

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS

FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA

**Área de Concentração: SISTEMAS DE PROCESSOS QUÍMICOS
E INFORMÁTICA**

**SEQÜENCIAMENTO E INTEGRAÇÃO ENERGÉTICA
DE COLUNAS DE DESTILAÇÃO.
DESPROPORCIONAMENTO DO TOLUENO**

Autor: Alexandre Denes Arruda

Orientadora: Profa. Dra. Sandra Lúcia da Cruz

Co-Orientador: Prof. Dr. Roger Josef Zemp

**Tese de Doutorado apresentada à Faculdade de
Engenharia Química, como parte dos requisitos
exigidos para a obtenção do Título de Doutor em
Engenharia Química.**

Campinas - SP - Brasil

Julho - 1999

9319612



FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA
BIBLIOTECA DA ÁREA DE ENGENHARIA - BAE - UNICAMP

Ar69s

Arruda, Alexandre Denes
Sequenciamento e integração energética de colunas de destilação: desproporcionamento do tolueno / Alexandre Denes Arruda. --Campinas, SP: [s.n.], 1999.

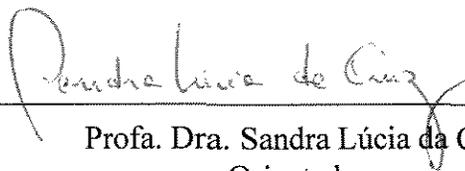
Orientadores: Sandra Lúcia da Cruz, Roger J. Zemp.
Tese (doutorado) - Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Química.

1. Destilação. 2. Separação (Tecnologia). 3. Recuperação do calor. 4. Processos químicos. I. Cruz, Sandra Lúcia da. II. Zemp, Roger J. III. Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de Engenharia Química. IV. Título.

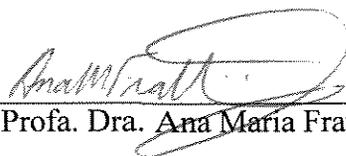
UNIDADE	BC
N.º CHAMADA:	1011/Ano
	de 1999
V. Ex.	
TOMPO SER	39379
PREÇO	229/99
U	<input type="checkbox"/>
D	<input checked="" type="checkbox"/>
PREÇO	R\$ 11,00
DATA	09/11/99
N.º CPD	

CM-00136656-2

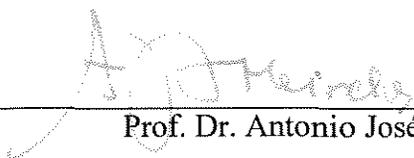
Tese de Doutorado defendida e aprovada em 22 de Julho de 1999 pela banca examinadora constituída pelos professores doutores:



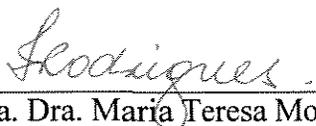
Profa. Dra. Sandra Lúcia da Cruz
Orientadora



Profa. Dra. Ana Maria Frattini Fileti



Prof. Dr. Antonio José de Almeida Meirelles

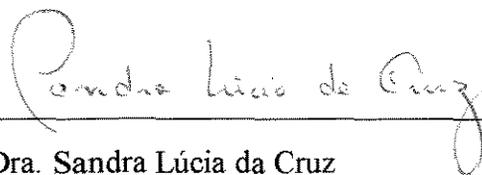


Profa. Dra. Maria Teresa Moreira Rodrigues



Prof. Dr. Mauro Antonio da Silva Sá Ravagnani

Esta versão corresponde a redação final da Tese de Doutorado em Engenharia Química defendida por Alexandre Denes Arruda e aprovada pela Comissão Julgadora em 22/07/99.

A handwritten signature in cursive script, reading "Sandra Lúcia da Cruz". The signature is written in black ink and is positioned above a horizontal line.

Profª. Dra. Sandra Lúcia da Cruz

Orientadora

AGRADECIMENTOS

Gostaria de agradecer a orientação da Dr^a. Sandra Lúcia da Cruz por seu suporte e paciência durante o desenvolvimento deste trabalho, na sua organização e elaboração do texto final.

Ao Dr. Roger J. Zemp pelas várias observações, já na época da primeira qualificação, que indicaram rumos favoráveis ao desenvolvimento deste trabalho. Agradeço também por disponibilizar o uso de subrotinas termodinâmicas e de custos de colunas de destilação.

Também ao Dr. João Alexandre F. Rocha Pereira, Dr. Sérgio Ravagnani e a Dr^a. Ana Maria Frattini Fileti pelo incentivo e correções realizadas durante o curso e exames de qualificação.

A Capes que com seu suporte propiciou realizar este curso em Campinas.

Sou particularmente grato aos meus amigos de Campinas pelas valiosas observações, que muito me acrescentaram e tornaram bastante positiva esta experiência.

Aos meus pais Antônio e Magali, pelo incentivo em prosseguir e finalizar este e tantos outros estudos. Dando-me positivo suporte durante este tempo em que estivemos “separados” um do outro.

Grato também, aos meus amigos Sr. Artur e Sr^a. Beth pela acolhida e amizade em sua família durante o início e decorrer das atividades deste curso em Campinas.

ÍNDICE

Lista de Figuras	ix
Lista de Tabelas	xi
Nomenclatura	xii
Resumo	xv
Abstract	xvi

CAPÍTULO 1. - INTRODUÇÃO 1

1.1. - Objetivos do Trabalho	4
------------------------------	---

CAPÍTULO 2. - ANÁLISE DA LITERATURA 6

2.1. – Introdução	6
2.2. - Economia em Processos Químicos	6
2.3. - Conceituando Síntese de Processos	8
2.4. - Síntese de Sequências de Separação por Destilação	10
2.4.1. - Sequências de Separação por Destilação Convencional	11
2.4.2. - Estudos Anteriores em Sequenciamento de Colunas Complexas	17
2.5. - Restrições de Processo	22
2.5.1. - Velocidade de Inundação e Diâmetro da Torre	23
2.5.2. - Custos e Faixas de Temperaturas das Utilidades	24
2.6. - Integração Energética entre Colunas de uma Sequência	24
2.7. - Métodos de Integração Energética	26
2.8. – Conclusão	31

CAPÍTULO 3. - MÉTODOS UTILIZADOS NA SÍNTESE DE COLUNAS DE DESTILAÇÃO INTEGRADAS 32

3.1. - Introdução	32
3.2. - Cálculo de Colunas de Destilação Multicomponente. Método Aproximado	32

3.2.1. - Cálculo do Número de Pratos	35
3.2.2. - Cálculo do Diâmetro da Coluna	36
3.2.3. - Cálculo da Altura da Coluna	37
3.2.4. - Cálculo da Carga Térmica da Coluna	37
3.3. - Método Proposto para Síntese de Seqüências de Destilação Integradas	37
3.3.1. - Casos Envolvendo um Acoplamento Térmico	40
3.3.2. - Casos Envolvendo mais de um Acoplamento Térmico	42
3.4. - Método Aproximado para Resolução de Colunas com Saída Lateral	46
3.5. - Custos em Colunas de Destilação	49
3.6. - Conclusões	51
CAPITULO 4. - DESPROPORCIONAMENTO DO TOLUENO. SÍNTESE DE COLUNAS DE DESTILAÇÃO	53
4.1. - Introdução	53
4.2. - Síntese de Colunas de Destilação Integradas e Não Integradas	53
4.3. - Síntese de Seqüências de Destilação Não Integradas	55
4.4. - Análise e Aplicação do Método Proposto	57
4.4.1. - Tipo de Seqüência	57
4.4.2. - Tipo de Alimentação	60
4.5. - Seqüências Utilizando Colunas com Saída Lateral Integradas e Não Integradas	61
4.6. - Proposta de Método Simplificado para Obtenção de Seqüências Integradas	64
4.7. - Fatores que Influenciam o Seqüenciamento de Colunas de Destilação	69
4.8. - Principais Fatores	71
4.8.1. - Tipo de Configuração	71
4.8.2. - Pressão da Coluna	71
4.8.3. - Composição da Alimentação	73
4.8.4. - Vazão de Alimentação	78
4.8.5. - Volatilidade Relativa	80

4.9. - Seqüências Complexas Não Integradas	81
4.9.1. - Separação Fácil entre os Componentes	81
4.9.2. - Separação Difícil entre os Componentes Leves	82
4.9.3. - Separação Difícil entre os Componentes Pesados	83
4.9.4. - Separação Difícil entre os Componentes de Meio	84
4.10. - Conclusões	85
CAPÍTULO 5. - CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS	87
5.1. - Conclusões	87
5.2. - Sugestões para Trabalhos Futuros	88
REFERÊNCIAS BIBLIOGRAFICAS	89
APÊNDICE A	93
A) Subrotina DESTILAÇÃO	93
B) Subrotina COMPLEXA	101
C) Subrotina CUSTOS	104
D) Subrotina COLCOST1	106
APÊNDICE B	123
A) Subrotina INTSIMPLS	123
B) Subrotina INTCOMPLX	132

LISTA DE FIGURAS

1.1	Diagrama de blocos com as etapas de produção do benzeno	3
2.1	Diagrama cebola	9
2.2	Processo de separação utilizando (a) um sistema de destilação convencional e (b) um sistema de colunas complexas	17
2.3	Alternativas de projeto para separação de misturas ternárias	20
2.4	Seqüência de colunas de destilação não integradas	25
2.5	Soluções possíveis para seqüências integradas e não integradas	25
2.6	Diagrama Q Δ T para duas seqüências diferentes	27
2.7	Sistema de destilação multiefeito	28
2.8	Diagrama Temperatura –Entalpia	29
2.9	Diagrama temperatura - entalpia para o sistema benzeno/ tolueno/ xileno (a) sem integração; (b) com integração.	30
2.10	Sendo inviáveis as estruturas A e B, a estrutura C torna-se inviável	30
3.1	Formas de integração de energia	39
3.2	Integração energética entre colunas de destilação simples.	39
3.3	Diferentes modos de acoplamento térmico.	42
3.4	Exemplos de acoplamento térmico com duas colunas	43
3.5	Modelos simplificados para coluna de parede dividida	47
4.1	Seqüências possíveis para a separação de quatro componentes na alimentação	55
4.2	Valores para as melhores seqüências integradas - razão molar igual a 10	58
4.3	Outras formas de integração da seqüência I	59
4.4	Outras formas de integração da seqüência III	59
4.5	Curvas comparativas de custo de seqüências simples com e sem integração	62
4.6	Seqüências utilizando colunas com saída lateral	63
4.7	Integração de calor em seqüências utilizando colunas com saída lateral	63
4.8	Custo de seqüências utilizando colunas com saída lateral	64
4.9	Temperaturas de topo (ti) e base de cada coluna na seqüência	65
4.10	Seqüência direta ótima não integrada	66

4.11	Colunas integradas (a) Novak (1996), (b) método seção 3.3 (c) método simplificado	67
4.12	Seqüência ótima não integrada	68
4.13	Resultados para as seqüências integradas (a) Porter (1987), (b) método simplificado	69
4.14	Possibilidades de integração entre duas colunas de destilação	70
4.15.	Aumento da pressão nas seqüências do D12-Tipo I	72
4.16	Variação do custo da coluna 2 com o ΔT no trocador de integração	73
4.17.	Variação da composição de benzeno (sistema: benzeno/ tolueno/ o-xileno)	74
4.18	Variação da composição de benzeno (sistema: benzeno/ tolueno/ o-xileno)	75
4.19	Variação da composição de benzeno em sistema benzeno/ o-xileno/ p-xileno (F=1900 moles/h)	76
4.20	Variação da composição de benzeno em sistema benzeno/ o-xileno/ p-xileno	76
4.21	Variação da composição de n-hexano em sistema i-pentano/ n-pentano/ n-hexano	77
4.22	Variação da composição de benzeno em sistema i-pentano,n/pentano/n-hexano.	78
4.23	Variação da alimentação de uma mistura equimolar de btx em uma seqüência direta.	79
4.24	Variação da alimentação de uma mistura de b-t-x-tmb em uma seqüência direta.	79
4.25	Variação da volatilidade relativa em uma mistura equimolar de três componentes.	80
4.26	Variação do custo da seqüência com a composição de benzeno (xf)	82
4.27	Variação do custo da seqüência com a composição de n-pentano (xf)	83
4.28	Variação do custo da seqüência com a composição de benzeno (xf)	84
4.29	Variação do custo da seqüência com a composição de benzeno (xf)	85
4.30	Seqüência final para desproporcionamento do tolueno (a) sem e (b) com integração	86

LISTA DE TABELAS

2.1	Número de seqüências de separadores tipo <i>sharp</i>	12
2.2	Métodos para a síntese de seqüências de separações	12
2.3	Custo e temperatura de utilidades	24
4.1	Composição do efluente do reator, com diversas razões molares H ₂ /H _c	53
4.2	Composição do efluente do reator para diversas composições de m-xileno	54
4.3	Composição da alimentação nas colunas de destilação	54
4.4	Custo total anual (em R\$) de cada seqüência, para várias razões H ₂ /H _c .	56
4.5	Custo total anual (em R\$) de cada seqüência, para várias composições de m-xileno	56
4.6.	Variação da composição de benzeno para vários arranjos integrados da seqüência I	60
4.7	Custos (R\$) para seqüências com colunas saída lateral	62
4.8	Composição da mistura benzeno/tolueno/o-xileno/difenil	65
4.9	Composição da mistura teste (Porter et all, 1987)	67
4.10	Custo de seqüências para vários tipos de alimentações	71

NOMENCLATURA

A_C	: Área do condensador.
A_R	: Área do refeedor.
B	: Taxa molar na base.
CES	: Coeficiente de separação
C_1 e C_2	: Constantes da equação de Hengstebeck-Geddes.
C_{aux}	: Custo dos equipamentos auxiliares.
C_{coluna}	: Custo da coluna.
C_{util}	: Custo de utilidades.
C_{eq}	: Custo do equipamento.
C_v	: Custo do vapor.
D	: Diâmetro da coluna.
d	: Taxa molar no destilado.
F_e	: 0,3, fator que depende do espaçamento entre os pratos.
f	: Taxa molar na alimentação.
H_{VPD}	: Entalpia do vapor no destilado.
h_{liqd}	: Entalpia do líquido no destilado.
h_{liqb}	: Entalpia do líquido na base.
h_{liqd}	: Entalpia do líquido no destilado.
h_{liqf}	: Entalpia do líquido na alimentação.
H_c	: Altura da coluna.
I	: Período de retorno do investimento.
K	: Constante de equilíbrio.
k	: fator de conversão para o custo de capital do equipamento para custo anualizado (= 0,3)
MOL	: Peso molecular.
N	: Número de estágios.
n	: Número de componentes na alimentação.
PS_2	: Taxa molar da corrente lateral.
P	: Pressão.

Q	: Carga térmica.
Q_C	: Carga térmica. do condensador
Q_R	: Carga térmica do refeedor.
q	: Condição térmica da alimentação.
R	: Razão de refluxo.
R_f	: Razão molar das taxas dos produtos (destilado e base).
rc	: 1 se o componente existe na corrente que entra na coluna, $j=0$ se ao contrário.
S_n	: Número de seqüências.
TAC	: Custo anual total.
Taxa	: Taxa corrente.
T	: Temperatura.
T_b	: Temperatura da base.
T_c	: Temperatura crítica.
T_d	: Temperatura do destilado.
T_{vapor}	: Temperatura do vapor.
V	: Taxa molar do vapor.
v^*	: Velocidade de inundação.
v	: Velocidade do vapor.
x	: Fração molar.
x_D	: Fração molar do destilado.
x_F	: Fração molar na alimentação.
x_p	: Fração molar de meio em uma coluna lateral.
x_B	: Fração molar da base.
z_c	: Fator de compressibilidade.
Subscritos	
1	: Refere-se a coluna 1.
2	: Refere-se a coluna 2.
3	: Refere-se a coluna 3.
A, B, C	: Componentes em ordem crescente de volatilidade.
g	: Gás.

HK	: Componente chave pesado.
inund	: Inundação.
i, j	: Componentes individuais em uma mistura multicomponente.
i, j, k	: Índice de qualquer coluna em uma seqüência.
l	: Líquido.
LK	: Componente chave leve.
min	: Mínimo.

Letras Gregas

α	: Volatilidade relativa.
ΔT	: Diferença de temperatura.
Δ_{LH}	: $(\alpha_{LK, HK} - 1)$.
ρ	: Densidade.
κ	: Variável capacidade de ebulição.
ϕ	: Raiz da equação de Underwood.

RESUMO

ARRUDA, ALEXANDRE DENES, **Seqüenciamento e Integração Energética de Colunas de Destilação. Desproporcionamento do Tolueno**, Tese de Doutorado - Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, 1999. 136 p.

Este trabalho visa o estudo do processo de desproporcionamento do tolueno. Industrialmente estas unidades são constituídas pela (i) seção de reação, (ii) seção de separação e (iii) seção de reciclo. Com o aumento da demanda de benzeno a seção de separação torna-se potencialmente favorável a redução dos custos de processamento.

Este estudo se dirige portanto, no sentido de diminuir o custo total da seção de separação, realizada por destilação, dos produtos da reação. Métodos de síntese e integração de seqüências de colunas de destilação são as ferramentas utilizadas para a análise deste problema.

Nos capítulos iniciais são apresentadas as técnicas mais utilizadas em síntese e integração de colunas: os métodos heurísticos (a partir da experiência de projetos anteriores), as equações preditivas, a inteligência artificial e os métodos aproximados são os mais aplicados. Nas técnicas de integração energética, destaca-se o $\Sigma Q\Delta T$ e a programação não linear.

Os produtos da reação de desproporcionamento do tolueno e portanto, alimentação das colunas, se realizam com diferentes composições. O método utilizado parte de um balanço de energia no trocador de integração que no final resultará no acréscimo de um refeedor ou de um condensador na coluna integrada. Independente do acréscimo destes equipamentos, cada coluna de destilação na seqüência integrada possui um condensador e um refeedor. O método proposto é computacional, e fornece o custo total de uma determinada seqüência de destilação, bem como, as possíveis melhores formas de integração. O mesmo procedimento é realizado para seqüências apresentando colunas com saída lateral. Comparações são realizadas entre as seqüências não integradas de modo a se obter a seqüência mais econômica. Por fim a integração destas seqüências é analisada e seu resultado é incorporado aos dados anteriores obtidos para avaliação.

Neste trabalho estão incluídos o desenvolvimento de um método simplificado baseado nas temperaturas de topo e base das colunas na seqüência. E uma análise de como a alimentação (componentes, volatilidade, vazão, etc) afeta a escolha da melhor seqüência de destilação convencional e com saída lateral.

Palavras Chave:

Destilação, Síntese de Processos, Integração energética.

ABSTRACT**Sequence and Energy Integration of Distillation Columns. Disproportionation of Toluene.**

This work's goal is to study the process of disproportionation of toluene. Industrially this process is composed of the units (i) reaction section, (ii) separation section and (iii) recycling section. The incline in the demand of benzene makes the separation section become potentially favourable to the reduction of processing costs.

Therefore the orientation of this study is to reduce the total cost of the separation section of the products reaction performed by distillation. The tools used in the analysis of the problem are the synthesis methods and the sequential integration of the distillation columns.

The first chapters presents the techniques often used in the synthesis and integration of columns: the heuristic methods (based on experiences from previous projects), the predictive equations, artificial intelligence and the approximate methods are mostly applied. During the integration, the $\Sigma Q\Delta T$ and the non-linear programming are more relevant.

The products from the disproportionation of toluene and subsequently from the columns' feeding take place via different compositions. The computational method was selected as it offers the total cost of an established sequence of distillation, as well as the best possible forms of integration.

The same procedure is done on sequences presenting lateral exits for their columns. Comparisons are performed among non-integrated sequences to obtain the most economic sequence. Finally the integration of these sequences is analysed and its results incorporated to previous data collected for the evaluation.

This work includes the development of a simplified method for obtaining integrated sequences as well as the analysis of how feeding (components, volatility, flowing, etc) affects the choice of the best distillation sequence. This study also covers columns with lateral exit.

Key words:

Distillation, Process Synthesis, Energy Integration.

1. - INTRODUÇÃO

Síntese de processos é uma atividade que exige criatividade. Criatividade no sentido de minimizar esforços para encontrar a melhor, ou as melhores, alternativas de processo para uma tarefa específica.

A experiência envolvida na questão também é fator essencial, e sem dúvida, determinará o sucesso na elaboração da nova unidade ou planta química. Assim, síntese não é uma atividade individual e sim de equipe.

O objetivo da síntese de processos portanto, é determinar de uma maneira segura e confiável uma metodologia capaz de propor um novo caminho de produção, ou mesmo, modificações de projeto.

De forma a auxiliá-la nestas atividades existe uma série de áreas de conhecimento aplicáveis como a inteligência artificial, métodos de otimização, simulação de processos, simulação analógica, entre outras.

Entretanto, a síntese de processos não se dissocia, e nem poderia, da experiência do engenheiro ou do projetista de processos. Esta experiência, é inserida através das chamadas aproximações heurísticas, ou seja, regras que orientam e agilizam a elaboração do projeto de processo.

Visto ser uma área ampla, torna-se necessário delimitar o problema, de modo a iniciar uma abordagem deste assunto. Verificando a literatura, encontraremos diversas linhas de trabalho como:

- i. Projeto de plantas conceituais;
- ii. Síntese de malhas de trocadores de calor;
- iii. Síntese de seqüências de destilação;

- iv. Síntese de seqüências de destilação com integração;
- v. Síntese de malhas de reatores;
- vi. Síntese de estruturas de controle para processos químicos.

Dentre as linhas (i) a (vi), a síntese de seqüências de destilação é com certeza o sistema de processo mais estudado nas últimas décadas. Isto porque a destilação é o método de separação mais largamente utilizado na indústria química e petroquímica, sendo portanto, uma das principais fontes de custos de capital e de operação, com possibilidades de serem reduzidos.

Deste modo, os itens (iii) e (iv) contribuem fortemente para a redução destes custos. A síntese de seqüências de destilação age basicamente sobre a rota de obtenção dos produtos puros e tem um efeito mais marcante sobre o custo do equipamento, enquanto que a síntese de seqüências com integração visa diminuir o consumo de utilidades e portanto os custos de operação. Esta conceituação não é rigorosa, mas fornece uma idéia geral de como o problema é analisado.

Como em todo processo industrial, o custo do produto está intimamente vinculado ao processo de fabricação, ou seja, aos custos dos equipamentos e custos operacionais. A redução destes custos, associada à qualidade do produto, é por certo um dos objetivos principais na elaboração de qualquer processo industrial.

O processo de produção de benzeno através do tolueno (reação (1.1)), por exemplo, se insere perfeitamente dentro das necessidades e objetivos acima expostos. A reação (1.1), que pode ser catalítica ou não, apresenta a vantagem de só produzir produtos valorizados (benzeno e xilenos) com pouca formação de metano.



O benzeno principalmente, tem grande utilização industrial e comercial. As três principais aplicações são na produção de etilbenzeno, cumeno e ciclohexano. Outros produtos químicos derivados do benzeno são estireno e fenol. Os produtos manufacturados incluem plásticos, resinas e outros intermediários empregados em inseticidas, drogas e detergentes.

Ressalte-se ainda que o consumo de benzeno cresceu em 1994 (Hydrocarbon Processing). Este crescimento se mostrou na faixa de 1,2% (em 1992) a 1,5% (em 1993) com recordes na produção de anilina e etilbenzeno/estireno. A expectativa em 1998 era de crescimento da taxa de benzeno, em média, em de 5,8%, de modo a alcançar o nível de 37,2 milhões de toneladas da produção global.

Na América do Sul a demanda de benzeno declinou desde 1989, mas com a economia mundial em crescimento, espera-se que volte a aumentar. Assim, a partir da década de setenta, vários processos tem sido estudados como mostra a Figura 1.1, a qual exemplifica as etapas de produção do benzeno.

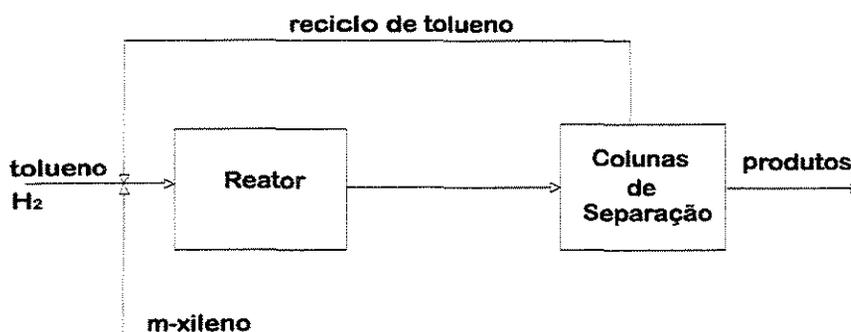


Figura 1.1. Diagrama de blocos com as etapas de produção do benzeno

Neste caso, a principal etapa de produção com possibilidades de redução de custos, é a da separação por destilação contínua.

No processo de destilação contínua, o número de colunas necessárias para realizar a separação de uma dada mistura nos seus componentes puros depende do número de componentes. Para separar uma mistura de N componentes com colunas convencionais são necessárias $N-1$ colunas.

No processo de fabricação do benzeno, trabalha-se com oito componentes, agrupados como quatro componentes principais: benzeno, tolueno, uma mistura de xilenos e outra de trimetilbenzenos. A alimentação para a primeira coluna é tratada como contendo quatro componentes, que exigirão três colunas de destilação para se obter os produtos desejados. Deste modo, toda a atenção é voltada para estas colunas com o objetivo de se reduzir o custo total da separação.

Entretanto, não é só o fator econômico que determina se um sistema é viável ou não. Na análise do resultado final deve-se observar se as condições de operabilidade, flexibilidade, controlabilidade e segurança são satisfeitas. Também, durante o processo de síntese, as restrições de temperatura de decomposição dos produtos químicos, tipo de material utilizado e seus limites, qualidade das utilidades (temperatura, pressão, etc) entre outras, devem ser levadas em consideração.

1.1. - Objetivos do Trabalho

Considerando a importância da produção de benzeno, o presente trabalho tem como objetivo determinar a melhor seqüência integrada e não integrada energeticamente, com colunas de destilação simples ou com saída lateral, aplicada ao processo de separação dos produtos do desproporcionamento do tolueno e isomerização do m-xileno.

De modo a realizar tal tarefa se introduz no início do trabalho conceitos econômicos e de síntese de processos. Uma análise da literatura é realizada abrangendo a síntese de seqüências de destilação, com e sem integração energética, tanto para colunas convencionais quanto para colunas com saída lateral.

Para se encontrar as seqüências economicamente atrativas desenvolve-se um método que permite a obtenção de uma seqüência de colunas de destilação sem integração bem como as diversas possibilidades de integração energética. O método propicia também encontrar o custo total de uma seqüência com colunas convencionais, ou com saída lateral, integradas e não integradas. Desta forma, com o uso deste procedimento é obtida a melhor seqüência não integrada e integrada, para a etapa de separação dos produtos de reação, aplicado ao caso do desproporcionamento do tolueno.

Em seguida, um segundo método é proposto para a obtenção de seqüências de destilação integradas. Tal método é qualitativo, ou seja, mostra apenas as possíveis formas de acoplamento térmico economicamente atrativos sem entretanto apresentar o custo das seqüências.

Por fim, no âmbito desse desenvolvimento, estudou-se a influência de variáveis como: condições da alimentação, volatilidade relativa, vazão e composição. A influência destas variáveis foi verificada para as seqüências convencionais integradas e não integradas, bem como em seqüências utilizando colunas com saída lateral sem integração.

2. - ANÁLISE DA LITERATURA

2.1. - Introdução

Síntese de processos é hoje uma área amplamente discutida com inúmeros trabalhos desenvolvidos que vão desde sistemas envolvendo alguns equipamentos até a criação de fluxogramas inteiros de plantas industriais.

A abordagem a seguir tem por objetivo apresentar a síntese de processos de modo a situar o contexto no qual ela é estudada. É neste sentido que apresentamos uma área mais específica dentro da mesma: a síntese de seqüências de colunas de destilação e a integração energética.

Antes de analisarmos os últimos tópicos iniciamos com uma discussão breve de questões e conceitos referentes a economia e síntese de processos químicos. Particularmente, neste último item, veremos que a síntese de processos faz parte de um universo em que a sua participação é de extrema importância, mas que ainda hoje soa pouco familiar dentro da terminologia técnica em engenharia.

2.2. - Economia em Processos Químicos

O projeto de sistemas de processos requer a realização de estudos econômicos que permitam determinar a viabilidade de execução da planta. Tais estudos proporcionam apenas uma estimativa econômica preliminar. Os principais custos envolvidos são os de operação e de capital.

Custos de Operação

Tendo sido calculadas as vazões e temperaturas das correntes do processo é possível calcular as correntes de utilidade desta unidade. Se for conhecido o custo unitário destas utilidades, pode-se calcular o custo de utilidades total. Combinando o custo destas utilidades

com os custos de matéria-prima e outros gastos de operação podemos obter o somatório dos custos de operação.

Custos de Capital

As melhores estimativas de cotação de um equipamento são obtidas diretamente com o vendedor. Porém, para projetos conceituais, ou seja, um projeto que está na sua concepção inicial são necessárias estimativas mais simples e rápidas.

Normalmente são utilizadas correlações para os custos dos equipamentos. Por exemplo, os custos de capital de um trocador de calor são expressos em termos de área de troca térmica, e não em função de detalhes mais específicos de projeto. De maneira análoga, os custos de um forno são dados em termos de carga térmica requerida e os custos de uma coluna de destilação são especificados em termos de sua altura e diâmetro (Douglas, 1988).

Custos de Instalação de Equipamento

A determinação do custo de instalação de um equipamento esta baseada em estimativas. Uma destas estimativas é proposta por Guthrie (1969) onde ele apresenta um grupo de correlações no qual inclui informações sobre custos de compra e custos de instalação de vários equipamentos de processos.

Uma vez obtidos os custos de operação e de capital podemos obter o custo anual total (TAC). Um modelo para o custo anual total é simplesmente a soma dos custos individuais de operação e capital. Para uma coluna de destilação podemos escrever o modelo de custo (Modi e Westerberg, 1992) como:

$$TAC = C_{util} (1 - taxa) + C_{eq} / I \quad (2.1)$$

onde C_{util} é o custo de utilidades e C_{eq} é o custo do equipamento (torre, pratos, condensador e refulvedor). *Taxa* é a taxa corrente de interesse I é o período de retorno do investimento.

2.3. - Conceituando Síntese de Processos

Dentro de um projeto de processo determinados estágios necessitam ser elaborados até que se alcance a sua perfeita conclusão. Estas etapas segundo Seader (1973) e Westerberg (1980) incluem três estágios essenciais: síntese, análise e cálculos. Com isto, projetos de processos tornam-se muitas vezes complicados devido o inter-relacionamento existente entre estes três estágios.

Em um sentido geral os termos síntese e análise podem ser considerados opostos frente aos seus objetivos. A análise de processos desenvolve-se de forma mais dedutiva e quantitativa, decompondo o sistema em partes menores de modo a estudá-los de maneira mais específica. Síntese de processos, por outro lado, permanece em grande parte uma arte, pois necessita de bastante criatividade, inovação e invenção. Fatores estes essenciais no desenvolvimento de metodologias que respondam ao problema solicitado, requerendo considerável conhecimento e experiência dos princípios de análise antes que ela mesma possa ser aplicada efetivamente (Seader, 1973).

De modo a esclarecer este conceito seguem-se as seguintes definições:

“Síntese de processos (Gundersen, 1991) é uma metodologia sistemática para a seleção e interconexão de operações unitárias e especificação de suas condições de operação, de modo a desenvolver um fluxograma conceitual que produza, ao longo de um caminho seguro e ambientalmente aceitável, os produtos desejados a partir de materiais disponíveis com máximo lucro, ao mesmo tempo que a planta exige flexibilidade, operabilidade e controlabilidade.”

“Síntese de processos (Umeda,1983) é a criação de um sistema operacional composto de unidades de processamento físico e/ou químico interagindo umas com as outras de modo que:

- (1) certos objetivos econômicos são otimizados;

- (2) as especificações dos produtos são alcançadas;
 (3) restrições de operação determinadas pelas unidades de processamento, códigos de segurança, regulamentos ambientais, etc, são satisfeitos.”

Smith e Linnhoff (1988) apresentam um diagrama no qual mostram a síntese de processos estabelecida de forma hierárquica. Este diagrama, mostrado na Figura 2.1, assemelha-se a uma cebola. No núcleo está o reator onde são tomadas decisões. Finalizando cada nível da estrutura, o procedimento segue até completar as necessidades do processo.

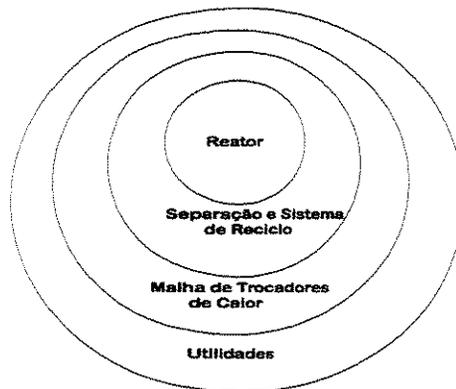


Figura 2.1. Diagrama cebola.

De forma semelhante Douglas (1985) estabelece uma metodologia para o desenvolvimento de um projeto de processo conceitual em níveis hierárquicos. Em cada nível da estrutura são feitos refinamentos mediante análise das informações disponíveis. Estas informações são traduzidas na forma de uma equação potencial econômico (PE), equação (2.2), que indica se o nível analisado possui um interesse econômico.

$$pe = \left[\text{valor dos produtos} \right] + \left[\text{custo de material base} \right] + \left[\text{custo de capital anualizado} \right] + \left[\text{custo de energia} \right] \quad (2.2)$$

Caso positivo passa-se ao nível seguinte. A técnica é dividida da seguinte forma em:

1. Batelada vs. Contínuo;
2. Estrutura de entrada e saída do fluxograma;
3. Estrutura de reciclo do fluxograma e considerações do reator;
4. Especificação do Sistema de Separação;
 - 4.1 Sistema de Recuperação de Vapor;
 - 4.2 Sistema de Recuperação de Líquido;
5. Malha de trocadores de calor.

O modo como o método acima é apresentado permite de forma bastante prática a análise de cada etapa do processo ao mesmo tempo em que este vai se desenvolvendo, sendo possível também a procura das melhores alternativas para aquele nível estudado, ou seja, a sua otimização. Isto favorece a eliminação de projetos economicamente pouco atrativos já nas etapas iniciais do desenvolvimento do novo fluxograma. Aliado a isto esta proposta leva consigo uma forma didática na abordagem do problema de tal forma que se insere com facilidade no contexto acadêmico, visto que pode ser desenvolvido com pouco auxílio computacional.

2.4. - Síntese de Seqüências de Separação por Destilação

Destilação é uma operação unitária extremamente investigada e desempenha um importante papel em muitos processos químicos. O desenvolvimento e contínuo refinamento de seqüências de destilação são importantes tarefas de um projeto, tendo uma considerável influência sobre o sucesso comercial de um dado processo de produção (Koehler et al, 1995). O objetivo principal é portanto encontrar o grupo das melhores seqüências de destilação, ou seja, daquelas que possuem um custo total menor, aliado à condições de operação que sejam satisfatórias e que atendam às especificações do processo.

2.4.1. - Seqüências de Separação por Destilação Convencional

O objetivo aqui é:

dada uma única mistura de alimentação multicomponente de condições conhecidas (i.e. taxa da alimentação, composição, temperatura e pressão) sintetizar um processo que possa isolar os produtos desejados da alimentação com um mínimo custo anual (que envolve a soma dos custos de investimento e custos anuais de operação da planta).

As principais considerações para este problema de síntese são:

- somente colunas simples de destilação são consideradas sem integração de energia;
- cada coluna opera com alta recuperação ($\geq 98\%$);
- somente separações do tipo *sharp* isto é, apenas os componentes chaves escolhidos (o leve e o pesado) aparecem em pequenas quantidades na base e no topo respectivamente;
- misturas ou divisões de correntes intermediárias são proibidas;
- a primeira coluna é alimentada com 1900 moles/h;
- alimentação de líquido saturado para cada coluna na seqüência (Thompson e King, 1972).
- integração energética entre as colunas;
- substituição de colunas simples por colunas complexas.

A questão começa a ser definida quando sabemos quantos componentes existem na alimentação. Respondendo esta pergunta podemos ter a dimensão do problema.

Isto porque o número de seqüências possíveis é diretamente dependente do número de componentes na alimentação. A Tabela 4.1 mostra que este número cresce rapidamente de acordo com a equação (2.3) formulada por Thompson e King (1972).

$$S_n = \frac{[2(n-1)]!}{n!(n-1)!} \quad (2.3)$$

Tabela 2.1. Número de seqüências de separadores tipo *sharp*.

Número de componentes, n	Número de seqüências de separadores simples
2	1
3	2
4	5
5	14
6	42
7	132
8	429

Neste sentido inúmeras propostas para sua solução surgiram. Estas propostas tem o objetivo básico de encontrar um pequeno grupo de seqüências que sejam economicamente atrativas. Elas podem ser classificadas em três principais categorias como mostra a Tabela 2.2: métodos matemáticos, estratégias evolutivas e métodos heurísticos que usam regras baseadas no resultado de experiência anteriores:

Tabela 2.2. Métodos para a síntese de seqüências de separações.

