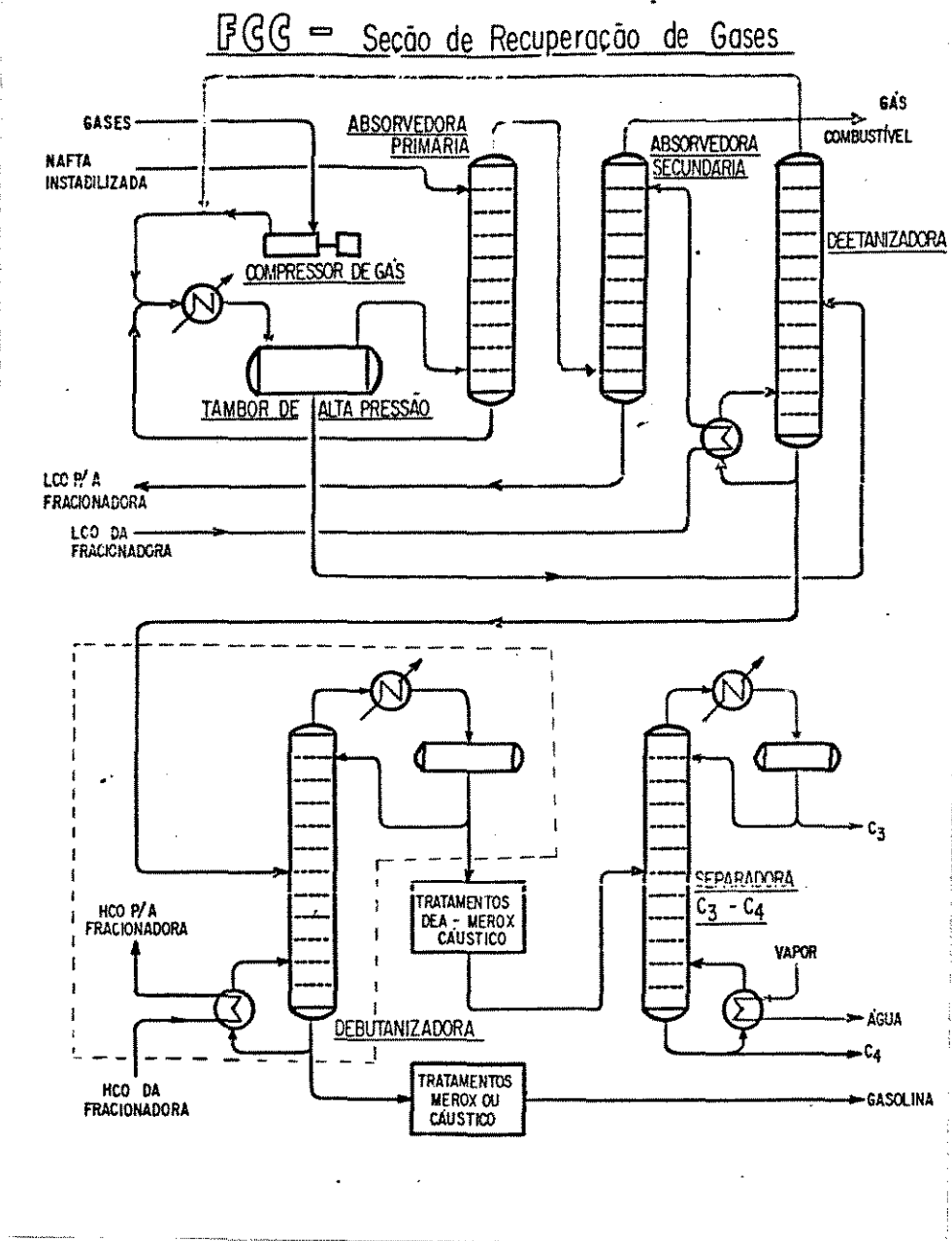


Figura 1.3 - Seção de recuperação de gases - Coluna Debutanizadora - Unidade de Craqueamento Catalítico

CAPÍTULO 2 - OTIMIZAÇÃO ON-LINE DE PROCESSOS QUÍMICOS

Há aproximadamente 30 anos teve início a utilização de computadores para aplicação em controle avançado de processos industriais, e uma das idéias que permaneceu através dos anos foi a utilização de computadores para se calcular o ponto ótimo de operação de um processo, em tempo real.

Muitos dos projetos desta área não foram documentados e, devido a problemas diversos em sua implementação, a otimização on-line foi tida como cara e de baixa confiabilidade. Nos últimos dez anos porém, uma nova geração de projetos tem surgido, tendo sido implementados com sucesso e aceitabilidade^[1].

A otimização on-line possibilita a otimização do processo, utilizando computadores em tempo real. O computador é utilizado na otimização e simulação estática do processo sujeito às variações nas perturbações, a fim de se obter, no menor tempo possível, as novas condições ótimas e de regime estacionário, depois de realizada uma variação permanente na perturbação do processo. Para tal, maximiza-se uma função objetivo, que em geral denota o ganho econômico operacional^[1].

Para o caso de destilação, as mais apuradas técnicas de simulação conhecidas hoje são as baseadas em modelos rigorosos que calculam a coluna "prato a prato", incorporando, para cada um destes, um balanço de massa e outro de energia. Apesar de serem bastante precisos, estes métodos são de execução lenta, e se utilizados em processo de otimização, tornam-se muitas vezes inviáveis, devido ao grande número de vezes de execução da simulação, além de muitas vezes, apresentarem problemas de convergência.

Frente a esta desvantagem dos métodos rigorosos, os métodos

short-cut têm sido usados em sistemas de otimização on-line. Nestes métodos, a coluna é dividida em seções, resolvendo-se os balanços de massa e energia para estas, facilitando a solução e provendo uma solução rápida e de boa precisão para a coluna de destilação.

Define-se a otimização on-line da seguinte forma : nível do controle hierárquico, onde as decisões gerenciais são integradas à operação da unidade. Esta ligação de efeitos econômicos e de processo constitui-se em uma poderosa ferramenta para maximização do lucro operacional.

A seguir passamos a descrever alguns aspectos importantes quanto à otimização e à otimização on-line de processos químicos.

A estrutura de um sistema de otimização on-line é constituída dos seguintes componentes (Figura 2.1) :

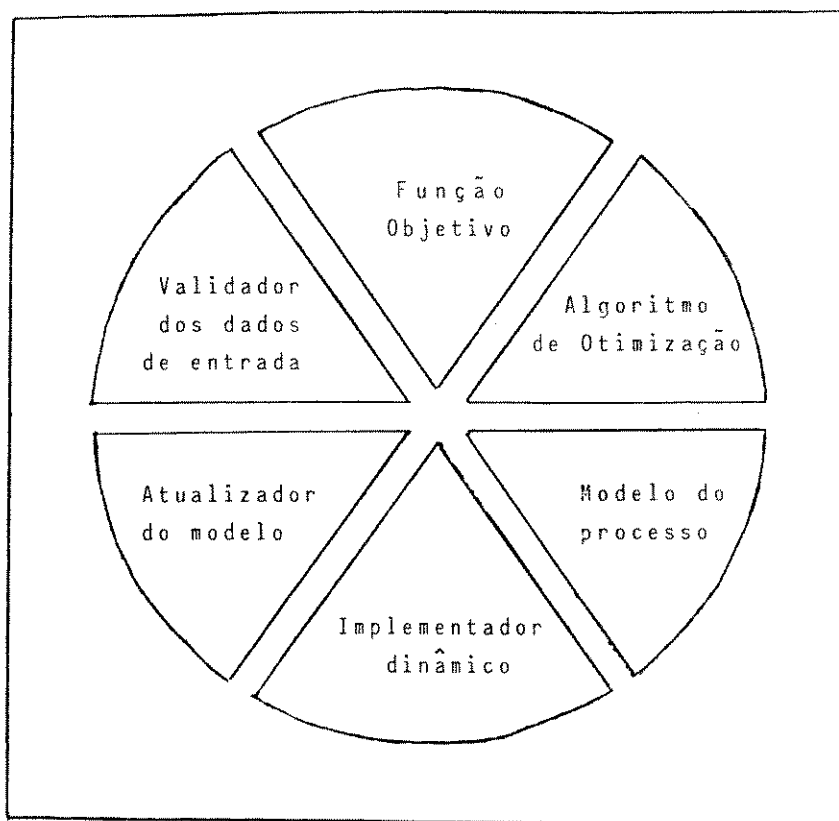


Figura 2.1 - Estrutura de um Otimizador On-Line

Modelo do processo

Conjunto de equações matemáticas que relacionam as variáveis controladas (dependentes) de operação com as variáveis manipuladas (independentes). Estas variáveis independentes são, muitas vezes, "set-points" de controladores. Assim por exemplo, frente a uma perturbação no processo, a resolução das equações do modelo devolverá os novos "set-points" dos controladores. Juntamente às equações do modelo do processo (programa), são colocadas as restrições operacionais e de produto.

Função objetivo

Função matemática que reflete os efeitos econômicos da operação de um determinado processo, sendo função de variáveis dependentes e independentes do processo. Esta função deve ser maximizada ou minimizada (conforme seu tipo), sempre que houver mudanças nas variáveis independentes (perturbações). É a função que representa o modelo econômico do processo. Para problemas de otimização on-line, a função objetivo é limitada aos efeitos das mudanças das variáveis operacionais e não dos custos fixos.

Exemplo :

$$F.O. = [\text{valor dos produtos}] - [\text{custo da carga}] - [\text{custos de utilidades}] + [\text{outras variáveis de efeito econômico}]$$

Algoritmo de otimização

Algoritmo que se utiliza do modelo do processo e da função objetivo, executando a interação entre estes para a resolução do problema. Deve ser escolhido de forma apropriada à natureza do problema, devendo ser robusto e sempre permitir uma solução possí-

vel.

Validador dos dados de entrada

Avalia os dados de entrada, identificando os erros possíveis e reconciliando outros dados, reduzindo desta forma os erros e provendo dados precisos ao otimizador.

Implementador dinâmico

Implementa a resposta obtida pelo algoritmo ao processo, de forma efetiva, checando e garantindo a resposta para as condições do processo.

Atualizador do modelo

Sendo o modelo matemático do processo uma aproximação do comportamento real, conforme se mudem as condições do processo, os coeficientes do modelo devem ser revisados, podendo algumas destas mudanças serem feitas automaticamente e outras manualmente.

No trabalho em questão, não se deu ênfase ao validador dos dados de entrada, ao implementador dinâmico e ao atualizador do modelo, por demandarem um estudo longo à parte, tendo-se limitado este trabalho ao funcionamento do simulador de processo e do algoritmo otimizador.

2.1 - A otimização na hierarquia dos sistemas de controle

Conforme definida anteriormente, a otimização on-line é o nível do controle hierárquico, onde as decisões gerenciais são implementadas ao processo.

A Figura 2.2 mostra o otimizador como sendo um nível superior

do controle hierárquico, de forma que as decisões de processo baseadas em condições econômicas sejam diretamente colocadas neste.

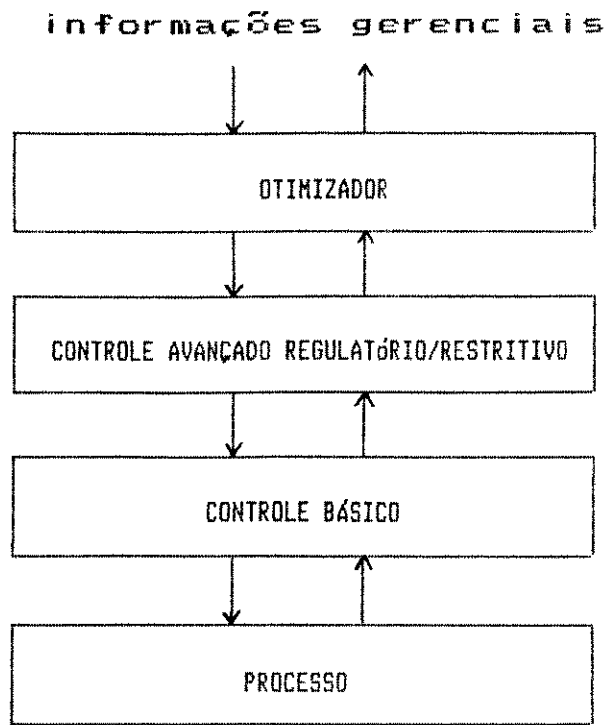


Figura 2.2 - Hierarquia da Otimização On-Line

Na sequência seguem os outros níveis hierárquicos do controle digital do processo, o controle avançado e o básico (PID), este diretamente ligado ao processo.

Dentro da hierarquia de controle, pode-se também adaptar o otimizador diretamente ao controle básico, dispensando-se assim o controle avançado.

Desta forma, o otimizador automatiza o trabalho dos engenheiros e operadores de uma planta, ajustando-a às condições ótimas, sempre que houver uma variação da perturbação do processo, sem demandar o trabalho de cálculos, informações e ajustes no processo. Darby e White^[13] discutem os ganhos, os tipos e as restrições da otimização on-line, dando exemplos da aplicação desta técnica a

alguns processos.

2.2 - O problema da otimização on-line

Na engenharia, economia e nas ciências físicas, o analista está sempre voltado ao problema da otimização de arranjo de equipamentos, circuitos ou processos. Sempre se deseja minimizar ou maximizar alguma função, denominada função objetivo, representando custo, peso, distância, etc.

Para os processos químicos industriais, o objetivo operacional principal é se atingir o melhor desempenho econômico, desempenho este que deverá ser atingido levando-se em conta a qualidade do produto e a segurança das condições operacionais.

É muitas vezes difícil se realizar o controle otimizado devido às perturbações que continuamente ocorrem no processo. Estas perturbações ocorrem em várias variáveis, afetando a operação do processo e em pontos onde não há ação de controle diretamente. A ação do controle é requerida para contornar estes efeitos. As perturbações não controladas podem estar associadas às cargas, condições ambientais, custos de combustível, energia e outros fatores econômicos.

As perturbações do tipo econômico variam com o tempo e são elas que irão ditar o modo de operação do processo. Como exemplo de tais perturbações, pode-se citar : mudança nas especificações de produto, maior demanda de energia, alterações de preço comercial dos produtos, etc.

Como ilustração de um problema de otimização, consideremos um processo hipotético com duas variáveis independentes :

C - variável de controle,

P - variável perturbação,

onde o objetivo de se melhorar a eficiência do processo consiste

em se otimizar uma dada função da operação.

O modelo do processo aparece sob forma gráfica na Figura 2.3. As linhas de contorno no plano CP representam os valores da função L (a ser maximizada), sendo o máximo de L o valor de 100 em uma dada escala arbitrária.

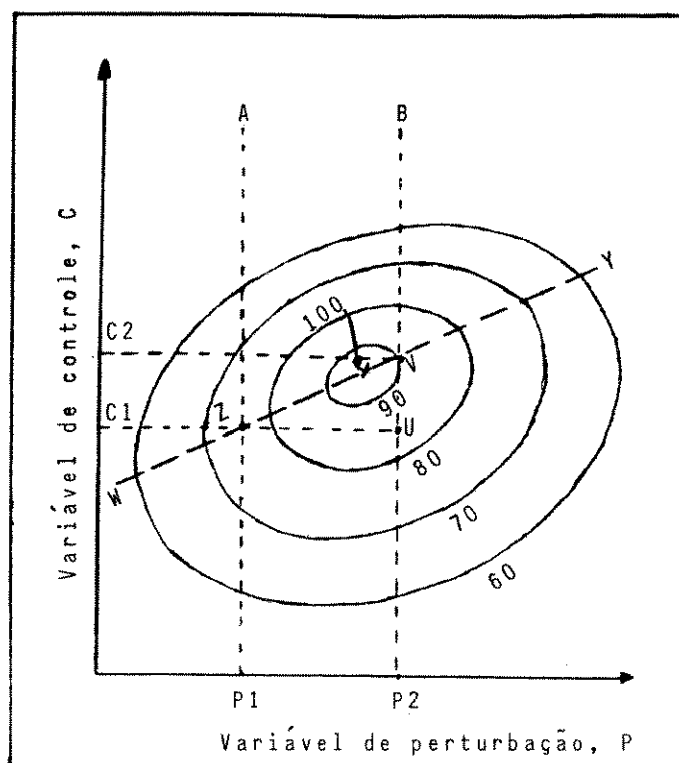


Figura 2.3 - Exemplo de problema de otimização

No instante t_1 a variável P tem o valor P_1 , significando que o processo opera em algum ponto da linha AP_1 , sendo o ponto de maior valor desta linha o ponto Z. Desta forma, tendo-se a finalidade de operar o processo na máxima condição de L, opera-se em C_1 .

Em outro instante t_2 , o valor da variável perturbação muda para P_2 . Se a perturbação for ignorada, não se alterando a variável de controle C, o processo passa a operar no ponto U. Entretanto, se for tomada a ação de otimização, a variável C deverá ser deslocada ao valor C_2 , maximizando-se L (ponto V). A diferença en-

tre os pontos U e V é que justifica economicamente o recurso à otimização.

A linha WZVY é a correspondente ao locus dos pontos ótimos para uma dada faixa da entrada P.

Em geral os processos são afetados por perturbações de vários tipos, que requerem manipulação de diversas variáveis de controle, complicando desta forma o problema de otimização. As falhas e não detecção de mudanças, assim como inabilidade e imprecisão na determinação da ação de controle para atingir os pontos ótimos é que produzem um desempenho inferior do processo, em relação ao controle ótimo. Como mostra a Figura 2.4, podem distinguir-se diversos níveis de ação de otimização num processo, conforme o desempenho alcançado :

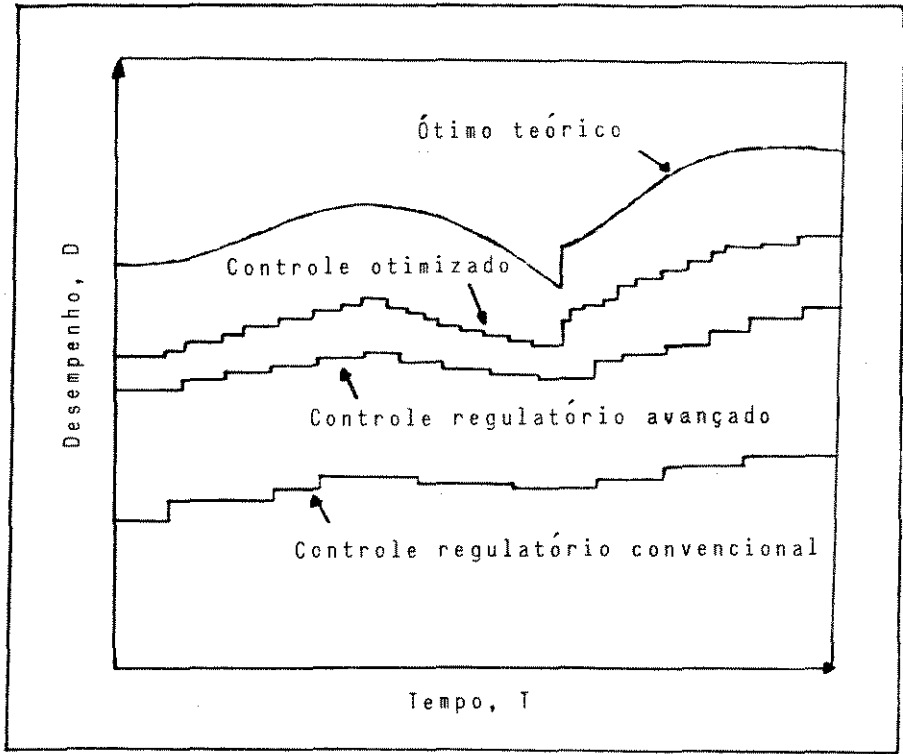


Figura 2.4 - Desempenho dos tipos de controle no processo

- 1 - Ótimo teórico - varia com o tempo devido a variações graduais e abruptas das perturbações.
- 2 - Controle otimizado - acompanha aproximadamente o controle teórico.
- 3 - Controle regulatório avançado - reajustes dos ganhos relativamente frequentes e controle bastante adequado.
- 4 - Controle regulatório convencional - reajustes dos ganhos pouco frequentes ou inadequados.

As áreas abaixo de cada uma das curvas da Figura 2.4, conforme comentado por Rogers J.A.^[23], representam o incentivo ao próximo nível de controle.

Assim, existem muitos incentivos à otimização de plantas utilizando-se modelos econômicos do processo; porém, para se conseguir tais objetivos, deve-se dispor de medidas e modelos precisos do processo^[23].

Realização do problema de otimização

A fim de se tornar possível a realização da otimização de uma planta, alguns requisitos são necessários :

- Análise do processo, definindo-se as variáveis mais importantes do ponto de vista econômico;
- Definição da função objetivo ou critério de desempenho, como uma função matemática, descrevendo custos associados ao fluxo material, de energia e à operação;
- Desenvolvimento do modelo matemático do processo relacionando as variáveis entrada-saída em estado-estacionário, assim como as restrições relativas ao proces-

so (operação e equipamentos) e as condições de mercado (especificação dos produtos).

2.3 - Técnicas de otimização

A maioria dos problemas de otimização tem diversas soluções e alguns podem até ter um número infinito de soluções. A proposta da otimização é a de achar a melhor solução dentre as possíveis, resolvendo o modelo do processo (equações) em conjunto com a função objetivo.

