

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS

FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA

**ÁREA DE CONCENTRAÇÃO: DESENVOLVIMENTO DE
PROCESSOS QUÍMICOS**

**SÍNTESE E OTIMIZAÇÃO DE SEQUÊNCIAS DE
DESTILAÇÃO UTILIZANDO SIMULADORES COMERCIAIS**

AUTOR: Caio Augusto Camargo de Carvalho

ORIENTADOR: Prof^a Dr^a Maria Regina Wolf Maciel

**DISSERTAÇÃO DE MESTRADO APRESENTADA À FACULDADE DE
ENGENHARIA QUÍMICA COMO PARTE DOS REQUISITOS EXIGIDOS
PARA A OBTENÇÃO DO TÍTULO DE MESTRE EM ENGENHARIA QUÍMICA**

JANEIRO / 1995

CAMPINAS - SP - BRASIL

9999166



UNIDADE	BC
NUM. DE FOLHAS:	
	38683
	229/99
PREÇO	R\$ 11,00
DATA	04/09/99
N.º OPD	

CM-00125681-3

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

C253s

Carvalho, Caio Augusto Camargo de
Síntese e otimização de sequências de destilação
utilizando simuladores comerciais. / Caio Augusto
Camargo de Carvalho.--Campinas, SP: [s.n.], 1995.

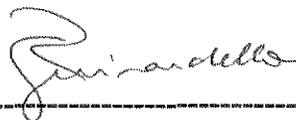
Orientador: Maria Regina Wolf Maciel
Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual de
Campinas, Faculdade de Engenharia Química.

1. Destilação fracionada – Métodos de simulação. 2.
Otimização matemática 3. Engenharia – Estimativa e
custo. 4. Heurística. I. Maciel, Maria Regina Wolf. II.
Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de
Engenharia Química. III. Título.

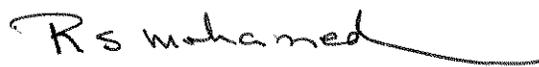
Tese defendida e aprovada, em 25 de Janeiro de 1995 pela banca examinadora constituída pelos professores:



Prof^o (a) Dr^o (a) Maria Regina Wolf Maciel



Prof^o Dr^o Reginaldo Guirardelo



Prof^o Dr^o Rahoma Sadik Mohamed

Este exemplar corresponde à redação final da Dissertação de Mestrado em Engenharia Química defendida por Caio Augusto Camargo de Carvalho e aprovada pela Comissão Julgadora em 25/01/1995.



Prof. Dra Maria Regina Wolf Maciel

SUMÁRIO

	PAG
- Agradecimentos	4
- Nomenclatura	5
- Resumo	11
Capítulo I - Introdução	12
Capítulo II - Conceitos Básicos em Destilação Multicomponente	16
II.1 - Introdução	16
II.2 - Classificação das Seqüências	16
II.3 - A Natureza Combinatorial do Problema	17
II.4 - Classificação dos Componentes	20
II.5 - Classificação das Separações	21
II.6 - Especificação de uma Coluna de Destilação	24
II.7 - Definições usuais encontradas na literatura	26
II.8 - Conclusão	27
Capítulo III - Revisão Crítica da Literatura	28
III.1 - Síntese de Sequências de Destilação	28
III.2 - Classificação Quanto aos Objetivos de Separação	30
III.3 - Especificações das Colunas de Destilação	32
III.4 - Tratamento Dado aos Componentes Chave	34
III.5 - Características das Misturas Estudadas	37
III.6 - Função Objetivo	38
III.7 - Otimização da Posição de Alimentação	40
III.8 - Conclusão	40
Capítulo IV - Síntese de Seqüências de Destilação	42
IV.1 - Introdução	42
IV.2 - Visão geral sobre a síntese de seqüências de destilação	43
IV.2.1 - Métodos heurísticos	43
IV.2.2 - Método heurístico ordenado	47
IV.2.3 - Métodos heurístico - evolucionários	48
IV.2.4 - Métodos heurístico - algorítmicos	51
IV.2.5 - Métodos algorítmicos	53

IV.3 - Aplicação para o desenvolvimento de uma metodologia de síntese e otimização	54
IV.3.1 - Definição do problema Alcanos 4	54
IV.3.2 - Análise heurística	58
IV.3.2.1 - Avaliação dos heurísticos isolados e ordenados	58
IV.3.2.2 - Aplicação do método heurístico evolucionário de Seader e Westerberg	62
IV.3.2.3 - Método evolucionário baseado nos heurísticos de Nadgir e Liu	65
IV.3.3 - Conclusão	67
Capítulo V - Otimização de Seqüências de Destilação -	68
V.1 - Introdução	68
V.2 - Especificação dos produtos em colunas de destilação	68
V.2.1 - Recuperação limite do componente chave	70
V.2.2 - Uso da especificação de vazões em seqüências de destilação	70
V.2.3 - Especificação de pureza (fração molar) e recuperação	74
V.2.4 - Otimização de especificações	77
V.3 - Otimização da posição da alimentação	83
V.4 - Otimização do número de estágios	84
V.5 - Otimização da pressão	90
V.6 - Otimização de uma seqüência de colunas para quatro componentes	91
V.6.1 - Introdução	91
V.6.2 - Estudo do seqüenciamento direto	91
V.6.2.1 - Influência da perda de carga nos estágios	91
V.6.2.2 - Otimização das especificações das colunas	92
V.6.2.3 - Otimização individual do número de estágios e da posição da alimentação	98
V.6.2.3.1 - Otimização não seqüencial	99
V.6.2.3.2 - Otimização seqüencial	104
V.6.2.4 - Seqüência final otimizada	106
V.6.3 - Aplicação da metodologia para os seqüenciamentos possíveis	109
V.7 - Análises e conclusões	112
Capítulo VI - Análise da Função Objetivo	124
VI.1 - Introdução	124
VI.2 - Estimativa de Custos	128

VI.2.1 - Custos Instalados de Equipamentos	128
VI.2.1.1 - Trocadores de Calor	128
VI.2.1.2 - Colunas de destilação	132
VI.2.2 - Custo operacional total anual	141
VI.3 - Correções de Custo Devido à Inflação	142
VI.4 - Planilha de Cálculo das Funções Objetivo	142
VI.5 - Análise das funções objetivo	151
VI.5.1 - Representatividade e variabilidade da função TAC tr	151
VI.5.2 - Análise de aplicação e performance das funções objetivo	154
VI.5.3 - Análise dos resultados obtidos nos capítulos IV e V	156
VI.6 - Conclusão	158
Capítulo VII - Metodologia, Conclusões e Sugestões	159
- Bibliografia	165
- Anexos	169
- Abstract	236

Agradecimentos

" O Senhor veio salvar-me; pelo que, tangendo os instrumentos de cordas, nós o louvaremos todos os dias de nossa vida na casa do Senhor." Isaías 38,20

Este trabalho é consagrado Àquele pelo qual todas as coisas subsistem e para quem tudo foi criado, ao Rei eterno, imortal, em cuja palavra está a fonte de eterna vida manifesta entre os homens, que veio e há de voltar. Ao meu amigo, Senhor e Salvador Jesus Cristo.

Dedico-o aos meus pais e irmãos pelo apoio através de constante carinho e interesse.

Aos meus queridos avós, responsáveis por grande parte da minha vocação profissional e ajuda sempre presente.

Aos pais de minha esposa por toda colaboração e companheirismo.

À minha esposa Léia, por todo o incentivo e amor e aos filhos Amanda e Thiago, que cederam um pouco do seu tempo comigo para que este trabalho fosse concretizado.

À prof.^a Dr^a Maria Regina Wolf Maciel por acompanhar com zelo e amizade a minha formação neste curso de pós graduação e dispor de seu tempo e conhecimento para que este trabalho fosse efetivado.

Aos amigos que encontrei nesta faculdade.

À CAPES pela bolsa de estudo cedida.

Aos colegas e professores do Departamento de Energia - DEM - UNICAMP

NOMENCLATURA

Índices

a	Tempo de retorno do investimento, coeficiente de correlação
A	Área de troca térmica (m ²); Área transversal em uma coluna
A,B,C..	Componente, Vazão molar dos componentes (Kmol/h)
b	Vazão molar do componente no fundo da coluna (Kmol/h), coeficiente de correlação
B	Vazão molar no fundo da coluna (Kmol/h)
C	Número de componentes, custo (US\$)
Cb	Custo base (FOB)
Ce	Custo do equipamento (FOB)
Cm	Custo de materiais
Cs	Custo dos estágios (FOB)
C% _{mn}	Custo de manutenção como percentual do custo instalado do equipamento
Cc	Custo instalado da coluna
Crv	Custo instalado do aquecedor
Crf	Custo instalado do resfriador
Ctc	Custo instalado de um trocador de calor (genérico)
Coc	Custo operacional da coluna
Cl	Custo de instrumentação
Cu	Custo de utilidades
Cti	Custo total instalado
Corv	Custo operacional do aquecedor
Corf	Custo operacional do resfriador
Cot	Custo operacional total anual
Cp	Calor específico molar (Kcal/Kmol °C)
D	Vazão molar de destilado (Kmol/h)
d	Vazão molar de um componente no topo da coluna (Kmol/h)
e	Espaçamento entre os estágios em metros (m)
e _v	Espaço da coluna não ocupado pelos estágios (m)
f	Vazão de alimentação (Kmol/h) ou fator de custo

fd	Fator de correção de custos associado ao projeto do equipamento
fp	Fator de correção de custos associado à pressão
fc	Fator genérico de correção de custo
fs	Fator de correção de custo devido ao espaçamento entre os estágios
ft	Fator de correção de custo devido ao tipo de estágio
fm	Fator de correção de custo devido ao material utilizado
fi	Vazão de alimentação de um componente genérico (Kmol/h)
ff	Fator de inundação (flooding)
F	Vazão de alimentação (Kmol/h); fator padrão de custo instalado
FT	Estágio de alimentação na coluna
G	Taxa percentual entre as vazões molares dos produtos da coluna
G(j)	Função de Gomez e Seader
H	Altura da coluna (m), entalpia (Kcal/h)
Ho	Número de horas anuais de operação do equipamento, entalpia de alimentação
h	Entalpia específica, calor latente de vaporização (Kcal/Kmol),
I, lo	Índice de correção devido à inflação
K	constante, constante de equilíbrio líquido vapor
Ki	Parâmetro de velocidade de fluxo (adimensional)
Kj	Parâmetro de distribuição de fluxo (adimensional)
L	Vazão de líquido na coluna (Kmol/h); Custos de mão de obra
Lfrac	Fração molar de líquido em uma corrente
Lw	Vazão mássica de líquido na coluna (Kg/h)
M	Massa molecular, Custo direto de materiais e equipamentos
N,n	Número genérico
Ns	Número de estágios
Nr	Número de estágios na zona de retificação
Nst	Número de estágios na zona de "stripping"
Nf	Número de variáveis a serem fornecidas
Nv	Número total de variáveis em um sistema
Ne	Número de equações de um sistema
Np	Número de produtos
n	Último estágio da coluna (o aquecedor)

n-1	Penúltimo estágio da coluna (o estágio de fundo)
P	Pressão de operação (ata)
PL	Vida útil da instalação (anos)
Q	Carga térmica (MKcal/h)
Qc	Carga térmica do resfriador (MKcal/h)
Qr	Carga térmica do aquecedor (MKcal/h)
q	Condição térmica do estágio de alimentação
R	Constante Universal dos Gases
RR	Razão de refluxo
ri	Recuperação do componente i
S	Número de seqüências possíveis, parâmetro de dimensão ou capacidade
SF	Fator de separação entre dois componentes
T	Temperatura da corrente ou equipamento (°C), número de tipos de separações possíveis
TAC	Custo Anual Total (US\$)
t	Temperatura do meio ou fluxo de utilidade (°C)
Th	Temperatura de bolha da corrente pesada (°C)
Tl	Temperatura de bolha da corrente leve (°C)
t	Temperatura do meio ou fluxo de utilidade
U	Coefficiente global de troca térmica (Kcal/hm ² °C)
ui	Corrente genérica ou vazão molar de um componente genérico (Kmol/h)
VR	Vazão de vapor no topo da coluna (Kmol/h)
VRT	Vazão total de vapor na seqüência dividida pela vazão de alimentação
Vw	Vazão de vapor no topo ou uma dada seção da coluna (Kg/h)
Vv	Vazão de vapor no topo da coluna (m ³ /s)
v	Velocidade média do vapor na coluna em (m/s)
vf	Velocidade de inundação (flooding)
x	Fração molar ou pureza de um componente no fundo da coluna
y	Fração molar ou pureza de um componente no topo da coluna, variável de programação MILP
z	Fração molar ou pureza de um componente na alimentação de uma coluna

Subíndices

1,2,3...	Relativo ao número da coluna de destilação na sequência
A,B,C..	Relativo ao componente
A	Ativo (área, diâmetro)
bub	Relativo ao ponto de ebulição ou ponto de bolha
b	Fundo ou relativo à um caso base
c	Frio, relativo à um estado padrão, valor calculado
f	valor que deve ser fornecido pelo usuário
h	Quente, pesado
hk	Corrente pesada
i	Componente genérico, instalado
j	Coluna genérica
k	Corrente de alimentação, coluna genérica
l	Líquido, leve
lk	Corrente leve
lk/hk	Relativo à tarefa de separação entre dois componentes chaves
o	Início, entrada, alimentação, operacional
op	Relativo à variável ótima
pr	Prático
rv	Aquecedor
rf	Resfriador
r	Rigoroso
s	Saída, final do processo, sequência genérica, simplificado ou "shortcut"
T	Total
TC	Trocador de calor
t	Topo
tr	Teórico
w	Ponto de orvalho