Métodos	Vantagens	Desvantagem
Métodos Matemáticos	Demonstração matemática computadorizada. Fácil de encontrar a seqüência sub-ótima	Limitada pelo tamanho do problema
Métodos Evolutivos	Novas seqüências através de evoluções	Estratégia depende de uma boa seqüência inicial
Métodos Heurísticos	Não necessita de bagagem matemática. Fácil de gerar uma seqüência inicial para outros métodos.	As heurísticas frequentemente se sobrepõem.

Assim, a primeira síntese de seqüências de destilação é referida por Lockhart (1947), que estudou a disposição de seqüências de destilação para três diferentes alimentações em uma planta de gasolina natural. Cada alimentação produziria três produtos, requerendo então duas colunas de destilação, as quais foram arranjadas nas formas direta e indireta. Ele concluiu que a seqüência direta não era a ótima quando o componente menos volátil era o constituinte predominante na alimentação.

Harbert (1957) observou que o aquecimento requerido no processo era a única variável mais importante na disposição de colunas de destilação. Ele propôs duas heurísticas para seqüências ótimas:

- separações difíceis por último;
- separação dos componentes da alimentação em duas correntes próximas do equimolar.

Os exemplos considerados foram limitados a uma alimentação com três componentes.

Heaven (1969) abordou o problema de sequenciamento considerando o custo das unidades de destilação. Ele identificou as seguintes quatro heurísticas baseadas em considerações de consumo de energia:

- seqüências diretas são geralmente favorecidas;
- seqüências no qual a alimentação pode ser dividida em duas correntes equimolares devem ser favorecidas;
- separações onde a volatilidade relativa dos dois componentes adjacentes está próxima da unidade devem ser realizadas na ausência de outros componentes;
- separações envolvendo especificações com altas recuperações devem ser reservadas como última na seqüência.

Nishimura e Hiraizumi (1971) expressam a função econômica em termos de volume de torre e carga do refeedor. Eles usaram as duas regras heurísticas:

- seqüência direta é preferida para alimentação tendo uma composição equimolar e volatilidades relativas aproximadamente iguais entre os componentes sucessivos;

- para uma alimentação em que é predominante um componente, esta separação deve ser realizada primeiro.

Powers (1971) delimitou um método heurístico para a criação de um esquema de separação. Propôs quatro heurísticas:

- a seqüência direta é normalmente favorecida;
- se um componente é predominante, ele é removido primeiro;
- componentes corrosivos são removidos antes na seqüência;
- separações difíceis são feitas na última seqüência.

Freshwater e Henry (1975) desenvolveram um trabalho para analisar a validade e a região de aplicabilidade das quatro heurísticas de Heaven (1969). Surpreendentemente para muitos casos considerados, a seqüência direta era a configuração ótima. O estudo, contudo, confirmou uma proporcionalidade direta entre a energia requerida e o custo.

Conclusões similares foram apresentadas por Hlavacek (1978). Observações adicionais de resultados numéricos incluem o seguinte:

- se não existem separações difíceis, os componentes devem ser removidos em ordem crescente de volatilidade;
- sem deixar as separações mais difíceis por último em muitos casos foi o fator dominante.

Lu e Motard (1982) usaram uma função heurística que leva em conta a carga mássica estimada, que deve ser processada por todas as seqüências, e o número de estágios médios para a carga mássica de separação.

Nadgir e Liu (1983a) propuseram um método simples de ordenamento heurístico para sínteses de separações multicomponente. O método envolve a aplicação sequencial das seguintes regras heurísticas:

- favoreça destilação ordinária;

- realize separações difíceis por último;
- remova o componente mais abundante primeiro;
- favoreça separações equimolares 50/50.

Nadgir e Liu (1983b), utilizando o método de procura baseado no coeficiente de separação (CES), fizeram uso da inteligência artificial de modo a evitar as contradições e conflitos existentes entre as heurísticas.

Um parâmetro auxiliar no sequenciamento, chamado de coeficiente de separação (CES) é usado para auxiliar a síntese.

$$CES = R_f \cdot \Delta T \quad (2.4)$$

onde R_f = razão molar das taxas dos produtos (destilado e base) B/D ou D/B; ΔT = diferenças entre os pontos de ebulição entre dois componentes.

Gomez e Seader (1985) propuseram um estudo da síntese de seqüência de destilação através de uma análise termodinâmica. Neste trabalho o problema de síntese é remetido a uma função objetiva termodinâmica. Um algoritmo de procura termodinâmica é apresentado para a síntese de seqüências de separação.

Douglas (1988) em seu Projeto Conceitual de Processos Químicos fornece um grande material de análise da síntese de seqüências de destilação dentro do contexto do processo todo. Um exemplo é a heurística que diz: selecione a seqüência que minimize o número de colunas em uma estrutura de reciclo. Deste ponto de vista o projeto de uma seqüência de separação não pode ser realizado isoladamente do restante do processo.

Floquet (1994) e outros selecionaram seqüências de separação combinando os valores da carga mássica estimada e da diferença nos pontos de ebulição de dois componentes chaves adjacentes. Não está incluído no estudo a solução dos conflitos, no caso de

contradições entre as heurísticas surgirem no processo de síntese. A automação é proposta com a utilização de um grupo de heurísticas fuzzy.

Modi e Westerberg (1992) introduziram o conceito de preço marginal, a alteração do custo de uma tarefa de separação como resultado da performance desta na ausência de componentes não-chaves. O preço marginal pode ser computado como qualquer quantidade que reflete a economia do processo: taxa de vapor e custo anualizado são exemplos típicos. Este tipo de separação na ausência de componentes não-chaves foi proposta por Gomez e Seader em 1976.

Porter, Momoh e Jenkins (1987) utilizaram uma equação que substituisse as heurísticas evitando assim contradições que pudessem ocorrer. Esta equação (2.5) chamada de equação da carga de vapor total para uma destilação binária (BDTVL) é estendida a separações multicomponentes como:

$$V_B = \sum k_i x_i + R \left[\frac{1}{\Delta_{LH,1}} + \sum_{j=2}^n \sum_{i=1}^n \frac{rc_i x_i}{\Delta_{LH,j}} \right] \quad (2.5)$$

A equação segundo Smith (1995) fornece uma indicação da melhor seqüência não-integrada. Contudo, o uso deste método é ainda um guia e pode não fornecer a ordem correta em alguns casos.

Novak, Kravanja e Grossmann (1996) aplicaram o método MINLP (Mixed Integer Nonlinear Programming) ao problema da síntese de colunas de destilação. Como exemplo destaca-se a separação de misturas de hidrocarbonetos por destilação e a otimização do processo HDA.

Jobson (1997) introduz um novo conceito na procura das melhores seqüências de destilação: “boiling capacity variable”. Este novo indicador de custos diferencia-se dos

outros pois leva em consideração o número de estágios na coluna. Assim os valores obtidos pela equação (2.6) se aproximam bem dos resultados calculados por métodos de custo.

$$(K_{\text{global}} - K_{\text{alimentação}})f = \sum_{\text{colunas}} [V_i(N_i + 1) + d_i] \quad (2.6)$$

Modi e Westerberg (1992) advertem entretanto, que a escolha do método de solução é dependente do contexto no qual o problema de projeto está inserido. Entre os vários métodos de solução disponíveis, deve-se encontrar razões para que um determinado método seja o apropriado.

2.4.2. - Estudos Anteriores em Sequenciamento de Colunas Complexas

Conhecidas por quase 50 anos, as colunas complexas, somente foram objeto de estudos de poucos autores. Entretanto, atualmente ela vem ganhando espaço na literatura especializada e em aplicações industriais.

Assim, usando como exemplo uma mistura de três componentes, duas colunas são necessárias para a separação conforme a Figura 2.2.(a). Com uma coluna complexa este arranjo é reduzido a uma coluna (Figura 2.2.(b)).

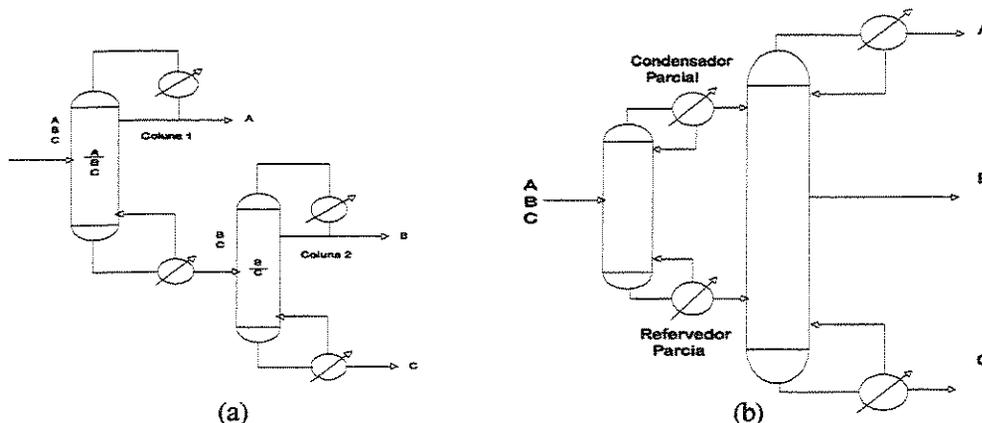


Figura 2.2. Processo de separação utilizando (a) um sistema de destilação convencional e (b) um sistema de colunas complexas.

Uma simplificação importante na Figura 2.2.(b) é feita quando se insere uma placa vertical no interior da coluna. Esta placa divide a alimentação de tal forma que a separação dos componentes é realizada na parte seguinte da coluna.

Ao compararmos a coluna complexa com o sistema convencional de destilação podemos, do ponto de vista termodinâmico considerá-los equivalentes, se condições de transferência de calor na placa forem negligenciadas.

Os trabalhos realizados neste sentido ressaltam que este sistema de separação, com número de componentes igual a três, requer tipicamente 30% menos energia e capital em relação aos arranjos convencionais que utilizam colunas simples. (Triantafyllou, 1991; Luyben e Alatiqi, 1985; e Elachi, 1983).

Entretanto, são poucos os trabalhos que analisam colunas complexas para misturas contendo mais de três componentes. Os estudos que tratam deste sistema dentro de uma seqüência de destilação também são escassos. Os principais trabalhos que encontramos na literatura se dividem em heurísticos e computacionais e procuram orientar a procura do melhor sistema, ou arranjo, de separação. A maioria destes trabalhos utilizam sistemas com três componentes.

No estudo de Tedder e Rudd (Douglas, 1988), um dos primeiros em síntese de colunas complexas, apresenta a seguinte heurística geral:

Se a alimentação possuir tipicamente mais de 50% do produto de meio e o produto pesado está presente em pequenas quantidades (menos de 5%) então o projeto 1 mostrado na Figura 2.3 é a opção mais atraente.

Se, por outro lado, a alimentação possuir mais de 50% do produto de meio e menos de 5% do produto leve o projeto 2 da Figura 2.3 é preferido.

A proposta acima se desdobra com as seguintes heurísticas:

Índice de fácil separação $IFS = K_A \cdot K_C / K_B \cdot K_B = \alpha_{AB} / \alpha_{BC}$

Se $IFS < 1$, a separação A / B é mais difícil do que a separação B / C .

Se $IFS > 1$, a separação A / B é mais fácil do que a B / C.

Heurísticas para $IFS < 1,6$

1. Se 40 a 80% da alimentação é produto de meio e quantidades equimolares da alimentação estão presentes como produtos de topo e base estão, então favoreça projeto 5 (Figura 2.3).
2. Se mais do que 50% da alimentação é produto de meio e menos do que 5% da alimentação é produto de base, então favoreça projeto 6.
3. Se mais do que 50% da alimentação é produto de meio e menos do que 5% da alimentação é produto de topo, então favoreça projeto 7.
4. Se menos do que 15% da alimentação é produto de meio e aproximadamente quantidades iguais da alimentação estão presentes no topo e na base, então favoreça projeto 3.
5. Do contrário favoreça projetos 1 ou 2, removendo antes o componente da alimentação em maior quantidade.

Heurística para $IFS > 1,6$

1. Se mais do que 50% da alimentação é produto de base, então favoreça o projeto 2.
2. Se mais do que 50% da alimentação é produto de meio e de 5 a 20% da alimentação é produto de base, então favoreça projeto 5.
3. Se mais do que 50% da alimentação é produto de meio e menos do que 5% é produto de base, então favoreça projeto 6.

4. Se mais do que 50% da alimentação é produto de meio e menos do que 5% é produto de topo, então favoreça projeto 7.
5. Do contrário, favoreça projeto 3.

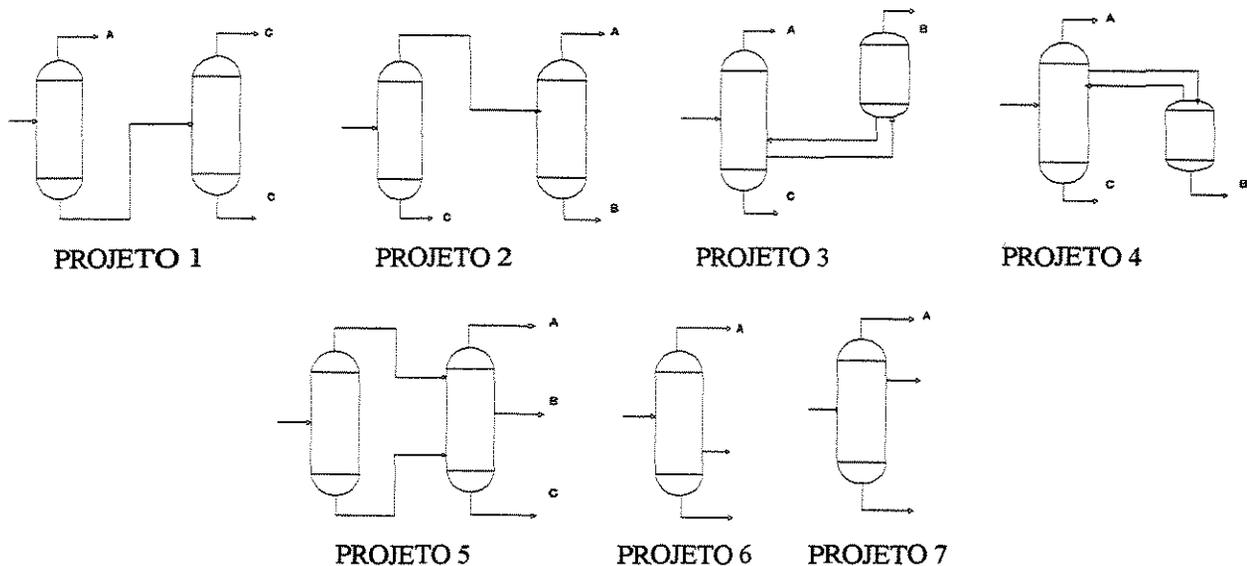


Figura 2.3. Alternativas de projeto para separação de misturas ternárias.

Outras heurísticas:

1. Projetos de acoplamento térmico 3 e 4 podem ser considerados como alternativas aos projetos 1 e 2, respectivamente, se menos da metade da alimentação é produto de meio.
2. Projetos 3, 4, 6, e 7 podem ser considerados para separar todas as misturas onde uma baixa pureza no produto de meio é aceitável.

Da mesma forma Glinos e Malone (Douglas, 1988), apresentam as seguintes heurísticas para seqüências de colunas com saída lateral:

- a. Considere sempre uma coluna com saída lateral quando a composição do x_{Af} e/ou $x_{Cf} < 0,1$.
- b. Considere o uso de uma coluna com saída lateral quando o intermediário é reciclado e uma pureza alta não é requerida.

- c. Considere o uso de uma coluna com saída lateral quando as volatilidades não estão eventualmente distribuídas.
- d. Considere uma corrente lateral acima da alimentação quando o intermediário é mais difícil de separar do componente pesado do que o leve. De outra forma, considere uma coluna com saída lateral abaixo da alimentação.

Uma coluna com saída lateral pode ser interessante quando o produto de meio está em excesso e um dos outros componentes está em menor quantidade. Assim uma coluna complexa se aplica em circunstâncias especiais para uma dada composição da alimentação.

No estudo do sequenciamento de colunas de destilação complexas, além do conhecimento heurístico, é necessário utilizar métodos aproximados.

Glinos e Malone (1985b) fornecem um método aproximado para o cálculo de colunas complexas, com saída lateral acima e abaixo da alimentação, para três componentes. São apresentadas equações para taxas de vapor e composição mínima do produto desejado na corrente lateral. O trabalho é estendido para uma alimentação contendo quatro componentes. Segundo Carlberg e Westerberg (1989) a generalização para n componentes é admitida, mas não é provada.

Em Triantafyllou (1991) uma abordagem mais detalhada é feita tanto no método de cálculo como na recuperação de energia para colunas de parede dividida. São colunas que apresentam uma placa vertical na região da alimentação. A corrente que entra divide-se e produz três correntes de saída.

Carlberg e Westerberg (1989) analisam o caso de colunas complexas acopladas termicamente como mostrados nos projetos 3 e 4 (Figura 2.3). Um estudo é realizado comparando o custo de separação deste tipo de coluna com uma seqüência simples para três componentes. O trabalho se estende a mais componentes.

Glinos, Nikolaides e Malone (1986) apresentam sequências de colunas complexas em diversos arranjos. As sequências incluem colunas com duas alimentações e duas saídas laterais. O estudo utiliza o método proposto por Glinos e Malone (1985b), e inclui o desenvolvimento de novas configurações de processo bem como análise de custos.

Nikolaides e Malone (1987) estudam um método aproximado para colunas de destilação com múltipla alimentação e múltiplas saídas laterais. A vantagem do método é demonstrada separando uma mistura de três componentes utilizando uma configuração complexa comparada com uma simples.

Floquet, Domenech, Pibouleau e Aly (1993) apresentam uma formulação matemática (eq.2.6) para determinar o número de sequências utilizando colunas complexas. A equação a (2.7) é restrita a duas ou três saídas de produtos:

$$S_n = \sum_{i=0}^{E\left(\frac{n-1}{2}\right)} \frac{(2n-2-i)!}{i! n! (n-2i-1)!} \quad (2.7)$$

onde $E(x)$ representa uma função em colchetes.

2.5. - Restrições de Processo

Em síntese de processos, as restrições necessitam ser incluídas pois, são parte integrante na escolha do melhor, ou dos melhores projetos de processo.

As restrições mais importantes são ditas na forma de heurísticas e se referem principalmente aos produtos envolvidos na separação. Por exemplo Nadgir e Liu (1983) adicionam a heurística que diz remova primeiro materiais corrosivos e perigosos em uma

sequência de separação. Outras aconselham evitar o uso de temperaturas elevadas para aqueles componentes que podem sofrer degradação térmica.

É importante salientar que a pressão também possui um grande efeito limitante. Não somente porquê a temperatura se modifica com ela, mas também devido ao reflexo que produz nos custos e nas condições de operação. No caso da destilação sob vácuo aconselha-se o uso da extração líquido-líquido, sempre considerando os diversos solventes possíveis para o caso em questão. A situação não é diferente se processos de refrigeração são requeridos. Alternativas menos custosas que a destilação, como a absorção, podem ser levadas em conta.

Quando processos de destilação são escolhidos devemos estar atentos para que este obedeça a certas condições de operação. Estas condições se referem principalmente à velocidade de inundação na coluna e ao diâmetro da torre. Também a qualidade da utilidade fornecida ao sistema (custo e temperatura) são também condições de operação importantes em todo projeto de processo.

2.5.1. - Velocidade de Inundação e Diâmetro da Torre

O diâmetro de uma torre é selecionado de tal forma que a velocidade do vapor esteja entre 60 e 80 % da velocidade de inundação. Para projetos iniciais a velocidade de inundação pode ser calculada como (Lockett,1986):

$$v^* \sqrt{\frac{\rho_g}{\rho_l - \rho_g}} = F_e \quad (2.8)$$

onde, v^* é a velocidade de inundação (m/s); ρ é a densidade do gás e do líquido (kg/m^3); F_e igual a 0,3 é um fator que depende do espaçamento entre os pratos.

2.5.2. - Custos e Faixas de Temperaturas das Utilidades

Sua influência se reflete diretamente no custo total. Os custos de vapor e água variam, dependendo do momento econômico do país e das condições geográficas para sua obtenção. Assim, o custo da utilidade quente pode ser separado dependendo de sua qualidade, ou seja, em vapor de alta, média ou baixa pressão. As faixas correspondentes de temperatura e custos relacionados são mostrados na Tabela 2.3 abaixo para um caso típico (Novak et all, 1996).

Tabela 2.3. Custo e temperatura de utilidades.

Utilidades	Temperatura (K)	Custo (\$ / 10 ⁶ kJ)
Água de resfriamento	300	0,159
Vapor de baixa pressão	420	2,807
Vapor de média pressão	470	3,980
Vapor de alta pressão	600	5,333

2.6. - Integração Energética entre Colunas de uma Sequência

Após a identificação das melhores sequências de destilação para uma determinada tarefa passamos à integração energética.

Tal procedimento faz uso da possibilidade da corrente de topo de uma coluna (Tc1 na Figura 2.4) fornecer algum, ou todo o aquecimento requerido para um refeedor de uma outra coluna (Andrecovich e Westerberg, 1985b). Isto é realizado pelo aumento da pressão de uma coluna de tal forma que a temperatura de topo supere a temperatura da base, Tb2, por um determinado ΔT . Feito isto o acoplamento térmico das correntes envolvidas pode ser realizado.

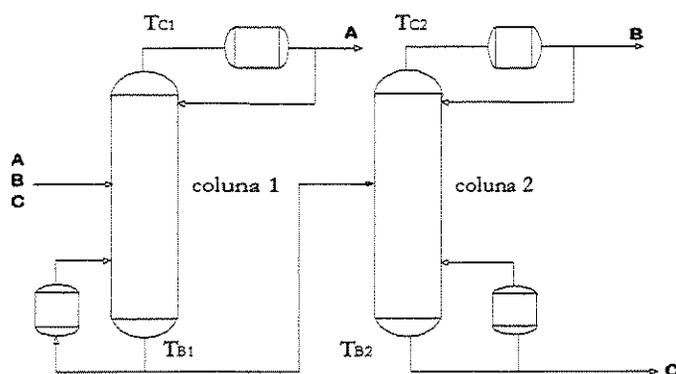


Figura 2.4. Sequência de colunas de destilação não integradas.

Desta forma a seleção e integração de seqüências de destilação não é feita, como diz Smith (1995), simultaneamente, mas sim em duas etapas: seleção das melhores seqüências e em seguida a integração energética.

Estes estudos mostraram que a configuração que alcançou a maior recuperação de energia por integração frequentemente tinha antes da integração o menor consumo de energia das seqüências sintetizadas. Andrecovich e Westerberg (1985a) indicam que as heurísticas usadas para escolher as melhores seqüências de separação sem considerar a integração de energia são as melhores heurísticas para a escolha daquelas seqüências que são as candidatas para integração energética. Em resumo isto significa que a ótima seqüência não integrada torna-se a melhor seqüência integrada em termos de custo mínimo total (capital e operação) conforme mostrado na Figura 2.5.

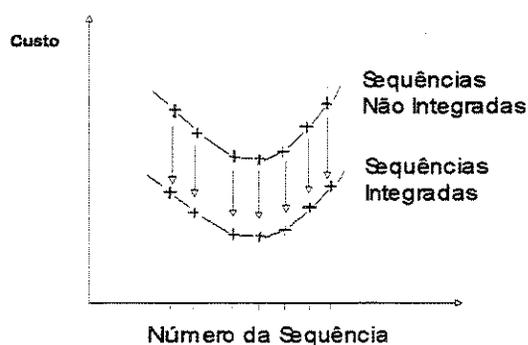


Figura 2.5. Soluções possíveis para seqüências integradas e não integradas.

Deste resultado, uma conclusão importante é que na prática não se tomará a melhor sequência não integrada, mas sim um grupo de poucas sequências com o menor custo total. Devido a incertezas nos cálculos e refinamentos posteriores, estas poucas sequências seriam consideradas em maiores detalhes ao longo do projeto.

Outro fator que reforça a conexão entre uma sequência não integrada com uma integrada é a natureza do acoplamento térmico (Floudas e Paules IV, 1988). Este leva em conta a diferença de temperatura existente entre as correntes de topo (T_{d1}) e base (T_{b2}) da coluna não integrada.

Esta diferença de temperatura para acoplamento pode ser de duas formas:

- i - $T_{d1} - T_{b2}$ é positivo;
- ii - $T_{d1} - T_{b2}$ é negativo.

Se o primeiro caso ocorre, a integração de energia pode ser feita diretamente, aproveitando-se total ou parcialmente a carga térmica desta corrente. Entretanto, se o segundo caso predomina, torna-se necessário aumentar a pressão da coluna de tal maneira que T_{C1} supere T_{B2} permitindo assim o acoplamento térmico.

Ambos os casos afetam favoravelmente o resultado final. E, é claro que um ΔT positivo em termos econômicos seja mais vantajoso que um ΔT negativo. Entretanto, o aumento da pressão introduz custos adicionais nos trocadores e na coluna de destilação, sendo que depois de um certo ponto este efeito torna-se desfavorável.

2.7. - Métodos de Integração Energética

Conforme mencionado anteriormente não é necessário resolver o problema de separação e integração simultaneamente.

É do conhecimento entretanto, que estudos no sentido da síntese e integração de calor simultânea foram realizados (Floudas e Paules IV, 1988). Tais métodos utilizam formulações do tipo MINLP (*Mixed Integer Nonlinear Programming*), ou seja, fazem uso de aproximações matemáticas.

De um modo geral o problema MINLP para síntese de sequência de destilação envolve três passos principais:

1. - Uma superestrutura é gerada onde várias alternativas possíveis competem entre si.
2. - A superestrutura é modelada como um problema MINLP.
3. - Resolvendo o problema MINLP o projeto ótimo é obtido da superestrutura (Gundersen, 1991 e Mizsey, 1991).

Com isto o projeto de separação e integração seria resolvido simultaneamente.

Andrecovich e Westerberg (1985a) propuseram um método mais simples para a integração de sequências de colunas de destilação. Neste método as cargas térmicas do condensador e refeedor são consideradas iguais a Q , e a diferença de temperatura entre o topo e a base da coluna não integrada é computada como ΔT . Em cada coluna da sequência este procedimento é realizado como mostra a Figura 2.6 para o caso envolvendo cinco componentes em duas sequências diferentes.

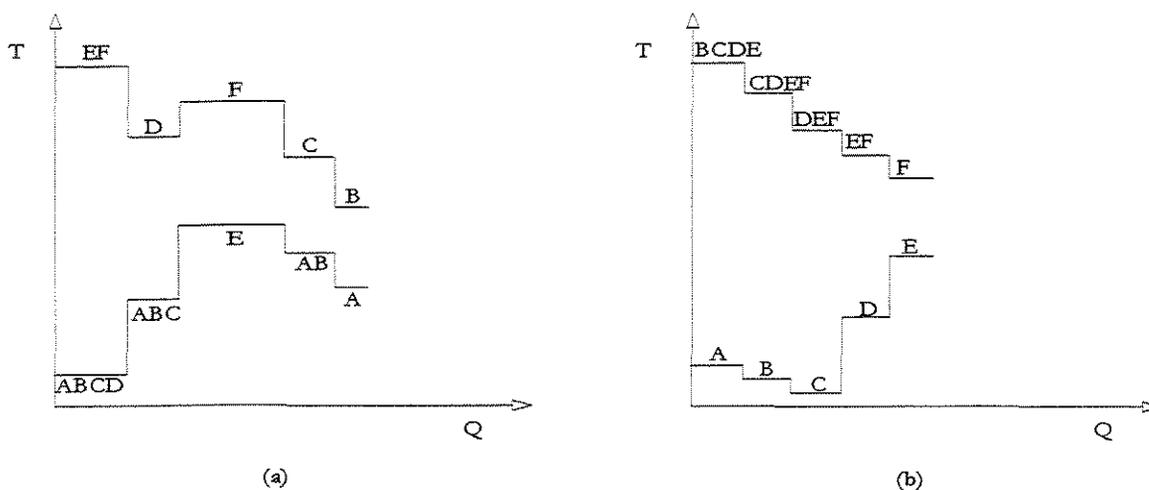


Figura 2.6. Diagrama $Q\Delta T$ para duas sequências diferentes.

As linhas superiores representam as correntes da base da coluna, enquanto as inferiores representam as correntes de topo. Se percebe também que as diferenças de temperatura na sequência 1 são bem menores que na sequência 2. Portanto a sequência 1 torna-se a melhor sequência não integrada. Ao mesmo tempo, ela é a melhor sequência com possibilidades de integração, visto que, o aumento de pressão necessário ao acoplamento térmico é menor que na sequência 2.

De outra forma, o menor valor do somatório do produto $Q\Delta T$ entre as colunas da sequência, indica a melhor sequência não integrada e por sua vez, a melhor para integração de calor. O método também faz uso dos princípios da destilação multiefeito, como mostrado na Figura 2.7. A alimentação é dividida em duas ou mais correntes que são enviadas às colunas de destilação. Com isto, uma redução no custo de energia (custo operacional) é alcançado ainda que haja um aumento no custo devido o acréscimo de colunas (custo de capital).

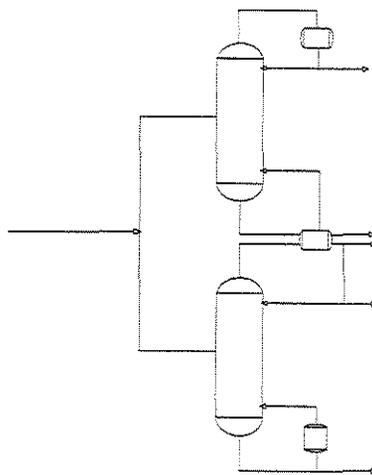


Figura. 2.7. Sistema de destilação multiefeito.

Com o auxílio dos diagramas do tipo temperatura-entalpia (T-H ou T-Q) mostrado na Figura 2.8 podemos visualizar como o procedimento de integração é realizado após determinar-se a melhor sequência não integrada.

A altura do retângulo indica a diferença de temperatura, ΔT na coluna. O comprimento do retângulo, no eixo das entalpias, mostra somente a carga de calor

requerido, Q . Para movimentar os retângulos verticalmente (Figuras 2.8a e 2.8c) necessitamos alterar a pressão da coluna e por consequência a temperatura de topo e base desta. (Ho, 1987).

A modificação da pressão permite portanto ajustar a temperatura de topo da coluna de tal forma que esta supere a temperatura da base da outra coluna. A integração energética fica desta forma representada pelo movimento horizontal do retângulo (Figura 2.8). Conforme esta figura, o posicionamento do retângulo menor abaixo do retângulo maior indica que a integração foi realizada com sucesso. Na Figura 2.9a é mostrado como a integração de calor pode ser realizada em uma coluna de tolueno acoplada com uma de benzeno. A Figura 2.9b mostra o resultado da integração.

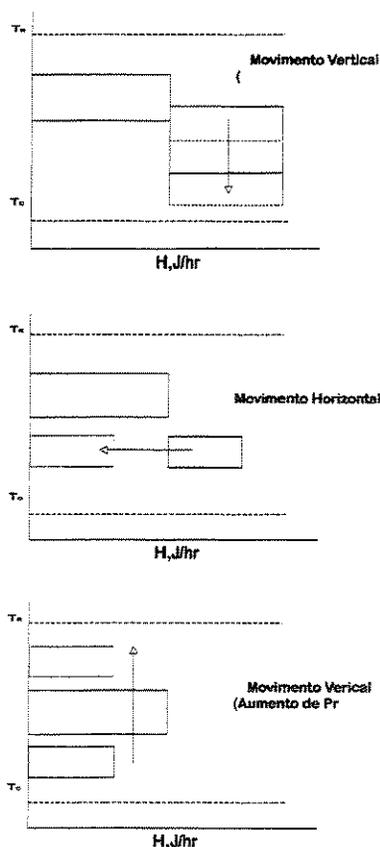


Figura 2.8. Diagrama Temperatura -Entalpia.

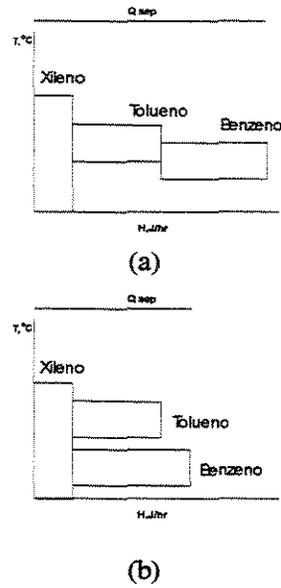


Figura 2.9. Diagrama temperatura-entalpia para o sistema benzeno/tolueno/xileno (a) sem integração (b) com integração.

Outra proposta é encontrada no trabalho de Morari e Faith (1980) onde o princípio da exclusão é apresentado. Este, é formulado de tal maneira que permite a eliminação da estrutura C, conforme a Figura 2.10, quando as estruturas A e B são impossíveis. Desta maneira a procura da sequência integrada economicamente mais adequada, é agilizada.

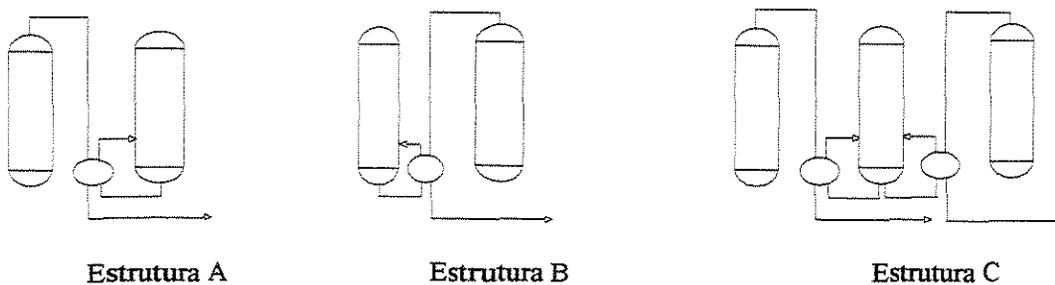


Figura 2.10. Sendo inviáveis as estruturas A e B, a estrutura C torna-se inviável.

Por fim, outros fatores devem ser levados em consideração com a mudança de pressão quando se quer obter a melhor solução para o problema. Estas são:

1. As volatilidades relativas da alimentação diminuem e a coluna pode não alcançar as especificações dos produtos.
2. A temperatura da base torna-se muito alta e seus produtos se decompõem. Isto pode causar incrustação excessiva no refeedor.
3. A espessura da coluna não seria suficiente para contrapor a pressão.
4. O calor latente de vaporização diminuindo vaporizaria a temperaturas maiores, assim as cargas do condensador e refeedor tornam-se menores (Triantafyllou, 1991).

2.8. - Conclusão

A literatura em síntese de colunas de destilação é bastante ampla. Apesar disto pouca atenção é dada a separação de misturas com composições próximas aos processos industriais. A aplicação dos métodos a sistemas com componentes já consagrados é um excelente guia para o estudo de novas metodologias, seja, na síntese de sequências integradas ou não integradas. Desta forma, acredita-se que o uso de uma alimentação próxima das condições industriais deverá produzir interpretações diferentes nos resultados finais, especificamente no que se refere as sequências integradas.

Ainda no que se refere a sequências integradas a literatura apresenta a melhor sequência integrada para uma determinada sequência não integrada. O objetivo do problema é alcançado porém, escassas informações são colocadas a respeito das outras alternativas encontradas. Se o custo de uma sequência é um pouco maior que a ótima sequência, mas possui melhores vantagens operacionais, isto não é levado em consideração. Neste ponto a experiência do projetista é muitas vezes determinante na escolha da melhor alternativa de processo.

Por fim, a substituição de uma coluna simples por uma de saída lateral e a análise da influência da composição e da facilidade de separação entre os componentes pode ser estudada da mesma forma que em sequências de colunas simples.

3. - MÉTODOS UTILIZADOS NA SÍNTESE DE COLUNAS DE DESTILAÇÃO INTEGRADAS

3.1. - Introdução

No presente capítulo serão apresentados os métodos utilizados na síntese de colunas de destilação do processo de desproporcionamento do tolueno.

O procedimento de síntese se constitui dos seguintes métodos:

- Cálculo de colunas de destilação multicomponente. Método aproximado;
- Método proposto para seqüências de colunas de destilação integradas;
- Método de resolução de colunas com saída lateral;
- Método para cálculo de custos de colunas de destilação.

Cada item acima foi resolvido através de subrotinas programadas em linguagem FORTRAN. Estas subrotinas estão listadas no Apêndice II.

3.2. - Cálculo de Colunas de Destilação Multicomponente. Método aproximado

O método aproximado de solução do problema responde de maneira simples ao objetivo proposto. O resultado obtido, ou seja, o custo total de cada seqüência, é comparado de forma a permitir a escolha das seqüências economicamente atrativas. Estes resultados estão mais em nível qualitativo, sendo que análises mais rigorosas são realizadas nas etapas seguintes do projeto.

O cálculo de colunas de destilação multicomponente através das equações de Fenske-Underwood-Gilliland está portanto amplamente divulgado na literatura (King, 1980; Chang, 1980; Triantafyllou, 1991).