Existem vários tipos de técnicas de otimização^[9] empregadas para a otimização em estado estacionário. Fazemos a seguir uma breve citação de alguns deles.

a) Programação linear

É a técnica utilizada para simultaneamente otimizar um certo número de variáveis independentes, quando existem restrições a serem obedecidas e as relações entre as variáveis são lineares.

b) Métodos diretos

Utilizados para modelos e funções objetivo lineares ou não lineares, calculando a função objetivo diretamente, não necessitando do cálculo de derivadas. Entre os quais são citados, o método de Hooke-Jeeves, os de pesquisa paralela aos eixos coordenados e os geométricos, sendo exemplos deste último, os métodos simplex e Complex.

c) Métodos gradiente

Utilizados para modelos e funções objetivo lineares e não lineares, apresentando cálculo de derivadas para convergência. Como exemplo citamos os métodos de Newton-Raphson e dos multiplicadores de Lagrange.

d) Evolução Operacional (EVOP)

é utilizada quando não se dispõe de um modelo matemático do processo, mas a função objetivo pode ser diretamente medida.

Para problemas mais simples, os métodos usando derivadas analíticas dão uma boa solução para a região de topo da curva, provendo uma solução elegante para a implementação on-line

2.4 - Os benefícios da otimização on-line^[4]

Os benefícios da otimização on-line do estado estacionário devem vir de melhorias na planta e no desempenho gerencial. As fontes de ganho variam de processo para processo, mas em geral vem de maiores rendimentos de produtos de alto valor comercial, redução no consumo de energia, de insumos e de mão de obra e aumento das taxas de processamento através do aumento da capacidade nos equipamentos existentes ou campanhas de operação mais longas.

De acordo com Latour ^[4], a otimização também pode influenciar na redução de outros custos operacionais tais como manutenção e uso de equipamento.

Os benefícios de engenharia vem de melhor resolução dos problemas de processo e em se efetuar mais rápida e precisamente as decisões relativas a ele. Há ainda os benefícios quanto ao projeto de processo de novas unidades : o conhecimento adquirido da otimização por computador traz uma orientação no sentido do dimensionamento de novos equipamentos e estimativa do fator de capacidade operacional. Se a otimização on-line pode aumentar a capacidade de processamento, então uma nova planta a ser projetada que contempla a otimização on-line, poderá ser menor, com equipamentos menores,

para processar a mesma capacidade.

A Tabela 2.1 contém os principais benefícios advindos da otimização on-line :

Tabela 2.1 - Benefícios da otimização on-line em estado-estacionário
• Melhoria dos rendimentos dos produtos • Menores consumos de energia • Aumento da capacidade dos equipamentos e tempo de campanha • Menores custos de manutenção • Engenheiros e operadores mais eficientes • Influência no dimensionamento de novas unidades

CAPÍTULO 3 - MODELAGEM E SIMULAÇÃO ESTATICA DA COLUNA DEBUTANIZADORA

3.1 - Dados de projeto e operação da coluna

A coluna debutanizadora em estudo separa duas correntes de alto valor comercial : GLP (gás liquefeito de petróleo) como produto de topo e gasolina (nafta craqueada) como produto de fundo. É uma coluna do tipo "simples", ou seja, apresenta uma única alimentação e duas retiradas, uma de topo e outra de fundo, as retiradas dos produtos mencionados.

A alimentação, constituída de uma mistura de hidrocarbonetos contendo moléculas com número de átomos de carbono na faixa de 2 a 12, é denominada nafta instabilizada e é oriunda da torre fracionadora principal, tendo passado intermediariamente por uma coluna deetanizadora, como foi visto atrás.

No topo, a coluna apresenta quatro trocadores, que condensam quase que totalmente o produto de topo. Uma pequena parte de gases leves (C_2 , H_2), retorna para outro ponto do processo. Diante da quantidade desprezível de gás não condensado, comparada com a quantidade do condensado, consideramos neste trabalho os condensadores como de condensação total. O fluido de resfriamento nestes trocadores é a água de resfriamento, fornecida pela Planta de Utilidades.

No fundo da coluna está um refulvedor, onde o fluido aquecedor é outra corrente da unidade denominada "borra", entrando no trocador de calor a aproximadamente 360 °C e saindo a 240 °C.

A coluna possui 31 pratos reais, e a alimentação é realizada no prato de nº 15, contado a partir do topo da coluna, sendo suas

bandejas do tipo perfuradas.

A coluna, acompanhando o projeto da unidade, foi projetada para duas cargas base :

I - Nafta instabilizada proveniente de gasóleo Baiano

II - Nafta instabilizada proveniente de gasóleo Abu-Dhabi

Cada um dos casos maximiza a recuperação de um dado produto. No caso I por se tratar de uma carga com maior concentração de leves (C_3 e C_4), é realizada a maximização de GLP e no caso II, por se tratar de uma carga com maior concentração de pesados, maximiza-se a gasolina, produto de fundo.

As Tabelas 3.1 e 3.2 mostram, respectivamente, as vazões mássicas e volumétricas de projeto da coluna para os dois casos anteriormente mencionados . A Figura 3.1 mostra a coluna debutanizadora com as correntes numeradas, indicando as Tabelas 3.3 e 3.4, as variáveis operacionais principais nas condições de projeto.

Tabela 3.1 - Vazões de carga e produtos (t/d)

	carga (t/d)	GLP(t/d)	Gasolina (t/d)
I	3881	1423	2458
II	3468	821	2647

Tabela 3.2 - Vazões de carga e produtos (m³/d)

	carga (m³/d)	GLP (m³/d)	Gasolina (m³/d)
I	5923	2564	3329
II	4961	1467	3498

Tabela 3.3 - Condições de projeto da nafta instabilizada, conforme numeração das linhas indicadas na Figura 3.1

CASO I - NAFTA INSTABILIZADA DE PETRÓLEO BAIANO

Nº da linha	fluido	% vapor.	vazão (t/d)	vazão (m³/d)	pressão (kgf/cm²)	temperatura (°C)	densidade (kg/m³)
1	N.I.	0	3881	5925	20,0	114,5	655
2	N.I.	32	3881	-	9,0	124,5	-
3	GLP	100	3757	6993	9,0	60,5	555
4	GLP	0	2333	4204	9,0	43,3	555
5	GLP	0	1424	2565	9,0	43,3	555
6	Gas.	0	2457	3329	9,8	174,4	738
7	Gas.	0	2457	3329	9,8	140,0	738
8	Gas.	0	6322	8967	9,8	159,4	705
9	Gas.	61	6322	8967	9,8	-	705
10	Borra	0	3750	4235	-	352,0	885
11	Borra	0	3750	4235	-	243,0	885
12	Água	0	15312	15312	-	27,0	1000
13	Água	0	15312	15312	-	42,0	1000

Calor refulvedor : $Q_B = 13.27 \text{ MW}$

Calor condensador : $Q_C = 15.33 \text{ MW}$

Tabela 3.4 - Condições de projeto da nafta instabilizada, conforme numeração das linhas indicadas na Figura 3.1

CASO II - NAFTA INSTABILIZADA DE PETRÓLEO ABU-DHABI

Nº da linha	fluido	% vapor.	vazão (t/d)	vazão (m³/d)	pressão (kgf/cm²)	temperatura (°C)	densidade (kg/m³)
1	N.I.	0	3468	4961	17,1	120,5	699
2	N.I.	32	3468	-	9,0	141,6	-
3	GLP	100	2657	4753	9,0	58,9	559
4	GLP	0	1836	3284	9,0	39,4	559
5	GLP	0	820	1467	9,0	39,4	559
6	Gas.	0	2648	3498	9,8	189,4	757
7	Gas.	0	2648	3498	9,8	149,4	757
8	Gas.	0	2866	3959	9,8	170,5	724
9	Gas.	61	2866	3959	9,8	-	724
10	Borra	0	3750	3551	-	363,0	1056
11	Borra	0	3750	3551	-	240,0	1056
12	Água	0	21096	21096	-	27,0	1000
13	Água	0	21096	21096	-	42,0	1000

Calor refulvedor : $Q_B = 10.84 \text{ MW}$

Calor condensador : $Q_C = 11.09 \text{ MW}$

O perfil de temperatura na coluna debutanizadora é diferente para cada um dos casos, e a vazão mássica de projeto também é diferente.

Atualmente as condições operacionais da coluna são um tanto diferentes das condições de projeto, em virtude especialmente do aumento de capacidade que a unidade de FCC sofreu nos últimos anos e também da qualidade das cargas processadas.

As condições de operação atuais se assemelham mais às condições do caso II de projeto (características da carga). A vazão volumétrica de operação tem chegado até a 8000 m³/d.

Apesar das vazões maiores, a coluna tem operado satisfatoriamente, enquadrando os produtos em suas especificações.

3.1.1 - Especificações dos produtos

As especificações do GLP e da gasolina para o mercado brasileiro estão mostradas nas Tabelas 3.5 e 3.6.

Estas especificações, porém, são para os produtos finais da unidade, que, após serem separados na coluna debutanizadora, são enviados às seções de tratamento posteriores.

As especificações dos produtos a serem obtidas na coluna debutanizadora, são apenas :

GLP - intemperismo : 2,0 °C (máx.)

Gasolina - pressão de vapor a 37,8 °C : 0,7 kgf/cm² (máx.)

Tabela 3.5 - ESPECIFICAÇÕES DO GÁS LIQUEFEITO DE PETRÓLEO (GLP)
PARA O MERCADO NACIONAL

	GLP
Pressão de vapor a 37,8 °C (kgf/cm²)	15,0 (máx.)
Ponto de ebulição(°C) 95 % evaporados (vol.) (760 mmHg)	2,0 (máx.)
Intemperismo	

Tabela 3.6 - ESPECIFICAÇÕES DA GASOLINA PARA O MERCADO NACIONAL

	GASOLINA
Pressão de vapor a 37,8 °C (kgf/cm²)	0,7 (máx.)
Ponto de ebulição(°C) 10 % evaporados (vol.) (760 mmHg)	70,0 (máx.)
Ponto de ebulição(°C) 50 % evaporados (vol.) (760 mmHg)	140,0 (máx.)
Ponto de ebulição(°C) 100 % evaporados (vol.) (760 mmHg)	220,0 (máx.)

As análises do GLP e da gasolina são feitas rapidamente com o objetivo de se poder agir convenientemente no sentido de se manter suas especificações. A pressão de vapor da gasolina é medida indiretamente através de um método analítico denominado Pressão de vapor REID, que pode ser correlacionado com a pressão de vapor verdadeira.

No programa de simulação, calculamos a pressão de vapor verdadeira diretamente, pois estamos lidando com uma mistura de composição conhecida e o cálculo desta se torna mais fácil que o da pressão de vapor REID.

A seguir passamos às definições e objetivos dos métodos de intemperismo, pressão de vapor e pressão de vapor REID.

a. Intemperismo :

O intemperismo é definido como sendo a temperatura na qual 95 % do produto, GLP, estão vaporizados à pressão atmosférica.

O ensaio de intemperismo, descrito na norma ASTM D 1837-86^[14] e MB-285/1970 da ABNT^[15], tem por objetivo controlar a vaporização do GLP nas condições atmosféricas, controlando indiretamente o teor de hidrocarbonetos mais pesados que o butano (C_4+) presentes no GLP. Isto se deve à necessidade de se ter um produto de fácil vaporização à pressão ambiente.

O butano é o hidrocarboneto parafínico mais pesado que existe teoricamente no GLP, apresentando este, um ponto normal de ebulição em torno de 0 °C. Fixa-se 2 °C como valor máximo do intemperismo, tendo em vista a presença relativamente reduzida de hidrocarbonetos com ponto de ebulição superior a 2 °C (C_4+).

b. Pressão de vapor :

Pressão de vapor de uma substância é a pressão em que a uma dada temperatura, se inicia a vaporização dessa substância. Ou ainda, é a pressão que deve ser exercida sobre o líquido para se evitar sua vaporização a uma dada temperatura.

Em se tratando de uma mistura de componentes puros, e considerando-se comportamento ideal da mesma (lei de Raoult), pode-se calcular a pressão de vapor da mistura por :

$$P^v_m = \sum_i x_i * P^v_i \quad i=1,2,\dots,n$$

x_i --> fração molar.

P^v_i --> pressão de vapor do componente puro.

A pressão de vapor é aditiva em base molar.

c. Pressão de vapor REID :

Pressão de vapor REID é a pressão obtida através de um ensaio, onde se mede a pressão no interior de um cilindro no qual se mantém a relação entre as quantidades voluméticas de vapor e de líquido em 4 (V/L=4) à temperatura de 37,8 °C (100 °F)

O ensaio de pressão de vapor REID na gasolina tem a finalidade de limitar a quantidade de produtos leves nesta por questões de segurança, limitar perdas por evaporação e evitar a formação excessiva de bolhas no fluxo de gasolina para os carburadores dos veículos, que levam à ocorrência de tamponamento.

3.2 - Modelo simplificado da coluna : o modelo de Smith-Brinkley

As técnicas mais precisas de simulação de processos de destilação são aquelas baseadas em métodos rigorosos de cálculo de balanços de massa e energia em cada um dos pratos da coluna.

Embora bastante precisas, estas técnicas requerem tempos relativamente elevados de cálculo em computador, também muitas vezes apresentando dificuldades na convergência. Devido à necessidade de se executar a simulação diversas vezes em uma otimização, o tempo total de otimização será elevado e normalmente proibitivo para a otimização on-line.

Desta forma, em se tratando de otimização on-line, é conveniente a opção por um método mais rápido de simulação afim de se ter a otimização para uma mudança no processo efetuada mais rapidamente. Uma redução no tempo requerida para simular a coluna de destilação significará uma redução considerável no tempo de solução do problema global de otimização.

Definem-se métodos short-cut como métodos rápidos de resolução de processos de separação, que fornecem uma solução bastante aproximada em relação aos métodos rigorosos.

O método de Smith-Brinkley é um método short-cut aplicável a todos os processos de separação por estágios. É baseado em um conjunto de equações que predizem a recuperação de componentes individuais nas correntes de topo e fundo. Aqui é feita apenas uma breve descrição do método, com apresentação das equações finais usadas na simulação. No Anexo A.1 é feita a dedução mais detalhada das equações para o caso destilação.

O método foi inicialmente desenvolvido para uma coluna de ex-

tração com três alimentações, incluindo solvente e também refluxos das correntes de refinado e extrato.

Para um processo de destilação simples, o método apresenta maior simplicidade.

A destilação é um processo físico de separação onde ocorre transferência de massa entre as fases líquido e vapor, em ambas as direções. O líquido que desce internamente à coluna contém componentes com pontos de ebulição mais baixos do que os da fase vapor ascendente. Os componentes mais leves da fase líquida tendem a passar para a fase vapor e os componentes mais pesados da fase vapor tendem a passar para a fase líquida. Enquanto um componente mais pesado do vapor condensa, um mais leve no líquido imediatamente utiliza o calor da condensação do primeiro para se vaporizar.

O calor liberado na condensação de um componente pesado não pode elevar muito a temperatura do líquido, pois um pequeno aumento nesta já provoca a evaporação de alguns componentes da fase líquida. Assim o calor despendido na condensação será destinado à evaporação de componentes do líquido e não na cessão de calor sensível.

Passando as fases em contracorrente, de estágio a estágio, em cada estágio as concentrações dos componentes em cada fase vão se alterando e se ajustando, conforme aos coeficientes de distribuição de equilíbrio de fases, K . A energia requerida por uma molécula para passar da fase líquida para a fase vapor é suprida por outra molécula condensando-se, sendo desta forma feita a transferência de massa em ambos os sentidos.

No cálculo do método de Smith-Brinkley, a coluna de destilação é dividida em duas seções, separadas pelo prato de alimenta-

ção, tendo-se assim uma seção superior e outra inferior. As condições físicas dos componentes em cada uma das seções são consideradas uniformes, isto é, são assumidas vazões molares de líquido e vapor constantes na seção.

Os coeficientes de distribuição de fases também são considerados constantes na seção, sendo os da seção superior, ou de retificação, calculados na temperatura média aritmética entre a temperatura de topo e uma temperatura de iteração do método e os da seção inferior na média entre a temperatura de fundo e a temperatura de iteração.

Com a coluna dividida em duas seções, conforme mostra a Figura 3.2, e utilizando-se cálculo às diferenças finitas, é calculada a concentração de um dado componente em relação ao estágio dentro de uma seção da coluna.

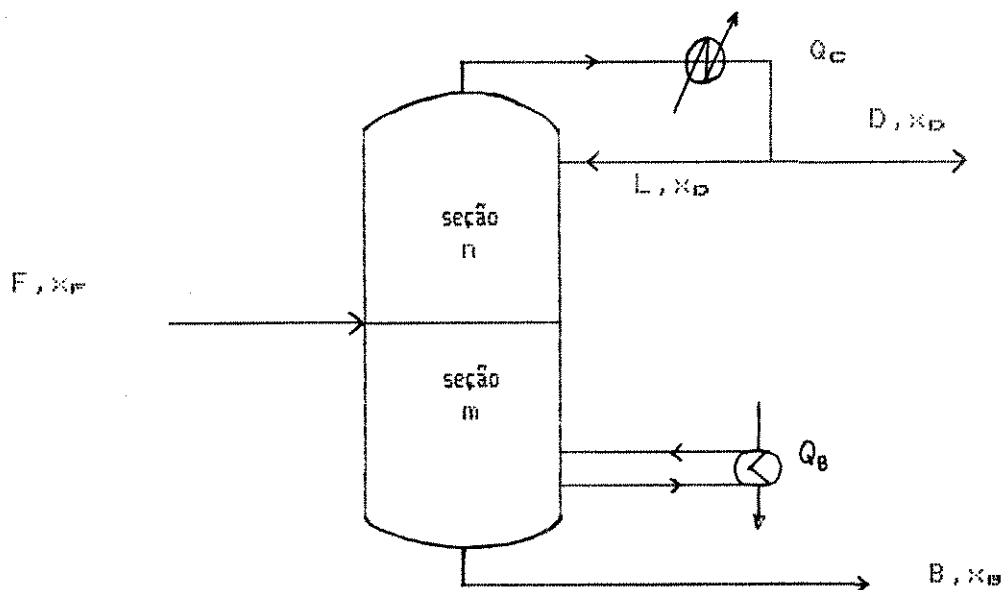


Figura 3.2 - Coluna debutanizadora - divisão em duas seções para o método de Smith-Brinkley

São montadas duas equações (para cada componente), uma para cada seção da coluna, sendo posteriormente combinadas através de um balanço mássico em torno do prato de alimentação, resultando em uma única equação, por componente, para a coluna inteira.

A equação (para cada componente), que dá a solução do método para a coluna é a seguinte :

$$f_i = \frac{(1-S_{n,i}^{N-M}) + R * (1 - S_{n,i})}{(1-S_{n,i}^{N-M}) + R * (1 - S_{n,i}) + h * S_{n,i}^{N-M} * (1 - S_{m,i}^{M+1})} \quad (3.1)$$

(i = 1, ..., n)

onde :

$$f_i = \frac{B * x_{B,i}}{F * x_{F,i}} \quad ==> \text{fração de componente de fundo recuperada} \quad (3.2)$$

$$S_{n,i} = K_{n,i} * \frac{V}{L} \quad ==> \text{fator de stripping para seção de retificação} \quad (3.3)$$

$K_{n,i}$ ==> coeficiente de equilíbrio líquido-vapor do componente i para a seção n, calculado a:

$$T_n = \frac{T_D + T_F}{2}$$

T_D --> temperatura de topo da coluna

$$S_{m,i} = K_{m,i} * \frac{V}{L} \quad ==> \text{fator de stripping para seção de esgotamento} \quad (3.4)$$

T_F --> temperatura de iteração na coluna

$K_{m,i}$ ==> coeficiente de equilíbrio líquido-vapor do componente i para a seção m, calculado a:

$$T_m = \frac{T_p + T_b}{2}$$

T_b --> temperatura de fundo da coluna

$$h_1 = \frac{K'_1}{K_1} * \frac{L}{L'} * \frac{1 - S_{n1}}{1 - S_{m1}} \quad ==> \text{para carga similar à fase líquida} \quad (3.5)$$

$$h_1 = \frac{L}{L'} * \frac{1 - S_{n1}}{1 - S_{m1}} \quad ==> \text{para carga similar à fase vapor} \quad (3.6)$$

Na aplicação do método short-cut, quando se simula uma coluna existente, em geral são conhecidas as seguintes especificações :

- Vazão de carga;
- Temperatura de carga;
- Pressão de carga;
- Número total de estágios;
- Número de estágios da seção de esgotamento;
- Razão de refluxo;
- Vazão de destilado ou produto de fundo;

Com as especificações da razão de refluxo, vazão de destilado ou produto de fundo e as variáveis de carga (composição, temperatura e pressão), pode-se calcular as vazões de líquido e vapor em ambas as seções da coluna.

O próximo passo é a determinação dos fatores de Stripping S_n e S_m , que dependem da estimativa dos valores individuais dos coeficientes de distribuição de fases, K .

Assumindo-se soluções ideais para as fases líquida e vapor, os valores de K serão função apenas da temperatura e pressão das seções.

Para a estimativa inicial das temperaturas de topo e fundo,

pode-se fazer uma divisão na corrente de carga, obtendo-se assim uma composição para o produto de topo e outra para o produto de fundo. Calcula-se o ponto de orvalho da corrente de topo e o ponto de bolha da corrente de fundo, sendo estas as temperaturas das correntes de topo e fundo respectivamente, para estimativa inicial.

A temperatura intermediária entre as seções, pode ser tomada, inicialmente, como a média entre as temperaturas de topo e fundo estimadas.