Letras Gregas

α	Volatilidade relativa, custo fixo associado à coluna
β	Taxa entre as vazões molares dos produtos de topo e fundo, inclinação (rd)
γ	Coefficiente de custo para trocadores de calor
Δ	Diferença
σ	Tensão superficial (dinas/cm)
η	Eficiência
Φ	Diâmetro em metros ou a raiz da equação de Underwood
Λ	Taxa entre a razão de refluxo e a mínima razão de refluxo
∞	Infinito
Δh	Calor latente de condensação (Kcal/Kmol)
ρ_v	Densidade do vapor no topo da coluna (Kg/m ³)

Abreviaturas

ata	Pressão absoluta em atmosferas
cf.	Conforme
CCM	Centro de Comando de Motores
CE	Chemical Engineering Plant Cost Index
CS	"Carbon Steel", Aço Carbono
CES	"Coefficient of Ease Separation", Coeficiente de Facilidade de Separação
CDS	"Coefficient of Difficulty Separation", Coef. de Dificuldade de Separação
ENR	Engineering News Record Construction and Building Indexes
FOB	"Free on Board"; Custo considerado até o embarque no país de origem
HK	"Heavy Key"; Componente chave pesado
HHk	"Heavy Heavy Key"; componente posterior ao chave pesado
K	"Key", chave
LK	"Light Key"; Componente chave leve
LLK	"Light Light Key; componente posterior ao chave leve
LLLK	terceiro componente a partir do componente chave
LNK	"Light Non Key", Componente não chave leve
MSA	"Mass Separating Agent", Agente de Separação de Massa
MTAC	"Marginal Total Anual Cost", Custo Total Anual Marginal
MV	"Marginal Vapor Rate", Vazão de Vapor Marginal
MILP	"Mixed Integer Linear Programming"
MINLP	"Mixed Integer Non Linear Programming"
min	mínimo
MLDT	Média logarítmica das diferenças de temperaturas
M&S	Marshall and Swift Equipment Index
NRC	Nelson Refinery Construction Index
NS	"Nonsharp"
PT	Peter & Timmerhaus
PS	"Pseudosharp"
SF	"Separation Factor", Fator de separação entre dois componentes
SS	"Semisharp", "Stainless Steel"
SF	"Separation Factor"
TAC	"Total Anual Cost", Custo Total Anual
Ti	Titânio
%var	Porcentagem de variação

RESUMO

Uma seqüência de destilação tem por finalidade o fracionamento de uma mistura multicomponente de alimentação em produtos que exigem uma determinada composição. No caso estudado, a composição dos produtos visa um único componente cujo grau de pureza pode ser estabelecido inicialmente, sendo então projetada toda a estrutura de separação baseada nesta exigência. Tal característica torna o procedimento de síntese aqui desenvolvido mais flexível do que os propostos em literatura, onde somente um tipo de especificação pode ser utilizado em cada coluna, resultando unicamente em produtos de alta pureza.

Neste trabalho, a síntese de uma seqüência de destilação é abordada de modo a incorporar uma análise rigorosa do comportamento de cada separador englobando a otimização de suas variáveis mais importantes. Exige-se para isto a elaboração de uma metodologia para que um simulador comercial possa ser utilizado, uma vez que a natureza multivariável do problema pode torná-lo extremamente complexo. Assim, uma criteriosa seleção de variáveis e procedimentos deve ser realizada. Neste contexto, o trabalho desenvolvido consiste em obter as especificações para a simulação em cada coluna das seqüências pesquisadas, o número de estágios, diâmetro, razão de refluxo e prato de alimentação ótimo de cada uma.

O resultado é a obtenção de um procedimento que é especialmente indicado para a escolha final de uma seqüência de destilação a partir de um grupo pré-selecionado de seqüências iniciais e um projeto final otimizado de cada uma, com estimativas reais de custos operacionais e de investimento.

PALAVRAS CHAVE: Síntese de Processo, Destilação, Seqüências de Destilação, Otimização, Simulação de Processos, Estimativa de Custos, Síntese Heurística.

Capítulo I

INTRODUÇÃO

A utilização de simuladores comerciais no desenvolvimento de processos químicos tem se tornado uma ferramenta indispensável ao engenheiro químico, uma vez que encontra à sua disposição um grande banco de dados de propriedades e parâmetros de correlação aplicáveis aos problemas típicos da engenharia química, entre eles, a destilação fracionada. Com o avanço da tecnologia eletrônica e os desenvolvimentos nas áreas da matemática aplicada e da ciência da computação, dispõem-se de soluções elaboradas por dezenas de pesquisadores ao longo de quase um século de avanços na área dos processos de separação difusionais.

A grande quantidade de publicações existentes e a diversidade de técnicas desenvolvidas para o estudo do seqüenciamento de colunas sugerem a complexidade e a dimensão do problema de otimização, que é inerente à sua natureza combinatorial.

Neste trabalho, desenvolve-se uma técnica para o projeto e para a otimização de seqüências de colunas de destilação a partir de um dado objetivo de separação: obtenção de produtos com pureza controlada, puros, semi-puros ou multicomponentes a partir de misturas onde a destilação fracionada é aplicável, o que significa, segundo um critério heurístico, haver uma volatilidade relativa entre os componentes a separar superior à 1,1.

Define-se, neste trabalho, que *um produto semi-puro é uma corrente multicomponente onde apenas um dos componentes possui valor comercial ou interesse no processo.*

O seqüenciamento de fracionadores tem sido estudado utilizando-se diferentes métodos dentre os quais destacam-se, pelo volume de trabalhos publicados, os métodos algorítmicos, e os métodos heurísticos. A característica dos primeiros é a implementação de uma solução para a busca da melhor estrutura de separação a partir da descrição matemática do relacionamento entre as variáveis de otimização com o Custo Total Anual, entre outras funções utilizadas. A metodologia heurística utiliza o conhecimento adquirido na prática industrial ou através de simulações e análises de processo, que se verifiquem concordantes com a observação, para postular regras de formação de estruturas de destilação.

Os métodos algorítmicos apresentam diversas metodologias, como a Programação Dinâmica (Hendry e Hughes, 1972), "Branch and Bound" (Westerberg e Stephanopoulos, 1975), Síntese Evolucionária (Stephanopoulos e Westerberg, 1975), "Ordered Branch Search" (Rodrigo e Seader, 1975), "Predictor- Based Ordered Search" (Gomez e Seader, 1976). Em cada um destes métodos pode-se utilizar técnicas de programação matemática, linear (LP) ou não linear (NLP), para a otimização de funções objetivo dentro de determinadas restrições. Em alguns dos métodos citados, são utilizadas funções matemáticas heurísticas para limitar o número de seqüências a serem calculadas. Neste trabalho, denominou-se tais métodos como heurístico-algorítmicos.

Os métodos algorítmicos baseados em LP e NLP são considerados "rigorosos", do ponto de vista da síntese, porque são capazes de realizar a investigação de todas as combinações possíveis e tem sido utilizados nos trabalhos mais recentes.

Na abordagem algorítmica, utilizam-se geralmente análises "shortcut", as quais envolvem simplificações no comportamento do equilíbrio de fases, como a hipótese de vazão molar constante para líquido e vapor acima e abaixo do estágio de alimentação e a não influência da razão de refluxo na separação dos componentes chave, entre outras. Misturas com características de idealidade, como a mistura de alcanos na indústria petroquímica são, portanto, as mais estudadas.

Convém destacar nos métodos algorítmicos que a maioria dos problemas estudados objetivam a obtenção de produtos puros ou multicomponentes a partir de um alto grau de separação entre dois componentes chave na mistura de alimentação (separação "sharp"), com a possibilidade de remistura entre correntes de produtos para obter um produto multicomponente final de composição desejada. Recentemente, tem-se pesquisado cortes com menor separação entre os componentes chave, ditos "nonsharp" (Aggarwal e Floudas, 1990 a, b). A análise algorítmica permite o estudo das redes de trocadores de calor e a síntese de seqüências de colunas com integração energética entre as correntes do processo.

Nas soluções que empregam técnicas heurísticas é utilizado um conjunto de regras, ordenadas ou não, formando uma base intuitiva para a tomada de decisão. Destaca-se a ocorrência de conflitos entre elas e a possibilidade de serem encontradas diferentes soluções conforme o critério utilizado para priorizá-las, caracterizando determinadas metodologias como subjetivas e, principalmente entre as técnicas não evolucionárias, passíveis de gerar soluções afastadas do ponto de otimização.

A conveniência e a aplicabilidade dos métodos heurísticos decorrem da simplicidade e de sua grande capacidade em pesquisar e selecionar as melhores seqüências, no universo de combinações possíveis.

Quanto ao objetivo de separação, são utilizadas geralmente para separações "sharp" e produtos puros. Recentemente, tem-se desenvolvido também aplicações para separações "nonsharp" e produtos multicomponentes, citando-se Chan e Prince (1989), Bamopoulos et al. (1988) e Cheng e Liu (1988), entre outros.

Após a avaliação de muitos trabalhos referentes à síntese de seqüências de destilação, constatou-se que alguns aspectos não foram abordados por nenhum dos autores. Tomou-se estas lacunas como ponto de partida para uma nova concepção para o projeto de seqüências ótimas de destilação a partir de uma única alimentação multicomponente.

O projeto de um processo de separação é classicamente dividido em três etapas distintas, como apresentado por Hendry e Hughes (1972) :

- Síntese de Seqüências de Separação (obtenção de um fluxograma de processo)
- Projeto de cada separador individual
- Otimização das condições operacionais.

Observa-se que os trabalhos de síntese puramente heurísticos conduzem à esta postura clássica de projeto devido à própria natureza do método, em outras palavras, métodos de síntese somente baseados em regras intuitivas não levam em consideração que uma seqüência aparentemente inferior pode vir a tornar-se mais econômica após a otimização de suas variáveis de processo, o que se observará no capítulo V.

Entretanto, para a obtenção de um fluxograma de processo ótimo, não é possível praticar estas etapas isoladamente e de modo independente umas das outras. Esta análise é realizada no capítulo V deste trabalho, onde se avaliou a influência da otimização das seqüências na lista ordenada inicialmente obtida por um procedimento de síntese desenvolvido a partir de regras heurísticas ordenadas e metodologias evolucionárias disponíveis na literatura (capítulo IV).

A primeira característica que diferencia este trabalho é a utilização da síntese heurística como etapa dependente da otimização rigorosa de cada seqüência, através de uma metodologia desenvolvida para esta finalidade.

Observou-se em alguns trabalhos de síntese algorítmica a realização de otimização nas pressões nas colunas, na posição de alimentação, na razão de refluxo ou no número de estágios associando-os à minimização ou maximização de uma função objetivo, geralmente o Custo Total Anual (TAC), como, por exemplo, no trabalho de Dhallu e Johns (1988). Nestes, utilizam-se as equações simplificadas de Fenske (1932), Underwood (1932 e 1946), Gilliland (1940) e Kirkbride (1944) descritas no Anexo IV.

Recentemente, com o desenvolvimento dos simuladores comerciais, surgiram alguns trabalhos algorítmicos que utilizam simulações rigorosas para a obtenção de dados na formulação das funções matemáticas utilizadas, como, por exemplo, o trabalho de Aggarwal e Floudas (1990 a, b), utilizando o simulador PROCESS. Nota-se, entretanto, que a escolha do par (Ns,FT) de cada coluna é baseada em uma análise "shortcut" realizada previamente e nenhum procedimento posterior de otimização destas variáveis é utilizado.

Como se verificará nos capítulos IV e V a aplicação de análises simplificadas para definir o par (Ns,FT) pode conduzir à soluções sub-ótimas devido ao fato de que a nova razão de refluxo obtida rigorosamente é substancialmente diferente da apontada pela análise simplificada, acarretando impacto no custo operacional anual da seqüência. Isto significa que os trabalhos baseados em síntese algorítmica não são tão rigorosos como universalmente apregoados na literatura.

A segunda característica deste trabalho é, portanto, a utilização da análise rigorosa através de um simulador de processos comercial.

Para que ela seja viável é necessário que um efetivo método de busca seja utilizado para que, entre o extenso número de combinações possíveis de colunas, sejam selecionadas seqüências próximas daquela que pode ser considerada como ótima, estando esta inclusa num subgrupo menor. A metodologia heurística possui as características desejadas devido à sua simplicidade e grande poder de pesquisa, ideal para a seleção de um conjunto inicial. Optou-se por um método evolucionário para aumentar a confiabilidade na capacidade de seleção do método.

No capítulo IV, a metodologia heurística é empregada e analisada para síntese, sendo possível, no entanto, a utilização de um método algorítmico para gerar o grupo de seqüências iniciais.

A terceira característica relaciona-se ao objetivo de separação estudado. Quatro são conhecidos na literatura, como se pode verificar no capítulo III, e tratam de produtos puros ou multicomponentes. Não se verificou trabalhos voltados à obtenção de produtos com pureza especificada. Aqui, permite-se a obtenção de produtos puros, semi-puros ou multicomponentes, isoladamente ou combinados.

Inicialmente, no capítulo II, apresentam-se conceitos básicos e definições que serão utilizadas extensamente neste trabalho.

A revisão bibliográfica, realizada no capítulo 3, expõe mais detalhadamente os assuntos mencionados.