Dadas a composição e as condições térmicas da alimentação, inicialmente são estimadas as recuperações dos componentes chave nos produtos destilado e da base.

O número de moles dos componentes chave leve (LK) e chave pesado (HK) são estabelecidos pelas seguintes relações:

$$d_{LK} = \left(\frac{d_{LK}}{f_{LK}} \right) (f_{LK}) \quad (3.1)$$

$$b_{LK} = f_{LK} - d_{LK} \quad (3.2)$$

$$d_{HK} = \left(1 - \frac{b_{HK}}{f_{HK}} \right) (f_{HK}) \quad (3.3)$$

$$b_{HK} = f_{HK} - d_{HK} \quad (3.4)$$

A distribuição dos componentes não-chave são estimadas através da equação de Hengstebeck-Geddes:

$$\ln \left(\frac{d_i}{b_i} \right) = C_1 + C_2 \ln \alpha_i \quad (3.5)$$

Substituindo o i -ésimo componente por LK e HK, obtém-se duas equações com dois termos desconhecidos, C_1 e C_2 , as quais podem ser resolvidas simultaneamente. Deste modo,

$$C_1 = \ln \left(\frac{d_{HK}}{b_{HK}} \right) \quad (3.6)$$

$$C_2 = \frac{\ln \left[\left(\frac{d_{LK}}{b_{LK}} \right) \left(\frac{b_{HK}}{d_{HK}} \right) \right]}{\ln \alpha_{LK}} \quad (3.7)$$

Rearranjando a equação (3.5), obtém-se:

$$\frac{d_i}{b_i} = \exp(C_1 + C_2 \ln \alpha_i) \quad (3.8)$$

O balanço material para o componente i é dado por:

$$f_i = d_i + b_i \quad (3.9)$$

A partir das equações (3.8) e (3.9) calcula-se o número de moles para cada componente, nos produtos destilado (d_i) e da base (b_i):

$$b_i = \frac{f_i}{1 + \exp(C_1 + C_2 \ln \alpha_i)} \quad (3.10)$$

$$d_i = f_i - b_i \quad (3.11)$$

Conhecidos d_i e b_i , as frações molares de cada componente no destilado e na base podem ser calculadas:

$$x_{Di} = \frac{d_i}{\sum d_i} \quad (3.12)$$

e

$$x_{Bi} = \frac{b_i}{\sum b_i} \quad (3.13)$$

Determinadas as frações molares de cada componente segue-se o cálculo da coluna em termos de número mínimo de pratos, razão de refluxo mínima, diâmetro e altura da coluna.

3.2.1. - Cálculo do Número de Pratos

O número de pratos teóricos (N) é calculado através da seguinte equação, que representa um bom ajuste dos dados experimentais de Gilliland:

$$Y = 1 - \exp \left[\frac{(1 + 54,4X)(X - 1)}{(11 + 117,2X)\sqrt{X}} \right] \quad (3.14)$$

onde,

$$X = \frac{R - R_{min}}{R + 1} \quad \text{e} \quad Y = \frac{N - N_{min}}{N + 1}$$

O número mínimo de pratos é calculado através da equação de Fenske:

$$N_{min} = \frac{\ln \left[\left(x_{D,LK} / x_{B,LK} \right) \left(x_{B,HK} / x_{D,HK} \right) \right]}{\ln \alpha_{LK}} \quad (3.15)$$

Sendo a razão molar igual a fração molar, N_{min} na equação de Fenske é equivalente a C_2 na equação (3.6).

O cálculo da razão de refluxo mínima é realizado através da equação de Underwood:

$$1 - q = \sum \frac{\alpha_i x_{Fi}}{\alpha_i - \phi} \quad (3.16)$$

A equação (3.15) é resolvida de modo que o valor de ϕ esteja na faixa: $\alpha_{HK} < \phi < \alpha_{LK}$. O valor de ϕ é substituído na equação (3.16) de modo a se obter R_{min} .

$$R_{min} + 1 = \sum_1^n \frac{\alpha_i x_{Di}}{\alpha_i - \phi} \quad (3.17)$$

3.2.2. - Cálculo do Diâmetro da Coluna

O diâmetro de uma coluna de destilação está relacionado com a vazão molar de vapor (V_d) através da densidade do gás e do líquido e da velocidade do vapor na coluna, nas condições de topo e de base.

As densidades do vapor e do líquido são dadas por:

$$\rho_g = \frac{P \cdot MOL}{T \cdot 0.08206} \quad (3.18a)$$

$$\rho_l = 1000 \cdot \frac{MOL \cdot Pc}{Tc} \cdot \left(\frac{0,653}{z_c^{0,773}} - 0,9 \cdot \frac{T}{Tc} \right) \quad (3.18b)$$

e devem ser calculadas para as condições no topo e na base da coluna, respectivamente.

A velocidade do vapor deve ser aproximadamente 60% da velocidade de inundação da coluna (V_{inund}). Se a velocidade de inundação é dada pela equação:

$$v^* = \frac{0,26}{\sqrt{\frac{\rho_g}{\rho_l - \rho_g}}} \quad (3.19)$$

a velocidade do vapor será dada por:

$$v = 0,60 \cdot v^* \quad (3.20)$$

A vazão molar de vapor pode ser obtida através da equação:

$$V = (R + 1) \cdot d \quad (3.21)$$

Deste modo, o diâmetro da coluna será:

$$D = \sqrt{\frac{4 \cdot V \cdot MOL}{\rho_g \cdot 3,1415 \cdot v \cdot 3600}} \quad (3.22)$$

calculado para as condições do topo e da base coluna, sendo que o maior valor é selecionado.

3.2.3. - Cálculo da Altura da Coluna

A altura da coluna (H_c) depende somente do número de pratos, e pode ser obtida através da seguinte equação (Triantafyllou, 1991):

$$H_c = (N - 1) \cdot 0,46 + 4 \quad (3.23)$$

3.2.4. - Cálculo da Carga Térmica da Coluna

Através de um balanço de energia ao redor da coluna de destilação obtemos as seguintes relações para a carga no condensador e a carga no refeedor, respectivamente.

$$Q_C = (H_{VPD} - h_{liq}) \cdot V \quad (3.24a)$$

$$Q_R = (R + 1) \cdot d \cdot H_{VPD} - R \cdot d \cdot h_{liqd} + b \cdot h_{liqb} - f \cdot h_{liqf} \quad (3.24b)$$

3.3. - Método Proposto para Síntese de Sequências de Destilação Integradas

A necessidade de propor um novo caminho para a síntese de sequências de destilação integradas, tem por objetivo estudar em detalhe alternativas de configuração não analisadas na literatura. Desta forma, não se procura somente a integração total de uma coluna de destilação, pelo uso de todas as colunas existentes e disponíveis no sistema de separação.

Em razão disto, encontra-se a seqüência de custo mais atrativo, juntamente com as demais formas de acoplamento térmico.

Os resultados encontrados são obtidos através de balanços de energia, ao redor do trocador de calor que promove o acoplamento térmico. A diferença de energia, e portanto o custo, é computado a favor de um refeedor ou de um condensador conforme o arranjo de integração necessário. O custo da seqüência é calculado levando-se em conta as modificações realizadas no fluxograma do processo de separação.

Neste sentido, este trabalho analisa as várias propostas de arranjos para integração energética em colunas de destilação, aplicando e comparando os resultados obtidos para o caso do desproporcionamento do tolueno a benzeno.

O procedimento de integração energética é realizado posteriormente à identificação das melhores seqüências de destilação para uma determinada tarefa.

De um modo geral, podemos classificar as seqüências de colunas integradas em dois grupos:

1. Seqüências integradas simples;
 - i) Quando uma coluna recebe ou fornece calor para uma ou mais colunas (Figuras 3.2.(a) e 3.2.(b)).
 - ii) Quando uma coluna fornece calor para duas ou mais colunas (Figura 3.2.(c)).
2. Seqüências integradas compostas;
 - i) Quando uma coluna, que recebe calor de outra coluna, fornece calor para uma ou mais colunas de destilação (Figura 3.2.(d)).

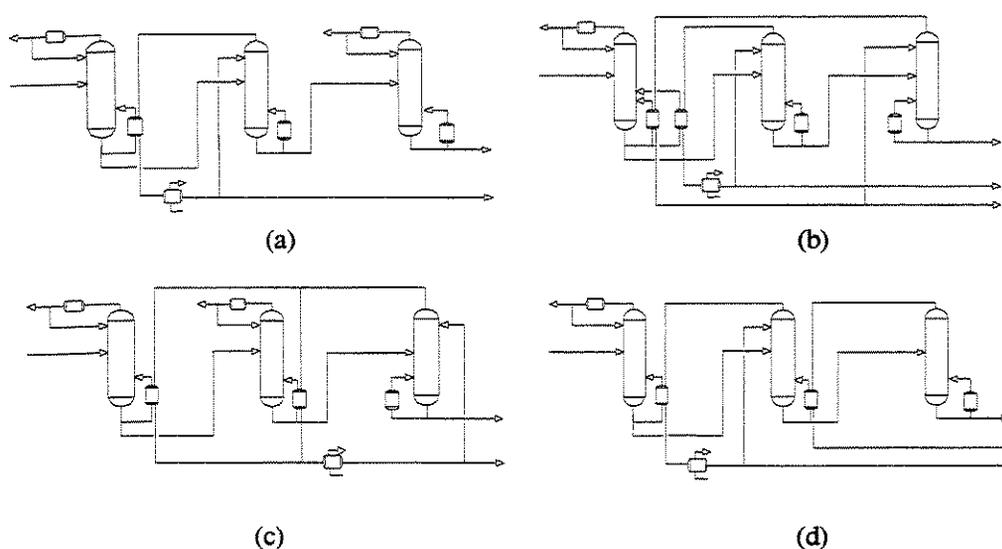


Figura 3.1. Formas de integração de energia

Para se integrar energeticamente uma coluna de destilação é necessário aumentar a pressão da coluna, de tal forma que a temperatura do topo desta coluna, supere a temperatura da base da outra coluna, em um ΔT especificado. A Figura 3.2 mostra como isto é realizado.

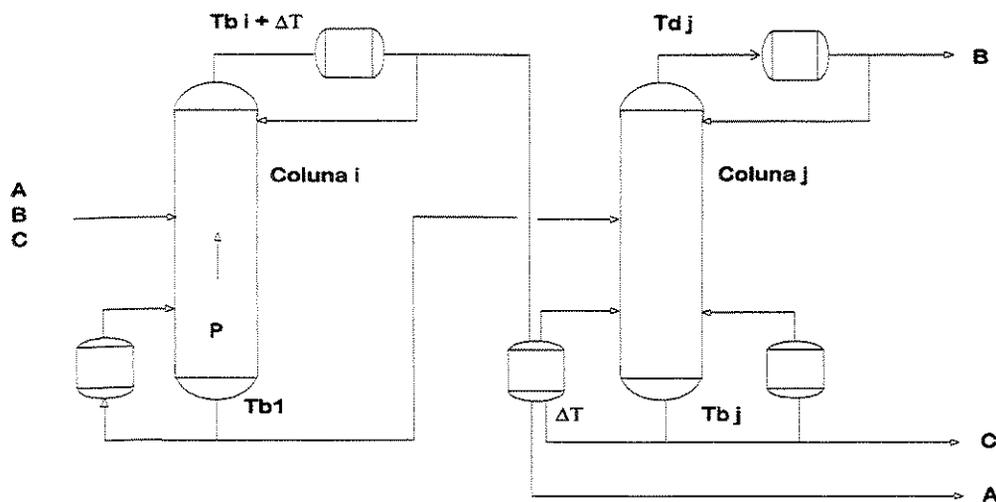


Figura 3.2. Integração energética entre colunas de destilação simples.

A seqüência integrada é obtida a partir de uma seqüência não integrada de tal modo que as composições e temperaturas de todas as correntes são conhecidas.

Se a seqüência integrada é conforme a Figura 3.2, acrescenta-se um valor ΔT à temperatura da base da coluna j , e assume-se este valor como sendo a nova temperatura de topo da coluna i . Da mesma forma, se a integração é feita da segunda coluna com a primeira, tomamos a temperatura da base da coluna i acrescentada de um ΔT , e a fazemos igual a temperatura de topo da coluna j , conforme a equação (3.25).

$$T_{di} = T_{bj} + \Delta T \quad (i=1, n \text{ e } j= n, 1) \quad (3.25)$$

onde n é o número total de colunas.

Ao se alterar a temperatura da coluna obteremos a sua nova pressão de operação. Deste modo, a partir dos valores de pressão, temperatura e composição (a mesma que a coluna original) obtém-se o novo diâmetro, altura e cargas térmicas (Q_R e Q_C) da coluna modificada.

A razão de refluxo mínima na coluna modificada também será alterada para valores maiores do que na coluna original, pois o aumento da pressão torna a separação mais difícil, requerendo maior refluxo na coluna.

Os casos abordados a seguir foram programados em FORTRAN e estão inseridas nas subrotinas INTSIMPLS e INTCOMPLX, presentes no Apêndice II.

3.3.1. - Casos Envolvendo um Acoplamento Térmico

Em uma seqüência integrada podemos ter diferentes opções de acoplamento que podem necessitar ou não de um novo refeedor ou condensador. Observa-se dois tipos de situações neste sentido:

1. $Q_{C,LI} > Q_{R,NI}$. A carga térmica de topo da coluna integrada é maior que a carga térmica da base da coluna não integrada, como mostra a Figura 3.3, situação 1.

Isto faz com que nem toda a energia seja aproveitada, de modo que é necessário adicionar um condensador a mais nesta corrente. Assim, este condensador é adicionado aos custos da coluna *i*, sendo que o trocador de calor de integração faz parte nos custos da coluna *j*. Com isto tomando Q_{RES} como sendo o resíduo de energia restante temos:

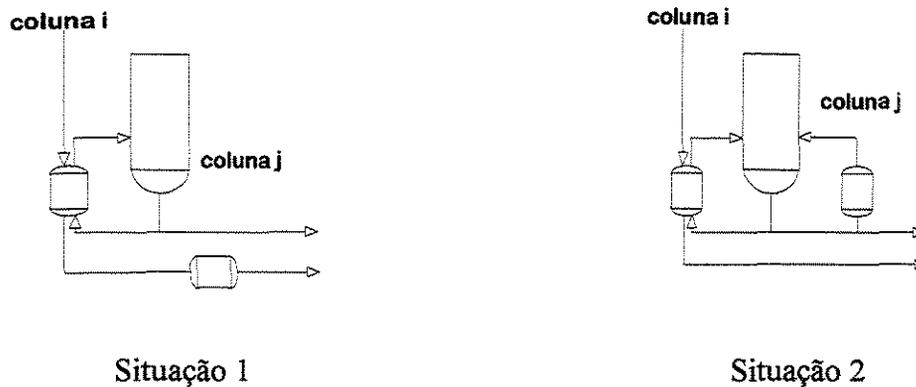
$$Q_{RES\ 1} = Q_{C\ i,I} - Q_{R\ j,NI} \quad (3.26)$$

2. $Q_{C\ i,I} < Q_{R\ j,NI}$. A carga térmica de topo da coluna integrada é menor que a carga térmica da base da coluna não integrada, como mostra a Figura 3.3, situação 2. Ou seja, a carga térmica fornecida não supre toda a necessidade do refeedor tornando necessário um refeedor a mais na coluna não integrada. Da mesma forma, este refeedor é adicionado aos custos da coluna *j*, sendo que o trocador de calor de integração faz parte nos custos da coluna *i*. Fazendo Q_{RES} como o resíduo de energia restante nesta coluna temos:

$$Q_{RES\ 2} = Q_{R\ j,NI} - Q_{C\ i,I} \quad (3.27)$$

Caso se verifique a situação 1 devemos primeiro calcular os custos deste novo condensador que está em linha com o topo da coluna *i*. Assim, a carga térmica deste condensador será $Q_{RES\ 1}$. Existe portanto um decréscimo no uso da utilidade fria, pois parte desta corrente é condensada no trocador de calor precedente.

Se a situação 2 é verificada, estes cálculos não são necessários, havendo então um $Q_{RES\ 2}$ referente ao refeedor a mais na coluna *j*. Neste caso não há necessidade de utilidade fria para a coluna *i* ($Q_{C\ i} = 0$), e devido ao acoplamento térmico, somente parte da utilidade quente é necessária na coluna *j*.



Situação 1

Situação 2

Figura 3.3. Diferentes modos de acoplamento térmico.

Com estas informações podemos calcular os custos de capital e de utilidades da coluna *i*. Feito isto adicionamos os custos referentes ao novo condensador, caso a situação 1 ocorra, aos custos da coluna *i*.

Por último, como temos os dados referentes à coluna *j*, sua nova carga (seja $Q_R=0$ na situação 1 ou $Q_R=Q_{RES\ 2}$ na situação 2), composições, pressão, temperatura e dimensões podemos calcular os custos desta coluna.

Portanto, o custo total da seqüência integrada será a soma dos custos parciais de cada coluna *i* e *j*.

3.3.2. - Casos Envolvendo mais de um Acoplamento Térmico

A situação 1 da Figura 3.4 mostra que toda a carga térmica das colunas *i* e *k* foram aproveitadas quando integradas com a coluna *j*. Isto indica que:

$$Q_{C\ i\ I} < Q_{R\ j\ NI} > Q_{C\ k\ I}$$

Não é importante saber com qual das colunas iniciamos a integração, ou seja, se é com a coluna *i* ou a *k*.

Partimos então do caso em que a coluna *i* é a primeira a ser integrada. Elevamos a pressão desta coluna de tal forma que a temperatura de topo exceda em um valor ΔT em relação ao refeedor da coluna *j*. A carga Q_{Ci}^I integrada é portanto, totalmente aproveitada pelo refeedor da coluna *j*, Q_{Rj}^{NI} , não integrada.

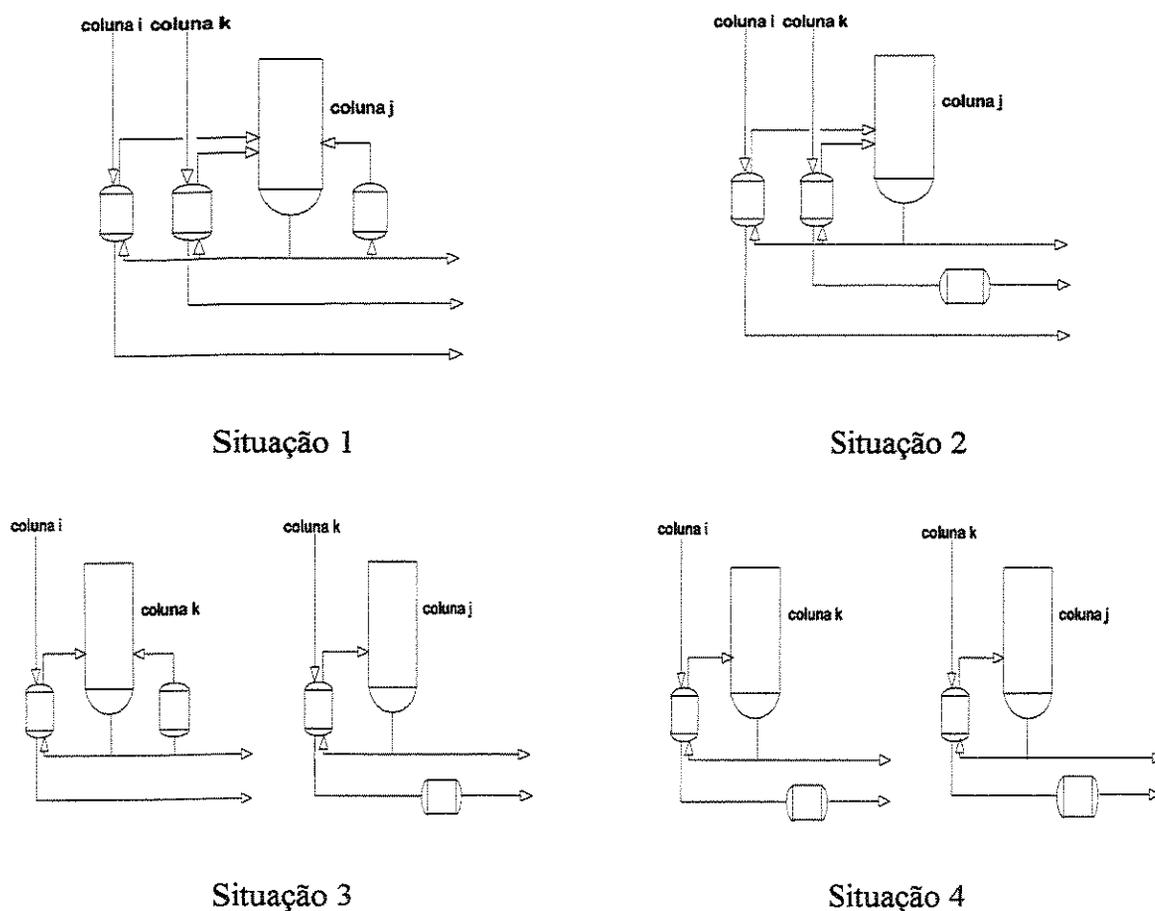


Figura 3.4. Exemplos de acoplamento térmico com duas colunas.

O calor excedente torna-se:

$$Q_{Rj}^{NI1} = Q_{Rj}^{NI} - Q_{Ci}^I \quad (3.28)$$

onde Q_{Rj}^{NI1} é a carga térmica resultante da coluna *j* não integrada.

Neste ponto é possível obter os custos de operação e de capital desta coluna lembrando que agora o condensador para a coluna *i* não é mais necessário devido o acoplamento térmico.

Na seqüência, o mesmo raciocínio segue para a coluna *k*. Esta tem sua pressão elevada e o calor do topo desta coluna é aproveitado, também totalmente, pela base da coluna *j*. A carga resultante é:

$$Q_{Rj}^{NI2} = Q_{Rj}^{NI1} - Q_{Ck}^I \quad (3.29)$$

Resta portanto determinarmos o custo da coluna *j*. Ela possui um condensador que trabalha com carga Q_{Cj}^{NI} e um refeedor que agora necessita Q_{Rj}^{NI2} de energia. Fazendo isto concluímos o procedimento de integração para a situação 1.

Na situação 2, da Figura 3.4, percebemos que a coluna *k* aproveita parte da energia na integração. Assim, podemos ter duas situações, que podem gerar arranjos distintos.

$$1. Q_{CiI} < Q_{RjNI} < Q_{CkI}$$

Se iniciarmos a integração pela coluna *k* teremos um arranjo final como aquele mostrado na Figura 3.3, situação 1. O acoplamento é completo e é desnecessário o uso da coluna *i* para integração.

Se começarmos pela coluna *i* o arranjo final será como aquele mostrado pela Figura 3.4, situação 2. Todo o calor da coluna *i* é aproveitado e parte do calor da coluna *k* necessita ser condensado posteriormente em um novo condensador.

$$2. Q_{CiI} > Q_{RjNI} > Q_{CkI}$$

No caso contrário, o raciocínio é análogo ao anterior, apenas alterando a coluna com calor excedente e portanto um condensador a mais, na coluna *i*.

Tomando-se o caso 1 como exemplo ilustrado na Figura 3.4, situação 2, que inicia a integração pela coluna *i*. A sua pressão é aumentada e o calor excedente na base da coluna *j* torna-se:

$$Q_{Rj}^{NI1} = Q_{Rj}^{NI} - Q_{Ci}^I \quad (3.30)$$

Podemos assim calcular o custo total da coluna *i*, e seguir a integração para a coluna seguinte que terá a sua disposição uma carga de Q_{Rj}^{NI1} na coluna *j*.

Mas, na coluna *k* a carga térmica é maior e portanto um novo condensador é necessário. Este necessita:

$$Q_{Ck}^{I2} = Q_{Ck}^I - Q_{Rj}^{NI1} \quad (3.31)$$

sendo portanto possível calcular os custos de capital e operação deste trocador de calor e da coluna *k*. A carga do refeedor da coluna *j* é o próprio Q_{Rj}^{NI1} junto com seu condensador de carga Q_{Cj}^{NI} . O custo total desta coluna *j* é calculado e somado aos custos das colunas anteriores já mencionadas

Nas situações 3 e 4 da Figura 3.4 temos duas colunas integradas, a *k* e a *j*. Este tipo de integração difere das anteriores pelo fato de que uma mesma coluna que fornece calor para outra coluna está por sua vez recebendo calor de uma terceira.

Deve-se ter cuidado na escolha das colunas a integrar pois uma coluna que já está integrada não pode ter mais a sua pressão aumentada. Portanto, se integrarmos primeiro a coluna *i* com a coluna *k* isto torna impossível acoplar a coluna *k* na coluna *j*.

O procedimento correto é acoplar primeiro a coluna **k** na coluna **j** e então dar seqüência na integração da coluna **i** com a **k**. Deve-se observar que, na integração da segunda coluna, a pressão desta deverá ser tal que a sua temperatura supere de um valor ΔT a base da coluna **k** já integrada.

Nota-se também que não há diferença no procedimento de cálculo entre as situações 3 e 4 devido ao posicionamento dos trocadores, ora em uma coluna, ora em outra.

O procedimento segue as linhas já descritas anteriormente, ou seja, se a carga de topo de uma coluna supera a carga do refeedor da outra coluna devemos calcular um novo condensador para a coluna que fornece energia. Se a carga é menor haverá um novo refeedor para a coluna que recebe energia.

3.4. - Método Aproximado para Resolução de Colunas com Saída Lateral

O método de resolução de colunas com saída lateral está baseado no trabalho de Triantafyllou (1991). Este método utiliza as técnicas aproximadas de Fenske-Underwood-Gilliland (seção 3.1).

Deste modo, com o auxílio das Figuras 3.5 podemos compreender melhor como o método se desenvolve. Cada coluna na Figura 3.5 desempenha um papel na separação dos componentes da alimentação, composta de três componentes A, B, C.

Desta forma, para cada coluna é necessário escolher um chave leve e um chave pesado. Assim, para a coluna 1 o chave leve como A e o pesado como C, o componente B será o componente de meio. Na coluna 2 o chave leve é o A e o pesado é o B sendo que todo o C vai para o fundo da coluna. Já na coluna 3 o B é o leve e o C é o pesado, fazendo com que o componente A saia todo no topo da coluna.

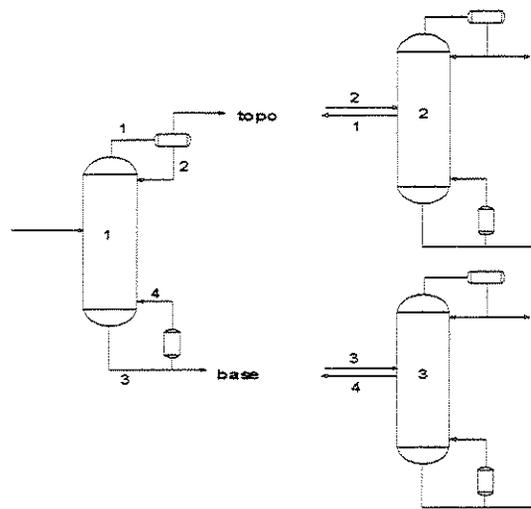


Figura 3.5. Modelos simplificados para coluna de parede dividida

O projeto se inicia com o cálculo da coluna 1 de modo a se obter o número de pratos, os balanços de massa, energia e a vazão de vapor. Realizada esta etapa, segue-se o cálculo da coluna 2 com $q=0$. O projeto prossegue assumindo-se que o condensador desta coluna é parcial. Deste modo a nova vazão para a coluna 2 será:

$$PS_2 = d_1 \cdot 1,2 \cdot R_{\min} \quad (3.32)$$

$$F_2 = d_1 + PS_2 \quad (3.33)$$

O retervedor da coluna 1 é parcial e a vazão da alimentação para a coluna 3, com $q=0$, é:

$$PS_3 = f_2 - (1-q) f_1 \quad (3.34)$$

$$F_3 = b_1 + PS_3 \quad (3.35)$$

Tendo-se calculado o número de estágios, vazão de vapor e balanços de massa e energia, torna-se necessário unir as colunas 2 e 3 de tal forma que a corrente de base da coluna 2 e de topo da coluna 3 transformem-se na saída lateral da nova coluna.

Para isto torna-se necessário ajustar as vazões de vapor de modo que elas sejam iguais tanto na coluna 2 como na 3. Com isto, escolhe-se o maior valor de R_{\min} , e recalcula-se o número mínimo de pratos daquela coluna.

Também, outro ponto a ser considerado é que o número de pratos da pré-fracionadora seja igual ao número de pratos da parte inferior da coluna 2 e da parte superior da coluna 3. Isto também provocará alterações no R_{\min} em uma das colunas mencionadas.

O seguinte procedimento é efetuado para ajustar a razão de refluxo nas colunas.

$$f_j = b_{j+1} + d_{j+2} \quad (3.36)$$

a nova vazão da saída lateral da coluna principal

$$x_{p_{j,i}} = (x_{d_{j+2}} \cdot d_{j+2} + x_{b_{j+1,i}} \cdot b_{j+1}) / f_j \quad (3.37)$$

composição da saída lateral da coluna

As vazões de cada coluna são:

$$V_{2\min} = \frac{((\alpha_{j+1,i} (d_{j+1} \cdot x_{d_{j+1,i}} + ps_2 \cdot x_{p_{2,j+1}})))}{\alpha_{j+1} - \phi_{j+1}} \quad (3.38)$$

$$V_{3\min} = \frac{((\alpha_{j+2,i} (b_{j+2} \cdot x_{b_{j+2}} + ps_3 \cdot x_{p_{3,j+2,i}})))}{\alpha_{j+2} - \phi_{j+2}} \quad (3.39)$$

$$R_j = \frac{V_{j+2} - d_{j+2}}{d_{j+2}} \quad (3.40)$$

$$R_j = \frac{V_{j+1} - d_{j+1}}{d_{j+1}} \quad (3.41)$$

Escolhe-se a maior razão de refluxo substituindo este valor na outra coluna e recalculando-se as novas cargas da coluna, altura, número de pratos e vazão interna.

Obtidos estes resultados poderemos calcular o novo número de pratos da coluna por:

$$N_j = N_{j+1} + N_{j+2} \quad (3.42)$$

e as temperaturas de topo e base como:

$$T_{d(j)} = T_{d(j+1)} \quad (3.43)$$

$$T_{b(j)} = T_{b(j+2)} \quad (3.44)$$

Finalizados estes procedimentos obtém-se os custos da coluna, do condensador e do refeedor através da subrotina custos.

3.5. - Custos em Colunas de Destilação

O custo de uma coluna de destilação é dividido basicamente em duas partes:

- i) Custos de operação
- ii) Custos de capital

Cada um destes itens necessita de dados suplementares para serem encontrados. Estas informações dependem da natureza do processo, como por exemplo, temperatura da corrente, pressão, dados físicos da coluna.

É conveniente ressaltar que os custos de capital contém os custos referentes ao refeedor, condensador e coluna, bem como os custos de operação contém consumo de água e vapor requeridos na coluna.

Para o cálculo dos custos de capital se faz necessário obter as áreas dos trocadores de calor. Como referência usamos a temperatura da água de refrigeração como sendo 300 K e a temperatura do vapor como aquelas referidas na Tabela 2.3.

Assim temos que a área do condensador será igual a:

$$A_c = \frac{Q_c}{5.11 \cdot 10^6 (T_d - 300)} \quad (3.45)$$

onde Q_c = carga no topo da coluna (kg/h); T_d = temperatura do topo da coluna (K).

A área do refeedor será,

$$A_R = \frac{Q_R}{5.11 \cdot 10^6 (T_{\text{vapor}} - T_b)} \quad (3.46)$$

onde Q_R = carga térmica da base da coluna; T_b é a temperatura da base da coluna.

No cálculo dos custos da coluna as informações sobre pressão, diâmetro, número de pratos e altura da coluna são necessárias. Aqui tanto a pressão quanto a temperatura serão referentes às condições de topo da coluna.

Com estas informações pode-se, com o auxílio da subrotina COLCOST1 (Apêndice II), encontrar os custos de capital, do número de pratos e coluna com o refeedor e condensador. Assim, resumindo:

$$C_{\text{aux}} = \text{Custo do condensador} + \text{Custo do refeedor} \quad (3.47)$$

$$C_{\text{coluna}} = \text{Custo da coluna} + \text{Custo dos pratos} \quad (3.48)$$

Finalizando, é necessário calcular os custos de operação que se referem ao consumo de vapor e água durante a operação do processo. Estes são calculados como:

$$\text{Custos de água} = 1.7403 \cdot 10^{-6} Q_C \quad (3.49)$$

$$\text{Custos de vapor} = 8.8005 \cdot 10^6 Q_R C_V \quad (3.50)$$

onde C_V é o custo do vapor para um determinado nível.

A soma destes custos fornece o custo total das utilidades.

$$C_{\text{util}} = \text{Custos de vapor} + \text{Custos de água} \quad (3.51)$$

Entretanto estes valores numéricos somente possuirão efeito de uso quando forem calculados de forma a considerarem as taxas incluídas e o período. Chamado custo anualizado, este é expresso como:

$$\text{TAC} = C_{\text{util}} (1 - \text{taxa}) + (C_{\text{aux}} + C_{\text{coluna}}) / I \quad (3.52)$$

onde, $\text{taxa} = 0,52$ e $I = 2,5$.

Deste modo, finaliza-se a etapa de obtenção do custo de uma coluna de destilação. Da mesma forma, este procedimento será necessário repetidas vezes quando possuímos mais colunas, como no caso de seqüências de destilação. O custo total da seqüência será a soma dos custos parciais de cada coluna.

3.6. - Conclusão

Neste capítulo foi apresentado a metodologia utilizada na síntese de colunas de destilação do processo de desproporcionamento do tolueno a benzeno. Tal metodologia

permite a síntese de colunas convencionais bem como a substituição de uma destas colunas por uma coluna com saída lateral. Das seqüências produzidas será obtida a seqüência integrada, sendo que informações do custo total da seqüência, custo por coluna e dados sobre cada coluna, como razão de refluxo, número de pratos e arranjo da seqüência serão fornecidos.

Nos capítulos 4 e 5 serão apresentados os resultados e conclusões obtidos a partir de dados da literatura, onde a aplicação da metodologia e análise do processo em questão é realizado.

4. - DESPROPORCIONAMENTO DO TOLUENO. SÍNTESE DE COLUNAS DE DESTILAÇÃO

4.1. - Introdução

No presente capítulo serão apresentados os resultados obtidos no estudo da síntese de colunas de destilação presentes no processo de desproporcionamento do tolueno e isomerização do m-xileno.

4.2. - Síntese de Colunas de Destilação Integradas e Não Integradas

Manoju et al (1982) estudou a reação de desproporcionamento do tolueno e isomerização do m-xileno, variando a razão H_2/H_c e a quantidade de m-xileno na alimentação do reator. A composição do efluente do reator é apresentada na Tabela 4.1 com quantidade fixa de m-xileno e na Tabela 4.2 com quantidades variáveis.

Tabela 4.1. Composição do efluente do reator, com diversas razões molares H_2/H_c .

composição dos produtos líquidos (mol%)	razão molar de H_2/H_c (mol/mol)				
	5	10	15	20	38
Benzeno	14,3	13,3	11,4	11,0	5,2
Tolueno	64,0	66,0	69,9	70,7	81,2
o-xileno	4,7	4,2	3,8	3,7	3,0
m-xileno	10,7	10,1	9,1	8,7	6,9
p-xileno	4,3	3,8	3,6	3,6	2,6
1,3,5-trimetilbenzeno	0,4	0,4	0,6	0,5	0,2
1,2,4-trimetilbenzeno	1,4	1,9	1,5	1,6	0,7
1,2,3-trimetilbenzeno	0,2	0,3	0,1	0,2	0,1
m-xileno = 9,5%					

A separação dos produtos do reator é realizada em três colunas de destilação, com as composições para cada coluna mostrada na Tabela 4.3, onde quatro produtos são obtidos:

benzeno, tolueno, uma mistura de xilenos e outra de trimetilbenzenos. Estas misturas são agrupadas segundo regras apresentadas por Glinos e Malone (1984).

Tabela 4.2. Composição do efluente do reator para diversas composições de m-xileno.

composição dos produtos líquidos (mol%)	composição de m-xileno (mol%)					
	0	9,5	12,6	17,8	37,0	100,0
Benzeno	12,9	13,3	15,5	13,7	7,5	3,0
Tolueno	75,3	66,0	58,9	58,3	53,9	26,9
o-xileno	2,7	4,2	5,9	6,2	8,4	12,9
m-xileno	6,1	10,1	13,0	13,4	16,9	25,5
p-xileno	2,2	3,8	4,4	5,0	6,7	11,7
1,3,5-trimetilbenzeno	0,1	0,4	0,3	0,5	1,3	3,6
1,2,4-trimetilbenzeno	0,6	1,9	1,9	2,5	4,5	15,0
1,2,3-trimetilbenzeno	0,1	0,3	0,1	0,4	0,8	1,4

Tabela 4.3. Composição da alimentação nas colunas de destilação.

composição dos produtos líquidos (mol%)	Alimentação $H_2/H_C=10$		
	Seqüência Direta		
	Coluna 1	Coluna 2	Coluna 3
Benzeno	13,3	0,31	0,0
Tolueno	66,0	77,0	6
o-xileno	4,2	5,0	19,0
m-xileno	10,1	12,0	46,0
p-xileno	3,8	4,4	17,0
1,3,5-trimetilbenzeno	0,4	0,55	1,9
1,2,4-trimetilbenzeno	1,9	0,25	8,7
1,2,3-trimetilbenzeno	0,3	0,49	1,4

As seqüências integradas serão obtidas a partir da melhor seqüência não integrada, de acordo com o procedimento de integração descrito na seção 3.3, e também através da análise econômica do processo.