Uma vez que as vazões são mantidas constantes, iteração a iteração, o ajuste dos fatores de stripping é feito pela mudança nos valores de K, ou seja, pelas temperaturas. Sendo as temperaturas de topo e fundo fixadas pelo ponto de orvalho e bolha respectivamente, resta apenas uma temperatura a ser variada, a temperatura intermediária da coluna. Como mostra o diagrama de blocos do programa (Figura 3.3), a temperatura de iteração é ajustada até que a vazão de destilado e a razão de refluxo converjam para os valores corretos.

O método é aplicável a colunas de destilação com um condensador total, uma alimentação e um reboiler parcial ou injeção de calor no último estágio. No caso de condensador parcial, uma aproximação que se faz é se somar um ao número total de estágios da torre:

$$N_{t*} = N_t + 1$$

onde :

N_{t*} --> nº total de estágios com condensador parcial.

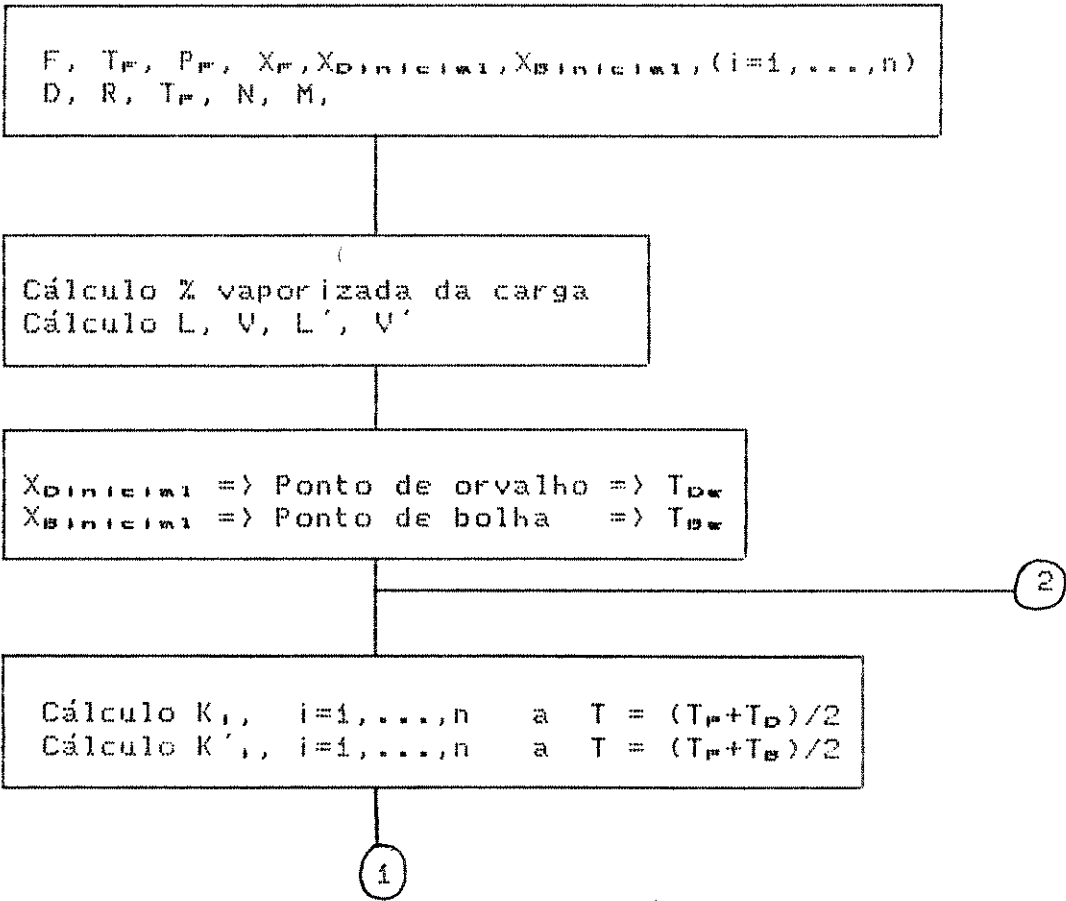
N_t --> nº total de estágios com condensador total.

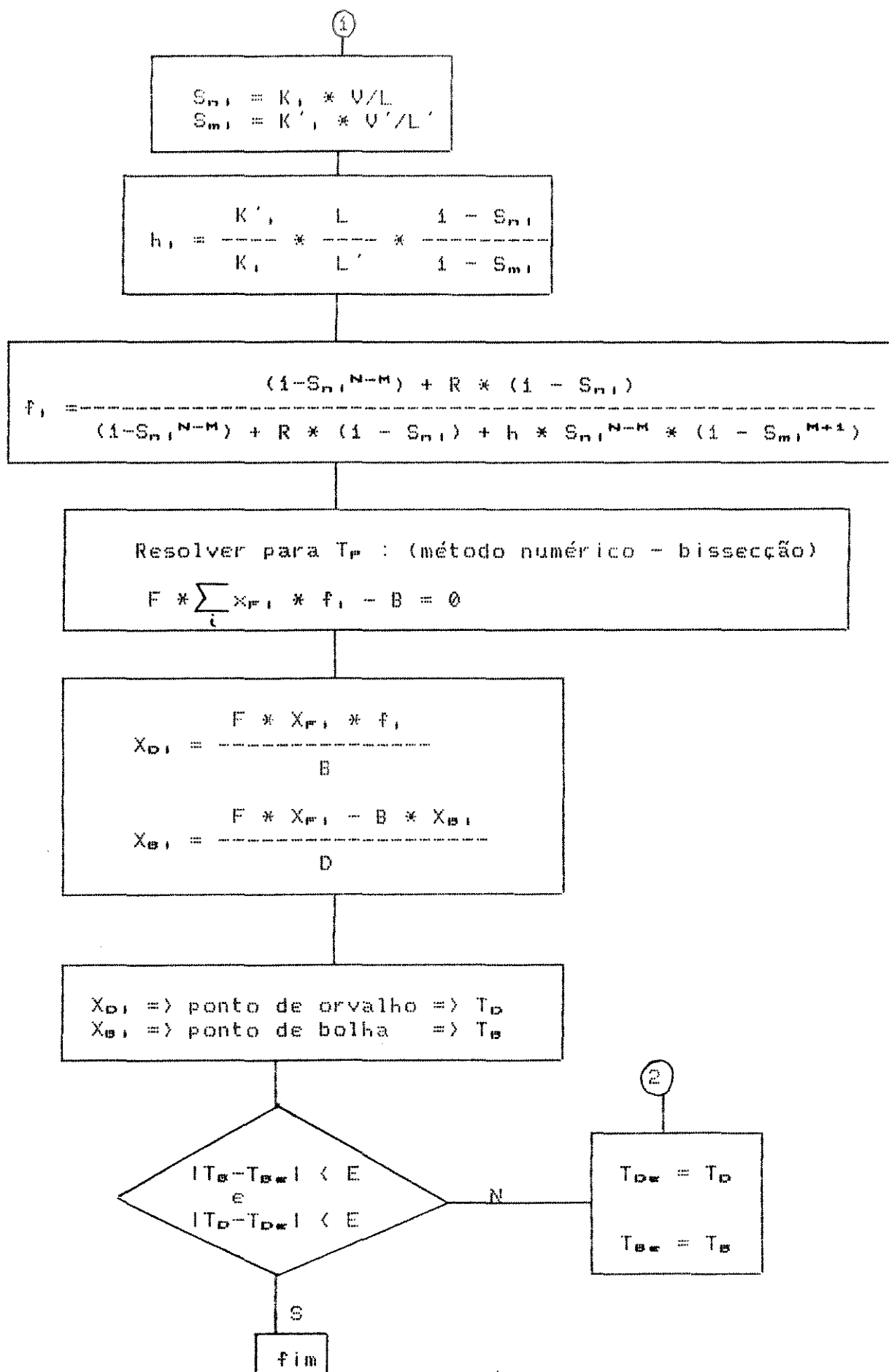
Este foi o método utilizado neste trabalho. Alguns autores têm apresentado modificações no método de Smith-Brinkley. Rosen-dorf, Kubicek e Schongut^[2] apresentam modificações em alguns pa-râmetros, resolvendo as equações para $f_{D,i}$:

$$f_{D,i} = \frac{D \cdot x_{D,i}}{F \cdot x_{F,i}} \qquad i = 1, 2, \dots, n$$

Fleischer e Pretti^[3] também apresentam algumas modificações no método original de Smith-Brinkley, propondo inclusive como mé-todo de convergência o método da secante.

Figura 3.3 – Fluxograma para simulação do método de Smith-Brinkley





3.2.1 - Comparação do método de Smith-Brinkley com um método rigoroso

A título de teste e verificação do programa de simulação confeccionado, foram feitos alguns estudos comparativos da simulação de uma coluna depropanizadora usando o método em questão e o método do simulador HYSIM¹¹³ (método rigoroso de cálculo).

Caso 1 - TORRE DEPROPANIZADORA

Alimentação :

Pressão : 19.8 kgf/cm²
Vazão : 1472.8 kmol/h
Temperatura : 74 °C
Razão de refluxo : 1.000
Eficiência global : 100 %
Nº total de estágios : 30
Nº estágios na zona de esgotamento : 14

Nome	Composição Molar
Eteno	0.0045
Etano	0.0650
Propeno	0.3646
Propano	0.1623
i-Butano	0.1086
n-Butano	0.0429
i-Buteno	0.0747
1-Buteno	0.0749
Trans 2 buteno	0.0616
Cis 2 buteno	0.0405
1,3 butadieno	0.0003

As Tabelas 3.7, 3.8 e 3.9 mostram os resultados obtidos por ambos os métodos :

Tabela 3.7 - Vazões e temperaturas calculadas

	SMITH-BRINKLEY	HYSIM
Temperatura de topo (°C)	48.9	49.7
Temperatura de fundo (°C)	111.4	105.4
Vazão de destilado (kmol/h)	1148.4	1148.5
Vazão de prod. fundo (kmol/h)	324.4	324.3

Tabela 3.8 - Composição molar dos produtos

Componente	SMITH-BRINKLEY		HYSIM	
	topo	fundo	topo	fundo
Eteno	0.005771	0.000000	0.005730	0.000000
Etano	0.083361	0.000000	0.083408	0.000000
Propeno	0.467589	0.000012	0.466675	0.002906
Propano	0.208134	0.000043	0.207255	0.003184
i-Butano	0.094035	0.160161	0.079183	0.213005
n-Butano	0.012189	0.151621	0.018951	0.127906
i-Buteno	0.054346	0.146756	0.049993	0.162345
1-Buteno	0.051593	0.157409	0.047206	0.172789
Trans 2 buteno	0.016275	0.222054	0.027125	0.183617
Cis 2 buteno	0.006527	0.160766	0.014287	0.133535
1,3 butadieno	0.000180	0.000725	0.000188	0.000713

Tabela 3.9 - Tempo de execução em microcomputador

	SMITH-BRINKLEY	HYSIM
Tempo de execução em computador (s) (AT SP-286)	15	125

Comparando-se os métodos, observa-se composições razoavelmente próximas entre os dois métodos, indicando boa aproximação do método short-cut. O tempo de execução utilizado de cálculo em computador mostrou boa vantagem do método short-cut, que é aproximadamente 8 vezes mais rápido, o que em um processo de otimização, pelo número elevado de execuções do método, levará a um tempo muito menor comparado à otimização com o método rigoroso.

Caso 2. Ainda para comparação do método de SMITH-BRINKLEY com o HYSIM, simulou-se uma carga de coluna debutanizadora obtida da simulação da UFCC no simulador HYSIM¹¹³.

Foram tomados do HYSIM os pseudo-componentes, classificados pelo ponto normal de ebulição. Com o auxílio do

Reid/Prausnitz¹³³, escolheram-se os compostos reais de ponto de ebulição normal mais próximos possíveis dos pseudo-componentes, obtendo-se assim, uma carga com 27 componentes.

Os resultados obtidos para os dois métodos são os constantes na tabela 3.10.

Tabela 3.10 - Composições molares e variáveis operacionais calculadas

=====						
		SMITH-BRINKLEY			HYSIM	

Nº	Composto	carga	topo	fundo	topo	fundo
=====						
1	H ₂ S	1.022300	1.048307	.000000	1.048600	.000000
2	Eteno	1.004100	1.008882	.000000	1.008700	.000000
3	Etano	1.030900	1.066937	.000000	1.066600	.000000
4	Propeno	1.132800	1.287678	.000000	1.287500	.000100
5	Propano	1.056700	1.122826	.000000	1.122700	.000100
6	Isobuteno	1.056800	1.122980	.000054	1.113300	.008400
7	N-butano	1.028500	1.061455	.000243	1.048700	.011200
8	Isobuteno	1.114700	1.248288	.000155	1.218600	.025600
9	1,3 butadieno	1.002400	1.005193	.000005	1.004500	.000600
10	Isopentano	1.103000	1.026057	.168975	1.069700	.131400
11	N-pentano	1.018300	1.000553	.033517	1.006400	.028600
12	3 M 1,2 butad.	1.045800	1.000410	.084720	1.003600	.082000
13	4M cis 2 penteno	1.052100	1.000001	.096772	1.000200	.096600
14	3M tr. 2 penteno	1.046700	1.000000	.086743	1.000000	.086600
15	Ciclohexeno	1.041500	1.000000	.077084	1.000000	.077000
16	Met.ciclo hexeno	1.038400	1.000000	.071326	1.000000	.071200
17	2,3 dimet hexano	1.031500	1.000000	.058510	1.000000	.058600
18	Etil ciclohexano	1.026700	1.000000	.049594	1.000000	.049600
19	Orto-xileno	1.028300	1.000000	.052566	1.000000	.052400
20	N-Prop.-benzeno	1.029900	1.000000	.050338	1.000000	.055500
21	Isobutil-benzeno	1.027100	1.000000	.050337	1.000000	.050400
22	Trans-decalina	1.020900	1.000000	.038821	1.000000	.038800
23	N-hex-ciclopent.	1.016100	1.000000	.029905	1.000000	.030000
24	N-dodecano	1.014500	1.000000	.026933	1.000000	.027000
25	1 Trideceno	1.008000	1.000000	.014860	1.000000	.014800
26	1 M Naftaleno	1.001600	1.000000	.002972	1.000000	.002900
27	N non. ciclopen- tano	1.000200	1.000000	.000371	1.000000	.000400

Pressão coluna		11.0 atm		11.0 atm		
Temp. topo		57.8 °C		62.3 °C		
Temp. condensador		29.2 °C		31.5 °C		
Temp. fundo		175.5 °C		178.9 °C		
Vazao carga		2490.0 kmol/h		2490.0 kmol/h		
Vazao destilado		1149.4 kmol/h		1149.2 kmol/h		
Vazão nafta		1340.6 kmol/h		1341.2 kmol/h		
Calor condensador		12.10 MW		11.93 MW		
Calor refeedor		8.70 MW		9.24 MW		
Intemperismo		1.9 °C		-		
=====						

Pedrosa Neto ^[11] executou a simulação da coluna debutanizadora no simulador HYSIM, e confrontou os dados obtidos da simulação, para várias eficiências, com alguns dados de laboratório e operacionais, e a conclusão a que se pôde chegar, foi uma eficiência global em torno de 75 %.

Neste trabalho, utilizou-se este dado de eficiência global obtido no trabalho acima citado. Desta forma a torre fica assim caracterizada:

Nº total de pratos teóricos : 22

Alimentação no prato nº : 12 (contado a partir do topo)

nº de pratos na zona de esgotamento : 10

3.3 - Carga utilizada para os estudos de simulação-otimização

Utilizou-se para os estudos posteriores de simulação-otimização da debutanizadora, como carga base uma nafta instabilizada cuja composição foi determinada por cromatografia gasosa. De aproximadamente 400 componentes observados na cromatografia, selecionaram-se os de maior composição, perfazendo-se assim 34 componentes.

A Tabela 3.11 mostra a composição desta carga base.

Tabela 3.11 - Composição molar da carga base - CARGA 1

	X_F		X_F
1 - ETANO	.0173	18 - 3-MET. CIS PENTENO 2	.3567
2 - ETENO	.0010	19 - 2-MET. HEXANO	.0060
3 - PROPANO	.0473	20 - 2-DIMET. HEXANO	.0034
4 - PROPENO	.1163	21 - MET. CICLOPENTANO	.0025
5 - N-BUTANO	.0225	22 - CICLOHEXANO	.1790
6 - ISOBUTANO	.0547	23 - METIL CICLOHEXANO	.0020
7 - ISOBUTENO	.0659	24 - 3 MET. HEPTANO	.0034
8 - 2-MET. 2-BUTENO	.0056	25 - 1-OCTENO	.0031
9 - CIS 2-BUTENO	.0214	26 - N-NONANO	.0013
10 - TRANS 2-BUTENO	.0305	27 - TOLUENO	.0090
11 - 1,3 BUTADIENO	.0005	28 - O-XILENO	.0045
12 - N-PENTANO	.0008	29 - P-XILENO	.0070
13 - ISOPENTANO	.0086	30 - ETILBENZENO	.0028
14 - 2-MET. PENTANO	.0027	31 - 1-MET. 3-ETILBENZENO	.0114
15 - 3-MET. PENTANO	.0015	32 - 1,2,3 TRIMET. BENZENO	.0020
16 - 2-MET. 2-PENTENO	.0019	33 - 1,2,4 TRIMET. BENZENO	.0039
17 - CICLOPENTENO	.0019	34 - NAFTALENO	.0015

Para se avaliar o efeito de variações na composição de carga da coluna debutanizadora, foram utilizadas variações da carga base da tabela 3.11, aumentando-se (Carga 2) e diminuindo-se (Carga 3) o teor de leves, da seguinte forma :

- Tomando-se um caso base de simulação da Carga 1 pelo método de Smith-Brinkley com valor para o intemperismo do GLP de 2 °C (Tabela 3.13), acrescentou-se 20 % do produto de topo na carga, tornando-a mais leve :

$$X_{F1} = \frac{F * X_F + 0.20 * D * X_D}{F + 0.20 * D} \quad ==> \text{CARGA 2}$$

Do mesmo modo, retirando-se 20 % do produto de topo, obtém-se uma carga mais pesada :

$$X_{F1} = \frac{F * X_F - 0.20 * D * X_D}{F - 0.20 * D} \quad ==> \text{CARGA 3}$$

A tabela 3.12 mostra as composições molares e densidades das três cargas. A tabela 3.13 mostra o caso base de simulação da Carga 1.

Tabela 3.12 - Composições molares e massa específica
Cargas 1,2 e 3

	CARGA 1	CARGA 2	CARGA 3
MASSA ESPECÍFICA (kg/m ³)	686.5	681.0	692.8
	X _w		
1 - ETANO	.0173	.0193	.0145
2 - ETENO	.0010	.0011	.0009
3 - PROPANO	.0473	.0527	.0410
4 - PROPENO	.1163	.1296	.1008
5 - N-BUTANO	.0225	.0251	.0195
6 - ISOBUTANO	.0547	.0609	.0474
7 - ISOBUTENO	.0659	.0734	.0571
8 - 2-MET. 2-BUTENO	.0056	.0054	.0058
9 - CIS 2-BUTENO	.0214	.0238	.0185
10 - TRANS 2-BUTENO	.0305	.0339	.0264
11 - 1,3 BUTADIENO	.0005	.0005	.0004
12 - N-PENTANO	.0008	.0008	.0008
13 - ISOPENTANO	.0086	.0089	.0081
14 - 2-MET. PENTANO	.0027	.0025	.0029
15 - 3-MET. PENTANO	.0015	.0014	.0016
16 - 2-MET. 2-PENTENO	.0019	.0017	.0025
17 - CICLOPENTENO	.0019	.0018	.0021
18 - 3-MET. CIS PENTENO 2	.3567	.3312	.3864
19 - 2-MET. HEXANO	.0060	.0056	.0065
20 - 2-DIMET. HEXANO	.0034	.0032	.0037
21 - MET. CICLOPENTANO	.0025	.0023	.0027
22 - CICLOHEXANO	.1790	.1662	.1939
23 - METIL CICLOHEXANO	.0020	.0018	.0022
24 - 3 MET. HEPTANO	.0034	.0032	.0037
25 - 1-OCTENO	.0031	.0029	.0033
26 - N-NONANO	.0013	.0012	.0015
27 - TOLUENO	.0090	.0083	.0097
28 - O-XILENO	.0045	.0042	.0049
29 - P-XILENO	.0070	.0065	.0076
30 - ETILBENZENO	.0028	.0026	.0030
31 - 1-MET. 3-ETILBENZENO	.0114	.0106	.0123
32 - 1,2,3 TRIMET. BENZENO	.0020	.0019	.0022
33 - 1,2,4 TRIMET. BENZENO	.0039	.0036	.0042
34 - NAFTALENO	.0015	.0014	.0016

Tabela 3.13 - Simulação da Carga 1 pelo método de Smith-Brinkley
para intemperismo = 2 °C

	X _F	X _D	X _B
1 - ETANO	.0173	.0450	.0000
2 - ETENO	.0010	.0026	.0000
3 - PROPANO	.0473	.1230	.0000
4 - PROPENO	.1163	.3025	.0000
5 - N-BUTANO	.0225	.0585	.0000
6 - ISOBUTANO	.0547	.1423	.0000
7 - ISOBUTENO	.0659	.1714	.0000
8 - 2-MET. 2-BUTENO	.0056	.0033	.0070
9 - CIS 2-BUTENO	.0214	.0556	.0000
10 - TRANS 2-BUTENO	.0305	.0793	.0000
11 - 1,3 BUTADIENO	.0005	.0013	.0000
12 - N-PENTANO	.0008	.0006	.0009
13 - ISOPENTANO	.0086	.0141	.0051
14 - 2-MET. PENTANO	.0027	.0000	.0044
15 - 3-MET. PENTANO	.0015	.0000	.0024
16 - 2-MET. 2-PENTENO	.0019	.0000	.0031
17 - CICLOPENTENO	.0019	.0000	.0030
18 - 3-MET. CIS PENTENO 2	.3567	.0000	.5794
19 - 2-MET. HEXANO	.0060	.0000	.0097
20 - 2-DIMET. HEXANO	.0034	.0000	.0055
21 - MET. CICLOPENTANO	.0025	.0000	.0041
22 - CICLOHEXANO	.1790	.0000	.2908
23 - METIL CICLOHEXANO	.0020	.0000	.0032
24 - 3 MET. HEPTANO	.0034	.0000	.0055
25 - 1-OCTENO	.0031	.0000	.0050
26 - N-NONANO	.0013	.0000	.0021
27 - TOLUENO	.0090	.0000	.0146
28 - O-XILENO	.0045	.0000	.0073
29 - P-XILENO	.0070	.0000	.0114
30 - ETILBENZENO	.0028	.0000	.0045
31 - 1-MET. 3-ETILBENZENO	.0114	.0000	.0185
32 - 1,2,3 TRIMET. BENZENO	.0020	.0000	.0032
33 - 1,2,4 TRIMET. BENZENO	.0039	.0000	.0063
34 - NAFTALENO	.0015	.0000	.0024

3.4 - Restrições à operação da coluna

A coluna debutanizadora deve operar de modo a se obter enquadrados o intemperismo do GLP e a pressão de vapor da nafta.