No capítulo IV é selecionado e apresentado, entre os critérios de síntese existentes na literatura, um método simples que limita o número de seqüências entre o universo de combinações possíveis, obtendo um conjunto de seqüências quase-ótimas iniciais ordenadas segundo uma função objetivo. Este conjunto inicial será então comparado com a simulação simplificada, rigorosa e com a otimização de todos os casos possíveis para verificar se a lista ordenada obtida é satisfatória para o objetivo proposto.

A otimização deste conjunto de seqüências é realizada no capítulo V utilizando-se a análise rigorosa através de um simulador comercial, resultando em uma lista ordenada de seqüências ótimas relativas a uma função objetivo de otimização adequada.

No capítulo VI é desenvolvida a função objetivo TAC, aplicada na análise dos resultados obtidos pelos capítulos IV e V, e realizada uma comparação com outras funções objetivo com o propósito de identificar se a função TAC poderá ser convenientemente substituída por uma função mais fácil de ser obtida.

Apresenta-se então, no capítulo 7, a metodologia desenvolvida, as conclusões e sugestões para trabalhos futuros.

Capítulo II

CONCEITOS BÁSICOS EM DESTILAÇÃO MULTICOMPONENTE

II.1 - INTRODUÇÃO

O tema abordado apresenta uma grande diversidade de definições e de vocabulário e para melhor compreendê-lo faz-se importante apresentar os termos usuais encontrados na literatura apresentando também os conceitos básicos envolvidos.

II.2 - CLASSIFICAÇÃO DAS SEQÜÊNCIAS

- SIMPLES

Quando constituída por colunas com uma alimentação e dois produtos, conforme o exemplo da figura II.1:

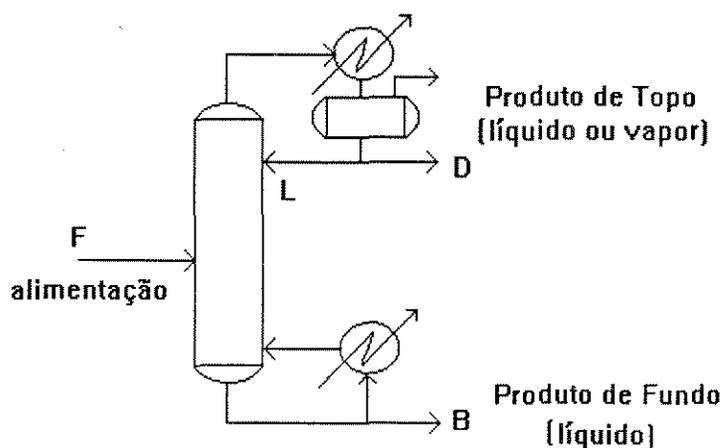


Figura II.1 - Exemplo de uma coluna simples

Nota-se que, numa seqüência simples, separando uma alimentação multicomponente em produtos puros são necessárias $C - 1$ colunas onde C é o número de componentes da mistura.

- COMPLEXAS

Quando há mais de uma alimentação e/ou mais de um produto nas colunas da seqüência, conforme o exemplo da figura II.2.

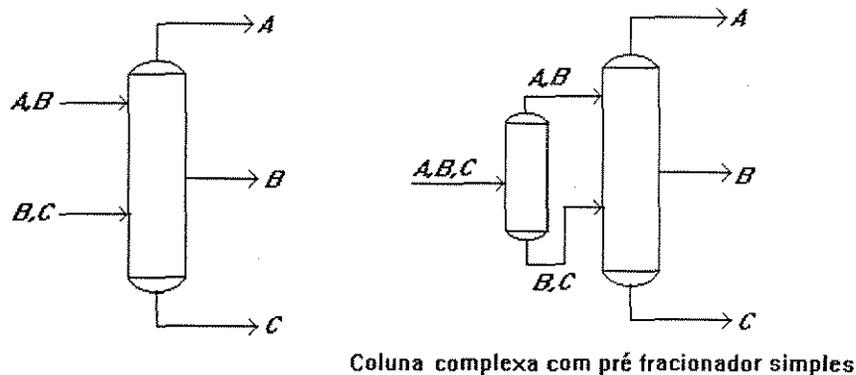


Figura II.2 Exemplos de Colunas Complexas

II.3 - A NATUREZA COMBINATORIAL DO PROBLEMA

Considerando-se colunas simples e separadores iguais (Destilação convencional, por exemplo), o número de seqüências possíveis, segundo Thompson e King (1972) pode ser calculado da seguinte maneira:

$$S = \frac{[2 \cdot (C-1)]!}{C! \cdot (C-1)!} \quad (\text{II.1})$$

Ex.: Destilação da mistura Etanol / Isopropanol / n-butanol conforme figuras II.3 e II.4

$$C = 3 \quad S = \frac{4!}{3! \cdot 2!} = 2$$

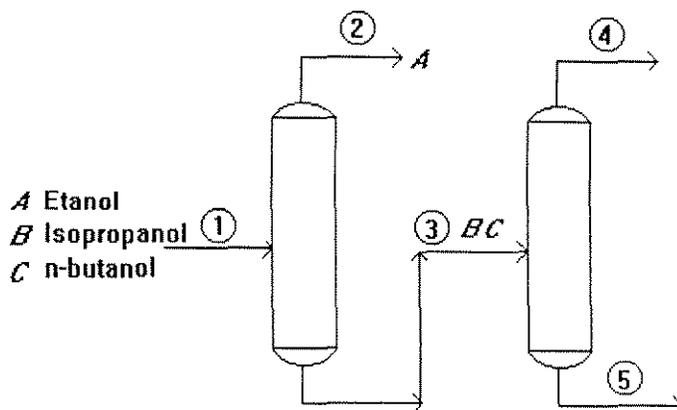


Figura II.3 - Exemplo de uma seqüência direta

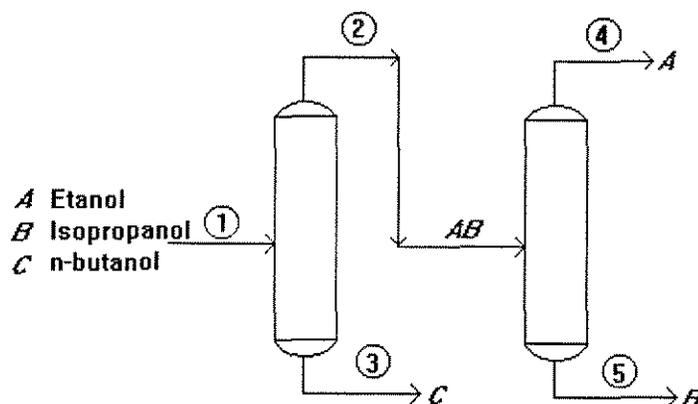


Figura II.4 - Exemplo de uma seqüência indireta

A Tabela II.1 demonstra a aplicação da equação com o aumento do número de componentes :

Tabela II.1 - Número de combinações possíveis de seqüências em função do número de componentes da alimentação

Número de Componentes (C)	Número possível de Seqüências (S)
2	1
3	2
4	5
5	14
6	42
7	132
8	429

Se, no entanto, outros tipos de separadores puderem ser usados na seqüência, a equação fica multiplicada pelo número de tipos diferentes de separadores, segundo a equação abaixo :

$$S = T^{c-1} \cdot \frac{[2 \cdot (C-1)]!}{C!(C-1)!} \quad (II.2)$$

T: número de tipos de separações possíveis

- Ex :
- Destilação extrativa com fenol
 - Destilação extrativa com hexeno
 - Extração com benzeno
 - Destilação convencional

Extração com heptano
Destilação azeotrópica com benzeno

Ex : Para $C=7$ e $T=10$ então $S=132.000.000$ (combinações possíveis de seqüências)

A Tabela II.2 demonstra a aplicação da equação completa.

Tabela II.2 - Comparação entre o número de seqüências possíveis utilizando um e dois processos de separação distintos

	T = 1	T = 2
Número de Componentes (C)	Ex: Destilação convencional	Dest. convencional / azeotrópica
3	2	8
5	14	224
7	132	33.792
10	4.862	9.957.376

Torna-se claro que existe um limite de componentes e tipos de separadores acima do qual uma análise e otimização de todas as combinações torna-se inviável mesmo para um computador.

Se forem utilizadas colunas complexas e/ou a integração de calor entre as colunas este número aumentará de forma ainda não quantificada pela literatura. A figura II.5 mostra o número possível de arranjos com três componentes, segundo Smith e Linnhoff (1988).

Felizmente, na prática, ocorre que, ou o número de componentes não é muito grande, ou os produtos desejados são misturas, diminuindo o número de colunas necessárias à seqüência.

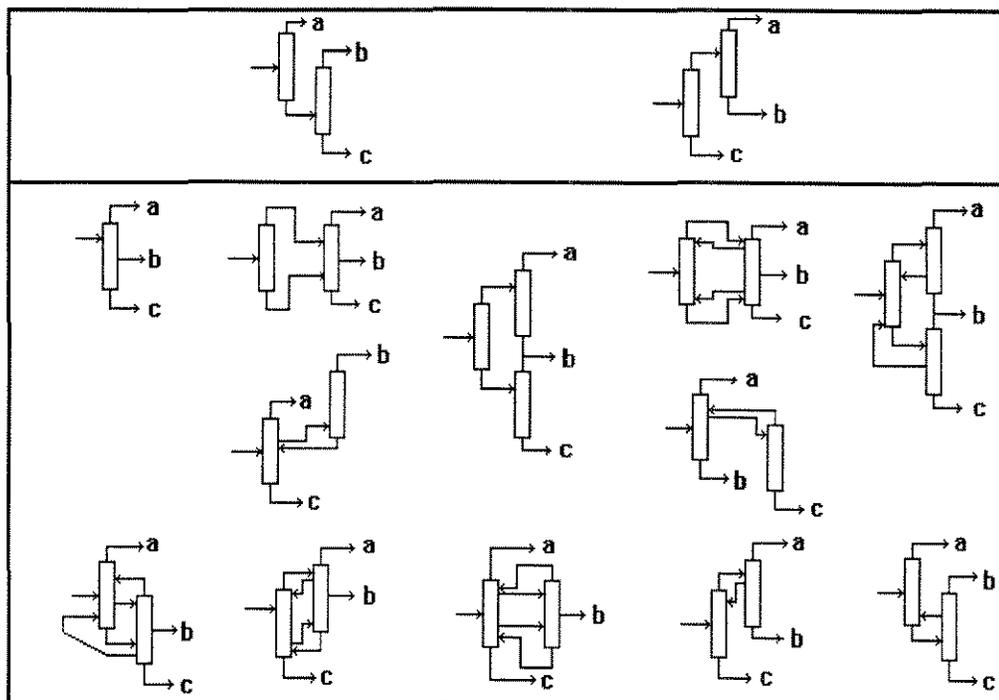


Figura II.5 - Configurações simples e complexas para 3 componentes

II.4 - CLASSIFICAÇÃO DOS COMPONENTES

Um componente de uma corrente a ser separado pode ser classificado como CHAVE ou NÃO CHAVE (K, NK).

Utilizando-se a definição de Coulson et al. (1980) tem-se :

" O chave leve (LK) é o mais leve dos componentes que aparece no fundo e o chave pesado (HK) é o mais pesado dos componentes no destilado ou topo ".

A figura II.6 mostra a aplicação desta definição.

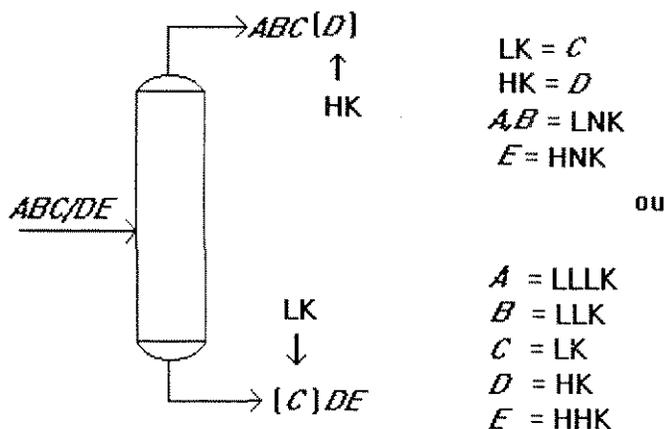


Figura II.6 - Exemplo de classificação de componentes em uma destilação

Percebe-se que nem sempre esta definição poderá ser aplicada; isto ocorre quando existem quantidades significativas de componentes pesados no topo ou leves no fundo, o que é perceptível quando se realiza uma separação multicomponente com recuperação dos componentes chave menor do que 80%. Assim, é mais prático considerar como chaves os dois componentes entre os quais se realiza o corte, formando dois grupos de componentes.

II.5 - CLASSIFICAÇÃO DAS SEPARAÇÕES

- Do ponto de vista do equipamento :

Pode-se classificar a separação em uma coluna em :

"SHARP" (fina) ou "SLOPPY" (diluída)

A separação "sloppy" pode ser subdividida em :

"PSEUDOSHARP" (PS)

"SEMISHARP" (SS)

"NONSHARP" (NS)

Não existe uma normalização ou padronização rigorosa desta classificação. Cheng e Liu (1988) propõem a seguinte classificação quanto à recuperação dos componentes chave:

"SHARP"	> 98%
"SLOPPY"	
95% a 98%	"PSEUDOSHARP"
80% a 95%	"SEMISHARP"
< 80%	"NONSHARP"

- Do ponto de vista do processo:

- Separação de uma única alimentação multicomponente nos componentes puros ou semi-puros. A figura II.7 ilustra este tipo de separação.