Como sabemos, o número de seqüências integradas é normalmente maior do que o de seqüências não integradas. Aquelas podem chegar a quinze ou mais para o caso do tolueno. Mas, devido a grande dependência das colunas integradas em relação à composição da alimentação, pode ocorrer casos em que nenhuma seqüência seja obtida. Esta imprevisibilidade no resultado final obriga a resolução de cada caso separadamente.

4.3. - Síntese de Seqüências de Destilação Não Integradas

O número de seqüências possíveis para a separação de uma mistura de 4 componentes é cinco, conforme mostra a Figura 4.1. A preferência por uma determinada seqüência em relação às outras é determinada pelas características individuais da alimentação. Estas podem ser resumidas nas heurísticas já apresentadas anteriormente, e que levam em conta entre outros fatores, principalmente, a composição e volatilidade relativa da alimentação.

Neste trabalho, a obtenção da melhor seqüência não integrada está baseada apenas em critérios econômicos, não se fazendo uso das heurísticas acima mencionadas.

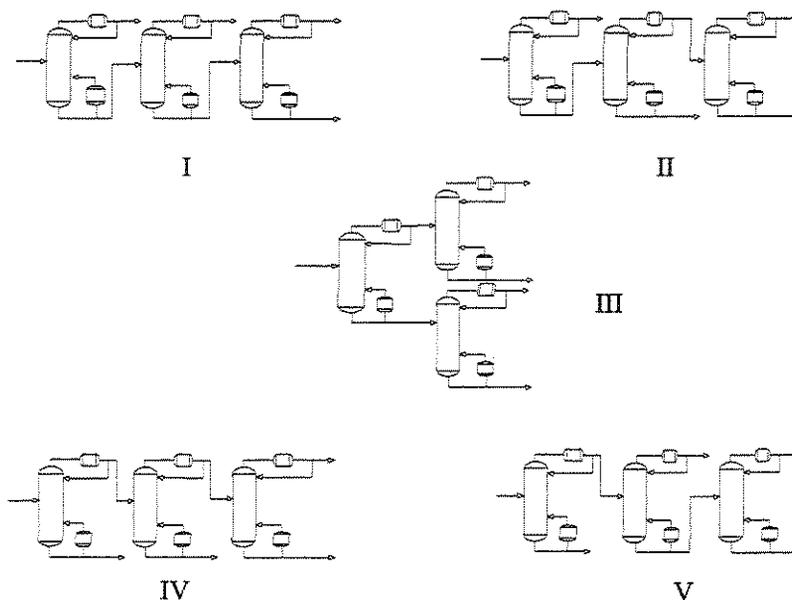


Figura 4.1. Seqüências possíveis para a separação de quatro componentes na alimentação

Utilizando-se as composições com as diversas razões molares H_2/H_c (Tabela 4.1) obtemos a seqüência I como a melhor configuração não integrada. O resultado final é mostrado na Tabela 4.4 para todas as seqüências.

Tabela 4.4. Custo total anual (em R\$) de cada seqüência, para várias razões H_2/H_c .

Seqüência	razão molar H_2/H_c				
	5	10	15	20	38
I	3269526	3270087	3331167	3337525	3530540
III	3750029	3732617	3750358	3747980	3784614
II	5576663	5603104	5777766	5799523	6354235
V	6335523	6312262	6405620	6408486	6708721
IV	6819650	6779448	6834359	6828631	6963680
m-xileno=9,5%					

Para cada razão molar as seqüências apresentam custo crescente, de acordo com a seguinte ordem: I, III, II, V, IV.

Tabela 4.5. Custo total anual (em R\$) de cada seqüência, para várias composições de m-xileno

seqüência	Composição de m-xileno na alimentação do reator (mo l%)					
	0	9,5	12,6	17,8	37,0	100,0
I	3400856	3270087	3250540	3252311	3800539	3823934
III	3922694	3732617	3724716	3661189	4116070	3835875
II	5831438	5603104	5446750	5473107	5610761	4928816
V	6534856	6312262	6265543	4279996	6044012	5068416
IV	7057704	6779448	6744138	6620259	6239133	5064103
$H_2/H_c = 10$						

A Tabela 4.5 apresenta os custos totais para as seqüências da Figura 4.1, para diferentes quantidades de m-xileno na alimentação do reator. A melhor seqüência novamente é a I sendo que a adição de m-xileno, na faixa de 9,5% a 17,8, altera sensivelmente o custo total final desta seqüência. A medida que a quantidade de m-xileno aumenta, o custo total também aumenta. Assim, de um modo geral, a presença de m-xileno

além de favorecer o rendimento em benzeno, contribui significativamente para obtenção de seqüências com custo menor. A diminuição no custo total da seqüência I, à medida que a quantidade de m-xileno aumenta, está em torno de 3,0% nos melhores casos. Por fim, o custo total de cada seqüência aumenta na mesma ordem que na Tabela 4.3: seqüências I, III, II, V, IV, para a mesma composição de m-xileno.

4.4. - Análise e Aplicação do Método Proposto

Considere as seqüências possíveis para a separação de uma mistura de 4 componentes, analisadas na seção 4.3. Ao transferirmos este problema para a integração energética encontramos dois caminhos de análise:

- i) tipo de seqüência - a escolha da melhor configuração pode não ser tão simples.
- ii) tipo de alimentação - pequenas variações influenciam o melhor resultado.

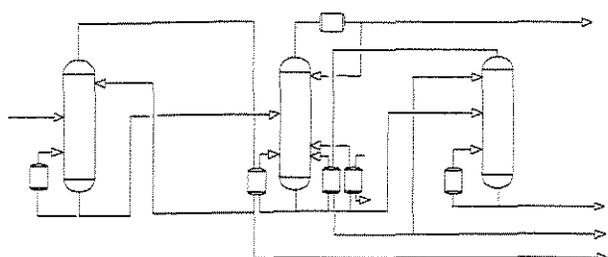
4.4.1. - Tipo de Seqüência

Calculando-se as seqüências integradas, para o caso onde a razão molar $H_2/H_c = 10$ observamos que estas mantêm um padrão ordenado, sendo que as modificações ocorrem basicamente na coluna utilizada para integração. Percebe-se também um favorecimento ao uso de arranjos com um refulvedor a mais (Figura 4.2).

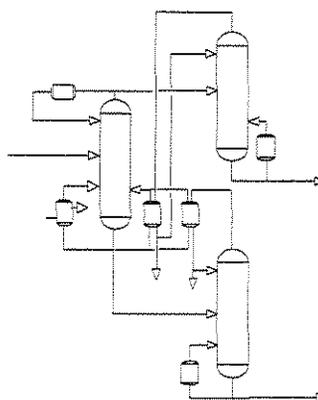
Analisados individualmente estes resultados podem sofrer interpretações diferentes. Há o caso das seqüências onde só uma coluna fornece calor e colunas onde ao mesmo tempo em que recebem energia fornecem calor a outra coluna. Estes casos podem gerar conclusões diferentes destas que são apresentadas na Figura 4.2.

Tomando como exemplo as seqüências I e III encontramos, para cada uma, mais três arranjos diferentes conforme as Figuras 4.3 e 4.4. Do ponto de vista econômico vemos que a Figura 4.3(a) possui mais vantagens do que a seqüência integrada I escolhida inicialmente. Entretanto, este tipo de configuração pode ser de difícil operação visto a

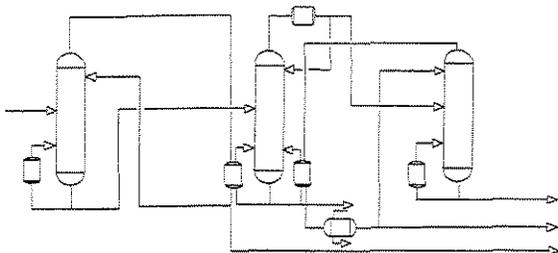
dependência que uma coluna integrada possui sobre a outra, podendo assim se tornar inviável na prática.



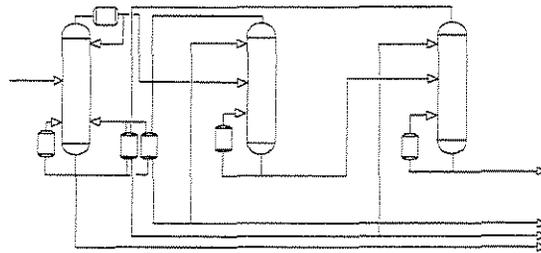
I - (R\$ 3186826)



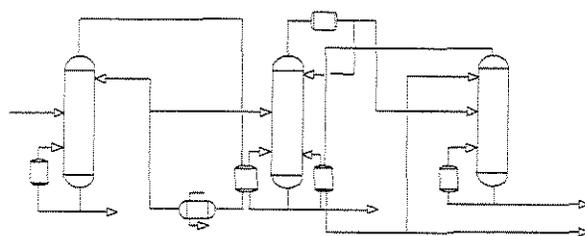
III - (3624377)



II - (5020032)



V - (5191134)



IV - (6025245)

Figura 4.2. Valores para as melhores seqüências integradas - razão molar igual a 10

Curioso é o resultado da seqüência 4.3(b), que com um custo total equivalente ao da Figura 4.2 - I, possui um arranjo mais simples do que todas as seqüências anteriores. Do ponto de vista energético a seqüência I da Figura 4.2 é vantajosa, pois apresenta na coluna de integração, uma economia de 8,3% contra 6,5%, da seqüência 4.3(b). Entretanto,

os custos de capital na mesma coluna são 7,3% maiores do que a seqüência sem integração. Se compararmos com a seqüência 4.3(b) os custos de capital não ultrapassam 2,3%.

Por último a seqüência 4.3(c) é cara demais, de tal modo que se deve considerar um estudo da possibilidade da seqüência 4.3(b) vir a se tornar a melhor seqüência integrada. E portanto, escolhe-la como a melhor alternativa para uma análise posterior mais rigorosa.

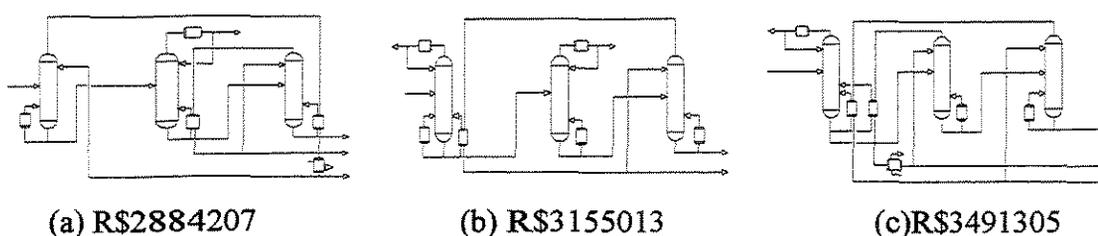


Figura 4.3. Outras formas de integração da seqüência I.

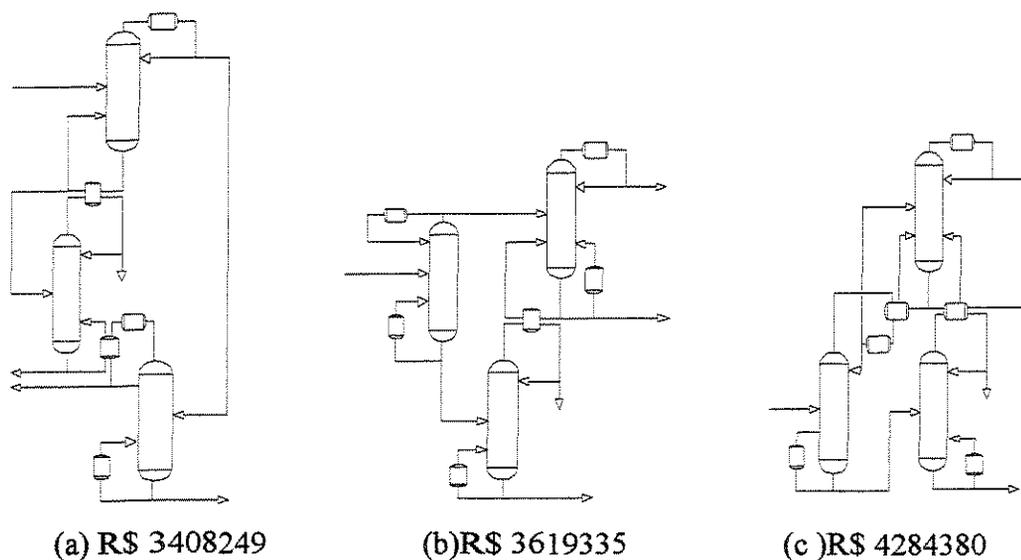


Figura 4.4. Outras formas de integração da seqüência III.

Da mesma maneira, conclusões semelhantes podem ser tiradas para a seqüência III. Por sinal, a mesma ordem é obtida quando comparada com a seqüência anterior. A similaridade só não é completa, pois existem modificações na estrutura de uma integração

para outra nas diferentes seqüências, que mesmo assim, se repetem nas seqüências restantes. Estes resultados nos conduzem a seguinte proposição:

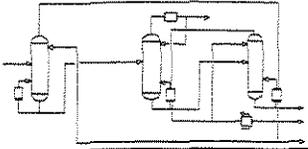
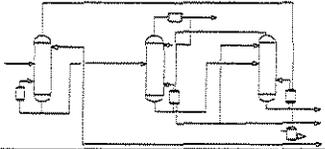
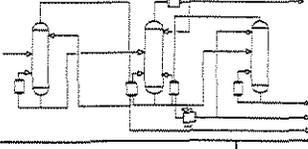
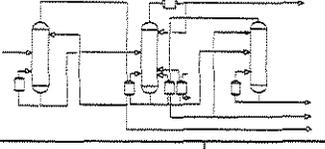
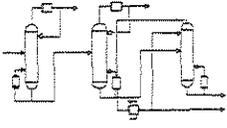
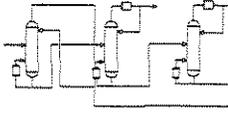
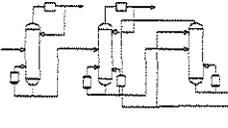
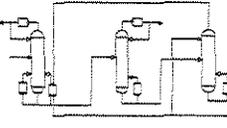
As melhores seqüências integradas, de cada seqüência não integrada, seguem um padrão ordenado de configuração.

4.4.2. - Tipo de Alimentação

Entretanto, se por um lado o tipo de seqüência produz modificações na estrutura dos arranjos, a influência do tipo de alimentação é menor. A Tabela 4.6 mostra os vários arranjos de integração obtidos com a variação da composição de benzeno na alimentação.

Conforme a composição de benzeno varia, modificações vão ocorrendo, nas seqüências 1 e 2, principalmente devidas a pequenas alterações na malha de trocadores de calor. Já a estrutura 3 apresenta uma série de alterações no arranjo de integração.

Tabela 4.6. Variação da composição de benzeno para vários arranjos integrados da seqüência I

Seqüência I				
Faixa de composição de benzeno na alimentação (mol %)				
	3,0		5,2 - 15,5	
1				
2				
	3,0	5,2	7,5	11,0 - 15,5
3				

Do ponto de vista econômico todas estas seqüências são mais atrativas que a seqüência não integrada. Entretanto, a escolha da melhor configuração depende também da composição da alimentação para o processo.

Levando-se em conta a flexibilidade de operação (faixas de composição de benzeno), bem como o custo, não há dúvida de que a seqüência 1 é a melhor. Contudo, como no caso anterior, ela possui uma estrutura operacionalmente mais difícil e pode ser eliminada. Com isso podemos escolher a seqüência 2, que é flexível (com $H_2/H_c = 5,2$ a $15,5$) e de operação viável, apesar de possuir um custo maior que a anterior.

Passando para a seqüência 3, a flexibilidade de operação já não é tão evidente, pois as estruturas se alteram bastante com a composição. Mas, se admitimos que o processo trabalha em condições ótimas, a última estrutura (seqüência 3 - $11,0$ a $15,5$) pode ser escolhida como a mais apropriada.

Agora, os resultados podem ser comparados, em termos de custo total com a seqüência não integrada. A diferença entre a seqüência não integrada I e as melhores integradas 2 e 3 estão na faixa de $2,5\%$ a $3,5\%$, de modo que a seqüência 3 é a melhor seqüência integrada, pois une as vantagens econômicas e arranjo simplificado.

A Figura 4.5 mostra como as seqüências não integradas se comportam quando procedemos a integração energética. Para o caso apresentado o custo total diminuiu, porém a medida que nos aproximamos da seqüência ótima a diferença entre o custo da seqüência com e sem integração torna-se menor.

4.5. - Seqüências Utilizando Colunas com Saída Lateral Integradas e Não Integradas.

O uso de colunas laterais, em geral, diminui bastante o custo total da seqüência. A literatura (Christiansen, A. C., 1997, et all) registra uma economia em até 30% sobre as seqüências simples.

Neste trabalho cinco seqüências foram estudadas quando substituímos uma coluna simples por uma com saída lateral. A integração energética destas seqüências gera cinco arranjos diferentes para serem analisados, sendo que os procedimentos utilizados são os mesmos já descritos na seção 3.3.

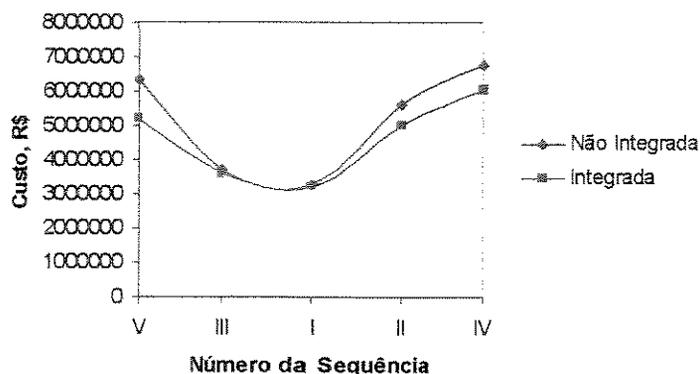


Figura 4.5. Curvas comparativas de custo de seqüências simples com e sem integração.

O arranjo IV na Figura 4.6 foi o melhor resultado para as seqüências utilizando colunas com saída lateral, quando comparados com a melhor seqüência simples não integrada (seqüência I, Figura 4.1, quando m-xileno igual a 9,5 mol %). Os arranjos 4.6(I) e 4.6(IV), apresentaram custos de R\$2379543/ano e R\$1987175/ano respectivamente, obtendo-se no melhor dos casos uma economia de 39% com relação a seqüência simples sem integração.

A Tabela 4.7 apresenta os resultados para as seqüências com saída lateral integradas e não integradas com m-xileno igual a 9,5%.

Tabela 4.7. Custos (R\$) para seqüências com colunas saída lateral

Seqüência	sem integração	com integração
IV	1987175	1944132
I	2379543	2842905
II	3318680	3329101
III	4386026	4239990
V	4850487	5462562

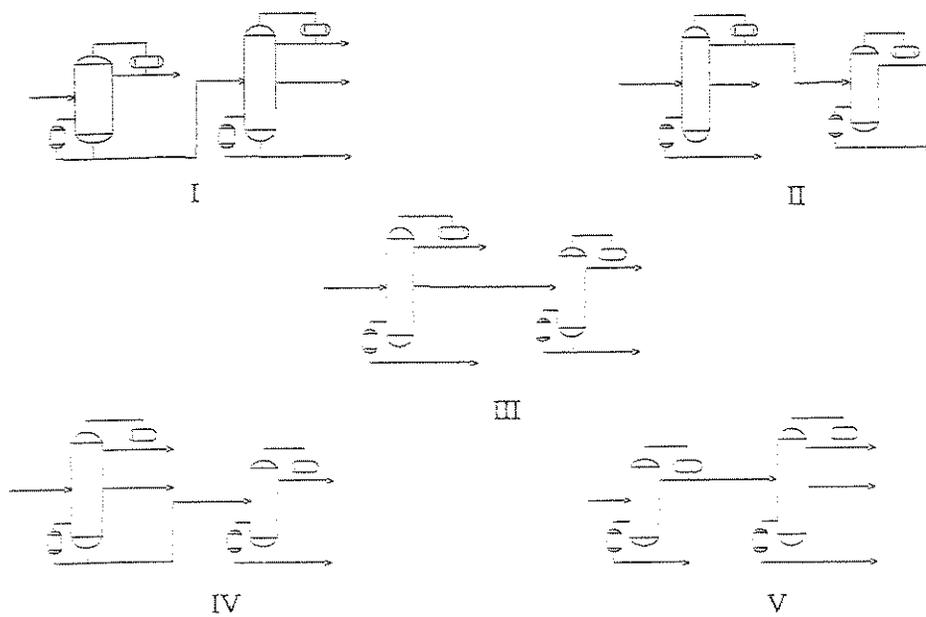


Figura 4.6. Seqüências utilizando colunas com saída lateral.

Integrando as seqüências da Figura 4.6 percebemos que dois tipos de arranjos surgem como mostra a Figura 4.7. A integração da seqüência 4.6(IV), mostrada na Figura 4.7(a), reduz os custos em 2,17% em relação à seqüência com saída lateral sem integração.

É interessante notar que a diferença entre os custos entre as seqüências com saída lateral não integradas 4.6(I) e 4.6(IV) é pequena, mas que quando integradas esta diferença aumenta, fazendo com que uma delas, a seqüência integrada 4.7(I), seja inviável economicamente. Ou seja, o custo desta seqüência torna-se maior que a seqüência não integrada.

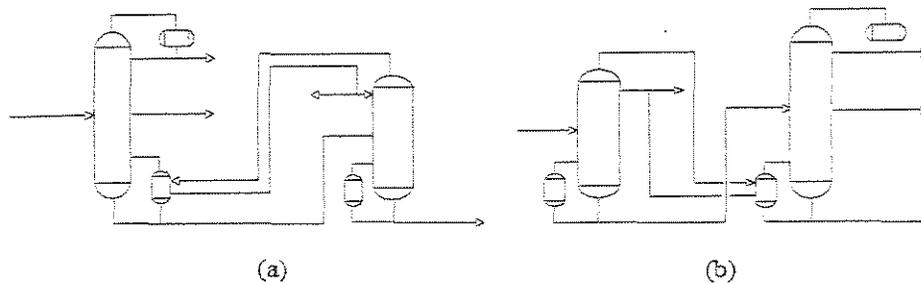


Figura 4.7. Integração de calor em seqüências utilizando colunas com saída lateral

Assim, das cinco seqüências integradas analisadas, duas apresentaram custo menor que a seqüência sem integração. Nas seqüências 4.6(I) e 4.6(V) os custos aumentaram principalmente pelo fato de se fazer o acoplamento térmico na segunda coluna de destilação. Como as temperaturas nesta coluna são mais altas, a pressão necessária para efetivar o acoplamento térmico com a primeira coluna também é maior. Com isto a preferência pelo arranjo de integração da Figura 4.7(IV) é predominante em todas as seqüências analisadas. Isto é ilustrado na Figura 4.8.

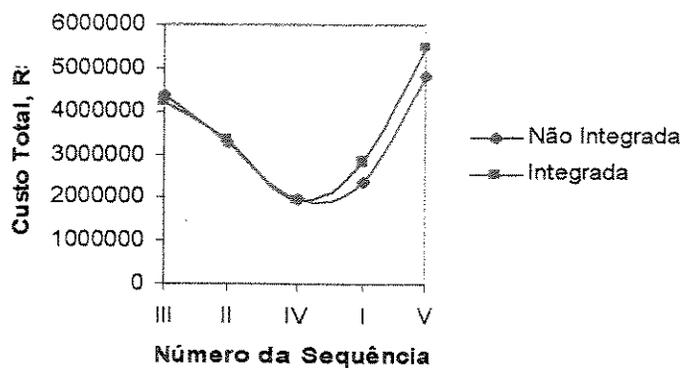


Figura 4.8. Custo de seqüências utilizando colunas com saída lateral.

4.6. - Proposta de Método Simplificado para Obtenção de Seqüências Integradas

O método proposto parte do conhecimento prévio da melhor, ou das melhores, seqüências não integradas. A necessidade de conhecer apenas as temperaturas de topo e base de cada uma das colunas na seqüência torna o método proposto simples de ser conduzido manualmente.

Do princípio da exclusão de Morari e Faith (1980) sabe-se que uma coluna integrada pode ser analisada de forma independente da seqüência inteira. Ou seja, a integração da coluna 1 com a 2 pode ser aceita se não existem restrições, como por exemplo, a degradação dos produtos pela temperatura. Ou seja, se o limite máximo permitido para temperatura não pode ser superado.

No método simplificado a restrição é apresentada através do $\Delta T_{\text{médio}}$, das diferenças de temperaturas entre as colunas, permitindo portanto a escolha dos acoplamentos possíveis. O método também considera os acoplamentos individuais como formas de integração interessantes na escolha da melhor seqüência integrada.

Baseado na Figura 4.9, os passos para a condução do problema são os seguintes:

- i) determinar as diferenças entre as temperaturas de topo, T_i , e base, T_j , de cada coluna que será integrada;
- ii) determinar a média geral das diferenças de temperatura, $\Delta T_{\text{médio}}$;
- iii) Escolher os menores valores de $\Delta T_{i,j}$ e $\Delta T_{j,i}$, menores do que $\Delta T_{\text{médio}}$;
- iv) Encontrar as possíveis melhores seqüências integradas simples.

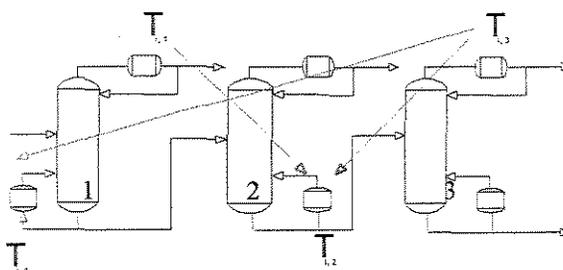


Figura 4.9 – Temperaturas de topo (T_i) e base (T_j) de cada coluna na seqüência.

Como primeiro exemplo o método será aplicado para obtenção da melhor seqüência integrada, na separação da mistura benzeno / tolueno / o-xileno / difenil, com as composições listadas na Tabela 4.8 (Novak, 1996). A Figura 4.10 mostra a melhor seqüência não-integrada para esta separação.

Tabela 4.8. Composição da mistura benzeno / tolueno / o-xileno / difenil.

Componente	xf
Benzeno	0,40
Tolueno	0,30
o-Xileno	0,20
Difenil	0,10

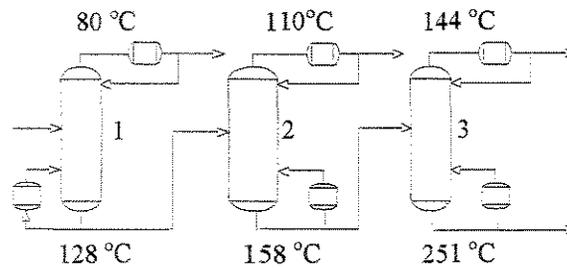


Figura 4.10. Seqüência direta ótima não integrada.

Aplicando o método à seqüência da Figura 4.10, tem-se:

i) Cálculo da diferença entre as temperaturas das colunas 1 e 2:

$$\Delta T_{12} = 158 - 80 = 78 \text{ } ^\circ\text{C}$$

Calculando para todas as colunas temos:

$$\Delta T_{13} = 171 \text{ } ^\circ\text{C}$$

$$\Delta T_{21} = 18 \text{ } ^\circ\text{C}$$

$$\Delta T_{23} = 141 \text{ } ^\circ\text{C}$$

$$\Delta T_{31} = 16 \text{ } ^\circ\text{C}$$

$$\Delta T_{32} = 14 \text{ } ^\circ\text{C}$$

ii) $\Delta T_{\text{médio}} = 73 \text{ } ^\circ\text{C}$

iii) Os menores valores dentre os ΔT 's são ΔT_{21} , ΔT_{31} e ΔT_{32} .

iv) Combinando os resultados temos:

a – C21-C31

b – C21

c – C31

d – C32

As melhores seqüências integradas obtidas por Novak (1996) e o melhor resultado obtido pelo método simplificado estão nas Figuras 4.11(a) e 4.11(b), respectivamente.

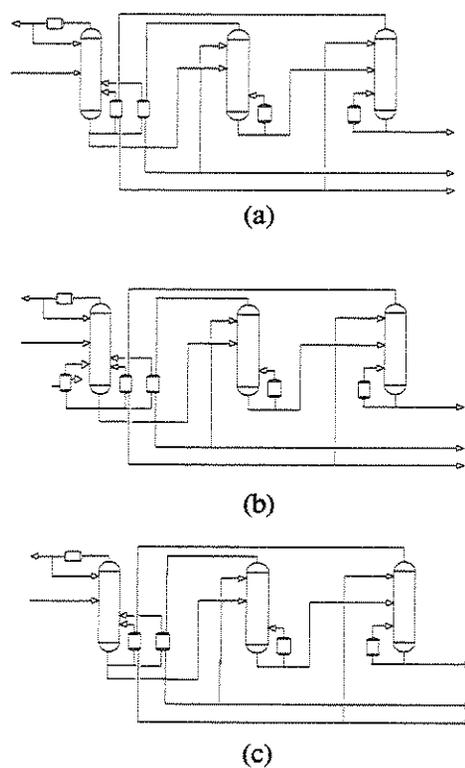


Figura 4.11. Colunas integradas (a) Novak (1996), (b) método seção 3.3, (c) método simplificado.

As configurações obtidas pelo método simplificado contém a melhor seqüência integrada, Figura 4.11(c). Assim, esta seqüência pode ser considerada um bom início para se encontrar a configuração ótima.

Um outro exemplo é a seqüência ótima proposta por Porter et all (1987) com composições dadas na Tabela 4.9.

Tabela 4.9. Composição da mistura teste (Porter et all, 1987)

Componente	x_f
i-butano	0,157
n-butano	0,263
i-penteno	0,210
n-pentano	0,368

A Figura 4.12 mostra a melhor seqüência obtida com as temperaturas de topo e base de cada coluna.

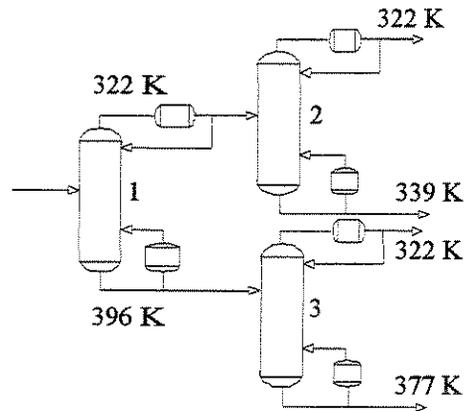


Figura 4.12. Seqüência ótima não integrada.

Aplicando o método à seqüência da Figura 4.12, tem-se:

i) Cálculo da diferença entre as temperaturas das colunas 1 e 2:

$$\Delta T_{12} = 339 - 322 = 17 \text{ } ^\circ\text{C}$$

Para todas as colunas temos:

$$\Delta T_{13} = 55 \text{ } ^\circ\text{C}$$

$$\Delta T_{21} = 74 \text{ } ^\circ\text{C}$$

$$\Delta T_{23} = 55 \text{ } ^\circ\text{C}$$

$$\Delta T_{31} = 74 \text{ } ^\circ\text{C}$$

$$\Delta T_{32} = 17 \text{ } ^\circ\text{C}$$

ii) $\Delta T_{\text{médio}} = 48,7^\circ\text{C}$

iii) Os menores valores dentre ΔT 's são ΔT_{12} , ΔT_{32} .

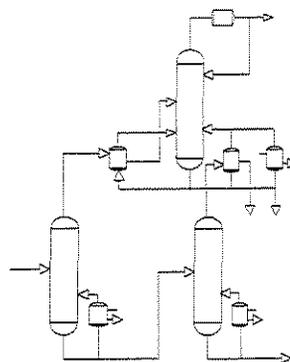
iv) Combinando os resultados temos:

a - C12-C32

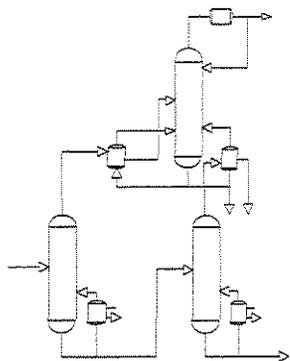
b - C12

c - C32

Que é também a melhor seqüência integrada proposta por Porter et all (1987). As seqüências obtidas são mostradas na Figura 4.13.



(a)



(b)

Figura 4.13. Resultados para as seqüências integradas (a) Porter(1987), (b) método simplificado.

4.7. - Fatores que Influenciam o Seqüenciamento de Colunas de Destilação

O objetivo do seqüenciamento de colunas de destilação é o de se obter uma seqüência que tenha baixo custo, e de preferência que este seja o menor dentre os custos de todos os arranjos possíveis.

Os resultados deste trabalho mostram que para uma seqüência integrada o número de arranjos possíveis normalmente é muito maior do que aquele de seqüências não-integradas. Sabe-se também que o número de arranjos de seqüências não-integradas pode aumentar muito, dependendo

do número de componentes na alimentação. Entretanto, podemos também ter casos em que apenas uma seqüência integrada, ou às vezes nenhuma, é obtida.

O fato é que o seqüenciamento de colunas integradas depende de vários fatores, e que a alteração de algum destes, modifica significativamente o resultado final.

Os principais fatores que influenciam o seqüenciamento de colunas de destilação são:

- i) tipo de configuração;
- ii) pressão da coluna, ou o ΔT no trocador de integração;
- iii) composição da alimentação;
- iv) vazão da alimentação;
- v) volatilidade relativa entre os componentes.

A Figura 4.14 mostra dois arranjos possíveis, D12 e D21, para uma seqüência direta com duas colunas. Para cada um destes arranjos, a Figura 4.14 também mostra duas outras configurações: a seqüência Tipo I, que possui um refeedor a mais, e a seqüência Tipo II, que possui um condensador a mais.

O problema em questão é determinar qual destas seqüências integradas apresenta o menor custo total e se a presença de um Tipo I ou Tipo II apresenta alguma influência no resultado final.

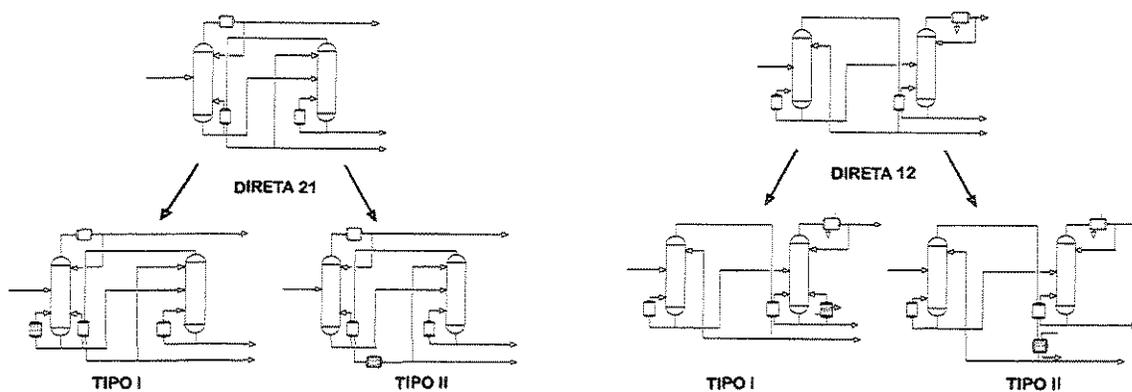


Figura 4.14. Possibilidades de integração entre duas colunas de destilação.

4.8. - Principais Fatores

4.8.1. - Tipo de configuração

A Tabela 4.10 mostra o custo para as seqüências da Figura 4.14. Os resultados foram obtidos através do método do item 3.3.

Tabela 4.10. Custo de seqüências para vários tipos de alimentações.

Custo da seqüência (R\$)					
Alimentação		D12		D21	
Componentes	composição	Tipo I	Tipo II	Tipo I	Tipo II
benz / tol / o-xil	0,6 / 0,2 / 0,2	--	1.161.000	851.700	--
i-but / n-hex / n-hep	0,6 / 0,3 / 0,1	--	1.011.000	805.700	--
i-but / n-but / n-pent	0,5 / 0,3 / 0,2	--	988.100	770.100	--

Os resultados na Tabela 4.9 mostram que as configurações do Tipo I proporcionam o menor custo. Deste modo, se possuirmos duas configurações integradas, daremos preferência à que possuir um refeedor a mais.

4.8.2. - Pressão da Coluna

A integração de colunas de destilação consiste em aproveitar o calor removido no topo de uma coluna, no refeedor de uma outra coluna. Isto requer que a pressão da coluna que fornece calor seja aumentada.

Várias são as conseqüências do aumento da pressão de operação de uma coluna:

- i) diminuição do volume do vapor circulante;
- ii) conseqüente redução do diâmetro;
- iii) a diferença entre as volatilidades relativas diminui;
- iv) aumento da razão de refluxo;
- v) aumento da altura da coluna;

- vi) aumento da temperatura do destilado;
- vii) diminuição do calor latente de vaporização;
- viii) aumento da espessura da parede da coluna;
- ix) diferença na temperatura de topo e de base diminui.