A operação da coluna tem mostrado que a pressão de vapor da gasolina sempre se enquadra, quando o GLP é enquadrado com intemperismo 2 °C. Desta forma, enquadrando-se o intemperismo do GLP, a pressão de vapor da nafta já é enquadrada.

3.4.1- A restrição intemperismo na coluna debutanizadora

Sendo a restrição que assegura a qualidade do GLP, o intemperismo é enquadrado na coluna debutanizadora.

A variável intemperismo é função da composição de pesados no GLP, principalmente os da faixa de C_{6+} . Assim só se obtém o valor do intemperismo na simulação, quando se calcula as composições das correntes de produto, sendo portanto necessária uma simulação completa a fim de se obter seu valor.

Analizou-se o efeito, separadamente, da razão de refluxo e da retirada de topo sobre o valor do intemperismo, e se constatou que a razão de refluxo apresenta pouca influência no intemperismo na faixa de operação da coluna : $1,0 < R < 2,3$. A variação de R nesta faixa, varia o valor do intemperismo para vazão de destilado constante, de aproximadamente, $0,4^{\circ}\text{C}$.

A retirada de topo, ao contrário da razão de refluxo, apresenta uma influência bastante acentuada no intemperismo (por aumentar ou diminuir o teor de pesados no GLP), sendo assim escolhida na simulação como variável de ajuste do intemperismo. Obviamente, o aumento da vazão de retirada de topo é conseguido às custas de maior calor fornecido ao refeedor.

Em cada vez que o algoritmo de otimização interage com a simulação, esta retorna à otimização, o valor da variável D, retirada de topo, cujo valor fornece um intemperismo de 2°C (precisão $= \pm 0,2^{\circ}\text{C}$).

Para o cálculo do intemperismo através dos dados de composição, tentou-se utilizar dois métodos :

- 1 - Método dos flashes sucessivos
- 2 - Método de destilação em batelada

3.4.1.1 - Método dos flashes sucessivos

No método dos flashes sucessivos toma-se a composição do produto de topo da torre, colocando-a como carga para uma bateria de tambores de flash colocados em série. Ao ser parcialmente evaporada no primeiro tambor, a vazão de líquido deste será a carga do segundo e assim por diante, sendo a vazão de vapor de cada um dos estágios, lançada para a atmosfera. Têm-se em cada um deles uma percentagem de vaporização fixa e igual a $95/N_i$ (em relação à carga do primeiro estágio), onde N_i é o número de estágios de flash. A pressão é constante em cada estágio e igual à pressão atmosférica. Tendo-se a pressão, a composição e a percentagem vaporizada no estágio, calcula-se a temperatura. A temperatura do tambor, onde tem-se que 95 % da alimentação foram vaporizados, será o intemperismo.

Este método apresentou bons resultados; porém, foram necessários 50 estágios para se conseguir o valor final do intemperismo. Executando-se o programa de simulação da coluna debutanizadora (Smith-Brinkley), com o cálculo de intemperismo pelo método de estágios, contruiu-se os seguintes gráficos :

- Figura 3.4 - Variação do intemperismo com o número de estágios de cálculo.

- Figura 3.5 - Tempo de execução em computador (AT-486 25 MHz) versus número de estágios.

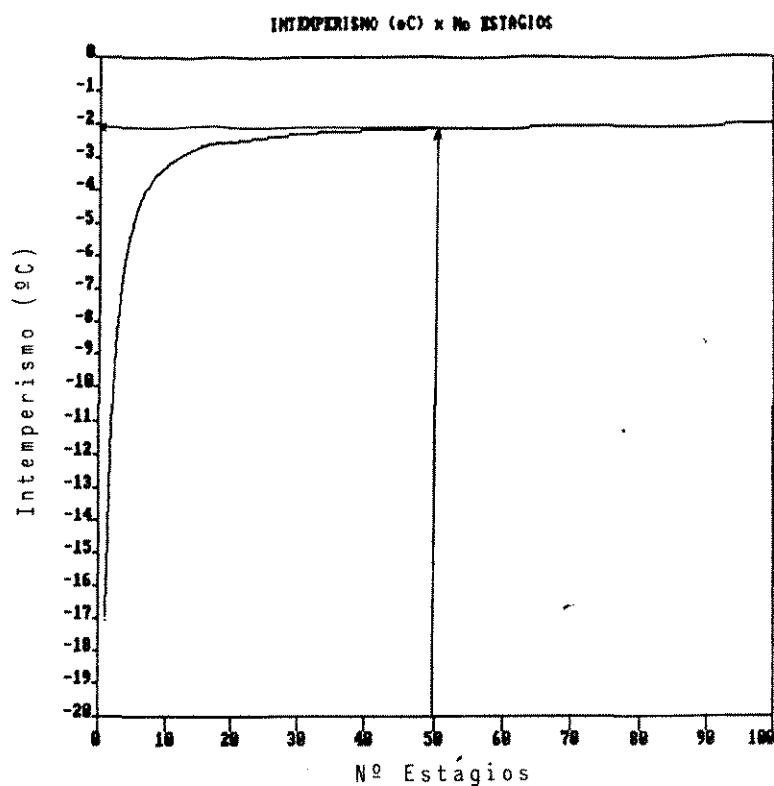


Figura 3.4 - Variação do intemperismo com o número de estágios de cálculo

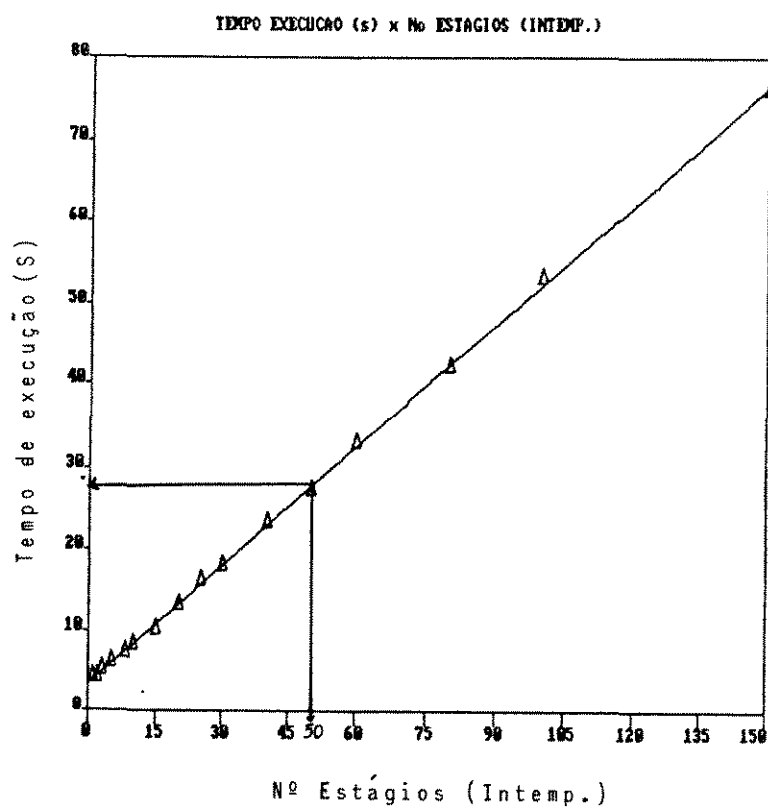


Figura 3.5 - Tempo de execução em computador (AT-486 25 MHz) versus número de estágios de cálculo do intemperismo

Pode-se concluir pelo gráfico 3.4, que somente a partir de 50 estágios é que se chega ao valor correto da variável intemperismo e pelo gráfico 3.5 observa-se que o tempo de execução do programa para um cálculo de intemperismo é de aproximadamente 28 segundos. Desta forma, o método se torna bastante lento quando utilizado na interação com o algoritmo de otimização, pelo número elevado de vezes de execução da rotina de simulação do método de Smith-Brinkley.

3.4.1.2 - Método de destilação em batelada

O método de destilação em batelada é o que representa melhor a realidade experimental do método. No ensaio experimental^[15], o GLP é colocado no interior de uma proveta graduada e permite-se que ele se evapore através de um pequeno furo no teto da proveta, medindo-se a temperatura para a qual 95 % do volume tenha se evaporado.

Simulou-se numericamente a destilação em batelada do GLP, fazendo-se a consideração de que a evaporação de GLP da proveta é proporcional ao número de moles presente nesta :

N_0 --> quantidade inicial de moles de produto

$$\frac{dN}{dt} = -k * N \quad (3.7)$$

$$N = N_0 * e^{-k * t} \quad (3.8)$$

$$\text{Beta} = k * t \quad (3.9)$$

$$N = N_0 * e^{-\text{Beta}} \quad (3.10)$$

É sabido que o experimento para determinação do intemperismo, é decorrido em um tempo aproximado de 30 minutos. Fazendo-se a aproximação :

$$\frac{N}{N_0} = \frac{V}{V_0} = \frac{5}{100} = 0.05$$

e resolvendo-se a equação (3.10) para $t = 0.5$ h, chega-se a $k = 6 \text{ h}^{-1}$.

O anexo A.3 mostra o desenvolvimento do cálculo do intemperismo pelo método de destilação em batelada, assim como o método de convergência pelo ajuste polinomial.

Durante a simulação para $Beta = 3$, o programa não apresentou convergência satisfatória, sendo necessária a redução deste para o valor de 0.001, colocando-se porém um acelerador, que dobra o valor de Beta a cada vinte passos de iteração, por se saber experimentalmente, e também por simulação que a vaporização do GLP é mais acentuada no início do processo, devido à quantidade de leves presentes neste, diminuindo com o tempo, conforme a evaporação destes leves.

Com estas implementações, o método de destilação em batelada para cálculo do intemperismo, exigiu cinco minutos de CPU apenas para se encontrar seu valor (AT-486, 25 MHz).

Comparou-se os resultados de intemperismo obtidos para a simulação, tanto por destilação em batelada como por flashes sucessivos, com os resultados operacionais da planta, chegando-se a resultados bastante próximos, como mostrado na Tabela 3.14 :

Tabela 3.14 - Comparação entre os métodos de cálculo de Intemperismo

composição molar		=====	
		INTEMPERISMO (°C)	
1 - ETANO	.0682	Experimental	3.1
2 - ETENO	.0092		
3 - PROPANO	.1396	Flashes	3.6
4 - PROPENO	.3113		
5 - N-BUTANO	.0501	Batelada	3.8
6 - ISOBUTANO	.1273	=====	
7 - ISOBUTENO	.0795		
8 - BUTENO-1	.0571		
9 - CIS 2-BUTENO	.0451		
10 - TRANS 2-BUTENO	.0645		
11 - 1,3 BUTADIENO	.0016		
12 - N-PENTANO	.0022		
13 - ISOPENTANO	.0107		
14 - 2-MET. PENTANO	.0033		
15 - H ₂ S	.0015		

A vantagem do método de cálculo por simulação de destilação em batelada, frente ao de flashes sucessivos, é o tempo de cálculo, aproximadamente 5 vezes menor que o do método de flashes sucessivos, sendo por esta causa o escolhido.

No programa de simulação, o ajuste de D para levar ao valor desejado foi feito através de um polinômio interpolador de segundo grau.

Para o ajuste do polinômio de segundo grau, calcula-se inicialmente o valor da variável intemperismo para três valores da variável D (três execuções da subrotina de simulação). Com estes três pares (D,Int.), determina-se a equação do polinômio de 2º grau que passa por estes. De posse da equação do polinômio, calcula-se o valor de D para o qual o intemperismo é de 2 °C, sendo este o substitutivo do ponto de D cujo intemperismo está mais longe do valor desejado. Executando-se assim sequencialmente chega-se ao valor de D cujo intemperismo enquadra-se à precisão desejada.

Com este método, para um ponto dado pelo otimizador, há a necessidade de execução da subrotina de simulação da coluna de no mínimo 4 vezes; deste modo, a consideração da restrição intemperismo é a limitante do tempo de execução do programa. Contudo, este método foi o que apresentou menor tempo, comparado com as outras tentativas de ajuste por dois pontos (linear - bissecção) e otimização de FIBONACCI. O aumento do grau do polinômio, leva a um maior nº mínimo de execuções do programa de simulação, levando a um tempo maior de execução. Por exemplo, para o polinômio de 3º grau o número mínimo de execuções da subrotina de simulação é de 5 vezes, para polinômio de 4º grau, 6 vezes e assim por diante. Além disto, quanto maior o grau do polinômio, maior a complexidade do cálculo de suas raízes.

4.1 - Função objetivo

A função objetivo, conforme já definida neste trabalho, é a função matemática que expressa os efeitos econômicos do processo, devendo ser maximizada ou minimizada, conforme a sua característica.

Para a coluna de destilação otimizada neste trabalho, tomou-se como função objetivo a seguinte equação :

$$[F.O.] = [\text{custo dos produtos}] - [\text{custo da carga}] - [\text{custo de utilidades}] \quad (4.1)$$

Assim a função objetivo fica :

$$[F.O.] = [V_{GLP} * C_{GLP}] + [V_{GLN} * C_{GLN}] - [V_{CARREN} * C_{CARREN}] - [m_{util.} * C_{util.}] \quad (4.2)$$

onde :

V --> vazão volumétrica (m³/h)

m --> vazão mássica (t/h)

C --> custo unitário (US\$/t) para utilidades

C --> custo unitário (US\$/m³) para os produtos e carga

F.O. --> função objetivo (US\$/h)

Os preços para os produtos foram obtidos junto à tabela de preços de derivados de petróleo (DECOM - Departamento Comercial - PETROBRÁS) :

GLP - 109.82 US\$/m³

GASOLINA - 142.10 US\$/m³

A avaliação do custo da carga para a coluna debutanizadora, se torna difícil, uma vez que é constituída de uma carga intermediária do processo de craqueamento catalítico, e por não ser comercializada diretamente, não apresenta preço definido.

Desta forma, para se ter um custo para esta corrente, e poder-se calcular a função objetivo, tomou-se seu custo como a média entre o valor do GLP e o da gasolina :

CARGA - 126 US\$/m³

Quanto às utilidades, computou-se o consumo de fluido de aquecimento (borra) do refeedor, em termos de vapor de 13 kgf/cm², para se poder quantificar mais facilmente o custo desta corrente. Esta consideração é bastante válida para o processo, uma vez, que em não sendo esta borra destinada ao refeedor da coluna debutanizadora, ela será destinada a um trocador do tipo caldeira, gerando vapor de 13 kgf/cm². Assim, computamos, em termos econômicos, a vazão de borra utilizada no refeedor, como uma quantidade de vapor equivalente, deixada de ser gerada no trocador de tipo caldeira.

O custo do vapor e da água de resfriamento são obtidos do balanço de utilidades da REPLAN (custo marginal) :

ÁGUA : 6.62 US\$/1000 m³

VAPOR : 12.04 US\$/ton

Assim considerando, a expressão para o custo de utilidades, fica a seguinte :

$$m_{\text{util.}} * C_{\text{util.}} = m_v * C_v + m_{\text{agua}} * C_{\text{agua}}$$

A seguir estão os cálculos para a conversão de fluido de aquecimento (borra) do refervedor, em vapor de 13 kgf/cm² equivalente.

A expressão que dá o balanço de energia para a torre é a seguinte :

$$F * H_F + Q_B = D * H_D + B * H_B + Q_C \quad (4.3)$$

E Q_B :

$$Q_B = D * H_D + B * H_B + Q_C - F * H_F \quad (4.4)$$

Os cálculos de entalpia para a carga e produtos são os seguintes :

Carga :

$$H_F = CSI * H_V + (1 - CSI) * H_L \quad (4.5)$$

E :

$$H_V = \sum_i Y_{C,i} * H_{V,i} \quad (4.6)$$

$$H_L = \sum_i X_{C,i} * H_{L,i} \quad (4.7)$$

$$X_{C,i} = \frac{X_{F,i}}{CSI * (K_i - 1) + 1} \quad (4.8)$$

$$Y_{C,i} = K_i * X_{C,i} \quad (4.9)$$

Produtos :

$$H_D = \sum_i X_{D,i} * H_{D,i} \quad (4.10)$$

$$H_B = \sum_i X_{B,i} * H_{B,i} \quad (4.11)$$

Para que Q_B seja calculado pela equação (4.4), basta apenas o cálculo da carga térmica do condensador :

$$Q_C = V * (H_{VD} - H_{LD}) \quad (4.12)$$

Mas :

$$V = D * (R + 1)$$

Assim, a expressão para Q_C fica :

$$Q_C = D * (R + 1) * (H_{VD} - H_{LD}) \quad (4.13)$$

Quantidade de borra e vapor equivalente a ser utilizada no
refervedor :

Dados térmicos da borra :

Calor específico : 2.72 kJ/kg.°C

Difer. temperatura no trocador : 125 °C

Vazão mássica de borra :

$$Q_B = m_B * c_{pB} * (T_w - T_m) \quad (4.14)$$

De (4.4), tomamos Q_B e calculamos a vazão mássica de borra :

$$m_B = \frac{Q_B}{2.72 * 125}$$

$$m_B = 254.1 * Q_B \quad (4.15)$$

$Q_B \rightarrow$ MW

$m_B \rightarrow$ ton/d

Vazão mássica de vapor equivalente :

Os dados térmicos do vapor de 13 kgf/cm² são os seguintes :

Entalpia do vapor saturado (T=240 °C) : 2786 kJ/kg

Entalpia do cond. saturado : 826 kJ/kg

Para tomarmos o equivalente em vapor, tomamos a igualdade dos
calores entre a borra e o vapor, com a consideração de que o vapor
saturado se condensa totalmente e não ocorre vaporização da borra
e sim, apenas aumento de calor sensível. Como a seguir :

$$Q_{\text{vapor}} = Q_{\text{bottom}}$$

$$m_v * (H_v - H_l) = m_b * c_{p_b} * DT$$

$$m_v = \frac{m_b * 2.72 * 125}{2786 - 826}$$

$$m_v = 0.173 * m_b \quad (4.16)$$

Ou

$$m_v = 44.08 * Q_b \quad (4.17)$$

$$Q_b \rightarrow \text{MW}$$

$$m_v \rightarrow \text{ton/d}$$

Vazão mássica de água de resfriamento :

Variação de temp. da água : 11 °C

Calor específico da água : 4,18 kJ/kg.°C

$$m_m = \frac{Q_c}{c_{p_m} * DT}$$

$$m_m = 78.29 * Q_c \quad (4.18)$$

$$Q_c \rightarrow \text{MW}$$

$$m_m \rightarrow \text{m}^3/\text{h}$$

Afim de se ter noção do comportamento da função objetivo, pesquisou-se os três tipos de cargas estudados através da simulação da coluna. Para uma dada vazão da alimentação constante da coluna, pesquisou-se a variação da função objetivo frente à variação da razão de refluxo, fixando-se como restrição o valor da variável intemperismo em 2°C. Procurou-se abranger uma boa faixa de razões de refluxo, desde 0,3 até 2,3. Notou-se que para a razão de refluxo de 0,5 a função objetivo atinge o seu valor máximo. As tabelas

4.2, 4.3 e 4.4 mostram as variáveis principais da coluna, para as simulações das cargas 1 (densidade = 686.5 kg/m^3), 2 (densidade = 681.0 kg/m^3) e 3 (densidade = 692.8 kg/m^3) respectivamente. Em todos estes casos fixou-se a pressão da coluna em 11 atm (pressão absoluta).