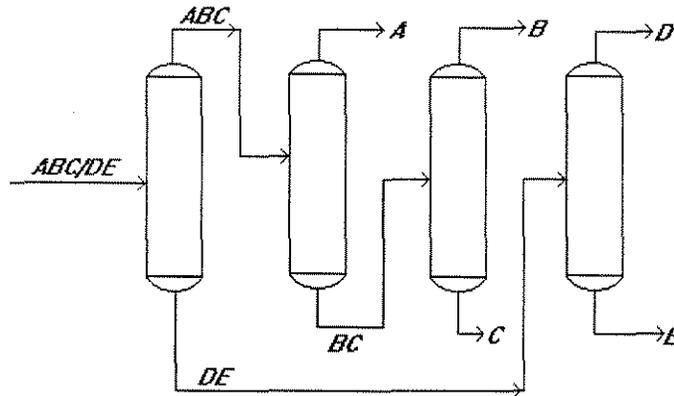


Figura II.7 - Separação de uma única alimentação em produtos puros ou semi-puros

- Separação de muitas alimentações multicomponentes em produtos puros ou semi-puros. A figura II.8 ilustra este tipo de separação.

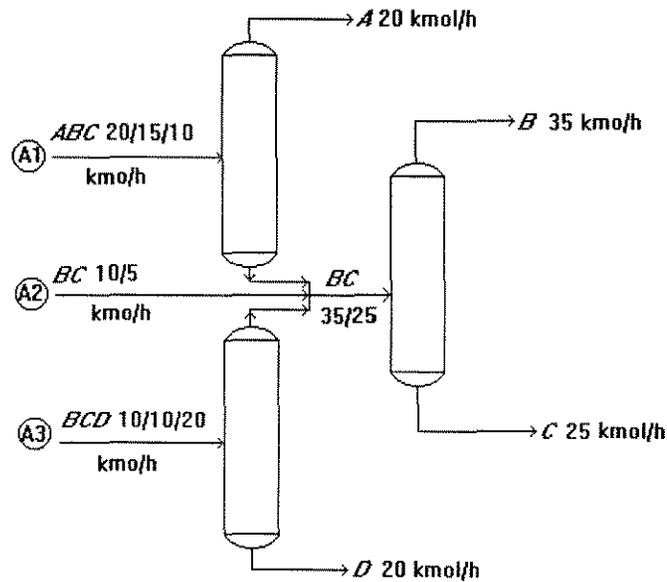


Figura II.8 - Separação de várias alimentações multicomponentes em produtos puros ou semi-puros.

- Separação de uma única alimentação multicomponente em produtos multicomponentes. A figura II.9 ilustra este tipo de separação.

$C = LK \quad r_c = 5/20 = 25\% \Rightarrow \text{sloppy}$

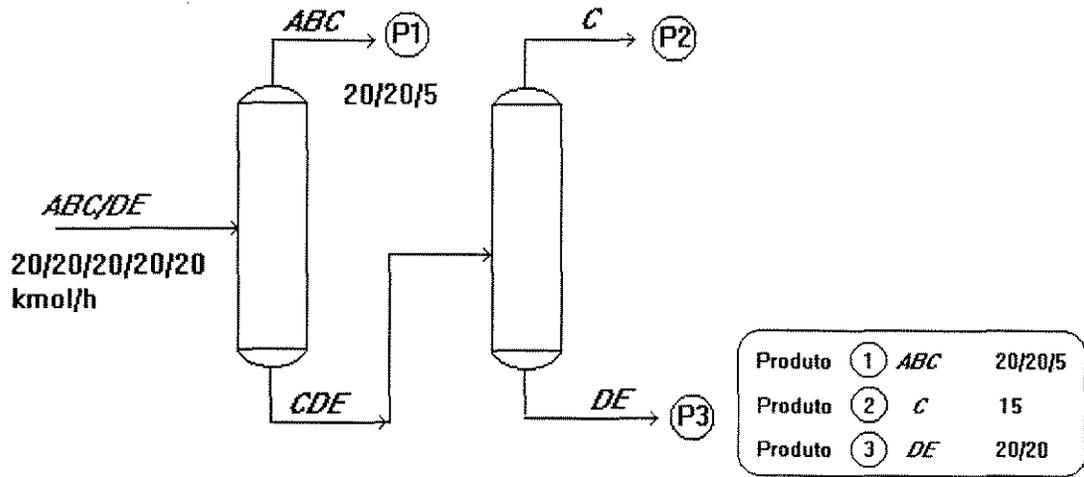


Figura II.9 Separação de uma única alimentação em produtos multicomponentes

- Separação de várias alimentações multicomponentes em vários produtos multicomponentes. A figura II.10 ilustra este tipo de separação.

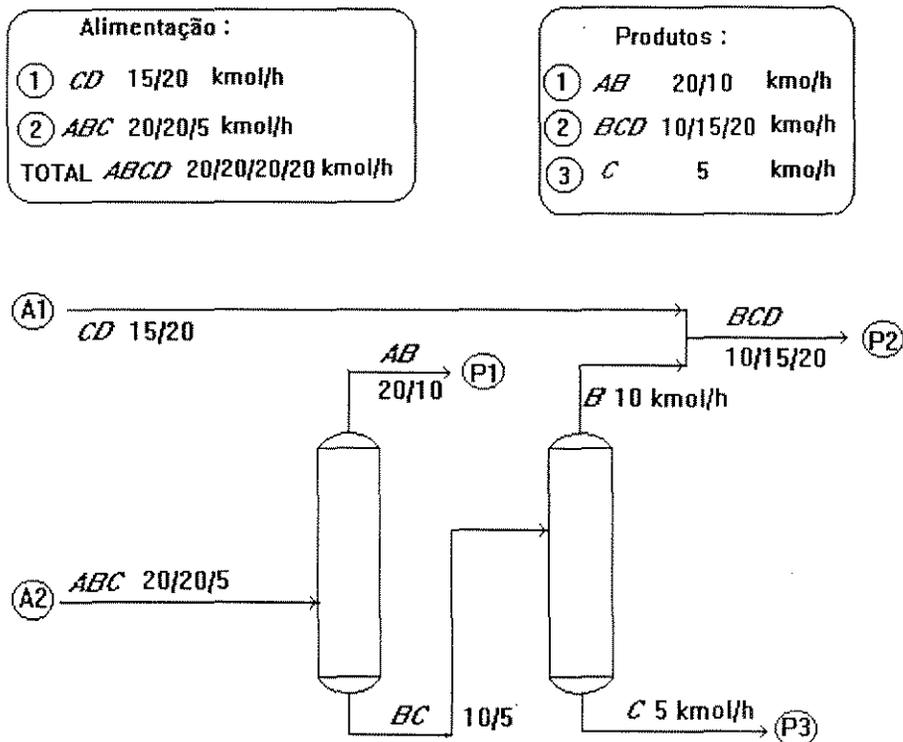


Figura II.10 Separação de várias alimentações em produtos multicomponentes.

II.6 - ESPECIFICAÇÃO DE UMA COLUNA DE DESTILAÇÃO

Para a simulação de uma coluna de destilação é necessário fornecer o valor de um conjunto de variáveis para conhecer outro conjunto, tal que o número de equações seja igual ao número de incógnitas.

O conjunto de variáveis independentes a ser fornecido é chamado de *Grau de Liberdade ou Variância* e é assim definido :

$$N_f = N_v - N_e \quad (II.3)$$

N_f : Número de variáveis a serem fornecidas

N : Número total de variáveis

N : Número de equações

Para um cálculo rigoroso, Henley e Seader (1981) apresentam a equação (II.4), desenvolvida para uma coluna simples numerando os estágios da base para o topo, sem considerar o condensador como estágio. A eficiência nos estágios não é considerada.

$$N_f = 2 \cdot N + C + 9 \quad (II.4)$$

N representa o número de estágios incluindo o refeedor (estágio 1).

Neste trabalho, utilizou-se a contagem de estágios conforme o simulador PRO/II, segundo mostrado na figura II.11. O condensador é considerado como um estágio.

$$N_s = N + 1 \quad (II.5)$$

$$N_f = 2 \cdot (N_s - 1) + C + 9 = 2 \cdot N_s + C + 7 \quad (II.6)$$

Considerou-se também que todos os estágios, exceto os trocadores, são adiabáticos, eliminando $N_s - 2$ variáveis de troca térmica a serem fornecidas. Duas simplificações foram também feitas, em relação às proposições de Henley e Seader para a equação II.4, a temperatura na saída do condensador é igual à temperatura do destilado, e a pressão do destilado e do líquido de retorno é igual à pressão no segundo estágio.

$$N_f = 2N_s + C + 7 - (N_s - 2) - 2$$

$$\boxed{N_f = N_s + C + 7} \quad (II.7)$$

As variáveis especificadas devem ser fornecidas de tal modo que não ocorram incompatibilidades, ou seja, a impossibilidade de se satisfazer o sistema de equações da coluna. Por isto, os programas comerciais geralmente apresentam máscaras de preenchimento mostrando as variáveis que podem ser especificadas; mesmo assim, é necessário analisar as variáveis fornecidas para evitar problemas de convergência e interpretar corretamente os resultados obtidos. Na tabela II.3 apresentam-se combinações usuais entre variáveis que deverão ser fornecidas juntamente com as outras (não mostradas na tabela) para satisfazer a equação II.3.

Tabela II.3 - Especificações usualmente fornecidas

Caso	Variável fornecida	Variável obtida
1	composição (duas) [*] , RR	Ns
2 **	Ns, RR, D	composição dos produtos
3 **	composição (uma), RR, Ns	composição dos produtos
4 **	composição (duas) [*] , Ns	RR

* Recuperação/Recuperação; Recuperação/pureza; pureza/pureza; etc

** Permitido no simulador PRO/II

Ex : Para uma coluna simples com 30 estágios e 4 componentes deve-se fornecer o valor de 41 incógnitas. Entre muitas possíveis combinações, as utilizadas neste trabalho são:

(C - 1) + 3 Frações molares, vazão , pressão e temperatura da alimentação

Ns Pressões em cada estágio

1 Temperatura do destilado ou ΔT_{bub} ($\Delta T_{bub}=0$, líquido saturado)

1 Número de estágios

1 Posição da alimentação

2 * (Np - 1) Especificação dos produtos

Ns + C + 7 , para Np = 2 , topo e fundo

Para a especificação dos produtos de topo e fundo deve-se fornecer 2 * (Np - 1) variáveis que determinam o balanço de massa na coluna. Podem ser :

Vazões totais
 Vazões de componentes
 Recuperação de um componente
 Pureza de um componente
 Razão de Refluxo

Destas, é importante destacar a **pureza** e a **recuperação** por estarem diretamente ligadas à qualidade dos produtos obtidos.

A figura II.11 mostra um exemplo típico de especificação de uma coluna

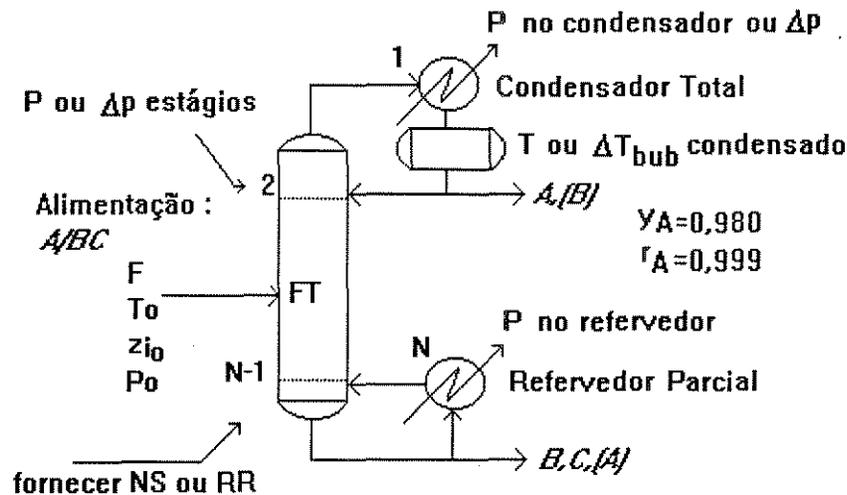


Figura II.11 - Especificação típica de variáveis em uma coluna de destilação

onde : ΔP é a perda de carga em cada estágio
 ΔT_{bub} é o grau de resfriamento desejado para o destilado abaixo de sua temperatura de saturação

II.7 - DEFINIÇÕES USUAIS ENCONTRADAS NA LITERATURA

- Define-se como **recuperação** de um componente sua distribuição no topo e/ou na base, relativamente à sua composição de alimentação avaliada por :

$$r_i = (d/f)_i \text{ ou } (b/f)_i \quad (II.8)$$

- Define-se como **pureza** de um componente a relação entre a sua quantidade e a de todos os componentes numa corrente :

$$x_i = \frac{u_i}{\sum_{i=1}^c u_i} \quad (II.9) \text{ onde, } u_i: \text{ corrente ou vazão molar / mássica do componente } i$$

A pureza de um componente é dada geralmente pela sua **fração molar** na corrente.

- **Fator de Separação**, "separation factor" (Modi e Westerberg, 1992; Douglas, 1988)

$$SF = \left(\frac{d}{b}\right)_{lk} \cdot \left(\frac{b}{d}\right)_{hk} = \left(\frac{xd}{xb}\right)_{lk} \cdot \left(\frac{xb}{xd}\right)_{hk} = \frac{(d/f)_{lk}}{1-(d/f)_{lk}} \cdot \frac{(b/f)_{hk}}{1-(b/f)_{hk}} = \frac{r_{lk}}{1-r_{lk}} \cdot \frac{r_{hk}}{1-r_{hk}} \quad (11.10)$$

O fator de separação pode também significar a volatilidade relativa entre dois componentes, como apresentado no trabalho de Nath e Motard (1981).