Com relação à configuração das seqüências, a pressão tem grande influência no arranjo e no custo final do projeto. Considerando a seqüência D12-Tipo I, conforme a Figura 4.15(a), que conseqüências traria o aumento progressivo da pressão da coluna 1?

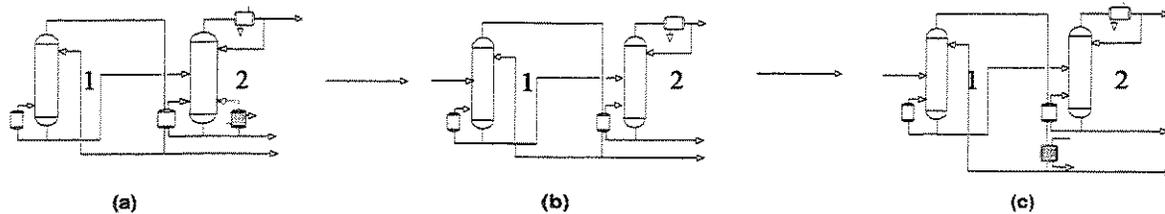


Figura 4.15. Aumento da pressão nas seqüências do D12-Tipo I

O custo de um arranjo Tipo I é, como foi visto anteriormente, menor do que o custo do arranjo Tipo II. O aumento da pressão na coluna 1 favorece um maior aproveitamento de calor no refeedor da coluna 2 (Figura 4.15(a)). No entanto, se a pressão continuar aumentando chegaremos a um ponto em que todo o calor será aproveitado como mostra a Figura 4.15(b). Ultrapassando este limite passamos a produzir um arranjo do Tipo II, conforme a Figura 4.15(c), ou seja, o condensador da coluna 1 será agora o trocador de calor em linha com a coluna 1, sendo que o refeedor da coluna 2 será o trocador de integração. Com isto mantemos cada coluna com um condensador e um refeedor.

Como a pressão tem influência direta na temperatura estas mudanças podem ser acompanhadas através do ΔT (diferença entre as temperaturas no topo e na base das colunas 1 e 2, respectivamente), no trocador comum às duas colunas.

A Figura 4.16 mostra a variação do custo total da coluna 2 em função do ΔT no trocador de integração.

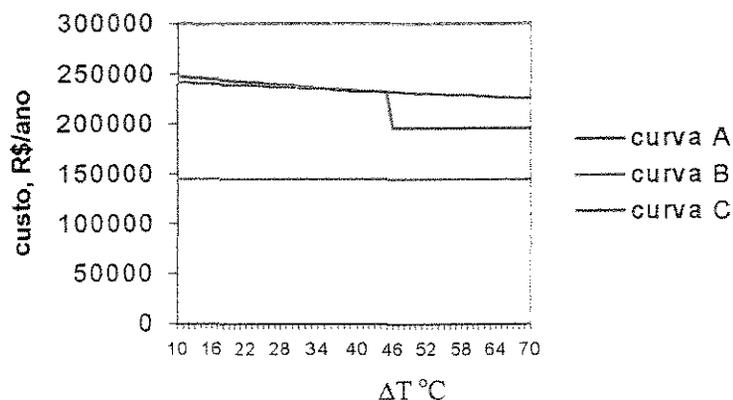


Figura 4.16. Variação do custo da coluna 2 com o ΔT no trocador de integração.

A curva B na Figura 4.16, mostra a variação do custo total da coluna 2 em função do ΔT . Observa-se que para $\Delta T < 46^\circ\text{C}$ o custo da coluna diminui com o aumento de ΔT (arranjo D12-Tipo I). Para $\Delta T > 46^\circ\text{C}$ o custo da coluna 2 independe do ΔT (arranjo D12-Tipo II), pois como o refervedor de integração pertence a coluna 2, o custo do conjunto, coluna 2, condensador e refervedor não se alteram.

Ainda nesta Figura 4.16 o custo da coluna 2 nas curvas C e A, representam respectivamente aos arranjos D12-I e D12-II. O custo desta coluna no arranjo D12-I, curva C, é sempre decrescente, sendo necessário aumentar a pressão acima do valor de $\Delta T=70^\circ\text{C}$ para se modificar o arranjo do Tipo I para Tipo II. Já para a mesma coluna no arranjo D12-II, curva A, o aumento de pressão não modifica a configuração final do projeto. O custo neste caso é sempre o mesmo com relação a coluna 2, mas crescente em relação a seqüência completa.

4.8.3. - Composição da Alimentação

A composição da alimentação influencia significativamente o custo das seqüências não-integradas. A principal consequência é que dependendo da composição uma seqüência direta ou indireta pode ser recomendada.

A Figura 4.17 mostra como o custo total da seqüência não-integrada varia com a composição de benzeno, na separação de uma mistura benzeno/ (0,1 mol %) tolueno/ o-xileno. A Figura 4.17 está de acordo com a heurística que diz: “preferir a seqüência direta quando a composição do componente leve for alta. Observa-se que para composições de benzeno $\leq 0,2$ o custo total das seqüências direta e indireta se aproximam, não havendo uma diferença significativa na escolha de uma ou outra seqüência. Ainda assim a seqüência direta possui menor custo, o que fortalece a heurística geral que dá preferência às seqüências diretas.

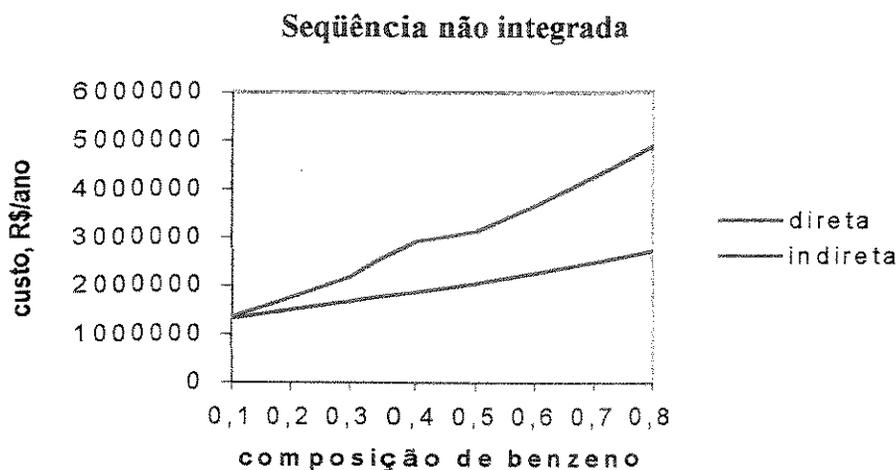
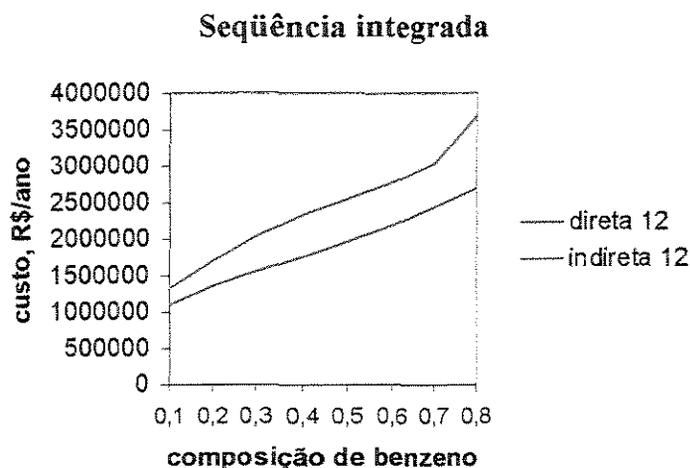


Figura 4.17. Variação da composição de benzeno (sistema: benzeno/ tolueno/ o-xileno).

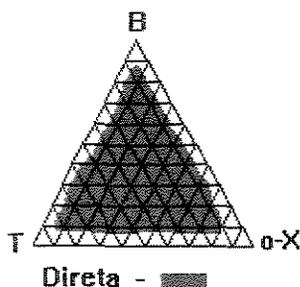
A composição da alimentação também influencia o custo das seqüências das colunas integradas. Quando as seqüências são integradas o custo total diminui. O comportamento geral das curvas tanto integradas (Figura 4.18.(a)) quanto não-integradas (Figura 4.17) é praticamente o mesmo.

O diagrama da Figura 4.18.(b) mostra que na interceccção de qualquer conjunto de composições de benzeno/tolueno/o-xileno, a seqüência direta na integração é a favorável. Ou seja, quando a separação é fácil entre os componentes e o o-xileno está em maior quantidade, a preferência pela seqüência direta segue mantida. Observa-se entretanto, na

Figura 4.18(a), que a diferença de custos entre as seqüências integradas direta e indireta diminui quando a composição de o-xileno na alimentação é maior.



(a)



(b)

Figura 4.18. Variação da composição de benzeno (sistema: benzeno/tolueno/o-xileno).

A Figura 4.19 mostra o custo do seqüenciamento de colunas para a separação de uma mistura benzeno/ (0,1 mol %) o-xileno/p-xileno; caso em que a separação dos componentes pesados (o-xileno e p-xileno) é difícil. Neste caso a preferência pela seqüência direta ocorre em toda a faixa de composições estando de acordo com a heurística que diz: *deixar por último a separação difícil*.

Seqüência não integrada

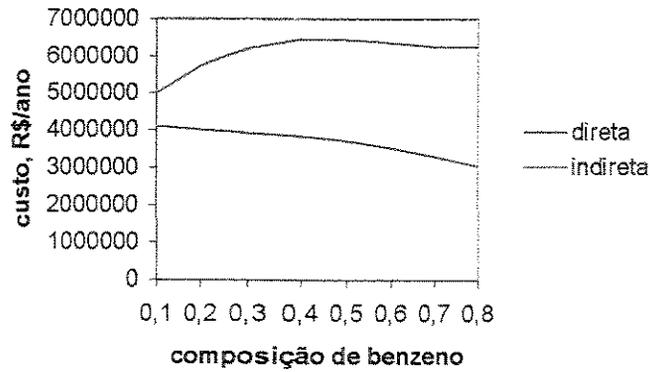
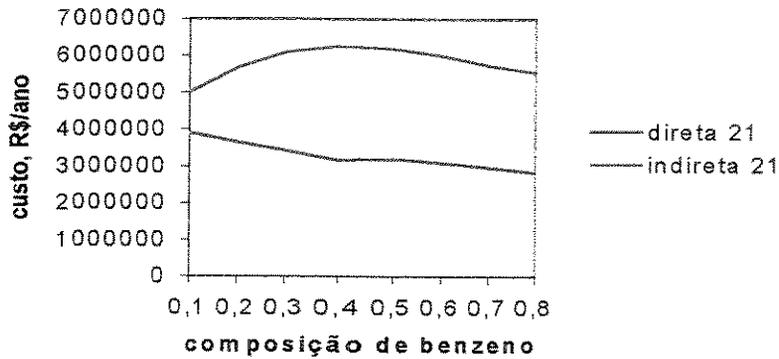


Figura 4.19. Variação da composição de benzeno em sistema benzeno/o-xileno/p-xileno.

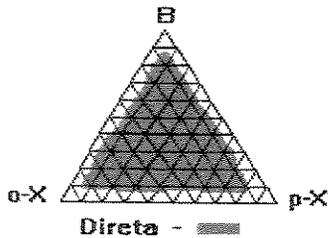
(F = 1900 moles/h)

Assim como no caso anterior, a integração energética diminui o custo total da seqüência (Figura 4.20.(a)).

Seqüência integrada



(a)



(b)

Figura 4.20. Variação da composição de benzeno em sistema benzeno, o-xileno, p-xileno.

O comportamento das curvas de custos na Figura 4.20(a) é semelhante às da Figura 4.19.(a) para a seqüência não-integrada. Também em toda a faixa de composições (Figura 20.(b)) a seqüência direta é favorecida sugerindo que a heurística aplicada ao seqüenciamento não-integrado também é válida para as seqüências integradas.

Finalmente, a Figura 4.21 mostra o custo da seqüência não-integrada para a separação de uma mistura i-pentano/ (0,1 mol %) n-pentano/n-hexano. A separação difícil entre os componentes leves (i-pentano e n-pentano) favorece a seqüência indireta quando o componente pesado está em maior quantidade.

Entretanto, a seqüência direta é favorecida à medida que a composição de n-hexano diminui. Isto contradiz a heurística - *deixar para último as separações difíceis* - mas por outro lado concorda com a idéia - “remova primeiro o componente em maior quantidade”. Neste caso, esta última heurística se sobrepõe a anterior, principalmente a baixas concentrações de n-hexano e altas concentrações de i-pentano.

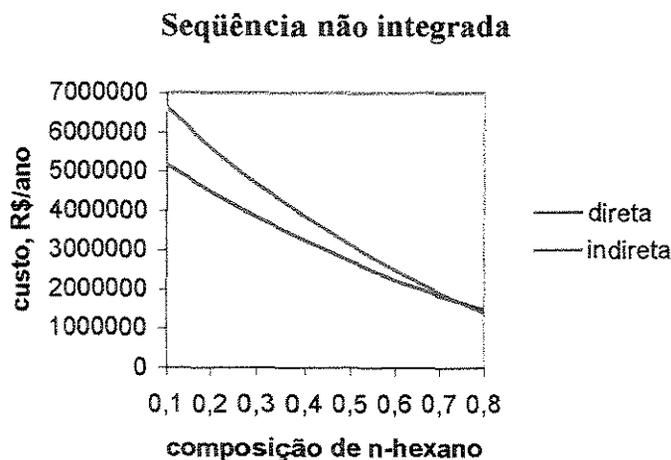
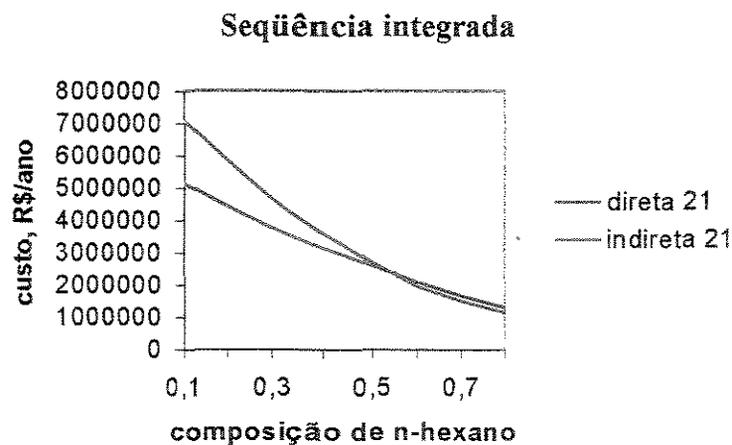
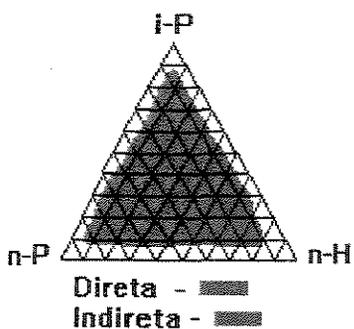


Figura 4.21. Variação da composição de n-hexano em sistema i-pentano/n-pentano/n-hexano.



(a)



(b)

Figura 4.22. Variação da composição de benzeno em sistema i-pentano/n-pentano/n-hexano.

Mais uma vez o comportamento das curvas das seqüências integradas é semelhante ao das curvas das seqüências não-integradas. Os custos totais na Figura 4.22(a) diminuem com o aumento da composição de hexano, mostrando que a integração é favorável para toda a faixa de composições. As mesmas conclusões obtidas para o caso não integrado se aplicam à Figura 4.22(b).

4.8.4. – Vazão de Alimentação

A Figura 4.23 mostra o custo da integração energética em função da vazão de alimentação de uma mistura equimolar: benzeno/ tolueno/ o-xileno. A integração energética torna-se vantajosa

apenas para vazões acima de 300 moles/hora. Os motivos que levam a vazão de alimentação a influenciar a integração estão relacionados com os custos de utilidades. Maiores vazões favorecem o aproveitamento de energia, ou seja diminuem a necessidade de utilidades, tanto quente quanto fria. Abaixo de um determinado valor o custos de capital são dominantes, e a integração já não apresenta efeitos práticos.

A Figura 4.24 mostra, para o caso do sistema sistema: benzeno/ tolueno/ o-xileno/ trimetilbenzeno, que nem sempre a integração é vantajosa. Para o caso da seqüência integrada 2 o custo total é maior do que no caso da seqüência não-integrada. No caso da seqüência integrada 1 o efeito da integração é apenas ligeiramente positivo.

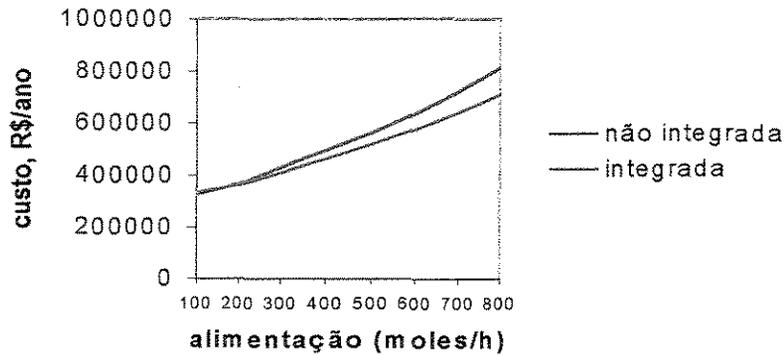


Figura 4.23. Variação da alimentação de uma mistura equimolar de btx em uma seqüência direta.

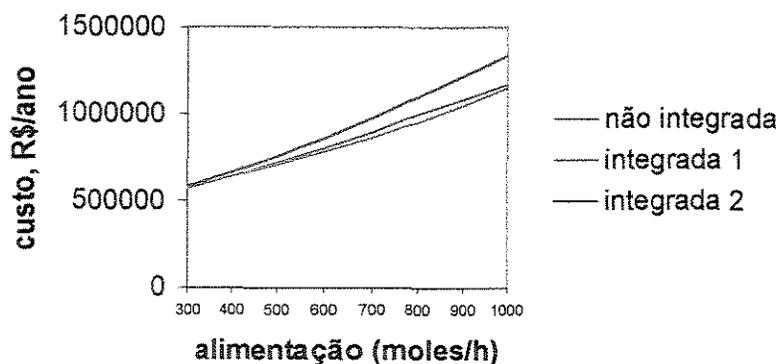
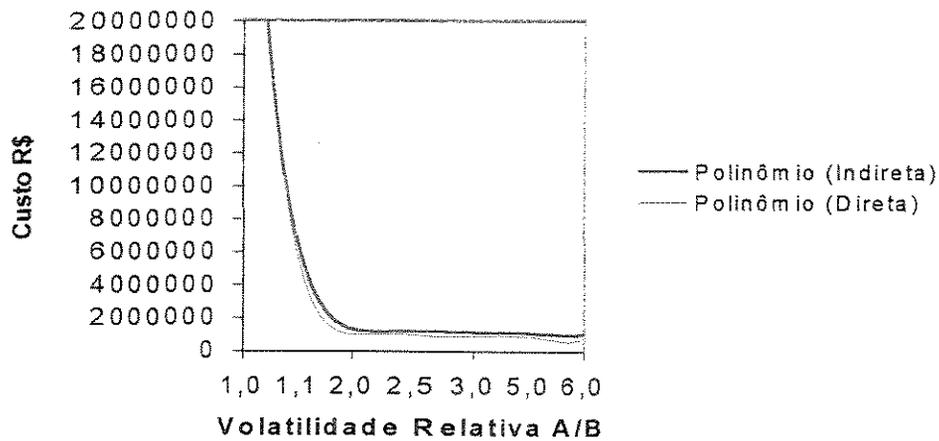


Figura 4.24. Variação da alimentação de uma mistura de b-t-x-tmb em uma seqüência direta.

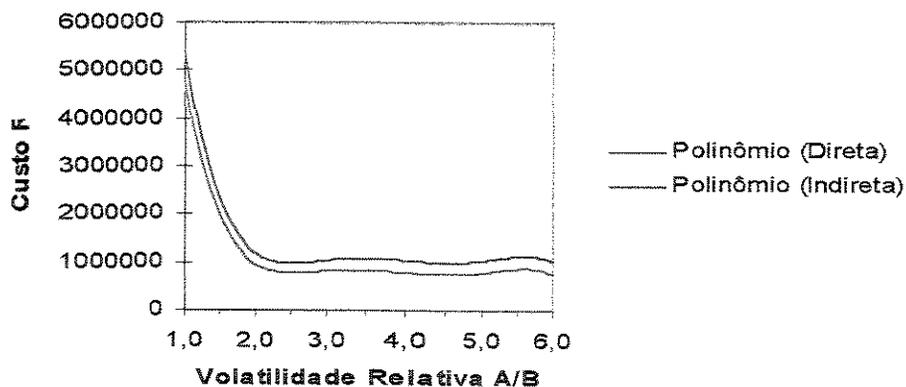
4.8.5. – Volatilidade Relativa

A Figura 4.25(a) mostra que uma seqüência indireta é preferida quando a volatilidade relativa é menor do que 1,2. Acima deste valor a seqüência direta é mais vantajosa, sendo que não se registra grandes variações no custo ao longo da faixa estudada.

Observa-se também que as curvas de custo das seqüências integradas, Figura 4.25(b), possuem comportamento bastante semelhante ao caso não integrado.



(a) seqüências não-integradas



(b) seqüências integradas

Figura 4.25. Variação da volatilidade relativa em uma mistura equimolar de três componentes.

4.9. - Seqüências Complexas Não-Integradas

As seqüências de colunas complexas estão sujeitas aos mesmos fatores que influenciam o seqüenciamento de colunas simples.

Dentre estes fatores, a variação da composição e a volatilidade relativa foram analisadas nas bases dos itens anteriores. Deste modo, considere a separação de uma mistura de quatro componentes, utilizando-se duas colunas de destilação, uma convencional e outra com uma saída lateral. A composição na alimentação do componente mais volátil em cada caso cresce a partir de 0,1, enquanto a composição do mais pesado decresce de 0,7. Os componentes intermediários são mantidos com composições fixas em 0,1.

4.9.1. - Separação Fácil entre os Componentes

Considere a separação dos componentes benzeno/ tolueno/ o-xileno/ difenil, utilizando-se duas colunas, uma com saída lateral. A separação dos componentes é considerada fácil. As curvas de custos na Figura 4.26 mostram que as seqüências 1 e 2 competem entre si, sendo que a escolha entre uma e outra é determinada principalmente pela composição da alimentação. Em geral, os custos destas seqüências se mantêm constantes para toda a faixa de composição.

Conceitualmente os arranjos das seqüências 1 e 2 estão muito próximos de uma seqüência direta com colunas simples. Sendo assim, podemos aplicar as mesmas regras heurísticas que nos casos anteriores. De tal forma que a heurística que diz, *favorecer o arranjo direto quando o componente leve estiver em maior quantidade* está perfeitamente de acordo com os resultados da Figura 4.26. E reforçado pois, mesmo com composições altas de difenil a seqüência 3 não é favorável. Desta forma, a preferência pelas seqüências diretas torna-se também caracterizada com as colunas complexas.

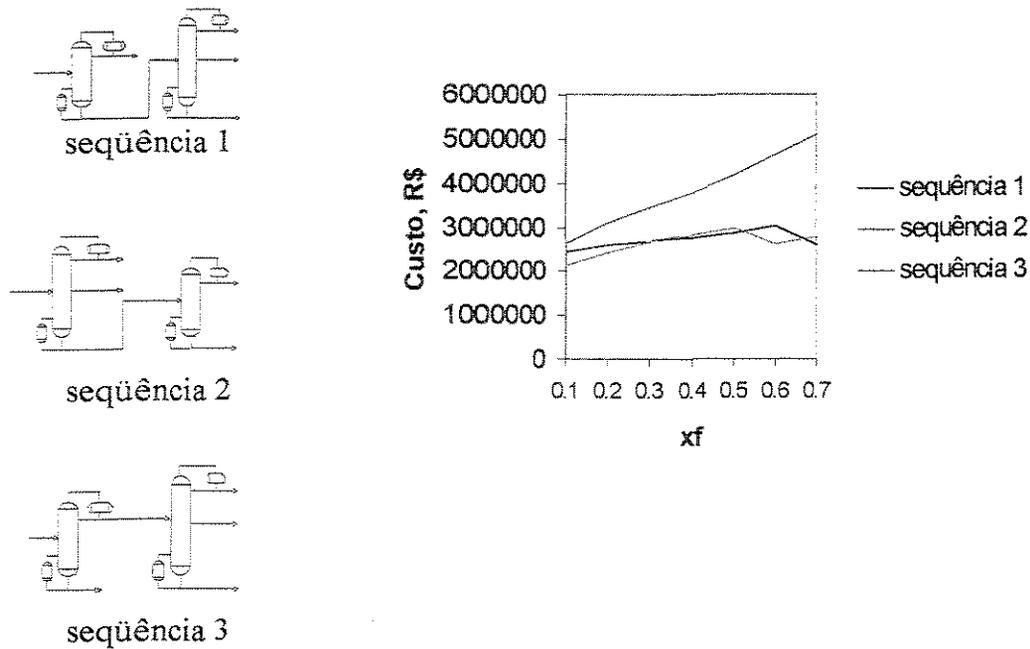


Figura 4.26. Variação do custo da seqüência com a composição de benzeno (x_f).

4.9.2. - Separação Difícil entre os Componentes Leves

Neste caso, considere a separação de uma mistura: n-pentano/ i-pentano/ benzeno/ tolueno. Quando a separação é difícil entre os componentes leves, a seqüência 2 é a preferida (Figura 4.27).

Apenas para baixas concentrações de n-pentano é que o custo da seqüência 1 compete com o da seqüência 2. Como a composição de tolueno é alta as heurísticas que dizem *remova o componente em maior quantidade primeiro* e *deixe as separações difíceis por último* estão de acordo com os resultados. Agora, quando a composição de n-pentano começa a aumentar, as contradições entre as heurísticas aparecem – *remover o componente abundante primeiro, ou deixar por último a separação difícil?*

É neste ponto que a seqüência 2 surge. Com o aumento da composição, a volatilidade relativa entre o n-pentano e o i-pentano começa a aumentar tornando a separação mais fácil.

Isto faz com que a seqüência 2 passe a ter custo cada vez menor com o aumento da composição do componente mais leve. Na realidade, a heurística - *remova o componente em maior quantidade* - é favorecida na seqüência 2.

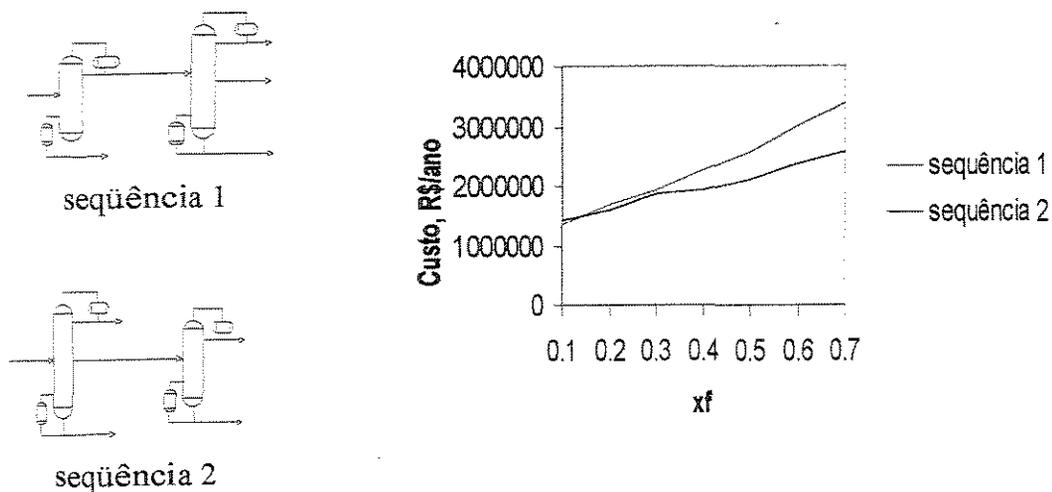


Figura 4.27. Variação do custo da seqüência com a composição de n-pentano (x_f).

4.9.3. - Separação Difícil entre os Componentes Pesados

A seqüência 1 na Figura 4.28 mostra ser o melhor arranjo quando temos uma mistura de benzeno/ tolueno/ 1,3,5-trimetilbenzeno/ 1,2,3-trimetilbenzeno quando a concentração de benzeno é baixa. A heurística que *diz deixe por último os componentes pesados difíceis de serem separados* está de acordo com o arranjo obtido.

Da mesma forma que no caso anterior a seqüência 2 compete com a seqüência 1. Quando a composição de benzeno começa a crescer na alimentação, a seqüência 2 proporciona menor custo. Entretanto, em composições mais altas a seqüência 1 volta a ser a melhor opção.

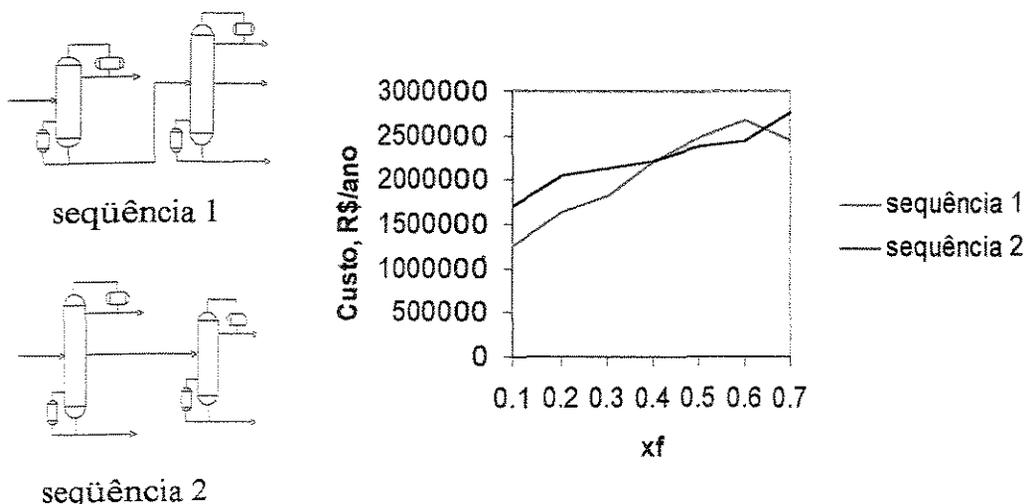


Figura 4.28. Variação do custo da seqüência com a composição de benzeno (x_f).

4.9.4. - Separação Difícil entre os Componentes de Meio

O gráfico da Figura 4.29 mostra que a seqüência 2 é para toda a faixa de composições a melhor opção. Este resultado, para altas composições de benzeno, está de acordo com as heurísticas - *remova o componente em maior quantidade* - e - *deixe por último as separações difíceis*.

Para baixas composições de benzeno a segunda heurística é mantida, ou seja, o arranjo direto permanece sendo melhor. Entretanto, notamos que o custo da seqüência 3, indireta, aproxima-se consideravelmente do custo da seqüência 2. E mesmo que este resultado não seja o melhor, vemos que a tendência do custo da seqüência 3 também concorda com as heurísticas acima, visto que a dificuldade de separação está entre os componentes intermediários da alimentação.

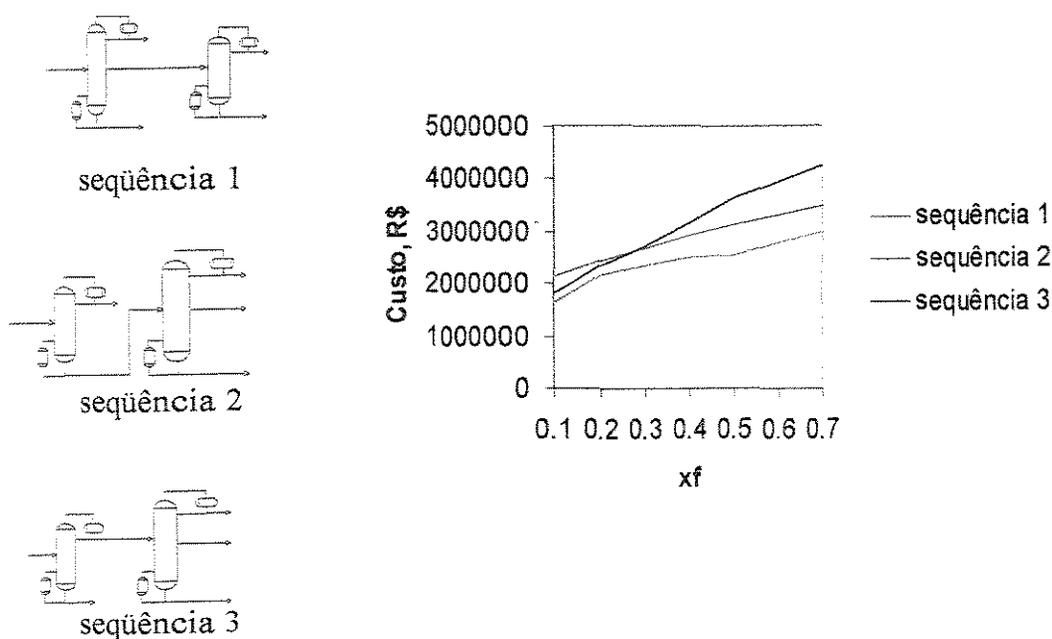


Figura 4.29. Variação do custo da seqüência com a composição de benzeno (x_f)

4.10. - Conclusões

Inúmeros são os caminhos que levam a obtenção de produtos puros através de um conjunto de colunas de destilação. O processo de síntese é um instrumento que propicia encontrar as melhores configurações para determinado serviço. Tal processo de seleção leva em conta, além de análise econômica, questões de flexibilidade e operacionalidade do sistema.

Com vistas a diminuir custos de operação, a recuperação de calor através de acoplamento térmico entre colunas apresenta bons resultados. No entanto, é aconselhável analisar as diversas formas possíveis de acoplamento. Isto porque o custo final é bastante influenciado pelo tipo de alimentação, configuração e malha de trocadores de calor.

Assim, das muitas formas de se separar os produtos do desproporcionamento do tolueno a benzeno, este trabalho indica que a seqüência direta é o melhor arranjo sem integração. Este resultado foi obtido para diversas composições de alimentação. A Figura

4.30.(a) apresenta o resultado final para a razão molar hidrogênio/hidrocarbonetos igual a 10 bem como dados de operação da coluna.

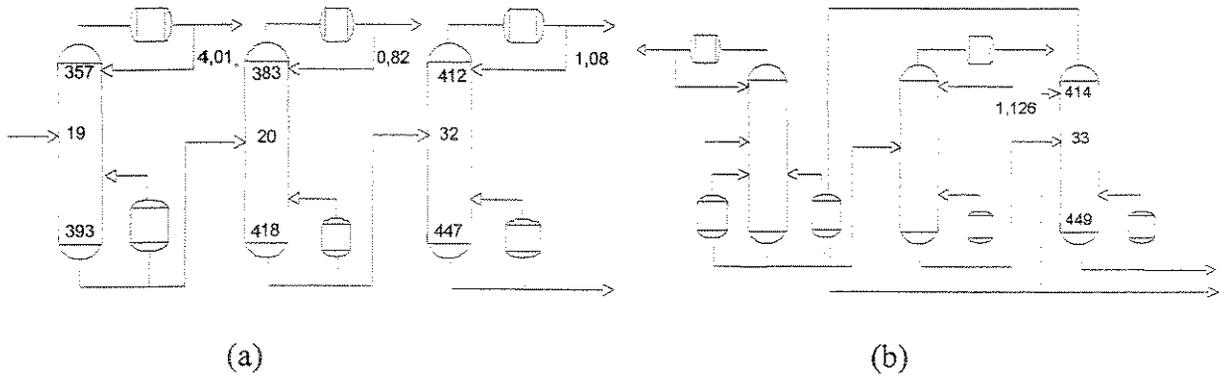


Figura 4.30. Seqüência final para desproporcionamento do tolueno (a) sem e (b) com integração.

A integração energética deste sistema reduziu os custos totais em 3,6% através de um único acoplamento térmico (tipo I) como mostra a Figura 4.30.(b). Este pode ser também otimizado com o aumento da pressão da terceira coluna ou pela recuperação de calor através de outros equipamentos do processo.

5. - CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

5.1. - Conclusões

Neste trabalho foram estudados métodos que objetivam a construção de fluxogramas alternativos para processos de destilação. No estudo de caso apresentado, a etapa de separação dos produtos da reação de desproporcionamento do tolueno foi analisada com o objetivo de diminuir o custo da operação. Isto foi alcançado ao encontrar a melhor seqüência de destilação não integrada e depois procedendo a integração. Durante as etapas de síntese e integração procurou-se fluxogramas alternativos que somassem vantagens operacionais e econômicas.

Também no trabalho, foram avaliadas as principais heurísticas existentes na literatura utilizando diversas misturas de componentes. Estes resultados, permitiram verificar quando a composição de uma substância é considerada alta em um determinado grupo de componentes. Ou seja, a heurística, - quando o componente estiver em maior quantidade - pode ser analisada do ponto de vista da quantidade mínima do componente em que a mesma é válida.