A nomenclatura para as tabelas 4.2, 4.3 e 4.4 é a seguinte :

R --> razão de refluxo

D --> vazão de destilado (kmol/h)

PVb --> pressão de vapor do produto de fundo (kgf/cm^2)

PVd --> pressão de vapor do produto de topo (kgf/cm^2)

Qc --> calor retirado no condensador (MW)

Qb --> calor cedido no refeedor (MW)

F.O. --> função objetivo ($\text{US\$/h}$)

GLP --> vazão volumétrica de produto de topo (m^3/d)

GASOLINA --> vazão volumétrica de produto de fundo (m^3/d)

CARGA --> vazão volumétrica de carga (m^3/d)

FO/F --> razão : função objetivo ($\text{US\$/h}$) / carga (kmol/h)

FO/FV --> razão : função objetivo ($\text{US\$/h}$) / carga (m^3/h)

CARGA 1 - F = 2577.5 kmol/h
(DENS. = 686.5) INTERPERISMO = 2 oC

R	D (kmol/h)	PVb (kgf/cm2)	PVd (kgf/cm2)	Qc (MW)	Qb (MW)	F.O. (US\$/h)	GLP (m3/d)	GASOLINA (m3/d)	CARGA (m3/d)	FO/F (US\$/kmol)	FO/FV (US\$/m3)
.3	1009.2	.310	10.82	7.2	7.4	1443	2054	4445	6500	.560	5.33
.4	996.4	.308	10.96	7.4	7.7	1487	2017	4483	6500	.577	5.49
.5	990.4	.308	11.03	7.7	8.1	1502	1999	4500	6500	.583	5.55
.6	989.8	.307	11.04	8.2	8.6	1494	1998	4502	6500	.580	5.52
.7	989.8	.306	11.04	8.7	9.1	1482	1998	4502	6500	.575	5.47
.8	990.0	.306	11.04	9.2	9.6	1472	1998	4501	6500	.571	5.44
.9	990.3	.305	11.03	9.7	10.1	1460	1999	4501	6500	.566	5.39
1.0	990.4	.305	11.03	10.2	10.6	1449	1999	4500	6500	.562	5.35
1.2	990.6	.305	11.03	11.3	11.6	1426	2000	4500	6500	.553	5.27
1.4	990.9	.304	11.03	12.3	12.7	1404	2001	4499	6500	.545	5.18
1.6	991.3	.304	11.02	13.3	13.7	1381	2002	4497	6500	.536	5.10
1.8	991.3	.304	11.02	14.3	14.7	1359	2002	4497	6500	.527	5.02
2.0	991.4	.304	11.02	15.3	15.7	1338	2003	4497	6500	.519	4.94
2.2	991.5	.304	11.02	16.3	16.7	1316	2003	4497	6500	.511	4.86

Tabela 4.2 - Simulação da carga 1 para interperismo = 2°C

CARGA 2 - F = 2577.5 kmol/h
(DENS. = 681.0) INTERPERISMO = 2 oC

R	D (kmol/h)	PVb (kgf/cm2)	PVd (kgf/cm2)	Qc (MW)	Qb (MW)	F.O. (US\$/h)	GLP (m3/d)	GASOLINA (m3/d)	CARGA (m3/d)	FO/F (US\$/kmol)	FO/FV (US\$/m3)
.3	1117.6	.308	10.90	7.8	6.4	1113	2268	4139	6407	.432	4.17
.5	1105.4	.306	11.00	8.6	7.3	1142	2232	4175	6407	.443	4.28
.7	1104.7	.305	11.00	9.7	8.4	1121	2231	4177	6407	.435	4.20
.9	1104.3	.304	11.00	10.8	9.5	1099	2230	4177	6407	.426	4.12
1.1	1104.6	.304	11.00	12.0	10.7	1073	2231	4176	6407	.416	4.02
1.3	1104.7	.304	11.00	13.1	11.8	1049	2231	4176	6407	.407	3.93
1.5	1104.8	.304	11.00	14.2	12.9	1025	2232	4176	6407	.398	3.84
1.7	1105.7	.303	11.00	15.4	14.1	998	2234	4173	6407	.387	3.74
1.9	1104.9	.304	11.00	16.5	15.2	977	2232	4175	6407	.379	3.66
2.1	1105.0	.303	11.00	17.7	16.4	953	2232	4175	6407	.370	3.57
2.3	1105.2	.303	11.00	18.8	17.5	928	2233	4174	6407	.360	3.48

Tabela 4.3 - Simulação da carga 2 para interperismo = 2°C

CARGA 3 - F = 2577.5 kmol/h
(DENS. = 692.8) INTERPERISMO = 2 oC

R	D (kmol/h)	PVb (kgf/cm2)	PVd (kgf/cm2)	Qc (MW)	Qb (MW)	F.O. (US\$/h)	GLP (m3/d)	GASOLINA (m3/d)	CARGA (m3/d)	FO/F (US\$/kmol)	FO/FV (US\$/m3)
.3	883.4	.315	10.70	6.5	8.5	1824	1808	4800	6608	.708	6.63
.4	867.5	.310	10.90	6.5	8.7	1883	1760	4848	6608	.731	6.84
.5	860.2	.309	11.00	6.8	9.1	1905	1739	4869	6608	.739	6.92
.6	859.2	.307	11.00	7.2	9.5	1901	1735	4872	6608	.738	6.90
.7	858.8	.306	11.00	7.6	9.9	1894	1734	4874	6608	.735	6.88
.8	858.4	.306	11.00	8.0	10.3	1886	1733	4875	6608	.732	6.85
1.0	858.3	.306	11.00	8.9	11.2	1868	1733	4875	6608	.725	6.79
1.2	858.9	.305	11.00	9.8	12.1	1847	1734	4873	6608	.717	6.71
1.4	858.6	.305	11.00	10.6	13.0	1830	1734	4874	6608	.710	6.65
1.6	859.6	.304	11.00	11.5	13.9	1807	1736	4871	6607	.701	6.56
1.8	858.8	.304	11.00	12.4	14.7	1792	1734	4873	6608	.695	6.51
2.0	859.0	.304	11.00	13.3	15.6	1772	1735	4873	6608	.687	6.44
2.2	859.1	.304	11.00	14.2	16.5	1753	1735	4872	6608	.680	6.37

Tabela 4.4 - Simulação da carga 3 para interperismo = 2°C

4.2 - O algoritmo de otimização

4.2.1 - Otimização para modelos não lineares

Os processos químicos em geral são caracterizados por diversas variáveis de entrada e de saída. Afim de se poder realizar a otimização de um certo processo, o comportamento do mesmo deve ser exatamente conhecido, ou seja, o processo deve ter um modelo matemático definido.

Os métodos de otimização analíticos foram desenvolvidos para o cálculo direto do ponto ótimo, obtendo-se por ele diretamente as variáveis otimizadas. Em grande parte dos processos, devido à não linearidade e complexidade do modelo, os métodos analíticos não podem ser aplicados, sendo necessários métodos numéricos para a pesquisa do ótimo.

Os métodos numéricos consistem na pesquisa do ótimo calculando os valores da função objetivo para novos valores das variáveis a serem otimizadas, comparando-os com valores anteriores já calculados. Este é o procedimento básico de cálculo de todos os métodos numéricos, havendo diferença entre eles, no procedimento de escolha de pontos de pesquisa sucessivos.

Há desde os métodos que pesquisam o ótimo arbitrariamente, em todo o universo de pontos, como aqueles que usam estratégias de busca. Nestas estratégias de busca, dois fatores são levados em consideração : a escolha da direção do movimento de atualização dos pontos e o passo a ser dado na direção escolhida.

Escolhida a direção do movimento, o passo poderá ser constante ou mesmo atualizado dentro do otimizador, testando-se a função objetivo para vários pontos em uma mesma direção. A busca rumo ao ótimo termina quando forem atingidas precisões pré-definidas.

Restrições às variáveis podem ser facilmente incorporadas a uma pesquisa de ótimo, bastando criar procedimentos especiais de cálculo que garantam a operação apenas na região desejada. Estas restrições podem ser contempladas no próprio modelo do processo.

Há dois tipos de métodos de pesquisa do ótimo :

- Métodos diretos : os que avaliam apenas a função objetivo em seus vários pontos.

- Métodos gradiente : os que necessitam da avaliação da função objetivo e do cálculo de derivadas.

Os métodos diretos necessitam apenas da avaliação da função objetivo em determinados pontos de pesquisa. Pelo fato de não necessitarem das derivadas, estes métodos consomem menor tempo de cálculo, porém, podem ter sua eficiência prejudicada, pois nestes métodos não se pesquisa a direção ótima a ser seguida e sim apenas o valor da função naquele ponto.

Dentre os métodos diretos se destacam o da pesquisa paralela aos eixos coordenados, o da pesquisa direta com aceleração (Hooke-Jeeves) e o da pesquisa através de elementos geométricos.

Discutiremos aqui os métodos geométricos, onde se insere o método de Box^[19], o utilizado neste trabalho.

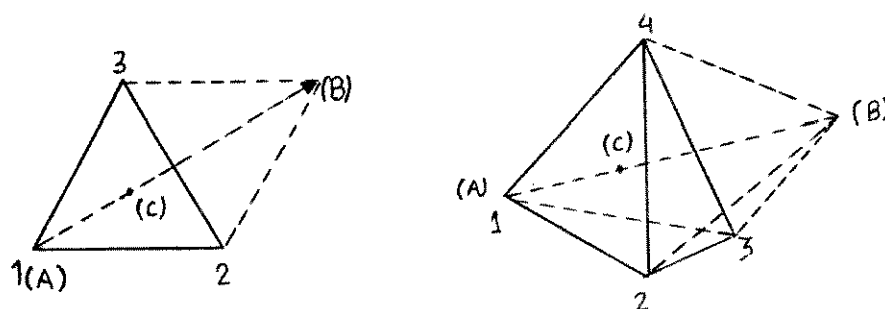
4.2.2 - Métodos geométricos

Um método para pesquisa do ótimo de uma função objetivo não linear é o que emprega figuras regulares denominadas simplex. Es-

tas técnicas têm sido bem sucedidas quando aplicadas para se achar extremos de funções objetivo sem restrições como com restrições, podendo ser aplicados a casos de elevado número de variáveis de otimização.

Trabalhando-se com duas variáveis, um simplex regular é dado por um triângulo equilátero, para três variáveis por um tetraedro regular. O número de pontos será sempre dado pelo número de variáveis mais um.

A Figura 4.1 mostra o simplex regular para problemas com duas e três variáveis.



(c) --> centróide

Figura 4.1 - Simplex regular para duas e três variáveis

Na pesquisa de um máximo da função objetivo, tentativas iniciais dos valores das variáveis podem ser escolhidas de tal modo a se selecionarem pontos no espaço das variáveis localizados nos vértices do simplex.

Conforme proposto originalmente por Spendley, Hext e Hims-worth^[17], esses pontos seriam vértices de um poliedro regular. Estes autores propuseram o uso de figuras regulares até que a pesquisa se aproximasse do ponto ótimo, sendo então tomadas medidas no sentido de diminuição da aresta do polígono para a conver-

gência final.

Nestes métodos geométricos, se avalia a função objetivo em cada vértice, fazendo-se uma projeção reflexiva do ponto onde se tem o menor valor da função, através do centróide do simplex. O ponto mínimo é desprezado e substituído pelo ponto refletido, tendo-se agora uma nova figura, mais próxima do ponto ótimo desejado.

Este é o procedimento básico do método. Além das reflexões e eliminações de pontos, ainda pode-se efetuar mudanças para diminuição ou aumento do tamanho do simplex.

A Figura 4.2 mostra a sucessão de simplexes obtidos em direção ao ponto ótimo.

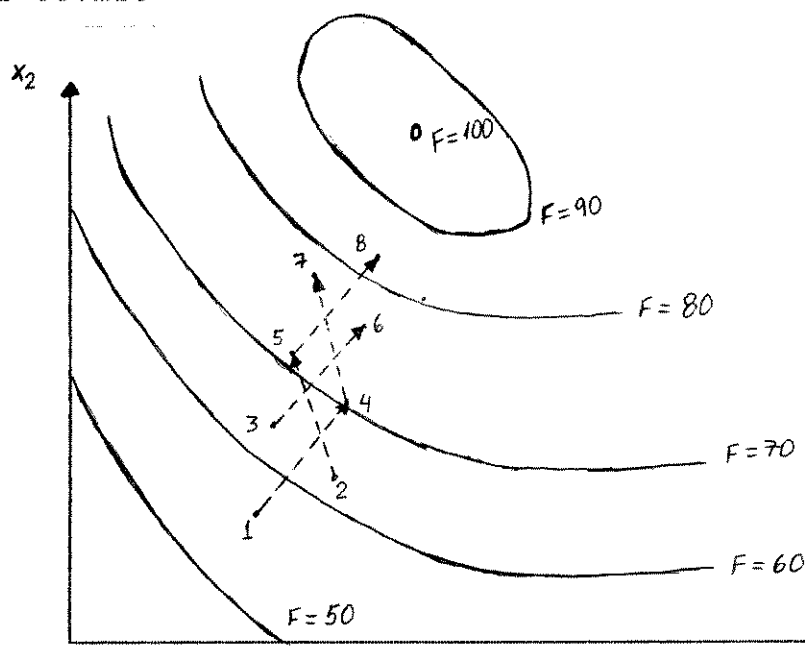


Figura 4.2 - Sucessão de simplexes em direção ao ponto ótimo.

4.2.3 - Método de Box

A posição do simplex inicial é definida por regras geométricas. O método independe da localização inicial do poliedro, motivo pelo qual a origem dos eixos coordenados é escolhida como um de seus vértices. Através de textos da geometria analítica, pode ser

demonstrado que as coordenadas dos vértices do simplex regular podem ser dadas como mostrado na Tabela 4.1 :

Tabela 4.1 - Coordenadas dos vértices do simplex inicial.

Vértice	Coordenadas					
	X_1	X_2	X_3	...	X_{n-1}	X_n
1	0	0	0		0	0
2	p	q	q		q	q
3	q	p	q		q	q
4	q	q	p		q	q
.	.	.	.		.	.
.	.	.	.		.	.
n-1	q	q	q		p	q
n	q	q	q		q	p

Onde : $p = \frac{d}{n\sqrt{2}} * (\sqrt{n + 1} + n - 1)$

$q = \frac{d}{n\sqrt{2}} * (\sqrt{n + 1} - 1)$

d = comprimento da aresta do simplex

Os pontos acima resultam de se assumir as duas seguintes condições :

a) distância de cada ponto à origem, igual à aresta d do simplex :

$p^2 + (n-1) * q^2 = d^2$ (4.19)

b) distância entre dois pontos igual à aresta d do simplex

$2 * (a-b)^2 = d^2$ (4.20)

No caso de as variáveis a serem otimizadas apresentarem ordem de grandeza muito diferentes, faz-se mudança de variáveis através de normalização. Desta forma, trabalha-se no algoritmo de otimização com as variáveis normalizadas e quando se passa ao modelo e à função objetivo, as mesmas são desnormalizadas.

Montado o simplex inicial, calcula-se a função objetivo para todos os vértices ou pontos (X_i). Uma vez calculados os pontos e a função objetivo correspondente à estes, identificam-se os valores mínimo e máximo da função objetivo para este conjunto inicial de pontos, assim como seus pontos correspondentes. Designa-se $f(X_{mín})$ o valor mínimo calculado para o vértice $X_{mín}$, $f(X_{máx})$ o valor máximo calculado para o vértice $X_{máx}$ e X_c o centróide de todos os vértices excetuado o vértice $X_{mín}$.

$$X_c = \frac{\sum_{i=1}^{n-1} X_i}{n-1}, \text{ para } i \neq \text{mín} \quad (4.21)$$

A seguir o procedimento consiste em se aplicar a regra de reflexão do método original, permitindo a mudança de geometria dos simplexes pela expansão ou contração da reflexão do ponto mínimo (uso de coeficientes de reflexão, contração e expansão).

Dá-se aqui a designação : (*) para a reflexão e (**) para a expansão ou contração.

1 - REFLEXÃO - efetua-se a reflexão de $X_{mín}$, fazendo-se :

$$X^* = X_c + g_r * (X_c - X_{mín}) \quad (4.22)$$

onde g_r é o coeficiente de reflexão, sendo selecionado previamente. Uma vez realizada a reflexão calcula-se a função objetivo neste ponto ($f(X^*)$).

2 - EXPANSÃO - Se $f(X^*) > f(X_{máx})$, faz-se expansão da reflexão de acordo com a expressão :

$$X^{**} = X^* + g_e * (X_c - X_{mín}) \quad (4.23)$$

onde g_e é o coeficiente de expansão escolhido. O valor da função é calculado neste ponto, $f(X^{**})$. Se $f(X^{**}) > f(X^*)$, então se substitui $X_{mín}$ por X^{**} , caso contrário, $X_{mín}$ por X^* .

3 - CONTRAÇÃO - Se $f(X^*) < f(X_{m(n)})$, anula-se a reflexão, anulando a contração no simplex original :

$$X^{**} = X_c + g_c * (X_c - X_{m(n)}) \quad (4.24)$$

onde g_c é o coeficiente de contração escolhido previamente. Se o ponto contraído $X^{**} > X_{m(n)}$, substitui-se $X_{m(n)}$ por X^{**} , caso contrário diminui-se todo o simplex em torno de $X_{máx}$ por um fator de escala, ou seja, para todos os vértices se faz :

$$X_i = (X_i + X_{máx}) * f_e \quad (4.25)$$

onde f_e é o fator de escala, ficando na faixa $0 < f_e < 1$.

A Figura 4.3 mostra o diagrama de blocos para o método de Box.

Como critério de parada do método é feito um teste de precisão. Este teste pode ser escolhido, sendo geralmente feito para os vértices (variáveis independentes) ou para a função objetivo.

Himmelblau^[10] recomenda o uso da variância da função objetivo calculada em cada vértice do simplex, conforme a equação (4.26) :

$$\sqrt{\frac{\sum (f_i - f_m)^2}{n}} < e_p \quad (4.26)$$

onde f_m é o valor médio de f_i e e_p é a precisão requerida.

Esta modificação de Box é uma adaptação ao método simplex inicial, com algumas características de outro método seu denominado Complex. O método Complex é um método mais sofisticado que permite a movimentação da figura em regiões altamente convexas.

O método utilizado neste trabalho é então um método que incorpora algumas vantagens do método Complex, tendo a simplicidade do simplex inicial.

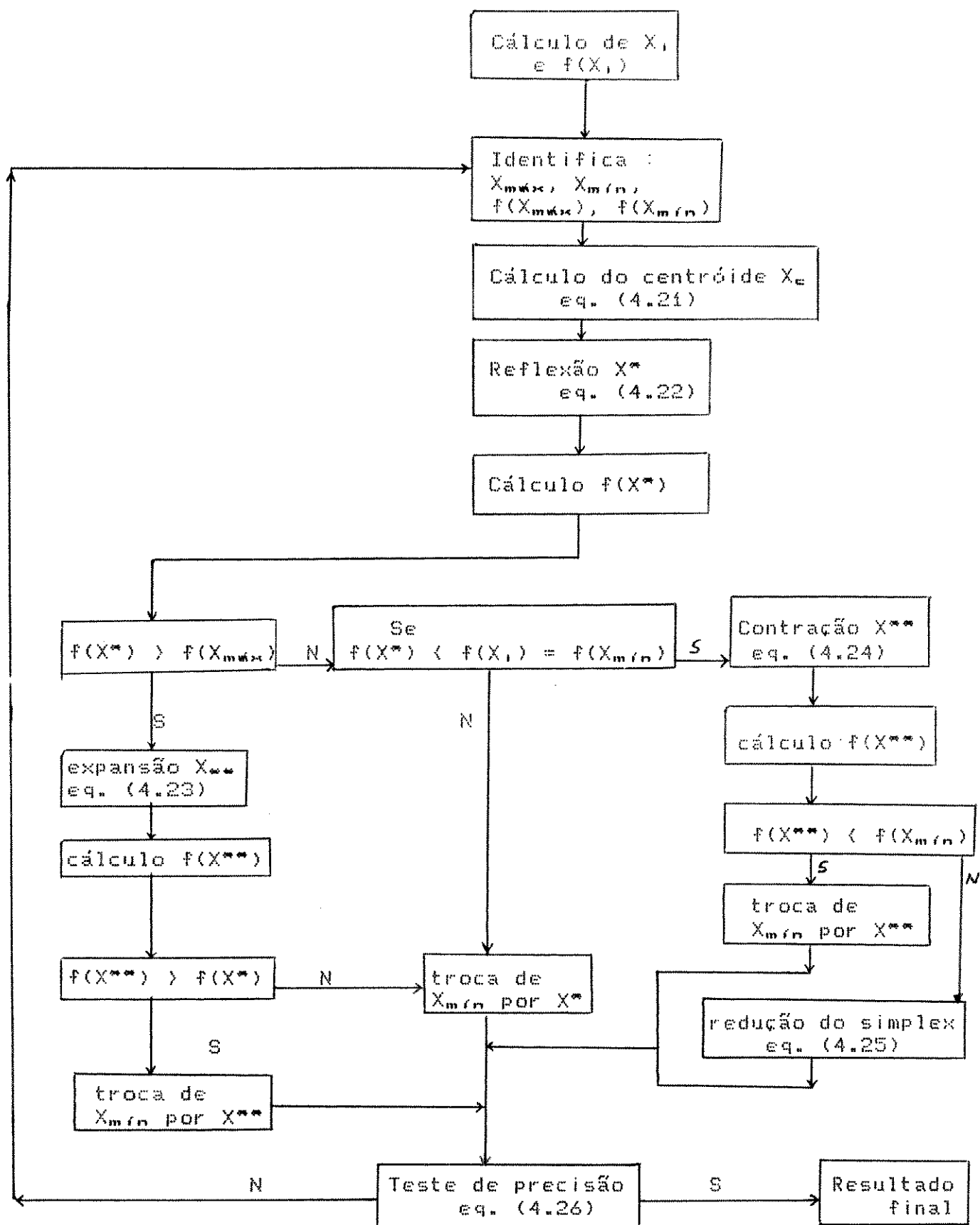


Figura 4.3 - Diagrama de blocos para o método de Box.