- **"Split Ratio"**, **"Distribution Ratio"** ou Razão de Distribuição = (d / b); (Cheng e Liu, 1988).
- **"Split fraction"** ou recuperação (Gomes e Seader, 1976; Nath e Motard, 1981; Modi e Westerberg, 1992).
- **"Recovery Fraction"** ou recuperação (Cheng e Liu, 1988).
- **"Distribution Coefficient"**, **"Distribution factor"** ou constante de equilíbrio líquido-vapor de um componente; $K = y_i / x_i$ (Nath e Motard, 1981).
- **Volatilidade Relativa** entre dois componentes é a razão entre suas constantes de equilíbrio.

$$\alpha_{i,j} = \frac{K_i}{K_j} = \frac{\left(\frac{y}{x}\right)_i}{\left(\frac{y}{x}\right)_j} = \frac{y_i/x_j}{x_i/y_j} \quad (11.11)$$

II.8 - CONCLUSÃO

A contribuição do presente capítulo reside na apresentação dos termos técnicos usuais encontrados na literatura relativos à colunas e seqüências de colunas de destilação, compilação esta que mostra a riqueza do vocabulário e das definições comumente utilizadas.

Apresentou-se também uma pequena análise da natureza combinatorial e multivariável do problema, onde a apropriada escolha das especificações a serem fixadas nas colunas é de fundamental importância para a convergência da solução.

Capítulo III

REVISÃO CRÍTICA DA LITERATURA

III.1 - SÍNTESE DE SEQÜÊNCIAS DE DESTILAÇÃO

Pode-se citar o trabalho de Lockhart (1947) como o primeiro a tentar aplicar regras resultantes da experiência e da observação do comportamento de trens de separação na indústria petroquímica, surgindo os primeiros critérios de otimização denominados regras heurísticas ou heurísticos.

Harbert (1957) considerou a energia consumida nas colunas como o principal fator de avaliação no arranjo ótimo de seqüências, por ser o custo predominante numa análise econômica. Pouco depois, Rod e Marek (1959) investigaram o fluxo total de vapor nas colunas da seqüência como uma função de otimização, colocando-o na forma de uma função heurística .

Heaven em 1969 realizou uma extensiva investigação computacional abrangendo o dimensionamento e o custo de colunas de destilação baseado no, então recente, trabalho desenvolvido por Guthrie (1969) para estimativas de custo de investimento a partir de correlações obtidas pelos preços do mercado americano. Neste trabalho, foram avaliados os heurísticos então existentes sendo propostos novos, originando uma estratégia de síntese heurística. Um procedimento similar é utilizado pouco depois por Powers (1971). Convém destacar que o trabalho apresentado por Guthrie foi utilizado na maioria dos trabalhos publicados até hoje, com as devidas correções por índices de custo apropriados.

A partir dos heurísticos, surgiram os heurísticos ordenados e a aplicação de princípios evolucionários. A Tabela III.1 mostra que os métodos heurísticos evolucionários estão em contínuo desenvolvimento.

Outras abordagens foram testadas e aprovadas, como os métodos algorítmicos, estatísticos, termodinâmicos e mistos, como os heurístico-algorítmicos. Nestes, uma função objetivo heurística é utilizada, isto é, apesar de não haver uma comprovação rigorosa da relação entre a otimização da função e a otimização do processo, a experiência demonstra que esta função é representativa das variáveis importantes para a otimização do processo.

A Tabela III.1 resume os tipos existentes, alguns dos trabalhos publicados e seus autores.

Tabela III.1 Abordagem da síntese de seqüências praticada na literatura

MÉTODO	AUTOR	ANO
Heurístico	Lockhart	1947
	Harbert	1957
	Rod e Marek	1959
	Nishimura e Hiraizumi	1971
Heurístico Ordenado	Heaven	1969
	Powers	1971
	King	1971
	Rudd, Powers e Sirola	1973
	Nadgir e Liu	1983
Heurístico Evolucionário	Stephanopoulos	1974
	Mahalec e Motard	1977 a,b
	Seader e Westerberg	1977
	Nath e Motard	1978 / 81
	Lu e Motard	1985 a,b
	Chan e Prince	1989
Heurístico-Algorítmico		
Técnicas		
heurística	Thompson e King	1972
"ordered branch search"	Rodrigo e Seader	1975
"branch and bound"	Westerberg e Stephanopoulos	1975
função preditiva "Predictor-Based Ordered Search"	Gomez e Seader	1976
função marginal	Modi e Westerberg	1992
Algorítmico		
Técnicas		
decomposição (análise de sub-grupos de separação) "Dynamic Programming"	Hendry e Hughes Rathore et al.	1972 1974 a,b
MILP	Andreacovich e Westerberg Floudas	1985 a,b 1988
MINLP	Aggarwal e Floudas	1989
evolucionário	Stephanopoulos e Westerberg Jelinek e Ptacnik	1976 1987
Fuzzy (incertezas nas variáveis de projeto)	Kraslawsky e Gorak	1989
Estatístico	Bezzina et al.	1989
Termodinâmico	Gomez e Seader	1985
	Glinos e Malone	1989

III.2 - CLASSIFICAÇÃO QUANTO AOS OBJETIVOS DE SEPARAÇÃO

Pode-se considerar a existência de quatro objetivos de separação aplicáveis a uma mistura multicomponente :

- A) Separação de uma mistura multicomponente em produtos puros ou semi-puros
- B) Separação de várias alimentações multicomponentes em produtos puros
- C) Separação de uma mistura multicomponente em produtos multicomponentes
- D) Separação de várias alimentações multicomponentes em produtos multicomponentes

São conhecidos e abordados na literatura separações que geram produtos puros ou multicomponentes. Verifica-se que, ou o produto é puro, tratado através de separações "sharp" (acima de 98% de recuperação dos componentes chave) ou é multicomponente em separações "sharp" ou "sloppy". A pureza de um ou mais componentes não é especificada.

Nenhuma referência se obteve de trabalhos que tratam de produtos semi-puros, onde se objetiva um determinado grau de pureza de um componente mediante uma especificação de produto.

Na prática, os objetivos listados podem aparecer combinados dentro de uma seqüência de destilação, conforme a especificação desejada para os produtos. Pode-se desejar, por exemplo, que dois produtos sejam puros, um semi-puro e outro multicomponente. Este objetivo de separação "misto" também não possui artigo na literatura e, apesar de não se realizar aqui um estudo com este caso, a metodologia proposta pode admiti-lo sem, no entanto, considerar a possibilidade da mistura de correntes, para o que normalmente se utiliza programação linear ou não linear.

Um produto multicomponente também pode ser obtido realizando um corte "sharp" entre dois componentes chave, de modo a evitar a interferência de componentes não chave nas colunas posteriores. A metodologia aqui desenvolvida permite a definição de qualquer pureza ou recuperação dos componentes mas, como se verificará no capítulo V, existem restrições para a recuperação entre os componentes chave, conforme a pureza estabelecida para os produtos nas colunas posteriores.

Para cada objetivo de separação, existe uma abordagem de síntese distinta, específica, como observado na literatura. Por exemplo, para o objetivo "D" aplicam-se unicamente as técnicas de programação matemática, enquanto que para o objetivo "A" é possível a síntese da seqüência sem um único cálculo, com a aplicação de heurísticos.

A análise rigorosa das colunas é citada em alguns trabalhos desenvolvidos na literatura, como o de Aggarwal e Floudas (1990 a,b). No entanto, tal análise partiu de dados de projeto apontados por uma etapa "shortcut" inicial (RR, Ns, FT), não havendo qualquer otimização rigorosa destas variáveis. Como se constata neste trabalho, a otimização das variáveis de projeto de uma coluna, através de sucessivas simulações rigorosas, influencia o resultado da síntese, isto é, esta otimização deve ser considerada como uma etapa de síntese.

A principal característica do método aqui desenvolvido está em incluir a otimização rigorosa das seqüências como uma etapa de síntese, cuja base é um conjunto inicial de seqüências quase-ótimas pré-selecionadas. Tal característica não foi observada em nenhum dos trabalhos pesquisados; quando ocorre otimização durante a síntese, observou-se a utilização de análise "shortcut", como no trabalho de Dhallu e Johns (1988). O procedimento de síntese utilizado para a obtenção de seqüências iniciais é o heurístico evolucionário, sendo aqui adotado devido à sua simplicidade; qualquer outro, no entanto, poderia ser utilizado.

Uma outra característica, é a forma como cada coluna da seqüência é especificada na etapa de análise para a obtenção das variáveis de projeto e operação (custo). Assim, como se observa no capítulo V, ao objetivo de separar uma mistura multicomponente em produtos semi-puros deve-se utilizar o par pureza/recuperação ou pureza/pureza para um mesmo componente chave. Em todos os demais objetivos, observou-se na literatura unicamente a utilização do par recuperação/recuperação entre os componentes chave.

Na tabela III.2 apresentam-se alguns dos trabalhos desenvolvidos e seus objetivos de separação e as especificações adotadas para a síntese e otimização de seqüências.

Tabela III.2 - Objetivos de separação abordados na literatura e especificações

OBJETIVO ESTUDADO	AUTOR	Ano	Separação	Especificação
A #3	Thompson e King	1972	"sharp"	$r_{lk} = r_{hk} = 0,990$
	Rodrigo e Seader	1975	"sharp"	$r_{lk}=r_{hk}$ ou $r_{lk} = 0,990$ e $r_{hk} = 0,995$ #1
	Hendry e Hughes	1972	"sharp"	r_{lk}, r_{hk} entre 0,95 a 0,99
	Rathore et al.	1974 a,b	"sharp"	$r_{lk} = r_{hk} = 0,99$
	Gomez e Seader	1976	"sharp"	r_{lk}, r_{hk} entre 0,95 a 0,99
	Modi e Westerberg	1992	"sharp"	$r_{lk} = l_{hk} = 0,999$
B	Mocsny e Govind	1988	"sharp"	$r_{lk} = r_{hk} = 0,99$ #2
C	Aggarwal e Floudas	1990 a,b	"Semisharp" "sharp"	$r_{lk} > 0,85$; $r_{hk} < 0,99$ $r_{lk}=r_{hk} > 0,99$
	Cheng e Liu	1988	"Nonsharp" a "sharp"	$r_{lk} \neq r_{hk}$, diversos
D	Floudas	1988	"sharp"	r_{lk}, r_{hk} #4
OBS	# 1 a recuperação de um componente chave é igual em todas as colunas # 2 são utilizadas colunas simples e complexas. # 3 não inclui produtos semi-puros, com especificação de pureza # 4 não informado			

III.3 - ESPECIFICAÇÕES DAS COLUNAS DE DESTILAÇÃO

No item II.5 apresenta-se a importância das especificações relativas aos produtos da coluna (topo e fundo) para sua simulação, correspondentes à $2 * (Np - 1)$ especificações.

Verifica-se entre os autores uma unanimidade na especificação das colunas da seqüência utilizando a recuperação dos componentes chave, como observado na **tabela III.2**.

Na prática industrial, no entanto, nota-se que existe geralmente interesse em um produto puro ou em um componente presente em uma corrente multicomponente, dentro de determinadas especificações e propriedades para seu reaproveitamento ou comercialização.

Como afirmam Rodrigo e Seader (1975):

"Geralmente, as especificações de processo ditam as recuperações globais de cada espécie de modo a satisfazer as exigências de pureza no produto".

Curiosamente, mesmo no trabalho acima citado, duas especificações de recuperação são utilizadas para simplificar o problema, de tal modo que as quantidades de produtos chave que passam para as colunas posteriores sejam desprezadas.

Pode-se verificar que utilizando o par de recuperação dos componentes chave e assumindo seus valores máximos (tendendo à unidade), a pureza obtida nos produtos será a máxima possível para o número de estágios considerado. Entretanto, diferentes purezas serão obtidas, dependendo onde o componente for separado na seqüência. Assim, os autores que especificam a máxima recuperação dos dois componentes chave obtêm a máxima pureza que pode ser alcançada limitando a quantidade de componentes não chave nas colunas posteriores.

Se o objetivo da separação for obter a máxima pureza possível aos componentes utilizando, se necessário for, uma etapa posterior de purificação, então tal especificação é inteiramente adequada (produtos de alta pureza). No entanto, se for utilizado um projeto resultante destas especificações para a obtenção de produtos com menor pureza, isto acarretará em um investimento mais caro (maior número de estágios) com um custo operacional menor (razão de refluxo menor que a inicialmente calculada) resultando em um Custo Total Anual global possivelmente sub-ótimo; o trabalho de síntese da seqüência pode ser comprometido pela falta de otimização da especificação dos produtos. Tal coluna poderá também apresentar problemas de operacionalidade devido às baixas vazões.

As variáveis a serem especificadas para o projeto de uma coluna não são necessariamente aquelas que serão controladas posteriormente (ex. temperatura de topo) mas, no caso da pureza, verifica-se a conveniência de sua especificação para o cálculo de uma coluna ao observar-se que as variáveis de processo manipuladas (carga térmica, perfil de temperaturas, razão de refluxo ou vazão de entrada) normalmente são ajustadas em função de análises periódicas da composição do produto, em laboratório ou com o uso de instrumentação "on line", por exemplo, um analisador de composição conectado a um controlador de concentração atuando sobre uma válvula de controle para a vazão de refluxo. A utilização da especificação de pureza em pelo menos uma das duas especificações é, portanto, conceitualmente apropriada.