A integração energética produziu resultados bastante semelhantes comparados com as seqüências não integradas. Mesmo assim é prematuro propor heurísticas que generalizem este comportamento, sendo necessário verificá-lo para outros sistemas químicos e maior número de componentes na alimentação.

Conclusões semelhantes pode-se dizer, com o estudo da variação do custo total da seqüência integrada com a vazão molar na alimentação. Apesar dos resultados indicarem que o custo total da seqüência diminui com o aumento da vazão, ainda assim se observa uma forte dependência deste quando modificações no arranjo de integração ocorrem.

Resultados interessantes foram obtidos utilizando seqüências com colunas de saída lateral. A melhor seqüência não integrada encontrada é economicamente vantajosa quando

comparada com as seqüências convencionais. Observa-se também que a integração energética destas seqüências torna maiores as vantagens econômicas, sendo que o arranjo de integração é bastante dependente do tipo e composição da alimentação. Apesar das vantagens econômicas deste tipo de coluna, estudos ainda devem ser realizados em termos de operação e controlabilidade de modo a permitir que sua aplicação se efetive, tornando-se assim uma alternativa frente aos processos de separação convencionais.

Comparando as heurísticas conhecidas para seqüências simples com os resultados das seqüências de saída lateral várias aproximações podem ser feitas. A preferência pela seqüência direta segue vantajosa quando a dificuldade de separação entre os componentes é semelhante ou quando é difícil entre os componentes pesados. O mesmo ocorrendo nos casos contrários quando a seqüência é indireta. Surge entretanto, uma novo tipo de configuração, retirada pelo meio, que compete com uma ou outra forma de seqüenciamento dependendo do caso.

5.2. - Sugestões para Trabalhos Futuros

Sugere-se para trabalhos futuros o desenvolvimento de uma interface compatível com o ambiente Windows. Isto permitirá um trabalho mais prático e visualmente mais interessante na escolha da melhor seqüência. Rotinas que visem a obtenção de informações específicas de determinado equipamento, ou alteração realizada, tornaria mais flexível e prático o programa existente. Estas rotinas podem ser estendidas na aplicação dos métodos de integração energética em alimentação com mais de quatro componentes, bem como a opção de inserir colunas com saída lateral nas seqüências geradas. Este procedimento facilitaria bastante a comparação das seqüências integradas e não integradas, de colunas com e sem saída lateral, no sentido de ampliar o conhecimento heurístico.

Também sugere-se o estudo e aplicação das técnicas apresentadas neste trabalho para sistemas azeotrópicos. As técnicas de síntese e integração para este processo podem ser adicionadas como opção nas rotinas anteriores.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Andrecovich, M. J. e Westerberg, A. W., "A Simple Synthesis Method Based on Utility Bounding for Heat-Integrated Distillation Sequences", *AIChE J.*, **31** (3), (1985).
- Andrecovich, M. J. e Westerberg, A. W., "An MILP Formulation for Heat-Integrated Distillation Sequences Synthesis", *AIChE J.*, **31** (9), p. 1461, (1985).
- Carlberg, N. A. e Westerberg, A. W., "Temperature-Heat Diagrams for Complex Columns. 2. Underwood's Method for Side Strippers and Enrichers", *Ind. Eng. Chem. Res.*, **28** (9), p. 1379, (1989).
- Chang, H. Y., "Computer Aids Short-Cut Distillation Desing", *Hydrocarbon Processing*, Agosto, (1980).
- Christiansen, A. C., Skogestad, S. e Lien, K., "Complex Distillation Arrangements: Extending the Petlyuk Ideas", *Computers Chem. Engng.*, vol. **21**, Suppl., pp. S237-S242, (1997).
- Douglas, J. L., "A Hierarquical Decision Procedure for Process Synthesis", *AIChE J.*, **31** (3), (1985).
- Douglas, J. M., "*Conceptual Design of Chemical Process*", McGraw-Hill Book Co., (1988).
- Floquet, P., Domenech, S., Pibouleau, L. e Aly, S. ,M., "Some Complements in Combinatorics of Sharp Separation Systems Synthesis", *AIChE J.*, **39** (6), p. 975, (1993).
- Floquet, P., Pibouleau, L., Aly, S. e Domenech, S., "Fuzzy Heuristic Approach for Sharp Separation Sequences Synthesis", *Computers Chem. Engng.*, **18** (9), p. 785, (1994).
- Floudas, C. A. e Paules IV, G. E., "A Mixed-Integer Nonlinear Programming Formulation for the Syntesis of Heat-Integrated Distillation Sequences", *Computers Chem. Engng.*, **12** (6), p. 531, (1988).
- Freshwater, D. C. e Henry, B. D., "Optimal Configuration Of Multicomponent Distillation Systems", *Chem. Engng.*, Setembro, p. 533, (1975).
- Glinos, K. N. e Malone, M. F., "Minimum Reflux, Product Distribution, and Lumping Rules for Multicomponent Distillation", *Ind. Eng. Chem. Process. Des. Dev.*, **23**, pp. 764-768, (1984).

- Glinos, K. N. e Malone, M. F., "Design of Sidestream Distillation Columns", *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.*, **24** (3), p. 822, (1985).
- Glinos, K. N., Nikolaides, I. P. e Malone, M. F., "New Complex Column Arrangements for Ideal Distillation", *Ind. Eng. Chem. Process Des.Dev.*, **25** (3), p. 694, (1986).
- Gomez-Munoz, A. e Seader, J. D., "Synthesis of Distillation Trains by Thermodynamic Analysis", *Computers Chem. Engng*, **9** (4), p. 311, (1985).
- Gundersen, T., "Achievements and Future Challenges in Industrial Design Applications of Process Systems Engineering, *Proceedings:- "4th International Symposium on Process Systems Engineering"*, Montebello, Quebec, Canada, Agosto, (1991).
- Guthrie, K. M., "Capital Cost Estimating", *Chem. Engng*, **76** (6), p 114, (1969).
- Harbert, W.D., "Which Tower Goes Where?", *Petroleum Ref.*, **36**(3), p. 169, (1957).
- Heaven, D. L., "Optimum Sequencing of Distillation Columns in Multicomponent Fractionation", M. S. Thesis, University of California, Berkeley, (1969).
- Hlavacek, V., "Synthesis in the Design of Chemical Process", *Computers Chem. Engng*, **2**, p.67, (1978).
- Ho, F., Keller II, G. E., "*Recent Developments in Chemical Process and Plant Design*", John Wiley & Sons, 1987.
- HP Impact, *Hydrocarbon Processing*, Novembro, 1994.
- Jobson, M., "Short-cut Evaluation of Distillation Sequences", *Computers Chem. Engng, Suppl.*, **21**, pp. S553-S557, (1997)
- King, C. J. , "Separation Process", McGraw Hill Inc, (1980).
- Koehler, J., Poellmann, P. e Blass, E., "A Review on Energy Calculation for Ideal and Nonideal Distillations", *Ind. Eng. Chem. Res.*, **34** (4), p.1003, (1995).
- Lockett M.J., "*Distillation Tray Fundamentals*", Cambridge University Press, Cambridge, (1986).
- Lockhart, F. J., "Multi-Column Distillation of Natural Gasoline", *Petroleum Ref.*, **26** (8), p.105, (1947).
- Lu, M. M. D. e Motard, R. L., "A Strategy for the Synthesis of Separation Sequences, *I. Chem. Symp. Series no. 74*, p. 141, (1982).

- Luyben, W.L. e Alatiqi, I.M., "Alternative Distillation Configurations for Separating Ternary Mixtures with Small Concentrations of Intermediate in the Feed", *Ind. Eng. Chem. Process. Des. Dev.*, **24** (2), p. 500, (1985).
- Luyben, W. e Elachi, A., "Alternative Distillation Configurations of Energy Conservation in Four Component Separations", *Ind. Eng. Chem. Process Des.*, **22** (1), p. 80, (1983).
- Manoui, D., Namba, S. e Yashima, T., "Disproportionation of Toluene and Isomerization of m-xylene Simultaneously Catalysed by Synthetic H-Mordenite", *J. Japan Petrol. Inst.*, **25**, (3), pp. 183-186 (1982).
- Mizsey, P , "A Global Approach to the Synthesis of Chemical Processes", Ph.D. Thesis, Swiss Federal Institute of Technology, Zurich, (1991).
- Modi, A. K. e Westerberg A. W., "Distillation Column Sequencing Using Marginal Price", *Ind. Eng. Chem. Res.*, **31** (3), p. 839, (1992).
- Morari, M e Faith, D. C. , "The Synthesis of Distillation Trains with Heat Integration", *AIChE J.*, **26** (6), p 916, (1980).
- Nadgir, V. M. e Liu, Y. A., "Studies in Chemical Process Design and Synthesis", *AIChE J.*, **29**, (6), p. 926, (1983).
- Nadgir, V. M. e Liu, Y. A., "Studies in Chemical Process Design and Synthesis. Part V: A Simple Heuristic Method for Systematic Synthesis of Initial Sequences for Multicomponent Separations", *AIChE J.*, **29** (6), p. 926, (1983).
- Nikolaides, I. P. e Malone, M. F., "Approximate Design of Multiple-Feed/Side-Stream Distillation Systems", *Ind. Eng. Chem. Res.*, **26** (9), p. 1839, (1987).
- Novak, Z., Kravanja, Z. e Grossmann, I. E., "Simultaneous Synthesis of Distillation Sequences in Overall Process Schemes Using a n Improved MINLP Approach", *Computers Chem. Engng*, **20** (12), p. 1425-1440, (1996).
- Nishimura, H. e Hiraizumi, Y. "Optimal System Pattern for Multicomponent Distillation Systems", *Int. Chem. Engng*, **11**, p.188, (1971).
- Porter, K. E., Momoh, S.O. e Jenkins, J. D., "Some Simplified Approaches to the Design of the Optimum Heat-Integrated Distillation Sequences", *I. Chem. E. Symposium Series no. 104*, (1987).
- Powers, G. J., "Recognising Patterns in the Synthesis of Chemical Processing Systems", Ph. D. Thesis, University of Wisconsin, Madison, (1971).
- Seader, J.D. et all, "Synthesis in the Design of Chemical Process", *AIChE J.*, **19** (1), p. 1, (1973).

Smith, R. e Linnhoff, B., "The Design of Separators in the Context of Overall Process", *Chem. Eng. Res. Des.*, **66** (3), p. 195, (1988).

Smith, R., "*Chemical Process Design*", McGraw-Hill Inc., (1995).

Thompson, R. W. eKing, J. C., "Systematic Synthesis of Separation Schemes", *AIChE J.*, **18** (5), p. 941, (1972).

Triantafyllou, C., "The Design Optimisation and Integration of Dividing Wall Distillation Columns, Ph. D. Thesis, University of Manchester Institute of Science and Technology, (1991).

Umeda, T., "Computer Aided Process Synthesis", *Computers Chem. Engng.*, **17** (4), p. (1983).

Westerberg, A. W., "A Review of Process Synthesis", *Computer Applications to Chemical Engineering*, (1980).

APÊNDICE A

A) Subrotina DESTILAÇÃO

```

SUBROUTINE DESTILA(CAO(Q,XDHK,XBLK,DFLK,BFHK,RRM,C,NPRT,RMIN,K,
+ICOL,N,PF,TD,TB,P,PD,PB,PP,DT,QC,QR,HCOL,AGUA,VAPOR,CCOL,CAUX, +TAC,ALFAI,NM,VD) IMPLICIT REAL*8
(A-H,O-Z) REAL*8 X3(10),KK(10),NM(10)
INTEGER LK, HK1,NCOMP,LK1,EE,ICOMP(10),E
INTEGER*2 HK(10)
DIMENSION FUNC(2),S(2),G(2),DG(2,2),ALFA(10),PD(10),PB(10),P(10),
+XDHK(10),XBLK(10),D1(10),F1(10),B1(10),IRNPRI(10),TAC(10),X1(10),
+X2(10),TD(10),TB(10),N(10),C(10),ALFA1(5,10),VD(10),RMIN(10),NPRT
+(10),HCOL(10),QC(10),QR(10),AGUA(10),VAPOR(10),RRM(10)
COMMON XF(5,10)
COMMON/BLOCK1/XD(5,10),XB(5,10),XP(5,10)
COMMON/BLOCK2/FD(5,10),SUMB(10),SUMD(10),SUMF(10),D(5,10),F(5,10)
+,B(5,10)
COMMON NOC,LK(10),HK1(10)
COMMON /COMP/NCOMP
COMMON PHLNCM(10)
OPEN(UNIT=16,FILE='DADOS2.DAT',STATUS='UNKNOWN')
OPEN(UNIT=17,FILE='DADOS3.DAT',STATUS='UNKNOWN')
OPEN(UNIT=18,FILE='DADOS4.DAT',STATUS='UNKNOWN')
OPEN(UNIT=19,FILE='DADOS5.DAT',STATUS='UNKNOWN')
OPEN(UNIT=20,FILE='DADOS6.DAT',STATUS='UNKNOWN')
OPEN(UNIT=21,FILE='DADOS7.DAT',STATUS='UNKNOWN')
ICOMP(1)=343
ICOMP(2)=400
ICOMP(3)=444
ICOMP(4)=445
ICOMP(5)=446
ICOMP(6)=520
ICOMP(7)=521
ICOMP(8)=522
S(1)=DFLK
S(2)=BFHK
E=0
NCOMP=NOC
CALL PARIN(ICOMP,'TERMORPP.DAT')
DO 2 I=1,NOC
X3(I)=XF(ICOL,I)
2 CONTINUE
HK(ICOL)=HK1(ICOL)
LK1=LK(ICOL)

```

```

P(ICOL)=PF
CALL RELVOL(HK,X3,P,ALFA,KK,T,ICOL)
DO 3 I=1,NOC
3 ALFA1(ICOL,I)=ALFA(I)

```

*****INTERACAO NEWTON-RAPHSON

```

KMAX = 10
DELTA = 1.E-5
CALL HG(S(1),S(2),C,ICOL,N,ALFA1)
FUNC(1) = XD(ICOL,HK1(ICOL))-XDHK(ICOL)
FUNC(2) = XB(ICOL,LK(ICOL))-XBLK(ICOL)
IF (ABS(FUNC(1)).LT.1..AND.ABS(FUNC(2)).LT.1.) THEN
DFLK=S(1)
BFHK=S(2)
DO 5 I=1,NOC
X1(I)=XD(ICOL,I)
5 X2(I)=XB(ICOL,I)
GO TO 200
ENDIF

```

C *****COMPONENTES DE MEIO*****

```

200 NCM1=HK1(ICOL)-LK(ICOL)-1
IF (NCM1.GE.1) THEN
DO 220 I=1,NOC
F1(I)=F(ICOL,I)
D1(I)=D(ICOL,I)
220 B1(I)=B(ICOL,I)
CALL COMPHI(F1,ALFA,D1,B1,SUMD,SUMB,ICOL,LK,HK,NOC,D,B,SUMB1
+,SUMD1)
DO 230 I=1,NOC
XD(ICOL,I)=D(ICOL,I)/SUMD1
230 XB(ICOL,I)=B(ICOL,I)/SUMB1
SUMB(ICOL)=SUMB1
SUMD(ICOL)=SUMD1
ENDIF

CALL TEMPR(EE,ICOL,P,T,Q,RRM,N,NM,QC,QR,C,TD,TB,DT,HCOL,NPRT,PD,
+PB,IMPRL,E,RRM1,RMIN,VD)

CALL CUSTOS(E,QC,QR,TD,TB,N,ICOL,DT,HCOL,NPRT,PD,TAC1,AGUA,VAPO
+R,CCOL,CAUX,CPRT)
TAC(ICOL)=TAC1
RETURN
END

```

```

SUBROUTINE DADOS(EE,E,Q,RRM,ICOL,N,PF,PB,PD,QC,QR,C,T,TD,TB,DT,HC
+OL,NPRT,IRNPR1,ALFA1,RRM1,RMIN,VD)
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
REAL*8 KK1,KK2,X(10),KK(10)
INTEGER HK1,EE,E
INTEGER*2 HK(10)
DIMENSION HLIQ(10),HVAP(10),XPD(10),XPB(10),DHV(10),VD(10),C(10),
+NPR1(10),TD(10),TB(10),Y(10),ALFA(10),N(10),IRNPR1(10),ALFA1(5,10
+),RMIN(10),NPRT(10),HCOL(10),PD(10),PB(10),PF(10),QC(10),QR(10),R
+RM(10)
COMMON XF(5,10)
COMMON/BLOCK1/XD(5,10),XB(5,10),XP(5,10)
COMMON/BLOCK2/FD(5,10),SUMB(10),SUMD(10),SUMF(10),D(5,10),F(5,10)
+,B(5,10)
COMMON NOC,LK(10),HK1(10)
COMMON PHL,NCM(10)
HLIQF=0
HLIQB=0
HLIQD=0
HVDP=0
HVD=0
HVPB=0
HVB=0
HK(ICOL)=HK1(ICOL)
DO 420 I=1,NOC
420 X(I)=XF(ICOL,I)
P3=PF(ICOL)
CALL BUBT(X,P3,Y,TBUB)
CALL RELVOL(HK,X,P3,ALFA,KK,TBUB,ICOL)
CALL IGEI(HVAP,TBUB)
CALL DHVAPI(DHV,TBUB)
CALL HLIQI(HLIQ,HVAP,DHV,TBUB)
DO 300 I=1,NOC
ALFA1(ICOL,I)=ALFA(I)
HLIQF=HLIQF+HLIQ(I)*X(I)*FD(ICOL,N(ICOL))
300 XPB(I)=XB(ICOL,I)
PB1=PB(ICOL)
CALL BUBT(XPB,PB1,Y,TBUB)
CALL RELVOL(HK,XPB,PB1,ALFA,KK,TBUB,ICOL)
HCB=APDELGF(XPB)
KK1=KK(HK(ICOL))
TB(ICOL)=TBUB
MOLB=AMOLW(XPB)
PCB=APCRIT(XPB)
TCB=ATCRIT(XPB)
ZCB=AZCRIT(XPB)

```

```

CALL DHVAPI(DHV, TBUB)
CALL IGEI(HVAP, TBUB)
CALL HLIQI(HLIQ, HVAP, DHV, TBUB)
DO 405 I=1, NOC
  HLIQB=HLIQB+HLIQ(I)*XPB(I)*SUMB(ICOL)
  HVPB=HVPB+HVAP(I)*XPB(I)*SUMB(ICOL)
405 HVB=HVB+DHV(I)*XPB(I)*SUMB(ICOL)
  DO 400 I=1, NOC
400 XPD(I)=XD(ICOL, I)
  PD2=PD(ICOL)
  CALL DEWT(XPD, PD2, X, TDEW)
  CALL DHVAPI(DHV, TDEW)
  CALL HLIQI(HLIQ, HVAP, DHV, TDEW)
  DO 410 I=1, NOC
  HLIQD=HLIQD+HLIQ(I)*XPD(I)*SUMD(ICOL)
  HVPD=HVPD+HVAP(I)*XPD(I)*SUMD(ICOL)
410 HVD=HVD+DHV(I)*XPD(I)*SUMD(ICOL)
  KK2=KK(HK(ICOL))
  TD(ICOL)=TDEW
  PCD=APCRIT(XPD)
  TCD=ATCRIT(XPD)
  ZCD=AZCRIT(XPD)
  MOLD=AMOLW(XPD)

C *****CALCULO DO DIAMETRO E ALTURA EM METROS*****

DENGD=(PD(ICOL)*MOLD)/(TD(ICOL)*0.08206)
DENGB=(PB(ICOL)*MOLB)/(TB(ICOL)*0.08206)
DENLD=1E3*((MOLD*PCD)/TCD)*((.0653/(ZCD**.773))-.09*TD(ICOL)/TCD
+)
DENLB=1E3*((MOLB*PCB)/TCB)*((.0653/(ZCB**.773))-.09*TB(ICOL)/TCB)
VFLOD = .26/SQRT(DENGD/(DENLD-DENGD))
VFLOB = .26/SQRT(DENGB/(DENLB-DENGB))
VAT=.6*VFLOB
IF (.6*VFLOD.LT..6*VFLOB) VAT=.6*VFLOD
CALL UWD(Q, RMIN, ICOL, ALFA1)
550 R=RRM(ICOL)*RMIN(ICOL)
  C(ICOL)=DLOG((D(ICOL, LK(ICOL))/B(ICOL, LK(ICOL)))*(B(ICOL, HK1
+(ICOL))/D(ICOL, HK1(ICOL))))/DLOG(ALFA1(ICOL, LK(ICOL)))
  CALL GLLD(ICOL, R, RMIN, NPR, C)
  NPR1(ICOL)=NPR
  ALFAM=(KK1*KK2)**0.5
  EFF=0.5/(0.3*ALFAM)*0.25
  NPRT(ICOL)=NPR1(ICOL)/EFF

C ****MODIFICACAO NPRATOS TOTAL PARA NPRATOS TEORICOS****
NPRT(ICOL)=NPR

```

C *****

```

HCOL(ICOL)=(NPRT(ICOL)-1)*0.46+4
IF (E.EQ.111) THEN
DIFF=NPRT(ICOL)-IRNPRT1(ICOL)
IF (ABS(DIFF).GT.2.5) THEN
IF (NPRT(ICOL).NE.IRNPRT1(ICOL)) THEN
IF (NPRT(ICOL).GT.IRNPRT1(ICOL)) RRM(ICOL)=RRM(ICOL)+0.01
IF (NPRT(ICOL).LT.IRNPRT1(ICOL)) RRM(ICOL)=RRM(ICOL)-0.01
GOTO 550
ENDIF
ENDIF
ENDIF
VD(ICOL)=(R+1)*SUMD(ICOL)
DTD=SQRT(4*VD(ICOL)*MOLD/(DENGD*3.1415*VAT*3600))
DTB=SQRT(4*VD(ICOL)*MOLB/(DENGB*3.1415*VAT*3600))
DT=DTB
IF (DTD.GT.DTB) DT=DTD
QC(ICOL)=HVPD*VD(ICOL)-HLIQD*VD(ICOL)
QR(ICOL)=(R+1)*SUMD(ICOL)*HVPD-R*SUMD(ICOL)*HLIQD+SUMB(ICOL)*HLIQ
+B-FD(ICOL,N(ICOL))*HLIQF
RETURN
END

```

```

SUBROUTINE HG(DFLK,BFHK,C,ICOL,N,ALFA1)
IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
INTEGER LK,HK1,ICOL
DIMENSION C(10),N(10),ALFA1(5,10)
COMMON XF(5,10)
COMMON /BLOCK1/XD(5,10),XB(5,10),XP(5,10)
COMMON/BLOCK2/FD(5,10),SUMB(10),SUMD(10),SUMF(10),D(5,10),F(5,10)
+,B(5,10)
COMMON NOC,LK(10),HK1(10)
COMMON /COMP/NCOMP
COMMON PHI,NCM(10)

```

*****ESTIMAR DISTRIBUICAO DOS COMPONENTES

```

DO 10 I=1,NOC
10 F(ICOL,I)=FD(ICOL,N(ICOL))*XF(ICOL,I)
D(ICOL,LK(ICOL))=DFLK*F(ICOL,LK(ICOL))
B(ICOL,LK(ICOL))=F(ICOL,LK(ICOL))-D(ICOL,LK(ICOL))
D(ICOL,HK1(ICOL))=(1.-BFHK)*F(ICOL,HK1(ICOL))
B(ICOL,HK1(ICOL))=F(ICOL,HK1(ICOL))-D(ICOL,HK1(ICOL))
C1=DLOG(D(ICOL,HK1(ICOL))/B(ICOL,HK1(ICOL)))
C(ICOL)=DLOG((D(ICOL,LK(ICOL))/B(ICOL,LK(ICOL))))*(B(ICOL,HK1
+(ICOL))/D(ICOL,HK1(ICOL))))/DLOG(ALFA1(ICOL,LK(ICOL)))

```

```

DO 20 I=1,NOC
IF(1.EQ.LK(ICOL))GO TO 20
IF(1.EQ.HK1(ICOL))GO TO 20
B(ICOL,I)=F(ICOL,I)/(1.+EXP(C1+C(ICOL)*DLOG(ALFA1(ICOL,I))))
D(ICOL,I)=F(ICOL,I)-B(ICOL,I)
20 CONTINUE

```

*****CALCULAR AS FRACOES MOLARES

```

SUMD(ICOL) = 0.00
SUMB(ICOL) = 0.00
DO 30 I=1,NOC
SUMD(ICOL)=SUMD(ICOL)+D(ICOL,I)
30 SUMB(ICOL)=SUMB(ICOL)+B(ICOL,I)
DO 40 I=1,NOC
XD(ICOL,I)=D(ICOL,I)/SUMD(ICOL)
40 XB(ICOL,I)=B(ICOL,I)/SUMB(ICOL)
RETURN
END

```

SUBROUTINE UWD(Q,RMIN,ICOL,ALFA1)

IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)

```

** ESTA SUBROTINA CALCULA RMIN PELA EQUACAO DE UNDERWOOD
** O VALOR DE PHI ESTA ENTRE OS ALFAS DOS CHAVES OBTIDO
** PELO METODO DA BISSECCAO
** PHILL = LIMITE INFERIOR DE PHI
** PHIUL = LIMITE SUPERIOR DE PHI
INTEGER LK, HK1
DIMENSION ALFA1(5,10),RMIN(10)
COMMON XF(5,10)
COMMON/BLOCK1/XD(5,10),XB(5,10),XP(5,10)
COMMON/BLOCK2/FD(5,10),SUMB(10),SUMD(10),SUMF(10),D(5,10),F(5,10)
+,B(5,10)
COMMON NOC, LK(10),HK1(10)
COMMON PHI,NCM(10)
PHILL=ALFA1(ICOL, HK1(ICOL))
PHIUL=ALFA1(ICOL, (HK1(ICOL)-1))
DO 10 I=1,20
PHI=0.5*(PHILL+PHIUL)
FPHI=Q-1.
DO 20 J=1,NOC
20 FPHI=FPHI+ALFA1(ICOL,J)*XF(ICOL,J)/(ALFA1(ICOL,J)-PHI)
IF(FPHI) 30,50,40
30 PHILL=PHI
GOTO 10

```

```

40 PHIUL=PHI
10 CONTINUE
50 RMIN(ICOL)=-1.
   DO 60 I=1,NOC
60 RMIN(ICOL)=RMIN(ICOL)+(ALFA1(ICOL,I)*XD(ICOL,I))/(ALFA
   +1(ICOL,I)-PHI)
   RETURN
   END

SUBROUTINE GLLD(ICOL,R,RMIN,NPR,C)
IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
DIMENSION C(10),RMIN(10)
X=(R-RMIN(ICOL))/(R+1)
Y=1.-EXP((1+54.4*X)*(X-1.)/((11.+117.2*X)*SQRT(X)))
NPR=(Y+C(ICOL))/(1.-Y)
RETURN
END

SUBROUTINE TEMPR(E,E,J,PF,T,Q,RRM,N,NM,
+QC,QR,C,TD,TB,DT,HCOL,NPRT,PD,PB,IRNPR1,E,RRM1,RMIN,VD)
IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
REAL*8 NM
INTEGER HK1,HK,L,K,EE,E
DIMENSION X1(10),X2(10),X3(10),NM(10)
+,TB(10),TD(10),Y1(10),N(10),C
+(10),IRNPR1(10),ALFA1(5,10),RMIN(10),VD(10),NPRT(10),HCOL(
+10),PB(10),PD(10),PF(10),QC(10),QR(10),RRM(10)
COMMON XF(5,10)
COMMON/BLOCK1/XD(5,10),XB(5,10),XP(5,10)
COMMON/BLOCK2/FD(5,10),SUMB(10),SUMD(10),SUMF(10),D(5,10),F(5,10)
+,B(5,10)
COMMON NOC,LK(10),HK1(10)
COMMON PHI,NCM(10)
DO 100 I=1,NOC
  X1(I)=XD(J,I)
  X2(I)=XB(J,I)
100 X3(I)=XF(J,I)
  HK=HK1(J)
  IF(E.EQ.111) THEN
    CALL BUBP(X1,T,Y1,PD1)
    PD(J)=PD1
    IF(PD1.LE.1.) PD(J)=1.
    PF(J)=PD(J)+(0.007*NM(J))
  ENDIF
  CALL BUBT(X3,PF,Y1,TA)
  CALL ALIMENT(E,RRM,J,C,TA,PF,PD,pb,Q,NM,NPRT)
  CALL DADOS(E,E,Q,RRM,J,N,PF,PB,PD,QC,QR,C,T,TD,TB,DT,HCOL,NPRT,

```

```

+IRNPRI,ALFA1,RRM1,RMIN,VD)
RETURN
END
SUBROUTINE TERMO(NOC,ICOL,X3,TA,P,HK,Q,ALFA1)
IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
INTEGER*2 HK(10)
REAL*8 KK(10)
DIMENSION X3(10),Y(10),ALFA1(5,10),ALFA(10),DHV(10),HLIQ(1
+0),HVAP(10),P(10)
HLIQA=0
HLIQB=0
DHVA=0

```

C ***** ENTALPIA DO LIQUIQ. A TEMP. BOLHA *****

```

P1=P(ICOL)
CALL BUBT(X3,P1,Y,TBA)
CALL RELVOL(HK,X3,P1,ALFA,KK,TBA,ICOL)
CALL DHVAPI(DHV,TBA)
CALL IGEI(HVAP,TBA)
CALL HLIQI(HLIQ,HVAP,DHV,TBA)
DO 3 I=1,NOC
HLIQA=HLIQA+HLIQ(I)*X3(I)
3 DHVA=DHVA+DHV(I)*X3(I)
HV=HLIQA+DHVA

```

C ***** ENTALPIA DO LIQUIDO A TEMP. ALIMENT. *****

```

CALL IGEI(HVAP,TA)
CALL DHVAPI(DHV,TA)
CALL HLIQI(HLIQ,HVAP,DHV,TA) DO 5 I=1,NOC
HLIQB=HLIQB+HLIQ(I)*X3(I)
ALFA1(ICOL,I)=ALFA(I)
5 CONTINUE
Q=(HV-HLIQB)/(HV-HLIQA)
Q=1.
RETURN
END
SUBROUTINE ALIMENT(E,RRM,ICOL,C,TA,PF,PD,PB,Q,NM,NPRT)
IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
DIMENSION NM(10),X3(10),ALFA1(5,10),RMIN(10),PB(10),PD(10),PF(10)
+,C(10),NPRT(10),ALFA(10),RRM(10)
INTEGER*2 HK(10)
INTEGER HK1,E
REAL*8 MP,RMP,NM,KK(10)
COMMON XF(5,10)
COMMON/BLOCK1/XD(5,10),XB(5,10),XP(5,10)

```

```

COMMON/BLOCK2/FD(5,10),SUMB(10),SUMD(10),SUMF(10),D(5,10),F(5,10)
+,B(5,10)
COMMON NOC,LK(10),HK1(10)
COMMON PH,NCM(10)
P1=PF(ICOL)
DO 5 I=1,NOC
5 X3(I)=XF(ICOL,I)
HK(ICOL)=HK1(ICOL)
RMP=0.206*0.43429*DLOG((SUMB(ICOL)/SUMD(ICOL))*(XF(ICOL,HK1(ICOL)
+))/XF(ICOL,LK(ICOL)))*(XB(ICOL,LK(ICOL))/XD(ICOL,HK1(ICOL))))**2)
CALL RELVOL(HK,X3,P1,ALFA,KK,TBA,ICOL)
DO 10 I=1,NOC
10 ALFA1(ICOL,I)=ALFA(I)
CALL UWD(Q,RMIN,ICOL,ALFA1)
R=RRM(ICOL)*RMIN(ICOL)
CALL GLLD(ICOL,R,RMIN,NPR,C)
MP=((10.0)**RMP)
NM(ICOL)=(NPR*MP)/(1+MP)
PD(ICOL)=PF(ICOL)-(0.007*NM(ICOL))
IF (PD(ICOL).LT.1.) PD(ICOL)=1.
PB(ICOL)=PD(ICOL)+(0.007*NPR)
RETURN
END
SUBROUTINE CONDENS(QC,TD,TB,N,J,DT,HCOL,NPRT,PI,CCOND,CCAG,E,D
+ELTA1)
IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
INTEGER E
DIMENSION N(10),TB(10),TD(10),CCOND(5,10),HCOL(10),PD(10),NPRT(10
+),QR(10),QC(10),PI(10),CCAG(10),VAPOR(10),DELTA1(10),TC(10)
TC(J)=TD(J)-DELTA1(J)
QR(J)=0
PD(J)=PI(J)
CALL CUSTOS(E,QC,QR,TC,TB,N,J,DT,HCOL,NPRT,PD,TAC,CCAG,VAPOR
+,CCOL,CAUX,CPRT)
CCOND(J,J1)=CAUX
RETURN
END

```

B) Subrotina COMPLEXA

```

SUBROUTINE COMPLEXA(Q,XDHK,XBLK,DFLK,BFHK,C,NPRT,RMIN,K,IC
+OL,N,PF,TD,TP,TB,P,PD,PB,PP,DT,QC,QR,HCOL,AGUA,VAPOR,CCOL,CAUX,
+TAC1,ALFA1,NM,NCOL,XCF,XCP,XCD,XCB) IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z) REAL*8 NM(10) INTEGER LK,
HK1,NCOMP,EE,E
DIMENSION PD(10),
+PB(10),P(10),XDHK(10),XBLK(10),TAC(10),TD(10),TP(10),TB(10),N(10)

```

```

+,C(10),VAPOR(10),AGUA(10),ALFA1(5,10),y1(10),HCOL(10),NPRT(10),
+VD(10),RMIN(10),XP2(5,10),XP3(5,10),THETA(10),QC(10),QR(10),XCF(1
+0),XCD(10),XCP(10),XCB(10),IRNPR1(10),RRM(10),TAC1(10)
COMMON XF(5,10)
COMMON/BLOCK1/XD(5,10),XB(5,10),XP(5,10)
COMMON/BLOCK2/FD(5,10),SUMB(10),SUMD(10),SUMF(10),D(5,10),F(5,10)
+,B(5,10)
COMMON NOC,LK(10),HK1(10)
COMMON /COMP/NCOMP
COMMON PHI,NCM(10)
E=0
IE=0
NCOL=2
DO 100 I=1,NOC
100 XF(ICOL,I)=XF(ICOL,I)
   FD(ICOL,I)=FD(ICOL,N(ICOL))
   LK(ICOL)=LK(ICOL)
   HK1(ICOL)=HK1(ICOL)
   IF (ICOL.EQ.2) IE=1
   DO 125 I=1,4
125 RRM(I)=1.2
150 DO 350 ICPX=ICOL,3+IE
   OPEN(UNIT=20,FILE='DADOS8.DAT',STATUS='OLD')
   READ(20,*) BFHK,DFLK
   READ(20,*) (XDHK(I), I=ICOL,3+IE)
   READ(20,*) (XBLK(I), I=ICOL,3+IE)
   CALL DESTILACAO(Q,XDHK,XBLK,DFLK,BFHK,RRM,C,NPRT,RMIN,K,ICPX,
+N,PF,TD,TB,P,PD,PB,PP,DT,QC,QR,HCOL,AGUA,VAPOR,CCOL,CAUX,TAC,AL
+FA1,NM,VD)
   THETA(ICPX)=PHI
   SOX2=0
   SOX3=0
   DO 360 I=1,NOC
   SOX2=(XD(ICOL,I)/ALFA1(ICOL,I))+SOX2
360 SOX3=(XB(ICOL,I)*ALFA1(ICOL,I))+SOX3
   DO 400 I=1,NOC
   XP2(ICOL+1,I)=(XD(ICOL,I)/ALFA1(ICOL,I))/SOX2
400 XP3(ICOL+2,I)=(XB(ICOL,I)*ALFA1(ICOL,I))/SOX3
   PS2=SUMD(ICOL)*RRM(ICOL)*RMIN(ICOL)
   F2=SUMD(ICOL)+PS2
   FF2=F2-PS2
   PS3=F2-(1-Q)*FD(ICOL,I)
   F3=SUMB(ICOL)+PS3
   FF3=F3-PS3
   IF ((ICPX+1.EQ.4+IE)) GOTO 350
   IF (ICPX.EQ.ICOL) THEN