4.3 - Programa de otimização com restrições

Desenvolveu-se o programa em FORTRAN 5.0. Primeiramente foi desenvolvida a simulação. Em seguida acoplou-se o método de otimização de Box à simulação. O programa de otimização utilizado foi o desenvolvido por Spandri^[12]. O programa principal ficou sendo o método de Box, sendo o método de Smith-Brinkley subrotina do programa principal. Na subrotina do método de Smith-Brinkley, outras subrotinas foram agregadas, como o método de cálculo de intemperismo, ponto de bolha e orvalho, estado de vaporização da carga e entalpia dos componentes.

Utilizou-se duas variáveis de otimização, a razão de refluxo da coluna e a vazão de retirada de topo, tendo as seguintes restrições (mínimas e máximas) :

Razão de refluxo $\rightarrow$ 1,0 a 2,3

Vazão de retirada de topo $\rightarrow$ 850 a 1500 kmol/h

Observa-se porém que estes limites fixados para a vazão de retirada de topo não tem muito efeito, pois esta variável sofre modificações até o ajuste do intemperismo em 2°C.

No programa de otimização, as variáveis acima foram utilizadas na forma normalizada :

$$\text{RAZÃO DE REFLUXO : } X(1) = \frac{R - 1,0}{2,3 - 1,0} \quad (4.27)$$

$$\text{DESTILADO : } X(2) = \frac{D - 850}{1500 - 850} \quad (4.28)$$

(kmol/h)

e na subrotina de simulação, reconvertidos aos seus valores :

$$R = 1,3 * X(1) + 1,0 \quad (4.29)$$

$$D = 650 * X(2) + 850 \quad (4.30)$$

Foram utilizados ainda os seguintes coeficientes de reflexão, expansão e contração e fator de escala no método de Box :

Coeficiente de reflexão : 1,0

Coeficiente de expansão : 2,0

Coeficiente de contração : 0,5

Fator de escala : 0,5

As condições para refluxo máximo e mínimo escolhidas são aquelas que garantem à coluna uma operação segura. O máximo, em função da vazão máxima de vapor no topo da coluna (inundação), além das cargas térmicas limite do reboilador e condensador, e a mínima, em função de se ter uma vazão mínima de líquido na coluna.

A fim de se verificar o efeito da razão de refluxo no intemperismo do GLP, pesquisou-se através da simulação a variação deste frente à razão de refluxo. Estas simulações estão nas Tabelas 4.2, 4.3 e 4.4 e foram feitas considerando-se fixa a vazão de retirada de destilado e variando-se a razão de refluxo na faixa de 1,0 a 2,3. Notou-se uma variação do intemperismo de aproximadamente 0,4 °C entre os valores mínimo e máximo da razão de refluxo, ou seja, uma variação bastante pequena. Assim, não se usou a razão de refluxo na simulação para ajuste do intemperismo e sim a vazão de retirada de destilado, concluindo-se então ser a variável intemperismo, função apenas da vazão de destilado.

O programa de simulação também contemplou as restrições para as variáveis, tanto a máxima e a mínima, como a vazão de destilado amarrada ao valor de intemperismo pré-fixado.

Para valores da razão de refluxo menores, da faixa de 0,3 a 0,7, a variação desta, mantendo-se a vazão de retirada de topo constante, provoca variações razoáveis no valor do intemperismo, porém denotam uma condição operacional de incerteza na coluna,

correndo-se o perigo de haver secamento de alguns pratos.

Para se analisar o comportamento da função objetivo com a variação da razão de refluxo, contemplando-se a restrição de intemperismo de 2°C , simulou-se as cargas 1, 2 e 3 para razões de refluxo desde 0,3 a 2,3. As curvas mostraram um ponto de máximo para razão de refluxo de aproximadamente 0,5. As tabelas 4.2, 4.3 e 4.4 mostram os resultados das simulações para as cargas 1, 2 e 3 respectivamente e a figura 4.4, o gráfico de variação da função objetivo com a razão de refluxo.

Destes gráficos conclui-se que o ponto ótimo de operação da coluna para a faixa de restrições dada, deverá coincidir com a razão de refluxo mínima, $R=1,0$, uma vez que o ponto de máximo da função objetivo está localizado fora da faixa operacional de razões de refluxo. A vazão de destilado sempre apresentou-se dentro da faixa dada. Estas condições foram também atingidas nos casos mostrados a seguir.

4.4 - Otimização On-Line para variação de vazão da carga

Neste caso estudado, executou-se o programa inicialmente para a vazão de alimentação à coluna de 2577.5 kmol/h ($6500 \text{ m}^3/\text{d}$) e em seguida, realizou-se outra execução do programa para uma vazão de alimentação 22.5 % maior, ou seja, 3156.9 kmol/h ($7969 \text{ m}^3/\text{d}$). A carga utilizada aqui foi a carga 1.

A Tabela 4.5 mostra os dados operacionais otimizados pelo programa para as duas condições de vazão de alimentação. Na Tabela 4.6 estão as composições das correntes de alimentação, produtos de topo e fundo calculadas para os dois casos.

4.5 - Otimização On-Line para variação do tipo de carga

Para vazão molar de alimentação constante na coluna, realizou-se uma perturbação do tipo mudança de composição, substituindo-se a carga 1 (densidade 686.5 kg/m^3) por primeiramente uma carga mais leve (carga 2, $d = 681.0 \text{ kg/m}^3$) e posteriormente por outra ligeiramente mais pesada (carga 3, $d = 692.8 \text{ kg/m}^3$).

A tabela 4.7 mostra as condições operacionais da coluna na condição otimizada para os três tipos de carga e as tabelas 4.8, 4.9 e 4.10 mostram as composições de alimentação e dos produtos de topo e fundo para as cargas 1, 2 e 3 respectivamente no ponto ótimo.

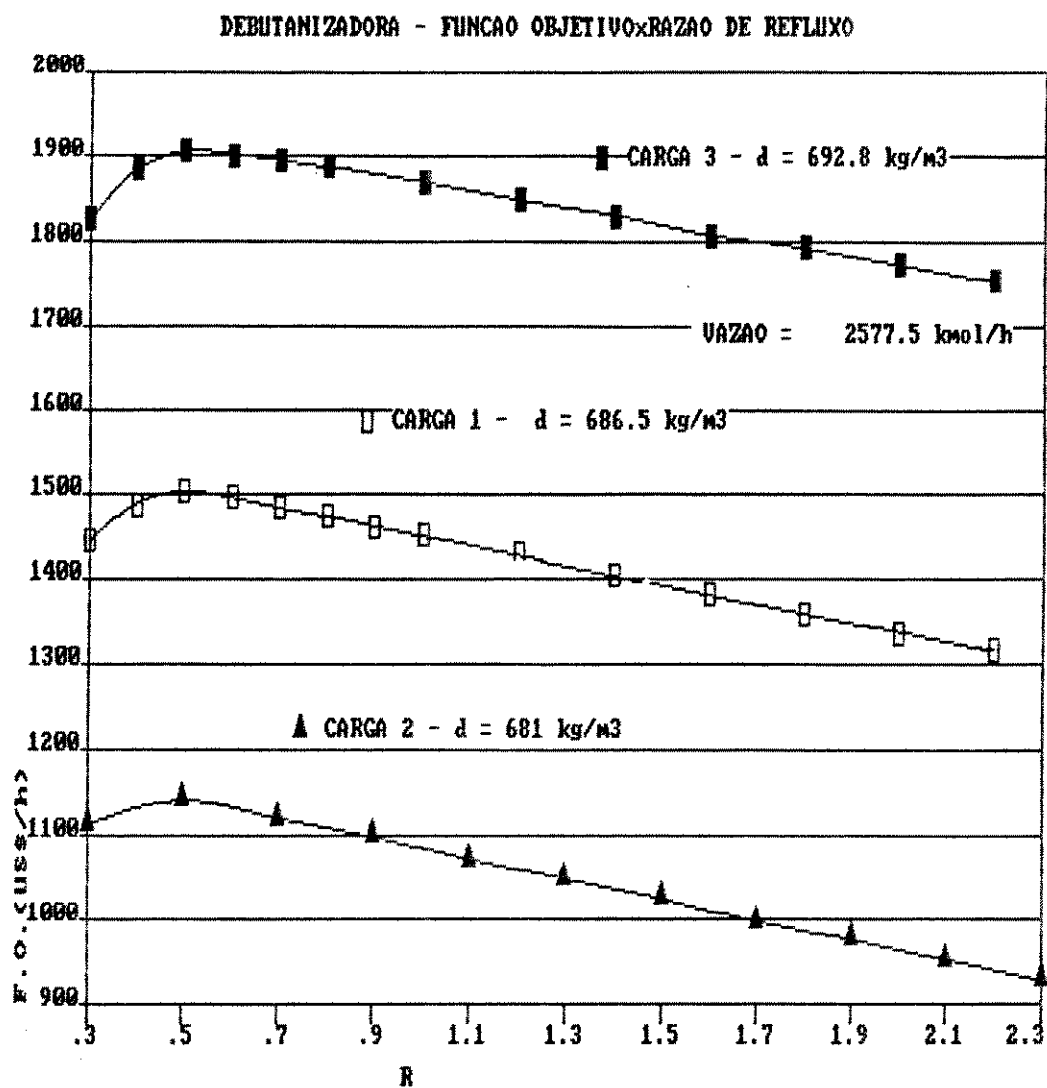


Figura 4.4 - Função objetivo versus razão de refluxo com intemperismo = 2°C

VARIACAO DE VAZAO -- CARGA No 1

	COND. INICIAL	COND. FINAL
VARIAVEIS DE OTIMIZACAO		
X(1)	.0000	.0000
X(2)	.2158	.5597
CARGA (kmol/h)	2577.5	3156.9
GLP (kmol/h)	990.3	1213.8
NAFTA (kmol/h)	1587.2	1943.1
CARGA (m3/d)	6499	7961
GLP (m3/d)	1999	2451
NAFTA (m3/d)	4500	5510
CARGA (ton/d)	4462	5465
GLP (ton/d)	1181	1448
NAFTA (ton/d)	3281	4017
TEMP. CARGA (oC)	121	121.0
RAZAO DE REFLUXO OTIMA	1.0	1.0
FRACAO VAPORIZADA CARGA	.303	.303
PRESSAO DA CARGA (atm)	11.0	11.0
TEMP. TOPO (oC)	62.5	62.6
TEMP. VASO TOPO (oC)	38.3	38.4
TEMP. FUNDO (oC)	180.0	180.0
TEMP. ITERACAO SB (oC)	143.7	144.9
PESO MOLEC. CARGA	72.1	72.1
PESO MOLECULAR GLP	49.7	49.7
PESO MOLECULAR NAFTA	86.1	86.1
oAPI CARGA	74.6	74.6
oAPI GLP	107.9	107.9
oAPI NAFTA	62.6	62.6
DENS. CARGA (kg/m3)	686.5	686.5
DENS. GLP (kg/m3)	590.9	591.0
DENS. NAFTA (kg/m3)	728.9	729.0
PRES. VAPOR GLP (kgf/cm2)	11.0	11.0
PRES. VAPOR NAFTA (kgf/cm2)	.31	.31
INTEMPERISMO GLP (oC)	1.8	2.0
CALOR CONDENSADOR (MW)	10.2	12.6
CALOR REFREREDOR (MW)	10.6	13.0
VAZAO BORRA (ton/d)	3096	3796
VAZAO AGUA (m3/h)	588	721
VAZAO VAPOR EQUIV. (ton/h)	18.2	22.3
CUSTO AGUA (US\$/h)	3.6	4.4
CUSTO VAPOR (US\$/h)	218.7	268.0
CUSTO GLP (US\$/h)	9146.6	11214.3
CUSTO NAFTA (US\$/h)	26647.8	32623.1
CUSTO CARGA (US\$/h)	34122.8	41793.4
FUNCAO OBJETIVO (US\$/h)	1449.3	1771.6
FUNCAO OBJETIVO (US\$/d)	34783	42518

Observacoes :

Variaveis de otimizacao :

REFLUXO :

X(1)=

R - 1.0

2.3 - 1.0

DESTILADO :

X(2)=

D - 850

1500 - 850

TABELA 4.5 - OTIMIZACAO ON-LINE - VARIACAO DA VAZAO DE CARGA

COMPOSICOES CARGA No1 (AUMENTO DE 22.5 % NA VAZAO DE ALIMENTACAO)

		COND. INICIAL (F = 2577.5 kmol/h)			COND. FINAL (F = 3156.9 kmol/h)		
COMPOSTO		XF	XD	XB	XF	XD	XB
1	ETANO	.017300	.045004	.000000	.017300	.044995	.000000
2	ETENO	.001000	.002601	.000000	.001000	.002601	.000000
3	PROPANO	.047300	.123047	.000000	.047300	.123022	.000000
4	PROPENO	.116300	.302544	.000000	.116300	.302483	.000000
5	N BUTANO	.022500	.058468	.000040	.022500	.058458	.000039
6	ISO BUTANO	.054700	.142276	.000013	.054700	.142248	.000013
7	ISO BUTENO	.065900	.171401	.000020	.065900	.171367	.000020
8	2 MET. 2 BUTENO	.005600	.003354	.007002	.005600	.003423	.006960
9	CIS 2 BUTENO	.021400	.055588	.000051	.021400	.055579	.000050
10	TRANS 2 BUTENO	.030500	.079266	.000048	.030500	.079252	.000047
11	BUTADIENO 1,3	.000500	.001300	.000000	.000500	.001300	.000000
12	N PENTANO	.000800	.000635	.000093	.000800	.000646	.000096
13	ISO PENTANO	.008600	.014138	.005142	.008600	.014247	.005073
14	2 MET. PENTANO	.002700	.000003	.004384	.002700	.000003	.004385
15	3 MET. PENTANO	.001500	.000001	.002436	.001500	.000001	.002437
16	2 MET. PENTENO 2	.001900	.000000	.003086	.001900	.000000	.003087
17	CICLOPENTENO	.001900	.000000	.003043	.001900	.000000	.003042
18	3 MET. CIS PENTENO 2	.356700	.000000	.579414	.356700	.000000	.579486
19	2 MET. HEXANO	.006000	.000000	.009747	.006000	.000000	.009748
20	2 DIMET. HEXANO	.003400	.000000	.005523	.003400	.000000	.005524
21	MET. CICLO PENTANO	.002500	.000000	.004061	.002500	.000000	.004062
22	CICLO HEXANO	.179000	.000000	.290776	.179000	.000000	.290813
23	MET. CICLO HEXANO	.002000	.000000	.003249	.002000	.000000	.003249
24	3 MET. HEPTANO	.003400	.000000	.005523	.003400	.000000	.005524
25	OCTENO 1	.003100	.000000	.005036	.003100	.000000	.005036
26	N NONANO	.001300	.000000	.002112	.001300	.000000	.002112
27	TOLUENO	.009000	.000000	.014620	.009000	.000000	.014622
28	ORTO XILENO	.004500	.000000	.007310	.004500	.000000	.007311
29	PARA XILENO	.007000	.000000	.011371	.007000	.000000	.011373
30	ETIL BENZENO	.002800	.000000	.004548	.002800	.000000	.004549
31	1 MET. 3 ETIL BENZENO	.011400	.000000	.018519	.011400	.000000	.018521
32	1,2,3 TRIMET. BENZENO	.002000	.000000	.003249	.002000	.000000	.003249
33	1,2,4, TRIMET. BENZENO	.003900	.000000	.006335	.003900	.000000	.006336
34	NAFTALENO	.001500	.000000	.002437	.001500	.000000	.002437

TABELA 4.6 - OTIMIZACAO ON-LINE - VARIACAO DA VAZAO DE CARGA - COMPOSICOES

VARIACAO DE COMPOSICAO DA CARGA

	CARGA 1	CARGA 2	CARGA 3
	D = 686.5 kg/m3	D = 681.0 kg/m3	D = 692.8 kg/m3
VARIAVEIS DE OTIMIZACAO			
X(1)	.0000	.0000	.0000
X(2)	.2158	.3917	.0136
CARGA (kmol/h)	2577.5	2577.5	2577.5
GLP (kmol/h)	990.3	1104.6	858.8
NAFTA (kmol/h)	1587.2	1472.9	1718.6
CARGA (m3/d)	6499	6407	6608
GLP (m3/d)	1999	2231	1734
NAFTA (m3/d)	4500	4176	4874
CARGA (ton/d)	4462	4363	4578
GLP (ton/d)	1181	1318	1025
NAFTA (ton/d)	3281	3045	3553
TEMP. CARGA (oC)	121	121.0	121.0
RAZAO DE REFLUXO OTIMA	1.0	1.0	1.0
FRACAO VAPORIZADA CARGA	.303	.457	.218
PRESSAO DA CARGA (atm)	11.0	11.0	11.0
TEMP. TOPO (oC)	62.5	62.6	62.7
TEMP. VASO TOPO (oC)	38.3	38.4	38.4
TEMP. FUNDO (oC)	180.0	180.0	180.0
TEMP. ITERACAO SB (oC)	143.7	141.8	150.0
PESO MOLECULAR CARGA	72.1	70.5	74.0
PESO MOLECULAR GLP	49.7	49.7	49.7
PESO MOLECULAR NAFTA	86.1	86.1	86.1
oAPI CARGA	74.6	76.3	72.7
oAPI GLP	107.9	107.9	107.9
oAPI NAFTA	62.6	62.6	62.6
DENS. CARGA (kg/m3)	686.5	681.0	692.8
DENS. GLP (kg/m3)	590.9	590.9	591.0
DENS. NAFTA (kg/m3)	728.9	729.0	729.0
PRES. VAPOR GLP (kgf/cm2)	11.0	11.0	11.0
PRES. VAPOR NAFTA (kgf/cm2)	.31	.30	.31
INTERPERISMO GLP (oC)	1.8	2.0	2.1
CALOR CONDENSADOR (MW)	10.2	11.4	8.9
CALOR REFERVEDOR (MW)	10.6	10.1	11.2
VAZAO BORRA (ton/d)	3096	2497	3272
VAZAO AGUA (m3/h)	588	656	511
VAZAO VAPOR EQUIV. (ton/h)	18.2	17.3	19.1
CUSTO AGUA (US\$/h)	3.6	4.1	3.2
CUSTO VAPOR (US\$/h)	218.7	208.1	231.0
CUSTO GLP (US\$/h)	9146.6	10206.8	7934.7
CUSTO NAFTA (US\$/h)	26647.8	24728.1	28855.0
CUSTO CARGA (US\$/h)	34122.8	33636.9	34689.5
FUNCAO OBJETIVO (US\$/h)	1449.3	1085.7	1866.0
FUNCAO OBJETIVO (US\$/d)	34783	26057	44784

Observacoes :

Variaveis de otimizacao :

REFLUXO : $X(1) = \frac{R - 1.0}{2.3 - 1.0}$

DESTILADO : $X(2) = \frac{D - 850}{1500 - 850}$
(kmol/h)

TABELA 4.7 - OTIMIZACAO ON-LINE - VARIACAO DE TIPO DE CARGA

COMPOSICOES DE CARGA, TOPO E FUNDO NO PONTO OTIMO
CARGA 1 (d = 686.5 kg/m3)

No	COMPOSTO	XF	XD	XB
1	ETANO	.017300	.045004	.000000
2	ETENO	.001000	.002601	.000000
3	PROPANO	.047300	.123047	.000000
4	PROPENO	.116300	.302544	.000000
5	N BUTANO	.022500	.058468	.000040
6	ISO BUTANO	.054700	.142276	.000013
7	ISO BUTENO	.065900	.171401	.000020
8	2 MET. 2 BUTENO	.005600	.003354	.007002
9	CIS 2 BUTENO	.021400	.055588	.000051
10	TRANS 2 BUTENO	.030500	.079266	.000048
11	BUTADIENO 1,3	.000500	.001300	.000000
12	N PENTANO	.000800	.000635	.000903
13	ISO PENTANO	.008600	.014138	.005142
14	2 MET. PENTANO	.002700	.000003	.004384
15	3 MET. PENTANO	.001500	.000001	.002436
16	2 MET. PENTENO 2	.001900	.000000	.003086
17	CICLOPENTENO	.001900	.000000	.003043
18	3 MET. CIS PENTENO 2	.356700	.000000	.579414
19	2 MET. HEXANO	.006000	.000000	.009747
20	2 DIMET. HEXANO	.003400	.000000	.005523
21	MET. CICLO PENTANO	.002500	.000000	.004061
22	CICLO HEXANO	.179000	.000000	.290776
23	MET. CICLO HEXANO	.002000	.000000	.003249
24	3 MET. HEPTANO	.003400	.000000	.005523
25	OCTENO 1	.003100	.000000	.005036
26	N NONANO	.001300	.000000	.002112
27	TOLUENO	.009000	.000000	.014620
28	ORTO XILENO	.004500	.000000	.007310
29	PARA XILENO	.007000	.000000	.011371
30	ETIL BENZENO	.002800	.000000	.004548
31	1 MET. 3 ETIL BENZENO	.011400	.000000	.018519
32	1,2,3 TRIMET. BENZENO	.002000	.000000	.003249
33	1,2,4, TRIMET. BENZENO	.003900	.000000	.006335
34	NAFTALENO	.001500	.000000	.002437

TABELA 4.8 - COMPOSICOES PARA A CARGA 1 NO PONTO OTIMO

COMPOSICOES DE CARGA, TOPO E FUNDO NO PONTO OTIMO
CARGA 2 (d = 681.0 kg/m3)