É interessante observar no trabalho de Rodrigo e Seader (1975), onde o procedimento algorítmico "ordered branch search" é apresentado, que os autores consideram a otimização das variáveis de decisão (assim por eles denominado) necessária à síntese de uma seqüência, referindo-se à pressão, razão de refluxo, condição térmica da alimentação, temperatura de refluxo, distribuição dos componentes chave, localização do estágio de alimentação, tipo de estágios, tipo de utilidade utilizada, tipo de condensador (parcial ou total), fator de inundação considerado (flooding) e temperaturas de aproximação nos condensadores. Entretanto, o procedimento por eles adotado exclui esta análise. Por simplificação, não realizaram qualquer otimização das variáveis de decisão, restringindo-se às variáveis estruturais apenas (aquelas que envolvem a escolha dos subgrupos de tarefas de separação, como a escolha dos componentes chave, por exemplo). Os autores sugerem que é melhor que a otimização seja deixada para estudos finais de projeto, onde diversas seqüências consideradas econômicas sejam investigadas, o que é exatamente o realizado neste trabalho.

Para separações "sloppy" (que podem ser obtidas especificando-se menores purezas e recuperações) espera-se que a influência da otimização das especificações de recuperação nas colunas seja muito mais acentuada, devido à influência da razão de refluxo, como abordado por Cheng e Liu (1988), caso que não será aqui analisado. Aggarwal e Floudas (1990 a,b) mostram a importância da otimização da recuperação entre os componentes chave para este tipo de separação.

A especificação de componentes chave não adjacentes não é praticada em separações "sharp" mas é utilizada em separações "sloppy". Neste caso, o interesse está na recuperação de uma faixa de componentes não chave; os componentes chave são especificados de modo a garantir a recuperação desejada para os não chave. Verifica-se, nestes casos, que a razão de refluxo na coluna de destilação possui importância significativa na razão de distribuição dos componentes não chave. Assim, os métodos baseados em análise "shortcut", isto é, a maioria dos métodos algorítmicos desenvolvidos até o momento, podem apresentar previsões errôneas, como apontado por Cheng e Liu (1988).

É também objetivo deste trabalho avaliar a otimização nas especificações das colunas, assumindo-se que a especificação ótima de um separador é importante para minimizar os custos de operação e de investimento, o que não foi investigado por nenhum autor em separações "sharp".

III.4 - TRATAMENTO DADO AOS COMPONENTES CHAVE

Numa mistura de C componentes é possível escolher $C - 1$ pares de componentes chave adjacentes. Para isto, é preciso ordenar os componentes segundo uma propriedade associada à separação, como a volatilidade relativa, por exemplo. A figura III.1 mostra os pares possíveis para cinco componentes.

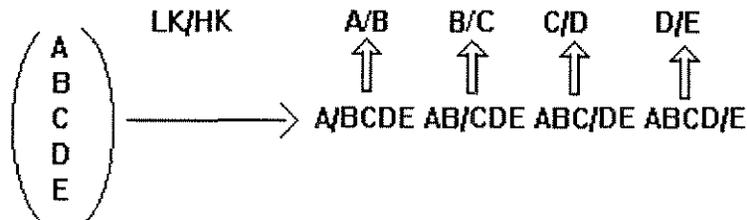


Figura III.1 - Pares chave adjacentes para cinco componentes

A partir de uma mistura inicial, derivam-se todos os subgrupos de separação com 2 até C componentes. A análise das combinações entre todos os subgrupos formados leva à investigação de todas as possibilidades de seqüenciamento, como ilustrado pela figura III.2.

Grupo inicial : A,B,C,D,E			
Subgrupos			
2 componentes	3 componentes	4 componentes	5 componentes
A,B	A,B,C	A,B,C,D	A,B,C,D,E
B,C	B,C,D	B,C,D,E	
C,D	C,D,E		
D,E			
Separações possíveis para os comp. chave			
A/B	A/B,C	A/B,C,D	A/B,C,D,E
B/C	A,B/C	A,B/C,D	A,B/C,D,E
C/D	B/C,D	A,B,C/D	A,B,C/D,E
D/E	B,C/D	B/C,D,E	A,B,C,D/E
	C/D,E	B,C/D,E	
	C,D/E	B,C,D/E	

Figura III.2 - Obtenção dos subproblemas de separação para a mistura de cinco componentes.

Os trabalhos que utilizam Programação Dinâmica (Hendry e Hughes, 1972) realizam a análise de todos os componentes chave possíveis. Cada subgrupo de separação é simulado independentemente e os seus custos avaliados. O seqüenciamento ótimo será aquele que apresentar a menor soma dos custos de cada etapa de separação.

Para cinco componentes são possíveis 14 combinações diferentes. Verifica-se no exemplo da figura III.2 que com 20 simulações independentes, pode-se montar todo o problema. Esta técnica é denominada de "decomposição" e utilizada com vantagem para um maior número de componentes e tipos de separação (extrativa, azeotrópica, etc).

Os métodos algorítmicos, em geral, quantificam através de uma função objetivo todas ou a maioria das combinações possíveis, ocorrendo a necessidade do uso de computadores de grande porte. Devido a isto, alguns métodos procuram limitar o número possível de separações através de uma técnica de busca baseada em heurísticos (Thompson e King, 1972) ou funções heurísticas, como a função preditiva de Gomes e Seader (1976), por exemplo.

Neste trabalho, pretende-se minimizar ao máximo a pesquisa entre as possíveis tarefas de separação, utilizando-se regras heurísticas e um método evolucionário, inicialmente proposto por Stephanopoulos e Westerberg (1976).

A Tabela III.3 mostra a abordagem realizada por alguns autores.

Tabela III.3 - Abordagem dos componentes chave praticadas na literatura

AUTOR	ANO	ABORDAGEM : Separação / Método / Análise / Pesquisa / Composição / Destilação extrativa
Rod e Marek	1959	Separação "sharp". Método Heurístico. Análise "shortcut". Pesquisa de todas as combinações para até 4 componentes. Benzeno, Tolueno, Etilbenzeno. Não
Seader e Westerberg	1977	"Sharp". Heurístico evolucionário. "Shortcut". Exemplo 1: São analisadas 3 seqüências em 227 possíveis, com 9 subgrupos de separação entre os componentes chave. Alcanos e alcenos. Sim
Floudas	1988	"Sharp". MILP. "Shortcut". Pesquisa de todas as combinações. Alcanos. Não.
Kraslawsky e Gorak	1989	"Sharp". Fuzzy-algorítmico. Método de Wang - Henke. Pesquisa de todas as combinações. Alcanos. Não.
Rodrigo e Seader	1975	"Sharp". "Ordered Branch Search". Análise por método de grupo (aproximado). Não são pesquisadas todas as combinações. Hexano, benzeno, ciclohexano. Sim
Hendry e Hughes	1972	"Sharp" e "semisharp". Programação Dinâmica. "Shortcut" Pesquisa de todas as combinações. Alcanos e alcenos. Sim
Thompson e King	1972	"Sharp". Heurístico-Algorítmico. "Shortcut". Não são pesquisadas todas as combinações. Alcanos e Alcenos. Sim (10 tipos diferentes de separação são pesquisados).
Westerberg e Stephanopoulos	1975	"Sharp". "Branch and Bound". "Shortcut". Exemplo1: 67% do total analisado. Alcanos e Alcenos. Sim Exemplo2: 51% do total analisado. Alcanos e Alcenos. Sim
Gomez e Seader	1976	"Sharp". "Predictor-Based Ordered Search". "Shortcut". Exemplo 1: 65% do total analisado, Alcanos. Não Exemplo 2: 70% do total analisado, Alcanos e alcenos. Sim Exemplo 3: 60% do total analisado, Alcanos e alcenos. Não
Modi e Westerberg	1992	"Sharp". Função Marginal. "Shortcut". Não são pesquisadas todas as combinações. Misturas de alcanos, alcenos e benzeno. Não.

III.5 - CARACTERÍSTICAS DAS MISTURAS ESTUDADAS

Uma mistura multicomponente pode ter um comportamento no equilíbrio de fases que se aproxime em maior ou menor grau das condições ideais, podendo apresentar um ou mais pontos de azeotropia. Todos os trabalhos pesquisados levam em conta misturas que não apresentam azeótropos podendo admitir, no entanto, volatilidades relativas muito próximas. Nestes casos, a destilação extrativa é utilizada, como indicado na tabela III.3.

Os trabalhos algorítmicos de Hendry e Hughes (1972) e Thompson e King (1972) foram um dos primeiros a apresentarem seqüências com outros tipos de separadores que a destilação convencional, permitindo misturas de componentes com volatilidades relativas muito próximas. Estes trabalhos possuem linhas distintas para a busca das seqüências ótimas. No primeiro, utilizou-se a seleção de tarefas de separação a partir de informações do custo das separações de cada subgrupo (ao que se denominou "dynamic programming") e no segundo, utilizando-se regras heurísticas e o custo de cada separador a partir de subrotinas de programação interligadas. Os trabalhos que se seguiram optaram pela linha de Hendry e Hughes. A partir de 1985 iniciaram-se os estudos dos processos multialimentados e/ou multiproduto empregando programação linear e não linear.

Nota-se, porém, que os procedimentos de síntese algorítmicos, considerados "rigorosos e infalíveis" (Nishida et al., 1981), possuem uma grande maioria de trabalhos voltados para a destilação convencional e extrativa, com estudos de casos aproximadamente ideais, como a separação de alcanos, alcenos e hidrocarbonetos aromáticos. Isto se deve ao uso generalizado da análise "shortcut".

Como se demonstra neste trabalho, um método de síntese baseado em análise "shortcut" não pode ser considerado infalível, por isso a tendência atual é a utilização da análise rigorosa através de um simulador comercial, como observado em alguns trabalhos recentes (Aggarwal e Floudas, 1990 a,b; Cheng e Liu, 1988).

Como se observa na tabela III.3, misturas com características de idealidade (lei de Raoult) são preferidas porque elas apresentam geralmente comportamento adequado às hipóteses estabelecidas pela análise "shortcut", ainda que isto não seja uma regra geral. Isto significa apresentar volatilidades relativas constantes com a temperatura e a composição ao longo da coluna, valores de entalpia de mistura desprezíveis; supõe-se ainda que a razão de refluxo utilizada não altere a distribuição dos componentes não chave e que a vazão molar seja constante na coluna ("constant molar overflow"). As perdas térmicas são desprezadas.

III.6 - FUNÇÃO OBJETIVO

Para obter-se a seqüência ótima, é necessário um parâmetro de comparação entre elas, o qual é uma função objetivo composta de variáveis que podem ser otimizadas. Entre as proposições existentes, a mais utilizada e melhor aceita na prática industrial e nos trabalhos existentes na literatura é a baseada em critérios econômicos, nos custos operacionais e de investimento das seqüências.

Nem sempre a função objetivo baseada em custos é a mais conveniente, particularmente nos casos em que se deseja realizar a integração de calor entre os trocadores da seqüência (Glinos e Malone, 1989), tendo sido proposta uma função objetivo baseada na energia mínima de separação entre os componentes, a partir de uma análise termodinâmica. Outras funções objetivo podem ser utilizadas para representar o TAC da seqüência simplificando a sua avaliação, como a somatória das vazões de vapor no topo das colunas, das razões de refluxo e das cargas térmicas dos trocadores.

Faz parte do escopo deste trabalho comparar diferentes funções objetivo com a função objetivo Custo Total Anual, verificando se funções mais simples podem ser utilizadas eficientemente.

A Tabela III.4 mostra as funções objetivo mais utilizadas na literatura.

Tabela III.4 - Funções objetivo praticadas na literatura

AUTOR	ANO	FUNÇÃO OBJETIVO
Rod e Marek	1959	$\Delta = (\sum VRc - \sum VRs) / F_o$ F_o Vazão molar de alimentação $\sum VRs$ Vazão de vapor para a seqüência padrão $\sum VRc$ Vazão de vapor para uma seqüência qualquer
Thompson e King	1972	Custo Total Anual (Peter e Timmerhaus)
Floudas	1988	Custo Total Anual $F = 1/a \sum_j (\alpha y + \sum_k \beta f) +$ $1/a \sum_{k,j} \gamma (Qc + Qr) +$ $b (C \sum_{k,j} Qr + C \sum_{k,j} Qc)$ a tempo de retorno de investimento b variável de correlação dos custos de utilidades. y variável de programação MILP F vazão de alimentação C custo de utilidades α custo fixo associado à coluna β Inclinação da reta $\alpha \times f$ γ coeficiente de custo trocadores k relativo à corrente de alimentação j relativo à coluna de destilação
Bamopoulos et al.	1988	Custo Total Anual
Cheng e Liu	1988	Custo Total Anual (Guthrie, Peter e Timmerhaus)
Kraslawsky e Gorak	1989	Função do tipo Fuzzy (incerteza) resultando em valores de Custo Total Anual
Aggarwal e Floudas	1990	Custo Total Anual (Guthrie e Peter e Timmerhaus)
Harbert	1957	Consumos de calor (refervedores) ou Consumos teóricos mínimos de calor (para RRmin) dado por : $\sum (Gh) \cdot f \cdot \left(\frac{T_h}{T_h - T_l} \right) = \min \text{ (energia/100 moles alimentação)}$ onde : G = 100 D/(D+B) ou 100 B/(D+B) ; o maior entre eles h Calor latente de vaporização molar médio da corrente f Fator de correção proposto Th temperatura de bolha da corrente pesada Tl temperatura de bolha da corrente leve
Glinos e Malone	1989	Consumo total de trabalho líquido ou mínimo trabalho reversível de separação.
Modi e Westerberg	1992	Custo Total Anual (Guthrie) ou Vazão de Vapor através da função objetivo denominada "Marginal Price".