```

```

DO 200 I=1,NOC
200 XF(ICOL+1,I)=(XD(ICOL,I)*SUMD(ICOL))/F2
WRITE(14+ICOL,*) (XF(ICOL+1,J), J=1,NOC)
FD(ICOL+1,2)=F2
PF=PD(ICOL)
IF (PF.LT.1.1) PF=1.1
N(ICOL+1)=2
LK(ICOL+1)=LK(ICOL)
HK1(ICOL+1)=LK(ICOL)+1
Q=0.
ENDIF
IF (ICPX.EQ.ICOL+1) THEN
DO 300 I=1,NOC
300 XF(ICOL+2,I)=(XB(ICOL,I)*SUMB(ICOL))/F3
WRITE(16+ICOL,*) (XF(ICOL+2,J), J=1,NOC)
FD(ICOL+2,1)=F3
PF=PB(ICOL)
IF (PF.LT.1.1) PF=1.1
N(ICOL+2)=1
Q=1.
LK(ICOL+2)=HK1(ICOL)-1
HK1(ICOL+2)=HK1(ICOL)
ENDIF
CLOSE(UNIT=21)
350 CONTINUE
355 NM2=NPRT(ICOL+2)-NM(ICOL+2)
NM1=NM(ICOL+1)+NM2
DIF=NM1-NPRT(ICOL)
IF (DIF.GT.1.) THEN
RRM(ICOL)=RRM(ICOL)-.001
R=RRM(ICOL)*RMIN(ICOL)
CALL GLLD(ICOL,R,RMIN,NPR,C)
NPRT(ICOL)=NPR
GOTO 355
ENDIF
IF (DIF.LT.1.) GOTO 150
SUMF(ICOL)=SUMB(ICOL+1)+SUMD(ICOL+2)
DO 380 I=1,NOC
XP(ICOL,I)=(XD(ICOL+2,I)*SUMD(ICOL+2)+XB(ICOL+1,I)*SUMB(ICOL+1))/
+SUMF(ICOL)
XCP(I)=XP(ICOL,I)
XCB(I)=XB(ICOL+2,I)
380 XCD(I)=XD(ICOL+1,I)
V2MIN=0
V3MIN=0
DO 420 I=1,NOC

```

```

V2MIN=((ALFA1(ICOL+1,I)*(SUMD(ICOL+1)*XD(ICOL+1,I)+PS2*XP2(ICOL+1
+,I)))/(ALFA1(ICOL+1,I)-THETA(ICOL+1))+V2MIN)
V3MIN=((ALFA1(ICOL+2,I)*(SUMB(ICOL+2)*XB(ICOL+2,I)+PS3*XP3(ICOL+
+2,I)))/(ALFA1(ICOL+2,I)-THETA(ICOL+2))+V3MIN)
420 CONTINUE
L2AC=VD(ICOL+1)-SUMD(ICOL+1)
V2AB=VD(ICOL+1)-F2
L2AB=L2AC-PS2
R2AC=L2AC/SUMD(ICOL+1)
R2AB=L2AB/(SUMD(ICOL+1)+PS2)
L3AC=VD(ICOL+2)-SUMD(ICOL+2)
V3AB=VD(ICOL+2)+PS3
L3AB=L3AC+F3
R3AC=L3AC/SUMD(ICOL+2)
R3AB=L3AB/(SUMD(ICOL+2)+PS3)
SUMD(ICOL)=SUMD(ICOL+1)
SUMB(ICOL)=SUMB(ICOL+2)
RRM(ICOL)=VD(ICOL+2)/SUMD(ICOL+2)
RRM(ICOL)=R3AC
ICPX=3
Q=1.
IF (VD(ICOL+1).GT. VD(ICOL+2)) THEN
RRM(ICOL)=VD(ICOL+1)/SUMD(ICOL+1)
RRM(ICOL)=R2AC
ICPX=2
Q=0.
ENDIF
CALL DADOS(EE,E,Q,RRM,ICPX,N,P,PB,PD,QC,QR,C,T,TD,TB,DT,HCOL,N
+PRT,IRNPR1,ALFA1,RRM1,RMIN,VD)
P(ICOL)=PD(ICOL+1)+0.007*NPRT(ICOL+1)
CALL BUBT(XCP,P,Y1,T)
NPRT(ICOL)=NPRT(ICOL+1)+NPRT(ICOL+2)
HCOL(ICOL)=HCOL(ICOL+1)+HCOL(ICOL+2)
TD(ICOL)=TD(ICOL+1)
TB(ICOL)=TB(ICOL+2)
TP(ICOL)=T
CALL CUSTOS(E,QC,QR,TD,TB,N,ICOL,DT,HCOL,NPRT,PD,TAC,AGUA,VAPO
+R,CCOL,CAUX,CPRT)
TAC1(ICOL)=TAC(ICOL)
RETURN
END

```

C) Subrotina CUSTOS

```
SUBROUTINE CUSTOS(E,QC,QR,TD,TB,N,ICOL,DT,HCOL,NPRT,PD,TAC,AGUA
```

```

+, VAPOR, CCOL, CAUX, CPRT)
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
INTEGER E
DIMENSION N(10), TD(10), TB(10), NPRT(10), HCOL(10), PD(10), QC(10), QR
+(10), AGUA(10), VAPOR(10)

C *****CUSTO COLUNA/CONDENSADOR/REFERVEDOR*****
NPRINT =0
DELTAT=TD(ICOL)-300.
IF (E.EQ.111) DELTAT=10.
ACOND = QC(ICOL)/(5.11067e06*DELTAT)
IF (TB(ICOL).LT.420.0) THEN
  DELTA=420.-TB(ICOL)
  COSTV = 2.807
  GOTO 600
ENDIF
IF (TB(ICOL).LT.470.)THEN
  DELTA=470.-TB(ICOL)
  COSTV = 3.98
  GOTO 600
ENDIF
CALL CONDICOES(TVAPOR,COSTV)
IF (TB(ICOL).LT.TVAPOR) THEN
  DELTA=TVAPOR-TB(ICOL)
  GOTO 600
ENDIF
600 AREB = QR(ICOL)/(5.11067e06*(DELTA))
TEMP=TD(ICOL)
P1=PD(ICOL)
NP=NPRT(ICOL)
HC=HCOL(ICOL)
CALL COLCOST1(DT,HC,NP,P1,TEMP,AREB,ACOND,COLCAP,HEXCAP,CONCAP,RE
+BCAP,CSTPR,NPRINT)
CAUX = HEXCAP*1.6
CCOL = (COLCAP+CSTPR)*1.6

C *****CUSTO DAS UTILIDADES*****

AGUA(ICOL) = (QC(ICOL)*0.108*8500)/(500000*1055)
VAPOR(ICOL) =(QR(ICOL)*COSTV*8500)/(915.5*1000*1055)
IF (E.EQ.111) AGUA(ICOL)=0
CUTIL = AGUA(ICOL)+VAPOR(ICOL)
TAC = CUTIL*(1-0.52)+(CAUX+CCOL)/2.5
E=111.
RETURN
END

```

D) Subrotina COLCOST1 (Triantafyllou, C., 1991)

SUBROUTINE COLCOST1(DIAM,HEIGHT,NTRAYS,PRES,TEMP,AREB,ACOND,
* COLCAP,HEXCAP,CONCAP,REBCAP,TRAMPLNPRINT)

```

C=====
C
C  COLUMN COST ESTIMATION
C
C  Calculation of the cost of a distillation column
C  including the reboiler and the condenser
C
C  COST BASIS 1990
C
C  Column MPI from ..... ICemE cost booklet
C  Cost of trays from ..... QUESTIMATE
C  Column installation cost from ..... ICI data
C  HE MPI from ..... IChemE cost booklet
C  HE installation cost from ..... ICI data
C  Material of construction ..... Carbon steel
C  Type of trays ..... Sieve trays
C  Tray spacing ..... 18 ins
C  Top + bottom spacing ..... 4 m
C
C  ORIGINAL AUTHOR: DINOS ..., CPI, 1990
C
C-----
C  IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
C  Real DUMD, DUMH
C  Real WEIGHT, DUMW
C  Real MPICOL
C  Character*1 REPLY
C  REBCAP=0
C  CONCAP=0

C
C  PI = 3.14159
C-----
C  Calculate column weight
C-----

C
C  CALCULATE SHELL THICKNESS

```

C Maximum allowable stress in bar

If (TEMP.LT.323.0) Then

S = 1350.0

Else If (TEMP.GT.323.0.AND.TEMP.LT.373) Then

S = 1250.0

Else If (TEMP.GT.373.0.AND.TEMP.LT.423) Then

S = 1150.0

Else If (TEMP.GT.423.0.AND.TEMP.LT.473) Then

S = 1050.0

Else If (TEMP.GT.473.0.AND.TEMP.LT.523) Then

S = 950.0

Else If (TEMP.GT.523.0.AND.TEMP.LT.573) Then

S = 850.0

Else If (TEMP.GT.573.0.AND.TEMP.LT.623) Then

S = 800.0

Else

S = 700.0

End If

C Joint efficiency = 0.85 for carbon steel

EJ = 0.85

C Safety factor (see Douglas notes)

C SF = 4.0

C You can use the safety factor if for S you use the tensile strength

c Air density = 1.20 Kg/m³

RHOA = 1.20

c Wind velocity = 63 m/s (140 mls/hr)

VELW = 63.0

c Allowance for cage ladders = 0.457 m (18 ins)

ZLAD = 0.457

c Corrosion allowance = 4 mm

c See Volume 6 pp.640

TCORR = 4.E-3

C Density of carbon steel (kG/M³)

DENCS = 7860.0

c Minimum design pressure = 4 barg

c For safety we design for 10 % higher pressure

PDF = 1.1

PDEF = 4.0

C Shell thickness at the top

If ((PDF*PRES).GT.PDEF) Then

```

PD = PDF * PRES
Else
  PD = PDEF
End If
C SHELL THICKNESS FOR INTERNAL PRESSURE
C = SHELL THICKNESS AT THE TOP OF THE COLUMN
c TP = PD*DIAM/(2.0*(S*EJ/SF-0.6*PD))
TP = PD * DIAM / (2.0*(S*EJ-0.6*PD))
c For TP > 31.8 mm use EJ = 1.0
If (TP.GT.0.0318) Then
  EJ = 1.0
  TP = PD * DIAM / (2.0*(S*EJ-0.6*PD))
End If
c Shell thickness at the bottom
C
C SHELL THICKNESS FOR WIND LOAD
C
OD = DIAM + 2.0 * TP
C TW = RHOA*VELW**2.0*(OD+ZLAD)*HEIGHT**2.0/(1.E5*S/SF*PI*OD**2.0)
TW = RHOA * VELW ** 2.0 * (OD+ZLAD) * HEIGHT ** 2.0 / (1.E5*S*PI*
* OD**2.0)
C SHELL THICKNESS FOR INTERNAL PRESSURE WHEN GIRTH SEAM
C GOVERNS BECAUSE OF WIND LOADING
TG = PD*DIAM/(2.0*(2.0*S*EJ/SF+0.4*PD))
TG = PD * DIAM / (2.0*(2.0*S*EJ+0.4*PD))
C SHELL THICKNESS AT BASE OF COLUMN
TB = TW + TG
C SHELL THICKNESS FOR WEIGHT CALCULATIONS
C Take the average between the top and the bottom
If (TB.GT.TP) Then
  TSH = (TP+TB) * 0.5 + TCORR
Else
  TSH = TP + TCORR
End If
C STANDARD PLATE THICKNESS INCREMENTS FOR SHELL
C SHELL THICKNESS UP TO 1 INCH INCREMENT = 1/32 INCH
C          2          1/16
C          3          1/8
C          OVER 3      1/4
C1BY32 = 0.03125
C1BY16 = 0.06250
C1BY8 = 0.12500
C1BY4 = 0.25000
C TSI = TSH/0.0254
C IF (TSI.LE.1.0) THEN
C DUM = MOD(TSI,C1BY32)

```

```

C IF(DUM.EQ.0.) THEN
C   CONTINUE
C ELSE
C   TSI = (AINT(TSI/C1BY32)+1.)*C1BY32
C   ENDIF
C ELSE IF (TSI.LE.2.0) THEN
C   DUM = MOD(TSI,C1BY16)
C   IF(DUM.EQ.0.) THEN
C     CONTINUE
C   ELSE
C     TSI = (AINT(TSI/C1BY16)+1.)*C1BY16
C   ENDIF
C ELSE IF (TSI.LE.3.0) THEN
C   DUM = MOD(TSI,C1BY8)
C   IF(DUM.EQ.0.) THEN
C     CONTINUE
C   ELSE
C     TSI = (AINT(TSI/C1BY8)+1.)*C1BY8
C   ENDIF
C ELSE
C   DUM = MOD(TSI,C1BY4)
C   IF(DUM.EQ.0.) THEN
C     CONTINUE
C   ELSE
C     TSI = (AINT(TSI/C1BY4)+1.)*C1BY4
C   ENDIF
C ENDIF
C TSHELL = TSI * 0.0254
  TSHELL = TSH
C CALCULATE WEIGHT OF COLUMN SHELL
  WEIGHT = PI * DIAM * (HEIGHT+0.8116*DIAM) * TSHELL * DENCS
C-----
C CALCULATE BASE COST OF COLUMN SHELL
C-----
C Cost of the column shell using the graph of the IChemE
c "A Guide to capital cost estimating",3rd edition
C This is valid for 1987
  DUMW = WEIGHT / 1000.
  Call COLMPI(DUMW,MPICOL)
c Update from 1987 to 1990
c Cost indices from ICI
  MPICOL = MPICOL * 131.3 / 108.9
C The cost of trays depends on the diameter
c These data are from QUESTIMATE (cost basis 1st half 1990) and
c are valid for carbon steel sieve trays
C Cost per tray

```

Call TRACOST(DIAM,CBT)

TRAMPI = CBT * NTRAYS

C CALCULATE INSTALLED CAPITAL COST

c By using installation factors from IChemE (COLFACT) or ICI

c (COLFACT1)

TOTALMPI = MPICOL + TRAMPI

c CALL COLFACT(DUMCBP,DUMCOST)

Call COLFACT1(TOTALMPI,COLINST)

C Calculate cost of the HE

c Condenser cost

If (ACOND.NE.0.0) Then

C Calculate the cost of HE through the graph of the

c IChemE "A Guide to Capital Cost Estimating", 3rd ed

c Cost basis : 1987

Call HEMPI(ACOND,CONMPI)

c Update from 1987 to 1990

c Cost indices from ICI

CONMPI = CONMPI * 131.3 / 108.9

c Installation cost of the condenser

c Installation sub-factors from the IChemE cost booklet (HEFACT)

c Or installation factors from ICI (HEFACT1)

c CALL HEFACT(CONMPI,CONINST,1)

Call HEFACT1(CONMPI,CONINST,1)

C Total cost for the condenser

CONCAP = CONMPI + CONINST

Endif

Reboiler purchase cost

If (AREB.NE.0.0) Then

Call HEMPI(AREB,REBMPI)

c Update from 1987 to 1990

c Cost indices from ICI

REBMPI = REBMPI * 131.3 / 108.9

c Installation cost of the reboiler

C CALL HEFACT(REBMPI,REBINST,2)

Call HEFACT1(REBMPI,REBINST,2)

C Total cost for the reboiler

REBCAP = REBMPI + REBINST

Endif

HEXCAP = CONCAP + REBCAP

C Printing the results

TSHELL = TSHELL * 1000.

COLCAP = TOTALMPI + COLINST

If (NPRINT.EQ.1) Then

```

Write(*,5000)DIAM
Write(*,5100)HEIGHT
Write(*,5200)TSHELL
Write(*,5300)WEIGHT
Write(*,5400)NTRAYS
Write(*,5500)MPICOL
Write(*,5600)TRAMPI
Write(*,5700)TOTALMPI
Write(*,5800)COLINST
Write(*,5900)COLCAP
Write(*,6000)AREB
Write(*,6100)REBMPI
Write(*,6200)REBINST
Write(*,6300)ACOND
Write(*,6400)CONMPI
Write(*,6500)CONINST
Write(*,6600)HEXCAP
End If
Return
5000 Format (/1X,'Column diameter (m) (1 - 6)      :', * F13.2)
5100 Format (1X,'Column height (m)                :', * F13.2)
5200 Format (1X,'Shell thickness (mm)             :', * F13.2)
5300 Format (1X,'Weight of column shell (Kg) (3,120 - 100,000) :', * F13.2)
5400 Format (1X,'Number of trays                   :', * I10)
5500 Format (/1X,'Cost of column shell (€)         :', * F13.2)
5600 Format (1X,'Cost of trays (€)                 :', * F13.2)
5700 Format (1X,'Total column MPI cost (€) (36,000 - 1,205,200) :', * F13.2)
5800 Format (1X,'Column installation cost (€)     :', * F13.2)
5900 Format (1X,'Total overall cost for the column (€) :', * F13.2)
6000 Format (/1X,'Reboiler area (m2) (10 - 1,000) :', * F13.2)
6100 Format (1X,'Reboiler MPI cost (€) (6,300 - 158,200) :', * F13.2)
6200 Format (1X,'Reboiler installation cost (€)  :', * F13.2)
6300 Format (/1X,'Condenser area (m2) (10 - 1,000) :', * F13.2)
6400 Format (1X,'Condenser MPI cost (€) (6,300 - 158,200) :', * F13.2)
6500 Format (1X,'Condenser installation cost (€)  :', * F13.2)
6600 Format (/1X,'Total overall cost for the HE (€) :', * F13.2)
End

```

```

C-----
C-----

```

```

Subroutine COLMPI(WEIGHT,COST)
C Cost of the column shell using the graph of the IChemE
c "A Guide to capital cost estimating",3rd edition
Real WEIGHT, COST, X1, X2, Y1, Y2
C Calculate cost per tone from the graph
If (WEIGHT.LT.3.12) Then
X1 = WEIGHT

```

```
X2 = 3.12
Y1 = 5.
Y2 = Y1
Else If (WEIGHT.GE.3.12.AND.WEIGHT.LT.4.0) Then
X1 = 3.12
X2 = 4.0
Y1 = 5.0
Y2 = 4.33
Else If (WEIGHT.GE.4.0.AND.WEIGHT.LT.5.0) Then
X1 = 4.0
X2 = 5.0
Y1 = 4.33
Y2 = 3.79
Else If (WEIGHT.GE.5.0.AND.WEIGHT.LT.6.0) Then
X1 = 5.0
X2 = 6.0
Y1 = 3.79
Y2 = 3.36
Else If (WEIGHT.GE.6.0.AND.WEIGHT.LT.7.0) Then
X1 = 6.0
X2 = 7.0
Y1 = 3.36
Y2 = 3.12
Else If (WEIGHT.GE.7.0.AND.WEIGHT.LT.8.0) Then
X1 = 7.0
X2 = 8.0
Y1 = 3.12
Y2 = 2.90
Else If (WEIGHT.GE.8.0.AND.WEIGHT.LT.9.0) Then
X1 = 8.0
X2 = 9.0
Y1 = 2.90
Y2 = 2.70
Else If (WEIGHT.GE.9.0.AND.WEIGHT.LT.10.0) Then
X1 = 9.0
X2 = 10.0
Y1 = 2.70
Y2 = 2.54
Else If (WEIGHT.GE.10.0.AND.WEIGHT.LT.20.0) Then
X1 = 10.0
X2 = 20.0
Y1 = 2.54
Y2 = 1.90
Else If (WEIGHT.GE.20.0.AND.WEIGHT.LT.30.0) Then
X1 = 20.0
X2 = 30.0
```

```

Y1 = 1.90
Y2 = 1.66
Else If (WEIGHT.GE.30.0.AND.WEIGHT.LT.40.0) Then
  X1 = 30.0
  X2 = 40.0
  Y1 = 1.66
  Y2 = 1.51
Else If (WEIGHT.GE.40.0.AND.WEIGHT.LT.50.0) Then
  X1 = 40.0
  X2 = 50.0
  Y1 = 1.51
  Y2 = 1.44
Else If (WEIGHT.GE.50.0.AND.WEIGHT.LT.60.0) Then
  X1 = 50.0
  X2 = 60.0
  Y1 = 1.44
  Y2 = 1.39
Else If (WEIGHT.GE.60.0.AND.WEIGHT.LT.70.0) Then
  X1 = 60.0
  X2 = 70.0
  Y1 = 1.39
  Y2 = 1.35
Else If (WEIGHT.GE.70.0.AND.WEIGHT.LT.80.0) Then
  X1 = 70.0
  X2 = 80.0
  Y1 = 1.35
  Y2 = 1.33
Else If (WEIGHT.GE.80.0.AND.WEIGHT.LT.90.0) Then
  X1 = 80.0
  X2 = 90.0
  Y1 = 1.33
  Y2 = 1.32
Else If (WEIGHT.GE.90.0.AND.WEIGHT.LE.100.0) Then
  X1 = 90.0
  X2 = 100.0
  Y1 = 1.32
  Y2 = 1.30
Else If (WEIGHT.GT.100) Then
  X1 = 100
  X2 = WEIGHT
  Y1 = 1.30
  Y2 = Y1
End If
C Calculation of the cost per tonne by linear interp.
CPERT = ((WEIGHT-X1)/(X2-X1)) * (Y2-Y1) + Y1
C WRITE(*,*)WEIGHT = ',WEIGHT','COST PER TONNE = ',CPERT

```

```

      CPERT = CPERT * 1000
C   Cost of column shell
      COST = WEIGHT * CPERT
      Return
      End
C-----
      Subroutine COLFACT(MPICST,INSTCST)
C   Calculate installation cost of the column
c   by using the sub-factors of the IchemE cost booklet
      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
      Real MPICST, INSTCST
      Real FER, FP, FI, FEL, FC, FSB, FL
      If (MPICST.LT.1800) Then
          FER = 1.13
          FP = 2.43
          FI = 1.38
          FEL = 0.19
          FC = 0.85
          FSB = 0.08
          FL = 0.38
      Else If (MPICST.GE.1800.AND.MPICST.LT.2700) Then
          FER = 1.13 + (0.77-1.13) * (MPICST-1800) / (2700-1800)
          FP = 2.43 + (1.96-2.43) * (MPICST-1800) / (2700-1800)
          FI = 1.38 + (0.96-1.38) * (MPICST-1800) / (2700-1800)
          FEL = 0.19 + (0.13-0.19) * (MPICST-1800) / (2700-1800)
          FC = 0.85 + (0.60-0.85) * (MPICST-1800) / (2700-1800)
          FSB = 0.08 + (0.06-0.08) * (MPICST-1800) / (2700-1800)
          FL = 0.38 + (0.31-0.38) * (MPICST-1800) / (2700-1800)
      Else If (MPICST.GE.2700.AND.MPICST.LT.7800) Then
          FER = 0.77 + (0.67-0.77) * (MPICST-2700) / (7800-2700)
          FP = 1.96 + (1.38-1.96) * (MPICST-2700) / (7800-2700)
          FI = 0.96 + (0.77-0.96) * (MPICST-2700) / (7800-2700)
          FEL = 0.13 + (0.10-0.13) * (MPICST-2700) / (7800-2700)
          FC = 0.60 + (0.50-0.60) * (MPICST-2700) / (7800-2700)
          FSB = 0.06 + (0.05-0.06) * (MPICST-2700) / (7800-2700)
          FL = 0.31 + (0.21-0.31) * (MPICST-2700) / (7800-2700)
      Else If (MPICST.GE.7800.AND.MPICST.LT.18000) Then
          FER = 0.67 + (0.56-0.67) * (MPICST-7800) / (18000-7800)
          FP = 1.38 + (0.96-1.38) * (MPICST-7800) / (18000-7800)
          FI = 0.77 + (0.60-0.77) * (MPICST-7800) / (18000-7800)
          FEL = 0.10 + (0.06-0.10) * (MPICST-7800) / (18000-7800)
          FC = 0.50 + (0.40-0.50) * (MPICST-7800) / (18000-7800)
          FSB = 0.05 + (0.04-0.05) * (MPICST-7800) / (18000-7800)
          FL = 0.21 + (0.14-0.21) * (MPICST-7800) / (18000-7800)
      Else If (MPICST.GE.18000.AND.MPICST.LT.42000) Then
          FER = 0.56 + (0.45-0.56) * (MPICST-18000) / (42000-18000)

```

```

FP = 0.96 + (0.61-0.96) * (MPICST-18000) / (42000-18000)
FI = 0.60 + (0.43-0.60) * (MPICST-18000) / (42000-18000)
FEL = 0.06 + (0.03-0.06) * (MPICST-18000) / (42000-18000)
FC = 0.40 + (0.31-0.40) * (MPICST-18000) / (42000-18000)
FSB = 0.04 + (0.025-0.04) * (MPICST-18000) / (42000-18000)
FL = 0.14 + (0.08-0.14) * (MPICST-18000) / (42000-18000)
Else If (MPICST.GE.42000.AND.MPICST.LT.120000) Then
  FER = 0.45 + (0.38-0.45) * (MPICST-42000) / (120000-42000)
  FP = 0.61 + (0.41-0.61) * (MPICST-42000) / (120000-42000)
  FI = 0.43 + (0.33-0.43) * (MPICST-42000) / (120000-42000)
  FEL = 0.03 + (0.03-0.03) * (MPICST-42000) / (120000-42000)
  FC = 0.31 + (0.21-0.31) * (MPICST-42000) / (120000-42000)
  FSB = 0.025 + (0.025-0.025) * (MPICST-42000) / (120000-42000)
  FL = 0.08 + (0.04-0.08) * (MPICST-42000) / (120000-42000)
Else If (MPICST.GE.120000.AND.MPICST.LT.180000) Then
  FER = 0.38 + (0.30-0.38) * (MPICST-120000) / (180000-120000)
  FP = 0.41 + (0.25-0.41) * (MPICST-120000) / (180000-120000)
  FI = 0.33 + (0.18-0.33) * (MPICST-120000) / (180000-120000)
  FEL = 0.03 + (0.03-0.03) * (MPICST-120000) / (180000-120000)
  FC = 0.21 + (0.15-0.21) * (MPICST-120000) / (180000-120000)
  FSB = 0.025 + (0.012-0.025) * (MPICST-120000) / (180000-120000)
  FL = 0.04 + (0.03-0.04) * (MPICST-120000) / (180000-120000)
Else If (MPICST.GT.180000) Then
  FER = 0.30
  FP = 0.25
  FI = 0.18
  FEL = 0.03
  FC = 0.15
  FSB = 0.012
  FL = 0.03

```

End If

C Installation cost for the column

```
INSTCST = MPICST * (FER+FP+FI+FEL+FC+FSB+FL)
```

Return

End

C-----

Subroutine TRACOST(D,COST)

C Evaluation of the cost of carbon steel sieve trays according
c to the diameter

c Data from QUESTIMATE (cost basis 1st half 1990)

```
IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
```

C Real D, COST

C Cost (¢) per tray by linear interpolation

If (D.LE.1.0) Then

```
COST = 569
```

Go To 10

Else If (D.GT.1.0.AND.D.LE.2.0) Then

X1 = 1.0

X3 = 2.0

Y1 = 569

Y3 = 1085

Else If (D.GT.2.0.AND.D.LE.3.0) Then

X1 = 2.0

X3 = 3.0

Y1 = 1085

Y3 = 1990

Else If (D.GT.3.0.AND.D.LE.4.0) Then

X1 = 3.0

X3 = 4.0

Y1 = 1990

Y3 = 3116

Else If (D.GT.4.0.AND.D.LE.5.0) Then

X1 = 4.0

X3 = 5.0

Y1 = 3116

Y3 = 4391

Else If (D.GT.5.0.AND.D.LE.6.0) Then

X1 = 5.0

X3 = 6.0

Y1 = 4391

Y3 = 5791

Else If (D.GT.6.0) Then

COST = 5791

Go To 10

End If

COST = Y1 + (Y3-Y1) * (D-X1) / (X3-X1)

10 Return

End

C-----

Subroutine COLFACT1(MPICST,INSTCST)

C Calculate installation cost of the column

c by using ICI data

IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)

Real*8 MPICST, INSTCST

Real FTOTAL

If (MPICST.LT.36000) Then

FTOTAL = 4.442

Go To 10

Else If (MPICST.GE.36000.AND.MPICST.LT.63100) Then

X1 = 36000

X3 = 63100

Y1 = 4.442

Y3 = 3.144
Else If (MPICST.GE.63100.AND.MPICST.LT.89700) Then
X1 = 63100
X3 = 89700
Y1 = 3.144
Y3 = 2.534
Else If (MPICST.GE.89700.AND.MPICST.LT.129700) Then
X1 = 89700
X3 = 129700
Y1 = 2.534
Y3 = 2.055
Else If (MPICST.GE.129700.AND.MPICST.LT.150200) Then
X1 = 129700
X3 = 150200
Y1 = 2.055
Y3 = 1.894
Else If (MPICST.GE.150200.AND.MPICST.LT.170800) Then
X1 = 150200
X3 = 170800
Y1 = 1.894
Y3 = 1.768
Else If (MPICST.GE.170800.AND.MPICST.LT.202600) Then
X1 = 170800
X3 = 202600
Y1 = 1.768
Y3 = 1.613
Else If (MPICST.GE.202600.AND.MPICST.LT.251700) Then
X1 = 202600
X3 = 251700
Y1 = 1.613
Y3 = 1.439
Else If (MPICST.GE.251700.AND.MPICST.LT.316900) Then
X1 = 251700
X3 = 316900
Y1 = 1.439
Y3 = 1.377
Else If (MPICST.GE.316900.AND.MPICST.LT.340100) Then
X1 = 316900
X3 = 340100
Y1 = 1.377
Y3 = 1.323
Else If (MPICST.GE.340100.AND.MPICST.LT.374400) Then
X1 = 340100
X3 = 374400
Y1 = 1.323
Y3 = 1.258

```

Else If (MPICST.GE.374400.AND.MPICST.LT.562300) Then
  X1 = 374400
  X3 = 562300
  Y1 = 1.258
  Y3 = 0.966
Else If (MPICST.GE.562300.AND.MPICST.LT.1094100) Then
  X1 = 562300
  X3 = 1094100
  Y1 = 0.966
  Y3 = 0.712
Else If (MPICST.GE.1094100.AND.MPICST.LE.1205200) Then
  X1 = 1094100
  X3 = 1205200
  Y1 = 0.712
  Y3 = 0.705
Else If (MPICST.GT.1205200) Then
  FTOTAL = 0.705
  Go To 10
End If
FTOTAL = Y1 + (Y3-Y1) * (MPICST-X1) / (X3-X1)

```

10 Continue

```

C   Installation cost for the column
INSTCST = MPICST * FTOTAL
Return
End

```

C-----

Subroutine HEMPI(AREA,COST)

```

C   Calculation of the purchase cost of heat exchanger
c   using the graph of the IChemE booklet
C   The data points from the graph were fitted to an equation
c    $f(x) = a(n+1) \cdot (x^{**n})$  where  $n=0,5$ , using the NAG routine: E02ACF
IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
Real A(6)
c   Coefficients of the equation
A(1) = 0.5391E+04
A(2) = 0.1134E+03
A(3) = -0.3200E+00
A(4) = 0.9013E-03
A(5) = -0.1027E-05
A(6) = 0.4095E-09
c   The graph is valid for Area between 10 and 1000 m2
c   Condenser purchase cost
If (AREA.LT.10.) Then
  COST = 6600.0
Else If (AREA.GT.1000) Then
  COST = 82000

```

```

Else
  COST = 0.0
  Do 10 I = 0, 5
    COST = COST + A(I+1) * (AREA**I)
10 Continue
End If
Return
End
C-----
Subroutine HEFACT(MPICST,INSTCST,ICASE)
C  Evaluation of the installation cost of a heat exchanger
c  using the purchase cost and the installation subfactors
c  of the IChemE cost booklet
C  ICASE = 1 : CONDENSER
C  ICASE = 2 : REBOILER
IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
Real MPICST, INSTCST
Real FER, FP, FI, FEL, FC, FSB, FL
Integer ICASE
If (MPICST.LT.1800) Then
  FER = 0.38
  FP = 1.76
  FI = 1.00
  FEL = 0.19
  FC = 0.35
  FSB = 0.08
  FL = 0.38
Else If (MPICST.GE.1800.AND.MPICST.LT.2700) Then
  FER = 0.38 + (0.15-0.38) * (MPICST-1800) / (2700-1800)
  FP = 1.76 + (1.40-1.76) * (MPICST-1800) / (2700-1800)
  FI = 1.00 + (0.65-1.00) * (MPICST-1800) / (2700-1800)
  FEL = 0.19 + (0.13-0.19) * (MPICST-1800) / (2700-1800)
  FC = 0.35 + (0.28-0.35) * (MPICST-1800) / (2700-1800)
  FSB = 0.08 + (0.06-0.08) * (MPICST-1800) / (2700-1800)
  FL = 0.38 + (0.31-0.38) * (MPICST-1800) / (2700-1800)
Else If (MPICST.GE.2700.AND.MPICST.LT.7800) Then
  FER = 0.15 + (0.13-0.15) * (MPICST-2700) / (7800-2700)
  FP = 1.40 + (0.98-1.40) * (MPICST-2700) / (7800-2700)
  FI = 0.65 + (0.49-0.65) * (MPICST-2700) / (7800-2700)
  FEL = 0.13 + (0.10-0.13) * (MPICST-2700) / (7800-2700)
  FC = 0.28 + (0.22-0.28) * (MPICST-2700) / (7800-2700)
  FSB = 0.06 + (0.05-0.06) * (MPICST-2700) / (7800-2700)
  FL = 0.31 + (0.21-0.31) * (MPICST-2700) / (7800-2700)
Else If (MPICST.GE.7800.AND.MPICST.LT.18000) Then
  FER = 0.13 + (0.11-0.13) * (MPICST-7800) / (18000-7800)
  FP = 0.98 + (0.66-0.98) * (MPICST-7800) / (18000-7800)

```

```

    FI = 0.49 + (0.34-0.49) * (MPICST-7800) / (18000-7800)
    FEL = 0.10 + (0.06-0.10) * (MPICST-7800) / (18000-7800)
    FC = 0.22 + (0.17-0.22) * (MPICST-7800) / (18000-7800)
    FSB = 0.05 + (0.04-0.05) * (MPICST-7800) / (18000-7800)
    FL = 0.21 + (0.14-0.21) * (MPICST-7800) / (18000-7800)
Else If (MPICST.GE.18000.AND.MPICST.LT.42000) Then
    FER = 0.11 + (0.10-0.11) * (MPICST-18000) / (42000-18000)
    FP = 0.66 + (0.40-0.66) * (MPICST-18000) / (42000-18000)
    FI = 0.34 + (0.22-0.34) * (MPICST-18000) / (42000-18000)
    FEL = 0.06 + (0.03-0.06) * (MPICST-18000) / (42000-18000)
    FC = 0.17 + (0.14-0.17) * (MPICST-18000) / (42000-18000)
    FSB = 0.04 + (0.025-0.04) * (MPICST-18000) / (42000-18000)
    FL = 0.14 + (0.08-0.14) * (MPICST-18000) / (42000-18000)
Else If (MPICST.GE.42000.AND.MPICST.LT.120000) Then
    FER = 0.10 + (0.08-0.10) * (MPICST-42000) / (120000-42000)
    FP = 0.40 + (0.26-0.40) * (MPICST-42000) / (120000-42000)
    FI = 0.22 + (0.13-0.22) * (MPICST-42000) / (120000-42000)
    FEL = 0.03 + (0.03-0.03) * (MPICST-42000) / (120000-42000)
    FC = 0.14 + (0.10-0.14) * (MPICST-42000) / (120000-42000)
    FSB = 0.025 + (0.025-0.025) * (MPICST-42000) / (120000-42000)
    FL = 0.08 + (0.04-0.08) * (MPICST-42000) / (120000-42000)
Else If (MPICST.GE.120000.AND.MPICST.LT.180000) Then
    FER = 0.08 + (0.05-0.08) * (MPICST-120000) / (180000-120000)
    FP = 0.26 + (0.16-0.26) * (MPICST-120000) / (180000-120000)
    FI = 0.13 + (0.09-0.13) * (MPICST-120000) / (180000-120000)
    FEL = 0.03 + (0.03-0.03) * (MPICST-120000) / (180000-120000)
    FC = 0.10 + (0.08-0.10) * (MPICST-120000) / (180000-120000)
    FSB = 0.025 + (0.012-0.025) * (MPICST-120000) / (180000-120000)
    FL = 0.04 + (0.03-0.04) * (MPICST-120000) / (180000-120000)
Else If (MPICST.GT.180000) Then
    FER = 0.05
    FP = 0.16
    FI = 0.09
    FEL = 0.03
    FC = 0.08
    FSB = 0.012
    FL = 0.03
End If
C    Installation cost
INSTCST = MPICST * (FER+FP+FI+FEL+FC+FSB+FL)
Return
End

```

```

Subroutine HEFACT1 (MPICST,INSTCST,ICASE)
C    Evaluation of the installation cost of a heat exchanger
c    using the purchase cost and the installation factors of ICI

```

```

c   Cost basis 1990
C   ICASE = 1 : CONDENSER
C   ICASE = 2 : REBOILER
IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
Real*8 MPICST,INSTCST
Real X1, X2, Y1, Y2, FTOTAL
Integer ICASE
If (MPICST.LT.6300) Then
    FTOTAL = 6.875
    Go To 10
Else If (MPICST.GE.6300.AND.MPICST.LT.9900) Then
    X1 = 6300
    X3 = 9900
    Y1 = 6.875
    Y3 = 5.280
Else If (MPICST.GE.9900.AND.MPICST.LT.11300) Then
    X1 = 9900
    X3 = 11300
    Y1 = 5.280
    Y3 = 4.889
Else If (MPICST.GE.11300.AND.MPICST.LT.13000) Then
    X1 = 11300
    X3 = 13000
    Y1 = 4.889
    Y3 = 4.509
Else If (MPICST.GE.13000.AND.MPICST.LT.15100) Then
    X1 = 13000
    X3 = 15100
    Y1 = 4.509
    Y3 = 4.139
Else If (MPICST.GE.15100.AND.MPICST.LT.17000) Then
    X1 = 15100
    X3 = 17000
    Y1 = 4.139
    Y3 = 3.870
Else If (MPICST.GE.17000.AND.MPICST.LT.24600) Then
    X1 = 17000
    X3 = 24600
    Y1 = 3.870
    Y3 = 3.148
Else If (MPICST.GE.24600.AND.MPICST.LT.27700) Then
    X1 = 24600
    X3 = 27700
    Y1 = 3.148
    Y3 = 2.948
Else If (MPICST.GE.27700.AND.MPICST.LT.60300) Then