No	COMPOSTO	XF	XD	XB
1	ETANO	.019278	.044983	.000000
2	ETENO	.001114	.002600	.000000
3	PROPANO	.052708	.122989	.000000
4	PROPENO	.129596	.302402	.000000
5	N BUTANO	.025068	.058457	.000027
6	ISO BUTANO	.060952	.142215	.000009
7	ISO BUTENO	.073432	.171329	.000013
8	2 MET. 2 BUTENO	.005440	.003225	.007101
9	CIS 2 BUTENO	.023841	.055583	.000036
10	TRANS 2 BUTENO	.033981	.079249	.000033
11	BUTADIENO 1,3	.000557	.001300	.000000
12	N PENTANO	.000788	.000629	.000907
13	ISO PENTANO	.008995	.014677	.004734
14	2 MET. PENTANO	.002507	.000002	.004386
15	3 MET. PENTANO	.001393	.000000	.002437
16	2 MET. PENTENO 2	.001764	.000000	.003087
17	CICLOPENTENO	.001764	.000052	.003049
18	3 MET. CIS PENTENO 2	.331235	.000027	.579624
19	2 MET. HEXANO	.005572	.000000	.009750
20	2 DIMET. HEXANO	.003157	.000000	.005525
21	MET. CICLO PENTANO	.002332	.000000	.004062
22	CICLO HEXANO	.166221	.000000	.290878
23	MET. CICLO HEXANO	.001857	.000000	.003250
24	3 MET. HEPTANO	.003157	.000000	.005525
25	OCTENO 1	.002879	.000000	.005038
26	N NONANO	.001207	.000000	.002113
27	TOLUENO	.008357	.000000	.014625
28	ORTO XILENO	.004179	.000000	.007313
29	PARA XILENO	.006500	.000000	.011375
30	ETIL BENZENO	.002600	.000000	.004550
31	1 MET. 3 ETIL BENZENO	.010586	.000000	.018525
32	1,2,3 TRIMET. BENZENO	.001857	.000000	.003250
33	1,2,4, TRIMET. BENZENO	.003622	.000000	.006338
34	NAFTALENO	.001393	.000000	.002438

TABELA 4.9 - COMPOSICOES PARA A CARGA 2 NO PONTO OTIMO

COMPOSICOES DE CARGA, TOPO E FUNDO NO PONTO OTIMO
CARGA 3 (d = 692.8 kg/m3)

No	COMPOSTO	XF	XD	XB
1	ETANO	.014493	.044995	.000000
2	ETENO	.000867	.002601	.000000
3	PROPANO	.040992	.123021	.000000
4	PROPENO	.100789	.302480	.000000
5	N BUTANO	.019505	.058413	.000061
6	ISO BUTANO	.047406	.142230	.000021
7	ISO BUTENO	.057113	.171341	.000032
8	2 MET. 2 BUTENO	.005787	.003904	.006728
9	CIS 2 BUTENO	.018553	.055525	.000077
10	TRANS 2 BUTENO	.026439	.079199	.000073
11	BUTADIENO 1,3	.000433	.001300	.000000
12	N PENTANO	.000814	.000699	.000871
13	ISO PENTANO	.008134	.013817	.005294
14	2 MET. PENTANO	.002925	.000006	.004383
15	3 MET. PENTANO	.001625	.000001	.002436
16	2 MET. PENTENO 2	.002058	.000001	.003086
17	CICLOPENTENO	.002058	.000120	.003027
18	3 MET. CIS PENTENO 2	.386407	.000099	.579453
19	2 MET. HEXANO	.006500	.000000	.009748
20	2 DIMET. HEXANO	.003683	.000000	.005524
21	MET. CICLO PENTANO	.002708	.000000	.004061
22	CICLO HEXANO	.193908	.000000	.290807
23	MET. CICLO HEXANO	.002167	.000000	.003249
24	3 MET. HEPTANO	.003683	.000000	.005524
25	OCTENO 1	.003358	.000000	.005036
26	N NONANO	.001408	.000000	.002112
27	TOLUENO	.009750	.000000	.014622
28	ORTO XILENO	.004875	.000000	.007311
29	PARA XILENO	.007583	.000000	.011372
30	ETIL BENZENO	.003033	.000000	.004549
31	1 MET. 3 ETIL BENZENO	.012349	.000000	.018521
32	1,2,3 TRIMET. BENZENO	.002167	.000000	.003249
33	1,2,4, TRIMET. BENZENO	.004225	.000000	.006336
34	NAFTALENO	.001625	.000000	.002437

TABELA 4.10 - COMPOSICOES PARA A CARGA 3 NO PONTO OTIMO

5.1 - Análise do caso de variação de vazão de alimentação

A análise das tabelas 4.5 e 4.6 mostra o seguinte :

- A razão de refluxo ótima não se altera, convergindo para a condição mínima , $R = 1,0$;
- Os rendimentos de GLP e gasolina permanecem inalterados;
- A função objetivo aumenta na proporção do aumento de carga (22,5 %);
- A variação de composição dos produtos é praticamente imperceptível.

Os resultados obtidos são explicados pelo fato de a condição de refluxo mínimo ser a que demanda menor consumo de energia no retervedor e condensador. Uma vez que a razão de refluxo permanece a mesma, para um dado tipo de composição de carga, o intemperismo fixa a composição do produto de topo, não podendo assim haver alteração no perfil de rendimentos dos produtos com variações de vazão.

5.2 - Análise do caso de variação de composição da alimentação

A análise dos dados das tabelas 4.7,4.8,4.9 e 4.10, mostra o seguinte :

- A razão de refluxo ótima não se altera, convergindo para a condição mínima, $R = 1,0$;
- Aumento do rendimento de GLP para a carga 2 e diminuição para a carga 3;
- Diminuição da carga térmica do retervedor para a carga 2 e

- aumento desta para a carga 3;
- Aumento da carga térmica do condensador para a carga 2 e diminuição desta a carga 3;
- Diminuição da função objetivo para a carga 2 e aumento para a carga 3;
- Para os três casos as densidades dos produtos de topo e fundo obtidas são praticamente idênticas;
- As composições dos produtos obtidos nos três casos são praticamente idênticas.

Os resultados obtidos aqui também são explicados pelo fato de sempre se convergir à razão de refluxo mínima, em função da menor demanda de energia e conseqüentemente maior valor da função objetivo. Assim para a mesma razão de refluxo, o intemperismo fixa a composição do produto de topo, obtendo-se rendimentos de produtos diferenciados que refletem a composição da carga (teores de leves e pesados).

Assim, chegamos à conclusão que a operação maximizada da coluna coincide com o valor mínimo da razão de refluxo, estando a vazão de GLP limitada pelo valor do intemperismo.

Uma sugestão a ser feita para a operação da coluna é a da verificação (experimental) das vazões mínimas de líquido no interior desta, a fim de se poder operá-la na condição de refluxo mínimo. Uma vez descoberta esta vazão, é razoável a execução do programa de otimização para se descobrir o valor de maior rentabilidade, pois conforme vimos nas cargas estudadas, havia um ponto ótimo para a razão de refluxo de 0,5.

Para a execução e convergência total do programa, para um dado tipo de carga, o tempo médio exigido de CPU foi de aproximadamente 8 minutos. O microcomputador utilizado foi um MICROTEC

Conclui-se desta forma que o tempo necessário à otimização da coluna é bastante satisfatório, podendo se constituir em uma boa ferramenta para a tomada de decisões referentes à maximização operacional da coluna, quando sujeita à perturbações de processo.

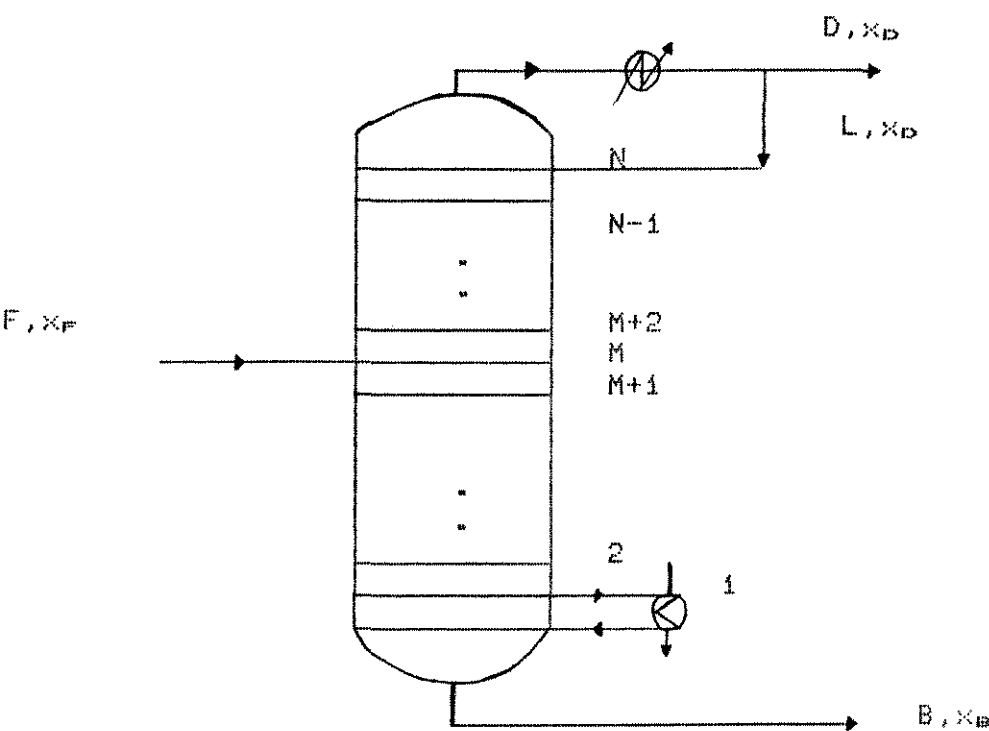
Bibliografia :

- [1] DARBY, M.L., WHITE, D.C. On-line optimization of complex process units. **Chemical Engineering Progress**, v.84, n. 10, p.51-59, out. 1988.
- [2] ROGERS, James A. Optimizing process and economic aims. **Chemical Engineering**, v.92, n.25, p.95-99, dez. 1985.
- [3] LATOUR, Pierre R. On-line computer optimization 1 : what is and where to do it. **Hydrocarbon Processing**, v.58, n.6 , p.73-82, jun. 1979.
- [4] LATOUR, Pierre R. Online computer optimization 2 : benefits and implementation. **Hydrocarbon Processing**, v.58, n.7, p.219-223, jul. 1979.
- [5] SMITH, Buford Don. **Design of equilibrium stage processes**. New York : McGraw-Hill, 1963. 647 p.
- [6] VELOSO, Eduardo. **Destilação Multicomponente : parte I**. Rio de Janeiro : PETROBRÁS. SEDES, s.d. 71 p.
- [7] ROSENDORF, P., KUBICEK, M., SCHONGUT, J. On-line optimization of a retification column. **Computer Chemical Engineering**, v.12, n. 2/3, p.199-203, 1988.
- [8] FLEISCHER, Miguel T., PRETT, David M. Multicomponent distillation calculations using simplified techniques. **Chemical Engineering Commun.** v.10, p.243-260, 1981.
- [9] FOSTER WHEELER LIMITED. Operating manual : Fluid catalytic cracking and gas recovery unit. U-220. PETROBRÁS. REPLAN. New York, 1971. iv.
- [10] FARAH, Marco Antônio. **Caracterização do petróleo e seus produtos**. Parte 1 - Combustíveis. Rio de Janeiro : PETROBRÁS. CENPES. DIVEN, 1989. 286 p.
- [11] PEDROSA NETO, Pedro, MORI, Milton. Simulação de uma unidade de craqueamento catalítico fluidizado. In : Congresso Brasileiro de Engenharia Química, 9, 1992, Salvador, BA. **Trabalhos técnicos**. Salvador : Associação Brasileira de Engenharia Química, 1992. v.2, p.33-40.
- [12] SPANDRI, Renato. **Modelagem e otimização de planta de estireno**. Campinas : UNICAMP, (1992), (Tese de mestrado).
- [13] REID, Robert C., PRAUSNITZ, John Michael, POLING, Bruce E.. **The properties of gases and liquids**. 4.ed. New York : McGraw-Hill, 1987. 741 p.

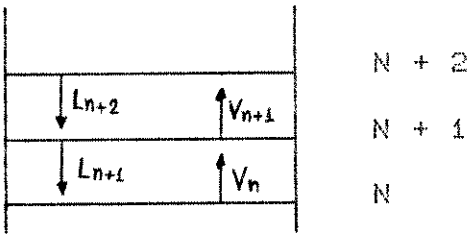
- E143 ABADIE, Elie. Craqueamento Catalítico : transparências. Rio de Janeiro, PETROBRÁS. CENPES. DIVEN, s.d. 1v.
- E153 ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE NORMAS TÉCNICAS. Ponto de ebulição dos 95 % evaporados no G.L.P. Rio de Janeiro, 1970. ABNT MB-285. 5p.
- E163 AMERICAN SOCIETY FOR TESTING AND MATERIALS. Standard Method for volatility of liquefied petroleum (LP) gases. Philadelphia, PA, 1986. ASTM - D 1637.
- E173 SPENDLEY, W., HEXT, G.R., HIMSWORTH, F.R. Sequential applications of simplex designs in optimization and evolutionary operation. *Technometrics*, n.4, p.441-461, 1962.
- E183 HIMMELBLAU, David Mautner. Process analysis by statistical methods. New York : John Wiley & Sons, 1968.
- E193 BOX, M.J. A new method of constrained optimization and a comparison with other methods. *Computer J.*, v.8, p.42-52, 1965.
- E203 BEVERIDGE, Gordon S.G. Optimization : theory and practice Tokyo : McGraw-Hill Kogakusha, 1970. 773p.
- E213 SNYDER, Dale R. Understanding distributed control. *Chemical Engineering*, v.96, n.5, p.87-89, maio 1989.
- E223 FUNK, John C., McALLISTER, Larry. Controlling continuous processes with DCS. *Chemical Engineering*, v.96, n.5, p.90-96, maio 1989.
- E233 CONDON, Benjamin T. Engineering workstations improve productivity. *Chemical Engineering*, v.96, n.5, p.104-107, maio 1989.
- E243 HIMMELBLAU, David Mautner, EDGAR, Thomas F. Optimization of chemical processes. New York : McGraw-Hill, 1988. 652 p.

ANEXO A - 1

DEDUÇÃO DA EQUAÇÃO DO MÉTODO DE SMITH-BRINKLEY



Inicia-se a dedução, fazendo-se um balanço ao redor do estágio $N+1$:



$$L_{n+2} \cdot x_{n+2} + V_n \cdot y_n = L_{n+1} \cdot x_{n+1} + V_{n+1} \cdot y_{n+1}$$

Assumindo-se vazões molares constantes :

$$L \cdot x_{n+2} + V \cdot y_n = L \cdot x_{n+1} + V \cdot y_{n+1} \tag{A1.1}$$

Sendo :

$$y_n = K * x_n \quad (A1.2)$$

Substituindo-se (A1.2) em (A1.1) :

$$L * x_{n+2} + V * K * x_n = L * x_{n+1} + V * K * x_{n+1}$$

Rearranjando chega-se :

$$x_{n+2} - (V * K/L + 1) * x_{n+1} + (V * K/L) * x_n = 0 \quad (A1.3)$$

A equação (A1.3) é uma equação homogênea, podendo ser resolvida pelo método de diferenças finitas :

$$x_n = C * z^n \quad (A1.4)$$

Substituindo-se (A1.4) em (A1.3) :

$$C * z^{n+2} - (V * K/L + 1) * C * z^{n+1} + (V * K/L) * x_n = 0$$

Simplificando a constante C e evidenciando-se z^n fica :

$$z^n * [z^2 - (V * K/L + 1) * z + V * K/L] = 0 \quad (A1.5)$$

O fator de stripping na seção n, S_n , é definido por :

$$S_n = K * V/L \quad (A1.6)$$

Substituindo (A1.6) em (A1.5) :

$$z^n * [z^2 - (S_n + 1) * z + S_n] = 0$$

Como $z^n \neq 0$ então :

$$z^2 - (S_n + 1) * z + S_n = 0$$

Da equação acima achamos :

$$z^1 = S_n$$

$$z^2 = 1$$

Como $x_n = C * z^n$, a resposta será a combinação linear das duas equações :

$$x_n = C_1 * S_n^n + C_2 \quad (A1.7)$$

Analogamente para a seção de esgotamento temos :

$$x_m = C_3 * S_m^m + C_4 \quad (A1.8)$$

Cálculo da constantes C_1 e C_2 :

Para um dado componente :

$$V_N * y_N = D * y_N + R * D * y_N = (1 + R) * D * y_N$$

Definindo-se :

$$f = \frac{B * x_B}{D * x_D} \quad (A1.9)$$

$$F * x_F = D * x_D + B * x_B$$

$$1 = \frac{D * x_D}{B * x_B} + f$$

$$D * x_D = (1 - f) * F * x_F$$

$$\text{Mas : } x_D = y_N$$

$$D * y_N = (1 - f) * F * x_F$$

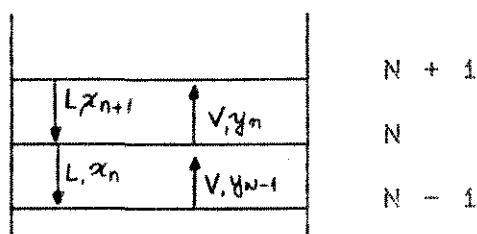
$$V * y_N = (1 + R) * D * y_N \quad (A1.10)$$

$$V * y_N = (1 + R) * (1 - f) * F * x_F$$

$$V * K_N * x_N = (1 + R) * (1 - f) * F * x_F$$

$$x_N = \frac{(1 + R) * (1 - f) * F * x_F}{K * V} = C_1 * (S_n)^N + C_2 \quad (A.1.11)$$

Balanco ao redor do estágio N :



$$L * X_{N+1} + V * Y_{N-1} = L * X_N + V * Y_N$$

$$Y_{N-1} = Y_N + \frac{L}{V} * X_N - \frac{L}{V} * X_{N+1}$$

$$L * X_{N+1} = R * D * Y_N = \frac{R * V}{R + 1} * Y_N$$

Substituindo $L * X_{N+1}$:

$$\frac{R * V}{R + 1} * Y_N + V * Y_{N-1} = V * Y_N + L * X_N$$

Substituindo $V * Y_N$:

$$\frac{R}{(R+1)} * (1+R) * (1-f) * F * X_F + V * Y_{N-1} =$$

$$(1+R) * (1-f) * F * X_F + L * X_N$$

$$R * (1-f) * F * X_F + V * Y_{N-1} = (1+R) * (1-f) * F * X_F +$$

$$L * \frac{(1+R) * (1-f) * F * X_F}{K * V}$$

$$Y_{N-1} = \frac{(1+R) * (1-f) * F * X_F}{V^2} + \frac{L * (1+R) * (1-f) * F * X_F}{K * V^2} -$$

$$\frac{R * (1-f) * F * X_F}{V}$$

$$Y_{N-1} = \frac{(1-f) * F * X_F}{V^2} * \left[V + \frac{L}{K} * (1+R) \right] \quad (A1.12)$$

$$Y_{N-1} = K * X_{N-1}$$

$$X_{N-1} = \frac{(1-f) * F * X_F}{K * V^2} * \left[V + \frac{L}{K} * (1+R) \right] =$$

$$C_1 * (S_n)^{N-1} + C_2 \quad (A1.13)$$

Subtraindo (A1.11) de (A1.12) :

$$X_{N-1} = \frac{(1-f) * F * X_F}{K * V} * \left[1 + \frac{L}{K * V} * (1+R) \right] =$$

$$C_1 * (S_n)^{N-1} + C_2$$

$$X_N = \frac{(1-f) * F * X_F}{K * V} = C_1 * (S_n)^{N-1} + C_2$$

$$\frac{(1-f) * F * X_F}{K * V} * \left[1 + \frac{L}{K * V} * (1+R) - (1+R) \right] =$$

$$C_1 * (S_n)^{N-1} + C_2$$

$$C_1 = \frac{(1-f) * F * X_F}{K * V^2 * (S_n^{N-1} - S_n^N)} * \left[\frac{L}{K} * (1+R) - R * V \right] \quad (A1.14)$$

$$C_2 = X_N - C_1 * (S_n)^N$$

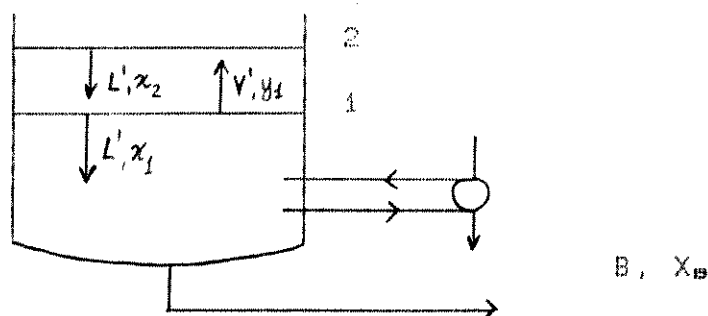
$$C_2 = \frac{(1-f) * F * X_F}{K * V} * \left\{ (1+R) - \frac{1}{V * (S_n^{N-1} - S_n^N)} * \left[\frac{L}{K} * (1+R) - R * V \right] * (S_n)^N \right\} \quad (A1.15)$$

Substituindo C_1 e C_2 na equação (A1.7) :

$$X_n = C_1 * (S_n)^n + C_2$$

$$X_n = \left\{ \frac{(1-f) * F * X_F}{K * V^2 * (S_n^{N-1} - S_n^N)} * \left[\frac{L}{K * V} * (1+R) - R * V \right] * (S_n)^n - S_n^N \right\} + \frac{(1-f) * (1+R) * F * X_F}{K * V} \quad (A1.16)$$