III.7 - OTIMIZAÇÃO DA POSIÇÃO DE ALIMENTAÇÃO

O trabalho efetuado por Maciel (1988) demonstra que a posição adequada da alimentação numa coluna de destilação nem sempre é avaliada corretamente quando submetida à análise "shortcut". A partir de uma avaliação incorreta podem ocorrer sensíveis variações na razão de refluxo, provocando um impacto direto nos custos operacionais de cada coluna, mesmo em se tratando de misturas ideais.

Verificou-se na literatura que nenhum dos trabalhos pesquisados apresentou uma otimização rigorosa da posição de alimentação. Este trabalho tem por objetivo incorporar esta importante variável.

III.8 - CONCLUSÃO

A revisão da literatura apresentada mostra a riqueza e a complexidade do tema, onde diversas técnicas e métodos de soluções foram propostos e desenvolvidos ao longo de 50 anos de trabalhos publicados.

Selecionou-se dentro do tema "Síntese de Seqüências de Destilação" o estudo da separação de uma única mistura multicomponente em produtos com purezas definidas, não havendo referências sobre trabalhos de síntese com esta abordagem.

Neste trabalho, pode-se definir qualquer recuperação ou pureza, desde que não hajam restrições para as colunas posteriores. Pode-se utilizar como especificação os pares recuperação/recuperação, pureza/pureza, e recuperação/pureza. Pode-se obter produtos puros, semi-puros e multicomponentes. Em todos os trabalhos encontrados na literatura observou-se somente a possibilidade de utilização do par recuperação/recuperação entre os componentes chave.

O método aqui desenvolvido inclui a otimização rigorosa das seqüências como uma etapa de síntese, cuja base é um conjunto inicial de seqüências quase-ótimas pré-selecionadas. Em alguns trabalhos algorítmicos verificou-se a possibilidade de otimização durante a síntese, requerendo a utilização de análise "shortcut". O procedimento de síntese aqui utilizado para a obtenção de seqüências iniciais é o heurístico evolucionário, sendo adotado devido à sua simplicidade e grande capacidade de seleção; qualquer outro, no entanto, poderia ser utilizado.

Observou-se na literatura uma tendência para a utilização de uma análise rigorosa nas colunas mediante o uso de um simulador comercial. Entretanto, verificou-se que a base para o projeto das colunas, o par (Ns, FT), foi apontado por uma análise "shortcut" inicial, não havendo em nenhum dos casos uma otimização rigorosa destas variáveis. Neste trabalho é realizada uma otimização de variáveis que inclui o par (Ns, FT), a posição de alimentação e a recuperação entre os componentes chave. A pressão não foi considerada por ser uma variável importante apenas quando se deseja a integração térmica entre as correntes, o que não é objeto deste estudo.

Apesar da generalidade do método de análise utilizado, optou-se, a exemplo da literatura, pelo estudo de uma mistura de alcanos. Em princípio, qualquer mistura poderia ser utilizada. A mistura de alcanos foi escolhida devido ao fato de ser bem conhecida e representada pelo método termodinâmico escolhido (Soave-Redlich-Kwong) e para evitar a possibilidade de obtenção de resultados particulares. A utilização de misturas pouco ideais requer uma análise de todas as etapas envolvidas na metodologia, o que poderá ser realizado como prosseguimento deste trabalho. Existe também a possibilidade de utilizar qualquer outro processo de separação difusional, como a destilação azeotrópica, extração líquido-líquido, stripping, etc. Nestes casos, deve-se analisar a utilização de outras especificações para as colunas e verificar sua adequação em cada etapa da metodologia apresentada.

As funções objetivo apresentadas na literatura são aqui estudadas e comparadas, propondo-se uma rotina de cálculo para a função TAC, baseada no trabalho de Guthrie (1969) e diversas outras fontes.

Capítulo IV

SÍNTESE DE SEQÜÊNCIAS DE DESTILAÇÃO

IV.1 - INTRODUÇÃO

O objetivo deste trabalho é desenvolver uma metodologia de síntese e otimização de seqüências de destilação. O desenvolvimento desta metodologia se inicia pela síntese e passa pela análise, otimização e projeto.

Para a realização da primeira etapa, pretende-se utilizar um método, selecionado dentre os existentes na literatura, como ferramenta para a obtenção de um conjunto de seqüências quase-ótimas ("near optimal") que deverão ser otimizadas e avaliadas por critérios econômicos, segundo a metodologia desenvolvida nos capítulos V e VI.

Desejar-se-ia, para alcançar a máxima eficácia na obtenção da seqüência ótima, que estas informações fossem obtidas a partir dos diversos métodos disponíveis mas, para o objetivo global deste trabalho, é suficiente a utilização de um único método. Optou-se pela síntese heurística devido à sua grande capacidade de simplificação e optou-se por uma técnica evolucionária para aumentar a confiabilidade desta etapa de síntese.

Pelo exposto, a metodologia de síntese aqui apresentada e selecionada, deverá ser vista como um meio prático, satisfatório, mas que poderá ser implementado tanto quanto possível para o aumento da capacidade de seleção e busca do ótimo.

O objetivo dos métodos de síntese é, de modo geral, eliminar a necessidade de analisar todas as combinações possíveis que podem resultar a partir de um número inicial de componentes, restringindo a busca a um grupo bastante menor. Existem, outrossim, métodos algorítmicos baseados em programação matemática (linear e não linear), capazes de avaliar todas as combinações possíveis. A tendência observada na literatura é, no entanto, a utilização de regras ou funções heurísticas capazes de diminuir o número de avaliações e, portanto, o tempo de busca.

Classificam-se os métodos existentes em :

- Heurísticos (simples, não ordenados)
- Heurísticos Ordenados
- Heurístico - Evolucionários
- Heurístico - Algorítmicos
- Algorítmicos
- Termodinâmicos
- Estatísticos
- Estatístico-Algorítmicos
- Evolucionários

Destes, os mais comuns e desenvolvidos na literatura são os do tipo Heurísticos e os Algorítmicos, dentre os quais utilizou-se aqui os primeiros, para a composição de uma metodologia de síntese.

IV.2 - VISÃO GERAL SOBRE A SÍNTESE DE SEQÜÊNCIAS DE DESTILAÇÃO

IV.2.1 - MÉTODOS HEURÍSTICOS

São aqueles baseados em "regras do polegar" ("rules of thumb"), em princípios que são generalizações de casos observados na prática. São regras intuitivas.

Os métodos baseados em heurísticos proporcionam um meio rápido, fácil e simples de seleção. Pode ocorrer, no entanto, durante a aplicação de um conjunto de heurísticos, contradição entre eles. Neste caso, deve-se optar por aquele que parecer mais conveniente. Assim, a utilização destes métodos pode levar à obtenção de seqüências distintas conforme o critério usado para priorizar as regras heurísticas em questão.

Ocorre, na prática, que os métodos que possuem apenas um heurístico predominante levam freqüentemente a soluções muito inferiores à ótima e os métodos baseados em diversos heurísticos não ordenados levam a uma série de conflitos entre eles resultando numa metodologia subjetiva, produzindo um resultado diferente conforme a interpretação realizada.

A aplicação destas regras isoladamente não garante, por si, um resultado ótimo ou próximo do ótimo. Por isto surgiram na literatura os métodos ordenados. Nestes, podem ocorrer os problemas relatados, porém, em menor intensidade.

As regras heurísticas ou simplesmente heurísticos, como se passará a denominar, podem ser divididas em quatro grupos. Apresentam-se a seguir os heurísticos obtidos na literatura os quais estão classificados segundo a divisão sugerida por Nadgir e Liu (1983).

- Heurísticos de Método

Relativos aos processos de separação ou métodos de separação que estão sendo utilizados na seqüência.

M1) Favorecer a destilação ordinária. Em outras palavras: Favorecer o separador cujo agente de separação seja a energia.

M2) Evitar refrigeração e destilação à vácuo (Rudd et al., 1973). Se uma destilação a vácuo for necessária, considerar uma extração líquido-líquido. Pode-se querer destilar líquidos com altas volatilidades relativas mas com pontos de ebulição muito baixos, exigindo refrigeração para a condensação do destilado. Neste caso, considerar alternativas mais baratas como a absorção (Souders, 1964; Seader e Westerberg, 1977; Nath e Motard, 1981).

M3) Remover primeiro o agente de separação de massa (MSA - "Mass Separating Agent" (Hendry e Hughes, 1972; Rudd et al., 1973; Seader e Westerberg, 1977). Quando um MSA é utilizado para aumentar as volatilidades relativas das espécies, ele deve ser removido no separador imediatamente seguinte àquele em que foi introduzido. Nath e Motard (1981) apresentam em seu trabalho exceções a esta regra.

M4) Um método de separação que utiliza um MSA não pode ser utilizado para isolar outro MSA, (Nath e Motard, 1978).

M5) Evitar condições extremas de processamento (Seader e Westerberg, 1977), isto é, pressões e temperaturas elevadas ou muito baixas.

- Heurísticos de Projeto

Para a escolha de seqüenciamentos que favoreçam a obtenção de determinadas propriedades da seqüência ou dos produtos.

D1) Favorecer o seqüenciamento que resulte no mínimo número de produtos. Aplicável quando produtos multicomponentes são desejados (Thompson e King, 1972; King, 1980).

Este heurístico é intuitivo pois, se um produto multicomponente é desejado, não convém separar seus componentes em produtos puros para depois misturá-los novamente.

Restrição: Quando a volatilidade relativa dos componentes a separar, para a obtenção do produto multicomponente, é apreciavelmente menor do que a obtida pela separação de outro par de componentes que conduza à separação completa dos componentes (Seader e Westerberg, 1977; Henley e Seader, 1981). Neste caso, para obter o produto multicomponente diretamente seria necessário utilizar um agente de separação de massa (MSA), o que contraria o heurístico M1. Nath e Motard (1981) apontam a prioridade de M1 sobre D1.

D2) Usar primeiro o separador mais barato. Dentre os possíveis tipos de separadores que podem ser incorporados na seqüência, avaliar os custos de todos e utilizar o mais barato. Segundo Thompson e King (1972), este heurístico por eles introduzido, é uma generalização de diversos heurísticos mais específicos (Harbert, 1957; Thompson e King, 1972; Rudd et al., 1973).

D3) Favorecer a seqüência direta sempre que a volatilidade relativa e as porcentagens molares de alimentação não forem muito diferentes entre cada componente (Lockhart, 1947; Harbert, 1957; Heaven, 1969; Rudd et al., 1973; King, 1980).

Restrição: Frequentemente o uso deste heurístico leva a grandes separadores, com altos custos de investimento. Este heurístico falha em desconsiderar que uma separação equimolar da alimentação entre os produtos de topo e fundo favorece a economia de energia (heurístico C2). Rudd et al. (1973) apresentam exemplos da vantagem do uso do heurístico C2 sobre o D3, relativamente à minimização dos custos operacionais e de investimento.

D4) Remover produtos valiosos por último, como produto de topo (Harbert, 1957; Rudd et al., 1973).

D5) A seqüência mais econômica é aquela que apresenta o mínimo fluxo total de vapor no topo (Rod e Marek, 1959).

- Heurísticos de Espécie

São aqueles baseados nas propriedades de um componente ou nas diferenças de propriedades das espécies a serem separadas.

S1) Remover os componentes corrosivos ou explosivos primeiro, assim como aqueles que podem acarretar reações químicas indesejáveis (Rudd et al., 1973).

S2) Separações que exigem altas recuperações de um componente devem ser reservadas para o final da seqüência (Heaven, 1969; King, 1980).

S3) Separações difíceis devem ser feitas por último na seqüência (Harbert, 1957; Rudd et al., 1973).

Separações onde as volatilidades relativas dos componentes chave são baixas (próximas da unidade) devem ser feitas na ausência dos componentes não chave, para isto selecionam-se seqüências em que os componentes chave desejados são deixados por último, para que sua separação seja feita na ausência de outros componentes (Heaven, 1969; King, 1980).

Comentário: Este heurístico decorre da observação de que uma determinada separação é mais econômica quando realizada na ausência de componentes não chave, como anotado por King (1971), Gomez e Seader (1976) e Modi e Westerberg (1992).

S4) Realizar as separações fáceis primeiro (Harbert, 1957; Seader e Westerberg, 1977).

Ordenando os componentes por suas volatilidades relativas, realizar a separação de modo que sejam primeiro realizadas as mais fáceis.

Restrições: Este heurístico falha em não considerar o efeito da composição de alimentação e a importância de uma coluna balanceada (distribuição equimolar dos produtos).

S5) Realizar primeiro a separação que possui o maior Coeficiente de Facilidade de Separação (CES - "Coefficient of Ease Separation" - Nadgir e Liu, 1983).

Este conceito foi desenvolvido como uma tentativa de minimizar a restrição ao heurístico S4.

Definição:

$$CES = \beta \cdot \Delta T_{bub} \quad \text{ou} \quad CES = \beta \cdot 100 \cdot (\alpha - 1) \quad (\text{IV.1})$$

onde: α = volatilidade relativa entre os componentes chave
 β = taxa das vazões molares dos produtos
 $\beta = D/B$ ou B/D desde que $\beta \leq 1$

Cheng e Liu (1988) apresentam este heurístico como :

$$CES = \beta \cdot \Delta \cdot \frac{1}{\log [(d/b)_{ik} \cdot (b/d)_{hk}]} \quad (\text{IV.2})$$

onde, $\Delta = \Delta T_{bub}$ ou $100 \cdot (\alpha - 1)$ (IV.3)

S6) Realizar primeiro a separação com o menor CDS (Nath e Motard, 1981).