```

```
X1 = 27700
X3 = 60300
Y1 = 2.948
Y3 = 1.941
Else If (MPICST.GE.60300.AND.MPICST.LT.158200) Then
  X1 = 60300
  X3 = 158200
  Y1 = 1.941
  Y3 = 1.184
Else If (MPICST.GE.158200) Then
  FTOTAL = 1.184
  Go To 10
End If
FTOTAL = Y1 + (Y3-Y1) * (MPICST-X1) / (X3-X1)
10 Continue
C  Installation cost
INSTCST = MPICST * FTOTAL
Return
End
```

APÊNDICE B

A) Subrotina INTSIMPLS

```

SUBROUTINE INTSIMPLS(TC2,TD,TB,P,Q,RRM,N,NM,QCSI,QRSI,IRNPR1,IRH
+COL,IRDCOL1,PD,NCOL,C,DCLHCL,NCL,PCI,QCL,QRI,TDI,TBL,CUTIL,CEQU +IP,TC1,TN1,SINT)
  IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
  INTEGER LK,HK1,N,EE,REF,REF1,FLAGE
  REAL*8 IRHCO1,IRDCOL1,NM(10)
  DIMENSION PD(10),PB(10),IRNPR1(10
+,TD1(10),TB1(10),P(10),QI(5,10),QDELTA(10),TAC(10)
+,QCI(5,10),QRI(5,10),C(10),QCSI(5),QRSI
+(5),TC1(5,10),TB(10),TD(10),SINT(20),N(10)
+,DCI(5,10),HCI(5,10),NCI(5,10),IRHCO1(10),IRDCOL1(1
+0),PCI(5,10),CUTIL(5,10),CEQUIP(5,10),CEQUIP1(5,10),RMI
+N(10),NPRT(10),HCOL(10),VD(10),PI(10),QC1(10),QR1(10),TDI(5,10),T
+BI(5,10),RQ(5,10),SQDELTA(5,10),QC(10),QR(10),TC2(10),Q
+CRESIDUO1(5,10),REF1(10),TN1(10),QCRESIDUO(10),REF(10),QCRESIDUO2
+(10),QCRESIDUO3(10),QCI1(5,10),QRI1(5,10),delta1(70),RMII(5,10),Q
+CM(10),CCAG(10),AGUA(10),VAPOR(10),R(5,10),RRM(10)
  COMMON XF(5,10)
  COMMON /BLOCK1/XD(5,10),XB(5,10),XP(5,10)
  COMMON/BLOCK2/FD(5,10),SUMB(10),SUMD(10),SUMF(10),D(5,10),F(5,10)
+,B(5,10)
  COMMON NOC,LK(10),HK1(10)
  COMMON /COMP/NCOMP
  COMMON PHI,NCM(10)
  OPEN(UNIT=26,FILE='SAIDA5.DAT',STATUS='UNKNOWN')
  OPEN(UNIT=30,FILE='SAIDA8.DAT',STATUS='UNKNOWN')
  DO 10 I=1,NCOL
  DO 15 J=1,10
  RMII(I,J)=0
  DCI(I,J)=0
  HCI(I,J)=0
  NCI(I,J)=0
  PCI(I,J)=0
  QCI(I,J)=0
  QCI1(I,J)=0
  QRI1(I,J)=0
  QRI(I,J)=0
  TDI(I,J)=0
  TBI(I,J)=0
  CEQUIP1(I,J)=0
  CEQUIP(I,J)=0

```

```

    CUTIL(I,J)=0
    TC1(I,J)=0
    QI(I,J)=0
    QCI(L,J)=0
    QRI(L,J)=0
    QCI1(L,J)=0
    QRI1(L,J)=0
15 RQ(L,J)=0
    TAC1=0
    IRF=0
    II=0
    REF1(I)=0
    REF(I)=0
    QCM(I)=0
    TN1(I)=0
    QDELTA(I)=0
    QC(I)=QCSI(I)
    QR(I)=QRSI(I)
    BAND1=0
    BAND=0
10 TAC(I)=0
    E=0
    CCOL1=0
    CAUX1=0
    CUTIL1=0
    CALL CONDICOES(TVAPOR,COSTV)
    DO 850 IGRAF=10,10
    DELTA1(1)=IGRAF
    DELTA1(2)=IGRAF
    DELTA1(3)=IGRAF

C *****COLUNA VERSUS COLUNA*****
    II=0
    JJ=0
    EE=101
    E=111
    SOMATAC=0
    DO 600 ICOL=1,NCOL
    SOMATAC=TAC(ICOL)+SOMATAC
    NF=0
580 NF=NF+1
    IF (NF.EQ.ICOL) NF=NF+1
    IF (NF.GT.NCOL) GOTO 600
    TI=TB(NF)+delta1(icol)
    IF (TILE.TD(ICOL)) THEN
    TI=TD(ICOL)

```

```

ENDIF
CALL TEMPR(EE,ICOL,P,TL,Q,RRM,N,NM,QC1,QR1,C,TD1,TB1,DT,HCOL,NPRT
+,PI,PB,IRNPRI,E,RRM1,RMIN,VD)
RMII(ICOL,NF)=RMIN(ICOL)
DCI(ICOL,NF)=DT
HCI(ICOL,NF)=HCOL(ICOL)
NCI(ICOL,NF)=NPRT(ICOL)
PCI(ICOL,NF)=PI(ICOL)
QCI(ICOL,NF)=QC1(ICOL)
QCI1(ICOL,NF)=QC1(ICOL)
QRI1(ICOL,NF)=QR1(ICOL)
QRI(ICOL,NF)=QR1(ICOL)
TDI(ICOL,NF)=TD1(ICOL)
TBI(ICOL,NF)=TB1(ICOL)
SQDELTA(ICOL,NF)=((QRI(ICOL,NF)+QCI(ICOL,NF))/2)*(TBI(ICOL,NF)-TD
+I(ICOL,NF))
IF (NF.LT.NCOL) GOTO 580
600 CONTINUE
C*****
DO 700 ICOL=1,NCOL
NF=0
620 NF=NF+1
IF (ICOL.EQ.NF) NF=NF+1
IF (NF.GT.NCOL) GOTO 700
IF (QC1(ICOL).LT.QR(NF)) RQ(ICOL,NF)=(QC(NF)/(QR(NF)-QC1(ICOL)))
+*(TB(NF)-TD(NF))
IF (QC1(ICOL).GT.QR(NF)) RQ(ICOL,NF)=(QC(NF)/(QR(NF)))
+*(TB(NF)-TD(NF))
IF (NF.LT.NCOL) GOTO 620
700 CONTINUE
DO 730 I=1,NCOL
DO 720 J=1,NCOL
IF (I.EQ.J) GOTO 720
IF (RQ(I,J).LT.RQ(J,I)) THEN R(I,J)=RQ(I,J)
WRITE(*,710) I,J,R(I,J),TDI(I,J),TBI(I,J),QCI(I,J),QRI(I,J),SQD
+ ELTA(I,J)
710 FORMAT(/2X,I3.1,1X,I3.1,2X,F5.2,2X,F7.2,2X,F7.2,2X,E8.2,2X,E8.2
+ ,2X,E8.2)
ENDIF
720 CONTINUE
730 CONTINUE
C *****COLUMNAS**INTEGRADAS*****
BAND1=0
CONT=0
COLUNA=1
QCI(1,1)=0.0

```

```

DO 1000 I=COLUNA,NCOL
DO 2000 J=COLUNA,NCOL
DO 1020 II=1,NCOL
DO 1010 IK=1,10
QCRESIDUO1(II,IK)=0
QCRESIDUO2(IK)=0
QCRESIDUO3(IK)=0
1010 QCRESIDUO(IK)=0
QC(IJ)=QCSI(IJ)
QR(IJ)=QRSI(IJ)
1020 CONTINUE
FLAG=1
LC1=0
IF (I.EQ.J) GOTO 2000
LC=0
KC=0
CALL COLUMN(L,J,LC,KC,NCOL,QC,QR,QCSI,QRSI,TDI,TBL,DCL,HCL,NC
+I,PCI,NPRT,Q,IRNPR1,N,C,RRM,QCI,QRI,QCM,P,NM,DELTA1,FLAG,TD1,TB1,
+E,QCRESIDUO,QCRESIDUO1,TC1,CCAG,CTVI,CTHI,CTCI)
tcsav=tc1(i,j)
DO 3000 KCOL=COLUNA,NCOL
DO 4000 LCOL=COLUNA,NCOL
IF(TB1(I).GT.TVAPOR) GOTO 3005
IF(NCOL.EQ.2) GOTO 420
IF (FLAG.EQ.1.AND.KCOL.GE.1) GOTO 433
IF (KCOL.EQ.J.OR.KCOL.EQ.I.OR.KCOL.EQ.LCOL) GOTO 4000
IF (QCRESIDUO(J).LT.0.AND.J.EQ.LCOL) GOTO 4000
CALL COLUMN(KCOL,LCOL,I,J,NCOL,QC,QR,QCSI,QRSI,TDI,TBL,DCL,HCL,NC
+I,PCI,NPRT,Q,IRNPR1,N,C,RRM,QCI,QRI,QCM,P,NM,DELTA1,FLAG,TD1,TB1,
+E,QCRESIDUO,QCRESIDUO1,TC1,CCAG,CTVI,CTHI,CTCI)
IF(TB1(KCOL).GT.TVAPOR) GOTO 3005

420 CALL COLUMN1(L,J,KCOL,LCOL,TDI,TBL,PCI,HCL,NCI,DCI,QCM,QRSI,QCRSI
+,QCRESIDUO,TC1,QCI,CCAG,QR,NCOL)

C *****COLUNA J*****
433 E=1.
II=II+1
if(QCRESIDUO1(L,J).LT.QCRESIDUO1(KCOL,LCOL))QCRESIDUO(J
+)=QCRESIDUO1(L,J)
QCVALOR=QCRESIDUO(J)
DT=IRDCOL1(J)
HCOL(J)=IRHCO1(J)
NPRT(J)=IRNPR1(J)
IF (TB(J).GT.TVAPOR) GOTO 4000
QCM(J)=0

```

```

IF (QCRESIDUO(J).GT.0) QR(J)=QCRESIDUO(J)
1500 IF (FLAG.EQ.0.AND.NCOL.EQ.4.AND.QCRESIDUO(J).GT.0) THEN
IF (QCI(KCOL,LCOL).GT.QCI(I,J)) THEN
E=111
DELTA1(KCOL)=DELTA1(KCOL)+1
TI=TB(LCOL)+DELTA1(KCOL)
P(KCOL)=1.1
KJJ=KCOL
NF=LCOL
ENDIF
IF (QCI(I,J).GT.QCI(KCOL,LCOL)) THEN
E=111
DELTA1(I)=DELTA1(I)+1
TI=TB(J)+DELTA1(I)
P(I)=1.1
KJJ=I
NF=J
LC=0
KC=0
ENDIF
CALL TEMPR(EE,KJJ,P,TL,Q,RRM,N,NM,QC1,QR1,C,TD1,TB1,DT,HCOL,NPRT
+,PI,PB,IRNPR1,E,RRM1,RMIN,VD)
RMI(KJJ,NF)=RMIN(KJJ)
HCI(KJJ,NF)=HCOL(KJJ)
PCI(KJJ,NF)=PI(KJJ)
QCI(KJJ,NF)=QC1(KJJ)
QCI1(KJJ,NF)=QC1(KJJ)
QRI1(KJJ,NF)=QR1(KJJ)
QRI(KJJ,NF)=QR1(KJJ)
NCI(KJJ,NF)=NPRT(KJJ)
TDI(KJJ,NF)=TD1(KJJ)
TBI(KJJ,NF)=TB1(KJJ)
DO 450 LI=1,NCOL
QC(LI)=QCSI(LI)
450 QR(LI)=QRSI(LI)
IF (KJJ.EQ.KCOL) THEN
CALL COLUMN(KCOL,LCOL,I,J,NCOL,QC,QR,QCSI,QRSI,TDI,TBL,DCL,HCL,NC
+,L,PCI,NPRT,Q,IRNPR1,N,C,RRM,QCI,QRI,QCM,P,NM,DELTA1,FLAG,TD1,TB1,
+E,QCRESIDUO,QCRESIDUO1,TC1,CCAG,CTVI,CTHI,CTCI)
CALL COLUMN1(I,J,KCOL,LCOL,TDI,TBL,PCI,HCL,NCI,DCL,QCM,QRSI,QCRSI
+,QCRESIDUO,TC1,QCI,CCAG,QR,NCOL)
QR(J)=QCRESIDUO(J)
IF((QCRESIDUO(J)-QCVALOR).LT.1.E8) GOTO 1700
IF(QCRESIDUO(J).GT.0) GOTO 1500
ENDIF
IF (KJJ.EQ.I) THEN

```

```

CALL COLUMN(L,J,LC,KC,NCOL,QC,QR,QCSI,QRSI,TDI,TBL,DCI,HCI,NC
+L,PCI,NPRT,Q,IRN,NPRI,N,C,RRM,QCI,QRI,QCM,P,NM,DELTA1,FLAG,TD1,TB1,
+E,QCRESIDUO,QCRESIDUO1,TC1,CCAG,CTVI,VTHL,CTCI)
CALL COLUMN(KCOL,LCOL,I,J,NCOL,QC,QR,QCSI,QRSI,TDI,TBL,DCI,HCI,NC
+L,PCI,NPRT,Q,IRN,NPRI,N,C,RRM,QCI,QRI,QCM,P,NM,DELTA1,FLAG,TD1,TB1,
+E,QCRESIDUO,QCRESIDUO1,TC1,CCAG,CTVI,CTHI,CTCI)
CALL COLUMN1(L,J,KCOL,LCOL,TDI,TBL,PCI,HCI,NCI,DCI,QCM,QRSI,QCRSI
+,QCRESIDUO,TC1,QCI,CCAG,QR,NCOL)
QR(J)=QCRESIDUO(J)
IF((QCRESIDUO(J)-QCVALOR).LT.1.E8) GOTO 1700
IF(QCRESIDUO(J).GT.0) GOTO 1500
ENDIF
ENDIF
1700 IF (QCRESIDUO(J).LT.0) QR(J)=0
CALL CUSTOS(E,QC,QR,TD,TB,N,J,DT,HCOL,NPRT,PD,TAC1,AGUA,
+VAPOR,CCOL,CAUX,CPRT)
TN1(J)=(AGUA(J)+VAPOR(J))*(1-0.52)+(CCOL+CAUX)/2.5
CCOL1=CCOL+CCOL1
CAUX1=CAUX+CAUX1
CUTIL1=AGUA(J)+VAPOR(J)+CUTIL1
 $\alpha v$ =VAPOR(J)*(1-0.52)+CTVI
 $\alpha c$ =(CCOL+CAUX)/2.5+ $\alpha ci$ 

EQUIP=0
EQUIP1=0
UTIL=0
EQUIP=CEQUIP(L,J)+CEQUIP(KCOL,LCOL)+CCOL1
EQUIP1=CEQUIP1(L,J)+CEQUIP1(KCOL,LCOL)+CAUX1
UTIL=CUTIL(L,J)+CUTIL(KCOL,LCOL)+CUTIL1
923 FORMAT(/2X,I7.2,2X,I7.2)
925 FORMAT(/2X,'DIAM=',F7.2,3X,'ALT.=',F7.2,3X,'NO PRATOS=',I7.2)
927 FORMAT(/2X,'PRES=',F7.2,3X,'QC=',E15.4,3X,'QC1=',E15.4,3X,'QR=',E
+15.4)
928 FORMAT(/2X,'TD=',F7.2,4X,'TB=',F7.2)
929 FORMAT(/2X,'TD=',F7.2,4X,'TB=',F7.2,4X,'DELTAT=',F7.2)
930 FORMAT(/2X,'*****')
932 FORMAT(/2X,'CUSTO TOTAL=',F15.2)
933 FORMAT(/2X,'CUSTO COLUNA=',F15.2,4X,'RMIN=',F15.3)
935 FORMAT(/2X,'CUSTO VAPOR=',F15.2,4X,'CUSTO CAPITAL=',F15.2)
IF (NCOLEQ.2.AND.LC1.NE.0) GOTO 3005

WRITE(26,923) I,J
WRITE(26,925) DCI(L,J),HCI(L,J),NCI(L,J)
WRITE(26,927) PI(I),QC(I),QCM(I),QR(I)
WRITE(26,929) TD1(I),TB1(I),DELTA1(I)
WRITE(26,933) TC1(L,J),RMII(L,J)

```

```

IF (NCOLEQ.2.AND. LC.EQ.0) GOTO 460
IF (FLAG.EQ.1) GOTO 456
WRITE(26,923) KCOL,LCOL
WRITE(26,925) DCI(KCOL,LCOL),HCI(KCOL,LCOL),NCI(KCOL,LCOL)
WRITE(26,927) PI(KCOL),QC(KCOL),QCM(KCOL),QR(KCOL)
WRITE(26,929) TD1(KCOL),TB1(KCOL),DELTA1(KCOL)
WRITE(26,933) TC1(KCOL,LCOL),RMII(KCOL,LCOL)
460 WRITE(26,923) J
WRITE(26,927) PD(J),QC(J),QCM(J),QR(J)
WRITE(26,928) TD(J),TB(J)
write(26,935) cv,CTC
WRITE(26,933) TN1(J)
TACTOTAL=TC1(L,J)+TC1(KCOL,LCOL)
TACTOTAL=TACTOTAL+TN1(J)
WRITE(26,932) TACTOTAL
IF (J.EQ.2) THEN
940 FORMAT(1X,F7.2,4X,F7.2,4X,F15.2,4X,F15.2,4X,F15.2)
WRITE(30,940) DELTA1(J),RQ(L,J),TC1(L,J),TN1(J),TACTOTAL
SINT(J)=TACTOTAL
ENDIF
WRITE(26,930)
IF (J.EQ.1) SINT(J)=TACTOTAL
IF (LC.EQ.0) GOTO 3005
456 IF (FLAG.EQ.1) THEN
WRITE(26,923) J
WRITE(26,927) PD(J),QC(J),QCM(J),QR(J)
WRITE(26,928) TD(J),TB(J)
write(26,935) cv,CTC
WRITE(26,933) TN1(J)
K1COL=2*NCOL-(I+J)
WRITE(26,923) K1COL
WRITE(26,927) PD(K1COL),QCSI(K1COL),QCM(K1COL),QRSI(K1COL)
WRITE(26,928) TD(K1COL),TB(K1COL)
WRITE(26,933) TC2(K1COL)
TACTOTAL=TC1(L,J)+TN1(J)+TC2(K1COL)
WRITE(26,932) TACTOTAL
WRITE(26,930)
BAND=1.
GOTO 4010
ENDIF
III=0
II=0
CAUX1=0
CTV=0
CUTIL1=0
CCOL1=0

```

```

3005 DO 3020 ID=1,NCOL
DO 3010 IK=1,10
QCM(IK)=0.0
tc1(i,j)=tcsav
QR(I)=QRI(L,J)
QR(KCOL)=QRI(KCOL,LCOL)
QRI(ID,IK)=QRI1(ID,IK)
3010 QCI(ID,IK)=QCI1(ID,IK)
LC1=1
3020 CONTINUE
BAND=0
4010 FLAG=0
4000 CONTINUE
3000 CONTINUE
2000 CONTINUE
1000 CONTINUE
850 CONTINUE
RETURN
END
SUBROUTINE COLUMN(ICOL,JCOL,II,III,NCOL,CXX,RXX,QCSI,QRSI,TDI,T
+BI,DCI,HCI,NCI,PCI,NPRT,Q,IRNPR1,N,C,RRM,QCI,QRI,QCM,P,NM,DELTA1,
+FLAG,TD1,TB1,E,QCRESIDUO,QCRESIDUO1,TC1,CCAG,CTVI,CTHI,CTCI)
IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
INTEGER LK,HK1,N,EE,REF,REF1,FLAGE
REAL*8 NM(10)
DIMENSION PB(10),IRNPR1(10),TD1(10),TB1(10),P(10),QCI(5,10),QRI(5
+,10),C(10),QCSI(5),QRSI(5),TC1(5,10),N(10),DCI(5,10),HCI(5,10),NC
+i(5,10),PCI(5,10),CUTIL(5,10),CEQUIP(5,10),CCOND(5,10),RMIN(10),N
+PRT(10),HCOL(10),VD(10),PI(10),TDI(5,10),TBI(5,10),CXX(10
+),RXX(10),QCRESIDUO1(5,10),REF1(10),QCRESIDUO(10),REF(10),QCRESID
+UO2(10),delta1(70),QCM(10),AGUA(10),VAPOR(10),CCAG(10),RRM(10)
COMMON XF(5,10)
COMMON /BLOCK1/XD(5,10),XB(5,10),XP(5,10)
COMMON/BLOCK2/FD(5,10),SUMB(10),SUMD(10),SUMF(10),D(5,10),F(5,10)
+,B(5,10)
COMMON NOC,LK(10),HK1(10)
COMMON /COMP/NCOMP
COMMON PHI,NCM(10)
CALL CONDICOES(TVAPOR,COSTV)
TD1(ICOL)=TDI(ICOL,JCOL)
TB1(ICOL)=TBI(ICOL,JCOL)
DT=DCI(ICOL,JCOL)
HCOL(ICOL)=HCI(ICOL,JCOL)
NPRT(ICOL)=NCI(ICOL,JCOL)
PI(ICOL)=PCI(ICOL,JCOL)
IF (JCOL.EQ.II) THEN

```

```

E=111
TI=TBI(II,III)+DELTA1(II)
CALL TEMPR(EE,ICOL,P,TI,Q,RRM,N,NM,CXX,RXX,C,TD1,TB1,DT,HCOL,N
+ PR
+ T,PI,PB,IRNPR1,E,RRM1,RMIN,VD)
QCI(ICOL,JCOL)=CXX(ICOL)
QRI(ICOL,JCOL)=RXX(ICOL)
ENDIF
IF (TBI(ICOL).GT.TVAPOR) THEN
GOTO 1050
ENDIF
QCRESIDUO(JCOL)=RXX(JCOL)
IF (II.NE.0) RXX(JCOL)=QCRESIDUO1(II,III)
IF (JCOL.NE.III.AND.III.NE.0) QCRESIDUO(JCOL)=QRSI(II)
IF (QCI(ICOL,JCOL).GT.(QCRESIDUO(JCOL))) THEN
E=1.
QCM(ICOL)=QCI(ICOL,JCOL)-(QCRESIDUO(JCOL))
CALL CONDENS(QCM,TD1,TB1,N,ICOL,JCOL,DT,HCOL,NPRT,PI,CCOND,CCA
+ G,E,DELTA1)
CXX(ICOL)=QCRESIDUO(JCOL)
RXX(ICOL)=QRI(ICOL,JCOL)
ENDIF
IF (QCI(ICOL,JCOL).LT.(QCRESIDUO(JCOL))) THEN
QCM(ICOL)=0
CXX(ICOL)=QCI(ICOL,JCOL)
RXX(ICOL)=QRI(ICOL,JCOL)
CCAG(ICOL)=0
CCOND(ICOL,JCOL)=0
ENDIF
CALL CUSTOS(E,CXX,RXX,TD1,TB1,N,ICOL,DT,HCOL,NPRT,PI,TAC1,AGUA,V
+APOR,CCOL,CAUX,CPRT)
CUTIL(ICOL,JCOL)=AGUA(ICOL)+VAPOR(ICOL)+CCAG(ICOL)
CEQUIP(ICOL,JCOL)=CCOL+CAUX+CCOND(ICOL,JCOL)
TC1(ICOL,JCOL)=CUTIL(ICOL,JCOL)*(1-0.52)+CEQUIP(ICOL,JCOL)/2.5
CTVI=VAPOR(ICOL)*.48
CTHI=(AGUA(ICOL)+CCAG(ICOL))* .48
CTCI=CEQUIP(ICOL,JCOL)/2.5
CUSTO1=TC1(ICOL,JCOL)
QCRESIDUO1(ICOL,JCOL)=RXX(JCOL)-QCI(ICOL,JCOL)
QCRESIDUO(JCOL)=QCRESIDUO1(ICOL,JCOL)
QCRESIDUO2(JCOL)=QCRESIDUO(JCOL)
REF1(1)=JCOL
REF(1)=ICOL
050 RETURN
END
SUBROUTINE COLUMN1(ICOL,JCOL,KCOL,LCOL,TDI,TB1,PCI,HCI,NCI,DCI,QC

```

```

+M,QRSI,QCRSI,QCRESIDUO,TC1,QCI,CCAG,QR,NCOL)
IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
INTEGER N(10),E
DIMENSION TD1(10),TBI(10),QCI(5,10),QRSI(5),TC1(5,10),PCI(5,10),C
+UTIL(5,10),CEQUIP(5,10),NPRT(10),HCOL(10),PI(10),TDI(5,10),TBI(5,
+10),QCI(10),QR(10),QCRESIDUO(10),NCI(5,10),HCI(5,10),QCM(10),DCI(5
+,10),AGUA(10),VAPOR(10),CCAG(10)
E=1.
TD1(LCOL)=TDI(ICOL,JCOL)
TBI(LCOL)=TBI(ICOL,JCOL)
DT=DCI(ICOL,JCOL)
HCOL(LCOL)=HCI(ICOL,JCOL)
NPRT(LCOL)=NCI(ICOL,JCOL)
PI(LCOL)=PCI(ICOL,JCOL)
IF (NCOLE.EQ.2) GOTO 433
IF (JCOLE.EQ.LCOL) GOTO 433
IF(QCI(KCOL,LCOL).GT.QRSI(LCOL)) THEN
IF (QCI(ICOL,JCOL).GT.QRSI(JCOL)) QC1(ICOL)=QCM(ICOL)
IF (QCM(ICOL).EQ.0.0) QC1(LCOL)=QCI(ICOL,JCOL)
QR(LCOL)=0
CALL CUSTOS(E,QCI,QR,TD1,TBI,N,LCOL,DT,HCOL,NPRT,PI,TAC1,AGUA,V
+ APOR,CCOL,CAUX,CPRT)
CUTIL(LCOL,JCOL)=AGUA(LCOL)+VAPOR(LCOL)
CEQUIP(LCOL,JCOL)=CCOL+CAUX
TC1(LCOL,JCOL)=CUTIL(LCOL,JCOL)*(1-0.52)+CEQUIP(LCOL,JCOL)/2.5
ENDIF
IF(QCI(KCOL,LCOL).LT.QRSI(LCOL)) THEN
IF (QCI(ICOL,JCOL).GT.QRSI(JCOL)) QC1(ICOL)=QCM(ICOL)
IF (QCM(ICOL).EQ.0.0) QC1(LCOL)=QCI(ICOL,JCOL)
QR(LCOL)=QRSI(LCOL)-QCI(KCOL,LCOL)
CALL CUSTOS(E,QCI,QR,TD1,TBI,N,LCOL,DT,HCOL,NPRT,PI,TAC1,AGUA,V
+ APOR,CCOL,CAUX,CPRT)
CUTIL(LCOL,JCOL)=AGUA(LCOL)+VAPOR(LCOL)
CEQUIP(LCOL,JCOL)=CCOL+CAUX
TC1(LCOL,JCOL)=CUTIL(LCOL,JCOL)*(1-0.52)+CEQUIP(LCOL,JCOL)/2.5
ENDIF
433 RETURN
END

```

B) Subrotina INTCOMPLX

```

SUBROUTINE INTCOMPLX(TD,TB,P,Q,RRM,N,NM,QCSI,QRSI,IRNPRI,IRHCO
+1,IRDCOL1,NCOL,C,DCL,HCL,NCI,PCI,QCI,QRI,TDI,TBI,CUTIL,CEQUIP,SINT)
IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)

```

```

INTEGER LK, HK1, N, EE, E
REAL *8 IRHCO1, IRDCOL1, NM(10)
DIMENSION PB(10), IRNPR1(10), X1(10), X2(10), X3(10), TD1(10), TB1(10),
+P(10), TAC(10), QCI(5,10), QRI(5,10), C(10), QCSI(5), QRSI(5), TC1(5,10)
+, TB(10), TD(10), SINT(20), N(10), DCI(5,10), HCI(5,10), NCI(5,10), IRHCO
+1(10), IRDCOL1(10), PCI(5,10), CUTIL(5,10), CEQUIP(5,10), CEQ
+UIP1(5,10), CCOND(5,10), RMIN(10), NPRT(10), HCOL(10), VD(10), PI(10), Q
+C1(10), QR1(10), TDI(5,10), TBI(5,10), RQ(5,10), SQDELTA(5,10), R(5,10)
+, QC(10), QR(10), CCOL2(10), CAUX1(10), CCAG(10), AGUA(10), VAPOR(10), QC
+M(10), DELTA1(10), RRM(10)
COMMON XF(5,10)
COMMON /BLOCK1 /XD(5,10), XB(5,10), XP(5,10)
COMMON /BLOCK2 /FD(5,10), SUMB(10), SUMD(10), SUMF(10), D(5,10), F(5,10)
+, B(5,10)
COMMON NOC, LK(10), HK1(10)
COMMON /COMP /NCOMP
COMMON PHI, NCM(10)
OPEN(UNIT=26, FILE='SAIDA4.DAT', STATUS='UNKNOWN')
DO 10 I=1,3
DO 15 J=1,10
CEQUIP1(I,J)=0
15 RQ(I,J)=0
J=3
J1=3
JJ=3
JJ1=3
10 TAC(I)=0
E=111
DELTA1(1)=10
DELTA1(2)=10

C *****COLUNA VERSUS COLUNA*****

II=0
JJ=0
SOMATAC=0
DO 600 ICOL=1, NCOL
EE=101
E=111
SOMATAC=TAC(ICOL)+SOMATAC
NF=0
580 NF=NF+1
IF (NF.EQ.ICOL) NF=NF+1
IF (NF.GT.NCOL) GOTO 600
TI=TB(NF)+10
IF (TI.LE.TD(ICOL)) THEN

```

```

      T=TD(ICOL)
      ENDIF
      IF (NCM(ICOL).GE.1) GOTO 600
      CALL TEMPR(EE,ICOL,P,TL,Q,RRM,N,NM,QC1,QR1,C,TD1,TB1,DT,HCOL,NPRT
+,PI,PB,IRNPRI,E,RRMI,RMIN,VD)
      DCI(ICOL,NF)=DT
      HCI(ICOL,NF)=HCOL(ICOL)
      NCI(ICOL,NF)=NPRT(ICOL)
      PCI(ICOL,NF)=PI(ICOL)
      QCI(ICOL,NF)=QC1(ICOL)
      QRI(ICOL,NF)=QR1(ICOL)
      TDI(ICOL,NF)=TD1(ICOL)
      TBI(ICOL,NF)=TB1(ICOL)
      SQDELTA(ICOL,NF)=QRI(ICOL,NF)*(TBI(ICOL,NF)-TDI(ICOL,NF))+QRSI(NF
+)*(TB(NF)-TD(NF))
      IF (NF.LT.NCOL) GOTO 580
600 CONTINUE

      DO 700 ICOL=1,NCOL
      IF (NCM(ICOL).GE.1) GOTO 630
      NF=0
620 NF=NF+1
      IF (ICOL.EQ.NF) NF=NF+1
      IF (NF.GT.NCOL) GOTO 700
      RQ(ICOL,NF)=((QRSI(NF)-QC1(ICOL))/QCSI(NF))*(TD1(ICOL)-TB(NF))
      IF (QC1(ICOL).GT.QRSI(NF)) RQ(ICOL,NF)=((QC1(ICOL)-QRSI(NF))/QRSI
+(ICOL))*(TB1(ICOL)-TD(NF))
      IF (RQ(ICOL,NF).LT.1.) RQ(ICOL,NF)=1/RQ(ICOL,NF)
630 IF (NF.LT.NCOL) GOTO 620
700 CONTINUE
      DO 730 I=1,3
      DO 720 J=1,3
      IF (NCM(I).GE.1) GOTO 720
      IF (I.EQ.J) GOTO 720
      IF (RQ(I,J).LT.RQ(J,I)) THEN
      R(I,J)=RQ(I,J)
      ENDIF
720 CONTINUE
730 CONTINUE

C *****CALCULO DO CUSTO DA SEQUENCIA*****
      K1=1
      DO 800 I=1,2
      DO 850 K=1,2
      IF (NCM(I).GE.1) GOTO 850
      IF (I.EQ.K) GOTO 850

```

```

J=I
J1=K
N1=K
DO 860 L=1,NOG
X1(L)=XD(J,L)
X2(L)=XB(J,L)
860 X3(L)=XF(J,L)

```

C *****COLUNA J COM COLUNA J1*****

```

DT=DCI(J,J1)
HCOL(J)=HCI(J,J1)
NPRT(J)=NCI(J,J1)
PI(J)=PCI(J,J1)
TD1(J)=TDI(J,J1)
TB1(J)=TBI(J,J1)
CALL CONDICOES(TVAPOR,COSTV)
IF (TB1(J).GT.TVAPOR) GOTO 800
IF (QCI(J,J1).GT.QRSI(J1)) THEN
  E=1.
  QCM(J)=QCI(J,J1)-QRSI(J1)
  CALL CONDENS(QCM,TD1,TB1,N,J,J1,DT,HCOL,NPRT,PI,CCOND,CCAG,E
+,DELTA1)
  QC(J)=QRSI(J1)
  QR(J)=QRI(J,J1)
ENDIF
IF (QCI(J,J1).LT.QRSI(J1)) THEN
  QCM(J)=0
  QC(J)=QCI(J,J1)
  QR(J)=QRI(J,J1)
  CCAG(J)=0
  CCOND(J,J1)=0
ENDIF
CALL CUSTOS(E,QC,QR,TD1,TB1,N,J,DT,HCOL,NPRT,PI,TAC1,AGUA,VAPOR,C
+COL,CAUX,CPRT)
CUTIL(J,J1)=AGUA(J)+VAPOR(J)+CCAG(J)
CEQUIP(J,J1)=CAUX+CCOND(J,J1)+CCOL
TC1(J,J1)=CUTIL(J,J1)*(1-0.52)+CEQUIP(J,J1)/2.5
CAUX1(J)=CAUX+CCOND(J,J1)
CCOL2(J)=CCOL
CTVI=VAPOR(J)*.48
CTHI=(AGUA(J)+CCAG(J))* .48

```

C *****COLUNA J1*****

E=1.

```

DT=IRDCOL1(J1)
HCOL(J1)=IRHCO1(J1)
NPRT(J1)=IRNPRT1(J1)
PI(J1)=1.0
QC(J1)=QCSI(J1)
IF (TB(J1).GT.514.8) GOTO 800
QR(J1)=QRSI(J1)
IF (QCI(J,J1).LT.QRSI(J1)) QR(J1)=QR(J1)-QCI(J,J1)
IF (QCI(J,J1).GT.QRSI(J1)) QR(J1)=0
CALL CUSTOS(E,QC,QR,TD,TB,N,J1,DT,HCOL,NPRT,PI,TAC1,AGUA,VAPOR,CC
+OL,CAUX,CPRT)
TAC(N1)=(AGUA(N1)+VAPOR(N1))*(1-0.52)+(CCOL+CAUX)/2.5
CTV=VAPOR(N1)*.48+CTVI
CTH=AGUA(N1)*.48+CTHI

C ***** SEQUENCIA COMPLETA *****
SINT(K1)=TC1(J,J1)+TAC(N1)
923 FORMAT(/2X,I7.2,2X,I7.2)
925 FORMAT(/2X,'DIAM=',F7.2,3X,'ALT.=',F7.2,3X,'NO PRATOS=',I7.2)
927 FORMAT(/2X,'PRES=',F7.2,3X,'QC=',F15.2,3X,'QC1=',F15.2,5X,'QR=',F
+15.2)
928 FORMAT(/2X,'PRES=',F7.2,3X,'QC=',F15.2,3X,'QR=',F15.2)
929 FORMAT(/2X,'TD=',F7.2,7X,'TB=',F7.2)
930 FORMAT(/2X,'*****')
931 FORMAT(/2X,'UTIL=',F15.2,2X,'EQUIP=',F15.2)
932 FORMAT(/2X,'CUSTO TOTAL=',F15.2)
933 FORMAT(/2X,'CTV=',F15.2)
IF (NCM(J1).GE.1) THEN
WRITE(26,923) J,J1
WRITE(26,925) DCI(J,J1),HCI(J,J1),NCI(J,J1)
WRITE(26,927) PCI(J,J1),QC(J),QCM(J),QR(J)
WRITE(26,929) TDI(J,J1),TBI(J,J1)
WRITE(26,931) CUTIL(J,J1),CEQUIP(J,J1)
WRITE(26,930)
WRITE(26,923) J1
WRITE(26,925) DT,HCOL(J1),NPRT(J1)
WRITE(26,928) PI(J1),QC(J1),QR(J1)
WRITE(26,929) TD(J1),TB(J1)
WRITE(26,933) CTV
WRITE(26,932) SINT(K1)
ENDIF
K1=K1+1
850 CONTINUE
800 CONTINUE
RETURN
END

```