Eliminação de C_3 e C_4 na equação para a seção de esgotamento :



Para o fundo da coluna :

$$L' * X_1 = B * X_B$$

$$f = \frac{B * X_B}{F * X_F}$$

$$L' * X_1 = f * F * X_F$$

$$X_1 = C_B * (S_m) + C_A$$

$$\frac{f * F * X_F}{L'} = C_B * (S_m) + C_A \quad (A1.17)$$

Balanco no prato 1 :

$$L' * X_1 + V' * Y_1 = L' * X_2$$

$$X_1 - \frac{V'}{L'} * K' * X_1 = X_2$$

$$X_2 = X_1 * \left(1 + \frac{K' * V'}{L'} \right) = \frac{f * F * X_F}{L'} * \left(1 + \frac{K' * V'}{L'} \right)$$

Expressão para X_2 :

$$X_2 = \frac{F * X_F}{L'} * \left(1 + \frac{K' * V'}{L'} \right) = C_B * (S_m^2 + C_A) \quad (A1.18)$$

Subtraindo (A1.17) de (A1.18) :

$$\frac{F * X_F}{L'} * \left(1 + \frac{K' * V'}{L'} \right) - \frac{f * F * X_F}{L'} = C_B * (S_m^2 - S_m)$$

$$C_3 = \frac{f * F * X_F * K' * V'}{L' * (S_m^2 - S_m)} \quad (A1.19)$$

$$C_4 = \frac{f * F * X_F}{L'} - C_3 * S_m$$

$$C_4 = \frac{f * F * X_F}{L'} * \left[1 - \frac{K' * V'}{L' * (S_m^2 - S_m)} * S_m \right] \quad (A1.20)$$

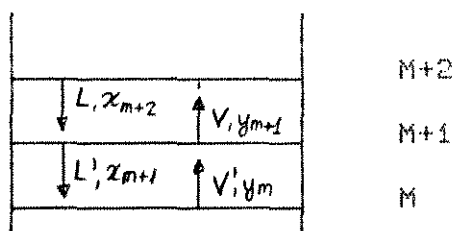
Expressão para X_m :

$$X_m = C_3 * (S_m)^m + C_4$$

Substituindo-se as equações (A1.19) e (A1.20) fica :

$$X_m = \frac{f * F * X_F * K' * V'}{L' * (S_m^2 - S_m)} * [(S_m)^{m+1} - 1] + \frac{f * F * X_F}{L'} \quad (A1.21)$$

Para a obtenção de uma única equação para a coluna toda, realiza-se um balanço de massa ao redor do prato de alimentação :



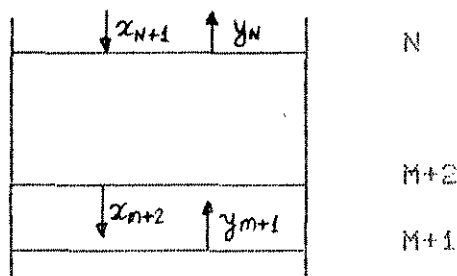
$$L * X_{M+2} + V' * Y_M + F * X_F = L' * X_{M+1} + V * Y_{M+1} \quad (A1.22)$$

Eliminação de Y_{M+1} :

$$L_{N+1} * X_{N+1} = \frac{R}{R + 1} * V_N * Y_N$$

$$Y_N = \frac{(1-f) * (1+R) * F * X_F}{V}$$

Balanco na seção superior da coluna :



$$V * Y_N + L * X_{M+2} = L * X_{N+1} + V * Y_{M+1} \quad (A1.23)$$

Combinando-se (A1.19) com :

$$Y_N = \frac{(1-f) * (1+R) * F * X_F}{V}$$

E isolando-se Y_{M+1} , chega-se :

$$Y_{M+1} = \frac{(1-f) * (1+R) * F * X_F}{V} + \frac{L}{V} * X_{M+2} - \frac{L}{V} * X_{N+1}$$

Fazendo-se $L = R * D$ e $X_{N+1} = Y_N$, fica :

$$Y_{M+1} = \frac{(1-f) * F * X_F}{V} + \frac{L}{V} * X_{M+2} \quad (A1.24)$$

Substituindo Y_{M+1} no balanço para o prato de alimentação :

$$L * X_{M+2} + V' * Y_M + F * X_F = L' * \frac{Y_{M+1}}{K_{M+1}} + V * Y_{M+1} \quad (A1.25)$$

Reagrupando chega-se :

$$V' * Y_M = (1-f) * F * X_F + \frac{L' * (1-f) * F * X_F}{K_{M+1} * V} + \frac{L' * L}{K_{M+1}} * X_{M+2}$$

$$Y_M = K' * X_M \tag{A1.26}$$

Utilizando (A1.21), (A1.26) e (A1.16) para X_{M+2} , substituindo-se em (A1.25), chega-se :

$$V' * K' * \left\{ \frac{f * F * X_F * K' * V'}{L'^2 * (S_M - 1)} * [S_M^{M-1} - 1] + \frac{f * F * X_F}{L'} \right\} =$$

$$(1-f) * X_F + \frac{L' * (1-f) * F * X_F}{K_{M+1} * V} + \frac{L * L'}{K * V^2} * \left\{ \frac{(1-f) * X_F}{K * V^2 * (S_N^{N-1} - S_N)} * \left[\frac{L}{K} * (1 + R) - R * V \right] * (S_N^{M+2} - S_N^N) + \frac{(1-f) * (1+R) * F * X_F}{K * V} \right\}$$

Esta equação, depois de manipulada algebricamente é simplificada na seguinte forma :

$$f_i = \frac{(1-S_{n_i}^{N-M}) + R * (1 - S_{n_i})}{(1-S_{n_i}^{N-M}) + R * (1 - S_{n_i}) + h * S_{n_i}^{N-M} * (1 - S_{m_i}^{M+1})} \tag{A.1.27}$$

(i = 1, ..., N)

Para $K_{M+1} = K$: $h = \frac{L - K * V}{L' - K' * V'} = \frac{L}{L'} * \frac{1 - S_n}{1 - S_m}$

Para $K_{M+1} = K$: $h = \frac{L/K - V}{L'/K' - V'} = \frac{K' * L}{K * L'} * \frac{1 - S_n}{1 - S_m}$

ANEXO A.2

DADOS DA ALIMENTAÇÃO - PROPRIEDADES FÍSICAS

A tabela A2.1 contém as principais propriedades físicas dos componentes da nafta instabilizada utilizada na simulação^{C133}.

Tabela A2.1 - Propriedades físicas dos componentes da nafta instabilizada

COMPOSTO	P.M.	DENS.	A	B	C
1 - Etano	30.1	548	16.6637	1511.42	-17.16
2 - Eteno	28.1	577	15.5368	1347.01	-18.15
3 - Propano	44.1	582	15.7260	1872.46	-25.16
4 - Propeno	42.1	612	15.7027	1807.53	-26.15
5 - N-butano	58.1	579	15.6782	2154.90	-34.42
6 - Iso-butano	58.1	557	15.5381	2032.73	-33.15
7 - Isobuteno	56.1	594	15.7528	2125.75	-33.15
8 - 2-metil 2 buteno	70.1	662	15.9238	2521.53	-40.31
9 - Cis 2 buteno	56.1	621	15.8171	2210.71	-36.15
10 - Trans 2 buteno	56.1	604	15.8177	2212.32	-33.15
11 - Butadieno 1,3	54.1	621	15.7727	2142.66	-34.30
12 - N-pentano	72.2	626	15.8333	2477.07	-39.94
13 - Isopentano	72.2	591	15.6338	2348.68	-40.05
14 - 2-metil pentano	86.2	653	15.7476	2614.38	-46.58
15 - 3-metil pentano	86.2	664	15.7701	2653.43	-46.02
16 - 2-metil penteno 2	84.2	691	15.9423	2725.89	-47.64
17 - ciclopenteno	70.1	745	15.8574	2588.48	-41.79
18 - 3-met. cis-penteno 2	84.2	694	15.9124	2731.79	-46.47
19 - 2-metil-hexano	100.2	679	15.8261	2845.06	-53.60
20 - 2,2 dimetil hexano	114.2	695	15.7431	2932.56	-56.08
21 - Metil ciclo-pentano	84.2	754	15.8023	2731.00	-47.11
22 - Ciclohexano	84.2	779	15.7527	2766.63	-50.50
23 - Metil ciclo-hexano	98.2	774	15.7105	2926.04	-51.75
24 - 3-metil heptano	114.2	706	15.8865	3065.96	-60.74
25 - Octeno-1	112.2	715	15.9630	3116.52	-60.39
26 - N-nonano	128.3	718	15.9671	3291.45	-71.33
27 - Tolueno	92.1	867	16.0137	3096.52	-53.67
28 - Orto-xileno	106.2	880	16.1156	3395.57	-59.46
29 - Para-xileno	106.2	861	16.0963	3346.65	-57.84
30 - Etil-benzeno	106.2	867	16.0195	3279.47	-59.95
31 - 1-met. 3-et.benzeno	120.2	865	16.1545	3521.08	-64.64
32 - 1,2,3 trimet.benzeno	120.2	894	16.2121	3670.22	-66.07
33 - 1,2,4 trimet.benzeno	120.2	880	16.2190	3622.58	-64.59
34 - Naftaleno	128.2	971	16.1426	3992.01	-71.29

Tabela A2.2 - Carga obtida pela simulação do FCC no HYSIM¹¹³

COMPOSTO	COMP. MOLAR	P.M.	DENS.	A	B	C
1 - H ₂ S	0.0223	34.1	993	16.1040	1768.69	-26.06
2 - Eteno	0.0041	28.0	577	15.5368	1374.01	-18.15
3 - Etano	0.0309	30.0	548	15.6637	1511.42	-17.16
4 - Propeno	0.1328	42.0	612	15.7027	1807.53	-26.15
5 - Propano	0.0567	44.0	582	15.7260	1872.46	-25.16
6 - Iso-butano	0.0568	58.1	557	15.5381	2032.73	-33.15
7 - N-butano	0.0285	58.1	579	15.6782	2154.90	-34.42
8 - Iso-buteno	0.1147	56.1	594	15.7528	2125.75	-33.15
9 - 1,3 Butadieno	0.0024	54.1	621	15.7727	2142.66	-34.30
10 - Iso-pentano	0.1030	72.1	591	15.6338	2348.67	-40.05
11 - N-pentano	0.0183	72.1	626	15.8333	2477.07	-39.94
12 - 3 metil 1,2 butadieno	0.0458	68.1	686	15.9800	2541.83	-42.26
13 - 4 metil cis 2 penteno	0.0521	84.2	669	15.7527	2580.52	-46.56
14 - 3 metil trans 2 penteno	0.0467	84.2	698	15.9484	2750.50	-48.33
15 - Ciclohexeno	0.0415	82.1	816	15.8243	2813.53	-49.98
16 - Metil ciclo hexano	0.0384	98.2	774	15.7105	2926.04	-51.75
17 - 2,3 Dimetil hexano	0.0315	114.2	712	15.8189	3029.06	-58.99
18 - Etil ciclo hexano	0.0267	112.2	788	15.8125	3183.25	-58.15
19 - Orto-xileno	0.0283	106.2	880	16.1156	3395.57	-59.46
20 - N-propil benzeno	0.0299	120.2	862	16.0062	3433.84	-66.01
21 - Iso-butil benzeno	0.0271	134.2	853	15.9524	3512.47	-69.03
22 - Transdecalina	0.0209	138.2	870	15.7989	3610.66	-66.49
23 - N-hexil ciclo pentano	0.0161	154.3	845	16.0140	3702.56	-81.55
24 - N-dodecano	0.0145	170.3	748	16.1134	3774.56	-91.31
25 - 1-Trideceno	0.0080	182.3	766	16.0850	3856.23	-97.94
26 - 1 metil naftaleno	0.0016	142.2	990	16.2008	4206.70	-78.15
27 - N-nonil ciclo pentano	0.0090	196.4	954	16.1089	4096.30	-103.00

Nestas tabelas tem-se :

- P.M. --> peso molecular (kg/kmol)
- DENS --> densidade do líquido a 20 °C
- A --> 1ª constante da equação de ANTOINE (pressão de vapor)
- B --> 2ª constante da equação de ANTOINE (pressão de vapor)
- C --> 3ª constante da equação de ANTOINE (pressão de vapor)

$$P_v = \text{EXP} \left(A - \frac{B}{T + C} \right)$$

Obs : Os seguintes compostos tem temperaturas de referência para a densidade do líquido diferentes de 20 °C :

- Etano : - 183 °C
- Eteno : - 163 °C
- Propano : - 231 °C
- Propeno : - 223 °C

EQUAÇÕES AJUSTADAS PARA ENTALPIA DOS COMPONENTES

Com os dados gráficos de entalpia constantes na referência [5], ajustou-se equações de entalpia como função da temperatura para as fases líquido e vapor de alguns compostos. De outros compostos, no entanto, assumiu-se para pesos moleculares e nº de carbonos na molécula semelhantes, mesma entalpia, devido à dificuldade de obtenção destas equações para estes compostos.

$$H_V = A_H + B_H * T + C_H * T^2$$

Hv ---> BTU/lbmol

T ---> °F

Tabela A2.3 - Equações ajustadas para entalpia dos componentes

	Estado físico	AH	BH	CH	Obs.
ETANO	vapor	8.502E+3	1.268E+1	7.853E-3	T < 250
ETANO	líquido	3.717E+3	9.264E+0	2.760E-1	0 < T < 100
ETANO	líquido	6.720E+3	6.010E-1	4.400E-2	100 < T < 250
PROPANO	vapor	1.210E+4	1.700E+1	-6.000E-2	0 < T < 100
PROPANO	vapor	1.055E+4	2.789E+1	-1.120E-2	0 < T < 100
PROPANO	líquido	4.806E+3	2.166E+1	5.072E-2	T < 250
N-BUTANO	vapor	1.585E+4	2.198E+1	-1.029E-2	T < 200
N-BUTANO	vapor	1.245E+4	3.700E+1	0.000E-0	200 < T < 250
N-BUTANO	líquido	5.820E+3	3.152E+1	2.464E-2	-
CIS/TR. BUTENO	líquido	5.964E+3	2.026E+1	5.319E-2	-
CIS/TR. BUTENO	vapor	1.561E+4	1.870E+1	1.112E-2	-
BENZENO	líquido	5.023E+3	3.215E+1	1.263E-2	-
BENZENO	vapor	2.061E+4	1.991E+1	4.456E-3	-
TOLUENO	líquido	5.877E+3	3.351E-1	2.607E-2	-
TOLUENO	vapor	2.326E+4	2.335E+1	1.295E-2	-
PENTANO	líquido	6.727E+3	3.842E+1	2.778E-2	-
PENTANO	vapor	1.917E+4	3.258E+1	-1.920E-2	-
HEXANO	líquido	2.229E+4	3.613E+1	4.789E-4	-
HEXANO	vapor	7.930E+3	4.227E+1	3.714E-2	-
HEPTANO	líquido	2.511E+4	4.355E+1	3.571E-3	-
HEPTANO	vapor	8.734E+3	4.935E+1	3.452E-2	-
OCTANO	líquido	2.829E+4	4.518E+1	1.681E-2	-
OCTANO	vapor	1.015E+4	1.791E+1	5.294E-2	-

Obs. : As equações de entalpia foram utilizadas nos cálculos térmicos do refeedor e condensador da coluna debutanizadora. Não obstante às igualdades assumidas, estes calores calculados por estas equações frente aos calculados pelo HYSIM, apresentaram erros menores que 10 %, como mostrados na tabela 3.10.

ANEXO A.3

CÁLCULO DO INTEMPERISMO

DESTILAÇÃO EM BATELADA

N --> quantidade inicial de moles de produto

$$\frac{dN}{dt} = -k * N \quad (A3.1)$$

$$N = N_0 * e^{-k * t} \quad (A3.2)$$

Ao termino de 0,5 h (tempo experimental aproximado do teste), para uma percentagem liquefeita final de 5 % tem-se que :

$$0,05 = e^{-k * 0,5} \implies k = 6 \text{ h}^{-1} \quad (N/N_0 \quad V/V_0 = 0,05)$$

$$\frac{d(N * x_i)}{dt} = -k * N * y_i \quad (A3.3)$$

$$x_i * \frac{dN}{dt} + N * \frac{dx_i}{dt} = -k * N * K_i * x_i$$

$$x_i * (-k * N) + N * \frac{dx_i}{dt} = -k * N * K_i * x_i$$

$$\frac{dx_i}{dt} = k * (1 - K_i) * x_i$$

$$x_i(t + dt) = x_i(t) * e^{-k * (1 - K_i) * dt} \quad (A3.4)$$

Cálculo da temperatura :

Normalização dos x_i :

$$x_{i \text{ corr}} = \frac{x_i}{\sum x_i} \quad (A3.5)$$

$$\sum_i K_i(T) * x_{i \text{ corr}} = 1,0 \implies \text{calcula temperatura} \quad (A3.6)$$

$$DV = D * \frac{x_i * PM(i)}{DENS(i)} \quad (A3.7)$$

Repito o cálculo até que :

$$\frac{DV}{DV_0} \leq 0.05$$

Enquanto não atinjo, faço :

$$X_{\text{interior}} = X_{\text{novo}} \quad (\text{A3.8})$$

Retornando, para (A3.4).

O valor de $k = 6 \text{ h}^{-1}$ não levou a bons resultados. Foi necessária a redução de seu valor (evaporação mais lenta) até 0,01, onde se conseguiu bons resultados. Para aumento da velocidade de cálculo e sabendo-se que a evaporação do GLP é mais acentuada no início, utilizou-se um acelerador que duplicava o valor de k a cada vinte iterações.

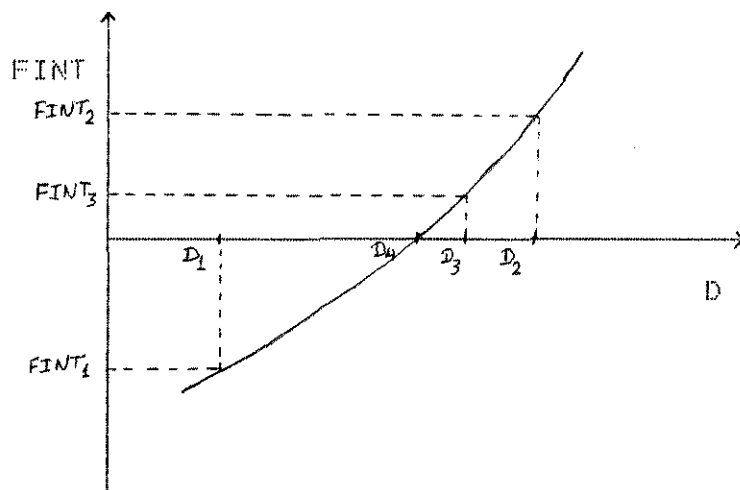
AJUSTE POLINOMIAL DE 2º GRAU PARA CONVERGÊNCIA DO INTEMPERISMO

Define-se a função :

$$FINT = INT - 2,0$$

Onde :

INT $\rightarrow$ intemperismo.



Tomando-se três pontos iniciais da variável D e calculando o valor da função nestes pontos :

ponto 1 : $(D_1, FINT_1)$

ponto 2 : $(D_2, FINT_2)$

ponto 3 : $(D_3, FINT_3)$

Supondo FINT, uma função quadrática de D :

$$FINT = a * D^2 + b * D + c$$

Calculando-se o valor da função para os três pontos têm-se :

$$FINT_1 = a * D_1^2 + b * D_1 + c$$

$$FINT_2 = a * D_2^2 + b * D_2 + c$$

$$FINT_3 = a * D_3^2 + b * D_3 + c$$

Têm-se um sistema de três equações a três incógnitas, a saber : a, b e c.

Este sistema é facilmente resolvido algebricamente por eliminação, chegando-se a :

$$a = \frac{FINT_1 - FINT_3}{D_1^2 - D_3^2 - (D_1 - D_3) * [D_2 + D_3 - \frac{FINT_2 - FINT_3}{D_2 - D_3}]}$$

$$b = \frac{FINT_2 - FINT_3 - a * (D_2^2 - D_3^2)}{(D_2 - D_3)}$$

$$c = FINT_3 - (a * D_3^2 + b * D_3)$$

De posse da equação de FINT, calcula-se a sua raiz, ou seja, o ponto para o qual o valor do intemperismo seja de 2,0 °C. Chama-se este ponto de ponto 4 $(D_4, FINT_4)$.

$$\text{FINT}_4 = 0$$

$$a * D_4^2 + b * D_4 + c = 0$$

$$D_{41} = \frac{-b - \sqrt{b^2 - 4 * a * c}}{2 * a}$$

$$D_{42} = \frac{-b + \sqrt{b^2 - 4 * a * c}}{2 * a}$$

Toma-se, D_{42} que é a maior raiz, tendo-se assim a menor possibilidade de se ter um valor negativo para D_4 .

Com D_4 , pela simulação da coluna, determina-se o valor do intemperismo e consequentemente, FINT_4 .

A seguir, faz-se uma análise dos 3 pontos anteriores, desprezando-se aquele cujo valor de FINT esteja mais longe de zero e se substitui este pelo ponto 4. Com estes três pontos ajusta-se um novo polinômio, e prossegue-se este raciocínio, até que :

$$-0,2 < \text{FINT}_4 < 0,2$$

Correspondendo este ponto, ao valor de D , cujo intemperismo é de $2,0^\circ\text{C}$.