O conceito de CDS (Coeficiente de Dificuldade de Separação) foi também criado para minimizar a restrição ao heurístico S4. Como se pode notar pela equação abaixo, o primeiro termo é a equação de Fenske para o número mínimo de estágios a qual favorece separações com menor recuperação dos componentes chave e com grandes volatilidades relativas (S4); o segundo termo representa o heurístico D3, favorecendo a seqüência direta, isto é, aquela que apresenta a menor quantidade possível de destilado; o terceiro termo favorece uma coluna balanceada, de acordo com o heurístico C2. No lugar de NS_{\min} pode-se utilizar opcionalmente RR_{\min} dado pela equação de Underwood.

Definição :

$$CDS = \frac{\log \left(\frac{r_{ik}}{1-r_{ik}} \cdot \frac{r_{hk}}{1-r_{hk}} \right)}{\log \alpha_{ik,hk}} \cdot \frac{D}{D+B} \cdot \left(1 + \left| \frac{D-B}{D+B} \right| \right) \quad (\text{IV.4})$$

sendo,

$$\log \frac{\left\{ \frac{r_{ik}}{1-r_{ik}} \cdot \frac{r_{hk}}{1-r_{hk}} \right\}}{\log \alpha_{ik,hk}} = NS_{\min} \quad (\text{Fenske}) \quad (\text{IV.5})$$

S7) Se a volatilidade relativa entre os componentes chave for menor do que 1,10 (Nath e Motard, 1981) ou menor do que 1,05 (Van Winkle, 1967; Seader e Westerberg 1977, Henley e Seader, 1981), realizar uma destilação com MSA para aumentar as volatilidades relativas.

S8) Se a volatilidade relativa entre os componentes chave for maior do que 2 em uma destilação ordinária então a destilação extrativa não precisa ser considerada. Se a volatilidade relativa for maior do que 3,2 então a extração líquido-líquido não precisa ser considerada (Henley e Seader, 1981).

- Heurísticos de Composição

Relacionam a composição dos produtos ou alimentação com o melhor seqüenciamento a ser realizado.

C1) Separar primeiro o componente que possui a maior composição na alimentação, observando que sua recuperação e volatilidade relativa sejam adequadas à separação e não ocorram grandes variações de volatilidades relativas entre os demais componentes (King, 1971; Nishimura e Hiraizumi, 1971; Rudd et al., 1973).

C2) Favorecer separações equimolares entre os produtos de topo e fundo, observando que as taxas de distribuição ou volatilidades relativas sejam adequadas à separação (Harbert, 1957; Heaven, 1969; King, 1971). Se for difícil o julgamento de qual separação é mais próxima à equimolaridade, utilizar o conceito de Coeficiente de Facilidade de Separação - CES, selecionando as separações onde seu valor é mais alto.

IV.2.2 - MÉTODOS HEURÍSTICOS ORDENADOS

São métodos que empregam uma seqüência hierárquica de heurísticos pré definidos para a síntese do processo global de separação. São utilizados normalmente como ponto de partida dos métodos evolucionários.

Não é nossa intenção apresentar todos os métodos existentes mas utilizar um deles para determinar um conjunto de seqüências iniciais a serem otimizadas por um método evolucionário.

Método de Nadgir e Liu (1983)

Os autores consideram que os melhores métodos de síntese existentes são os algorítmicos, os heurístico-algorítmicos e os evolucionários. Desenvolveram, no entanto, este método, para servir como gerador de seqüências iniciais, devido à sua simplicidade e boa performance.

Ordenação dos Heurísticos :

- 1- M1
- 2- M2
- 3- D1
- 4- S1
- 5- S2
- 6- C1
- 7- C2

Método de Seader e Westerberg (1977)

- 1- M1,M2,S7 e S8 simultaneamente (não conflitam entre si).
- 2- S4,S3
- 3- C1
- 4- D3
- 5- M3
- 6- D1

IV.2.3 - MÉTODOS HEURÍSTICO-EVOLUCIONÁRIOS

Consistem na aplicação de um método heurístico ordenado para gerar uma seqüência inicial e submete-la à modificações estruturais sugeridas por uma estratégia que questiona a validade das regras heurísticas aplicadas ao problema em consideração. São, entre os que utilizam heurísticos, aqueles que produzem os melhores resultados. Normalmente, eles levam à pesquisa de um grande número de alternativas, mas muito inferior ao universo total de combinações.

Conclui-se neste trabalho, que a análise rigorosa das estruturas pode ser importante para o sucesso da escolha do subgrupo inicial, o que representa uma novidade, uma vez que tal conceito nunca foi abordado ou utilizado na literatura. Tal fato, no entanto, dificulta a aplicação da metodologia evolucionária devido ao tempo despendido para estas simulações (duas simulações - "shortcut" e rigorosa - mais a planilha de custos). Estes métodos apresentam ainda o inconveniente de serem dependentes da estrutura inicial sintetizada. Se esta estrutura não estiver próxima da ótima irá necessitar de um maior número de evoluções e de trabalho despendido. Porém, uma vez que o método não pode garantir sistematicamente que o ótimo seja encontrado (por não ser rigoroso no sentido matemático), uma estrutura inicial muito inferior ao custo ótimo pode levar à evolução de um "ótimo local" e não a um "ótimo global".

Na modificação de estruturas para a análise de evoluções denomina-se ótimo local às evoluções resultantes da alteração de posição entre duas tarefas de separação (ou dois separadores), mantendo-se as demais inalteradas tanto quanto possível (cf. figura IV.1), como ocorre no trabalho evolucionário proposto por Stephanopoulos e Westerberg (1976) e Seader e Westerberg (1977).

Quando ocorre uma evolução acompanhada de uma substancial alteração das posições relativas entre as tarefas de separação, esta evolução é dita global. O método de Nath e Motard (1981) baseia-se em evoluções globais. Este tipo de síntese exige, em geral, um número maior de avaliações de estruturas do que o anterior.

Os métodos evolucionários baseiam-se nos seguintes passos:

- Parte-se de uma seqüência gerada pela aplicação de heurísticos ordenados.
- Modifica-se esta seqüência segundo a aplicação de regras e estratégias.
- Comparam-se as seqüências geradas com as iniciais, prosseguindo até que não haja mais minimização da função objetivo (normalmente custo).

Método Evolucionário de Seader e Westerberg (1977)

Utiliza-se primeiramente o heurístico ordenado proposto (vide item IV.2.2).

Obtém-se fluxogramas "vizinhos" aplicando-se então a regra evolucionária :

"Trocar a posição relativa entre dois separadores ou tarefas de separação adjacentes, mantendo as demais inalteradas".

A figura IV.1 ilustra o processo de modificação local em uma estrutura, no caso, invertendo as posições entre os separadores 2 e 3 (onde, 1 a 4 representam os separadores ou as tarefas de separação A/B; B/C; C/D; D/E e E/F, respectivamente). Os índices I e II representam dois métodos de separação distintos, a destilação convencional e a destilação extrativa.

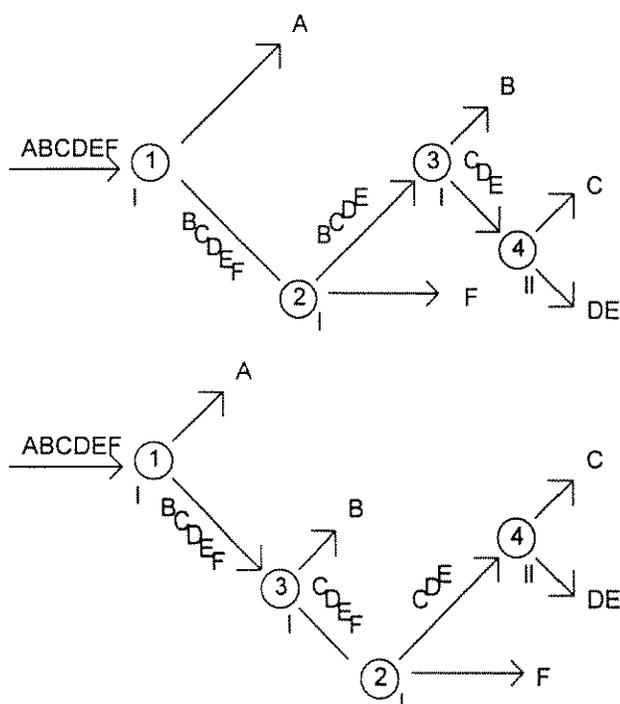


Figura IV.1 - Variação estrutural local - inversão entre os separadores 2 e 3

Para a aplicação do heurístico ordenado e da regra supracitada, define-se a seguinte estratégia :

1- Utilizar o heurístico ordenadamente gerando uma seqüência inicial. Se algum entre eles não for aplicável passa-se, então, ao imediatamente posterior.

2- Considerar todos os fluxogramas vizinhos possíveis a partir do inicial, através de modificações locais. Com estes fluxogramas potenciais, gerar seqüencialmente uma lista daqueles fluxogramas que poderiam ser considerados, se fosse admitido algum relaxamento das regras heurísticas utilizadas ou se a aplicação de um heurístico leva à escolhas praticamente equivalentes. Considerar a ordem desta lista de seqüências potenciais partindo daquelas que foram selecionadas a partir dos primeiros até os últimos heurísticos ordenados.

Ex: Aplicando o heurístico S4 "Realizar as separações fáceis primeiro" a volatilidade relativa entre duas separações - p.ex. A/BCD e ABC/D - são próximas, então as duas podem ser consideradas.

Se houver uma diferença substancial mas a quantidade de um dos produtos é muito maior do que o outro (heurístico C1) então esta separação pode ser considerada como um fluxograma potencial, logo após a primeira.

3- Avaliar progressivamente cada fluxograma potencial gerado na etapa 2 até que um melhor fluxograma seja encontrado em relação ao inicial (utilizando a função objetivo TAC). Quando isto ocorre, aplicar neste fluxograma a mesma estratégia do passo 2, considerando possíveis vizinhos gerados a partir dele e realizando uma nova lista ordenada.

4- Após examinar os fluxogramas que evoluíram, se houverem, seguir na avaliação das demais seqüências potenciais geradas pela lista do passo 2 aplicando a cada uma o passo 3 até que nenhuma evolução ocorra após a análise de todos os casos possíveis.

A figura IV.2 ilustra o procedimento. Os círculos negros representam as evoluções; os pontilhados, os vizinhos gerados destas evoluções e os círculos com linha cheia, os fluxogramas que não resultam em evoluções após sua avaliação econômica. As linhas pontilhadas representam o processo de obtenção de vizinhos e as linhas cheias representam o processo de avaliação de custos. No exemplo, o fluxograma inicial (0) gera 3 vizinhos em ordem de importância: 0,1; 0,2 e 0,3. Destes, serão avaliados dois: 0,1 e 0,3 que foram considerados potenciais pela possibilidade de relaxamento das regras heurísticas. O primeiro da lista é avaliado (custo) e resulta na evolução 1. Novamente, geram-se os vizinhos (1,1 e 1,2) dos quais somente um foi avaliado e não gera evolução. Se 1,2 fosse avaliado o processo continuaria até que não houvessem mais evoluções. O próximo da lista é 0,3 que, após avaliado, resulta na evolução 2 que não pode gerar vizinhos. A seqüência 2 será, portanto, a escolhida.

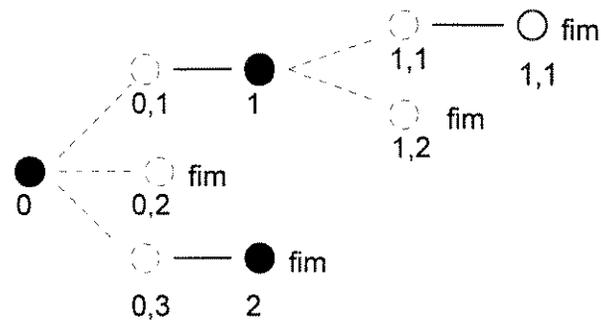


Figura IV.2 - Síntese Heurística Evolucionária

IV.2.4 - MÉTODOS HEURÍSTICO - ALGORÍTMICOS

São métodos que empregam o uso de heurísticos para diminuir o número de alternativas a serem calculadas por um programa de computador. Os trabalhos recentes apontam para o uso de estratégias algorítmicas ou evolucionárias onde apenas poucos heurísticos, de reconhecida aplicabilidade geral, são ordenados e utilizados, para reduzir a gama de alternativas de pesquisa, com um risco muito menor de ocorrerem falhas, proporcionando uma confiabilidade suficiente. Apresenta-se a seguir dois exemplos de funções heurísticas utilizadas nos métodos algorítmicos.

A Função Preditiva de Gomez e Seader (1976)

Em seu procedimento denominado "Pesquisa Ordenada Baseada em Preditor ("Predictor-based Ordered Search"), Gomez e Seader propõem que uma tarefa de separação seja avaliada por seu Custo Total Anual somado a todos os custos das separações consecutivas, porém, somente dos componentes chave na ausência de não chaves, segundo uma função $G(j)$ tal que :

$$G(j) = TAC(j) + TAC^*(j) \quad (IV.6)$$

onde $G(j)$ é a função de Gomez e Seader

$TAC(j)$ é o custo total anual de uma determinada tarefa de separação

$TAC^*(j)$ é o custo estimado para as separações consecutivas na ausência de componentes não chave.

Isto significa obter um TAC não real mas que, segundo os autores, serve para avaliar a melhor tarefa de separação sem ter que pesquisar todas as separações possíveis. Bastará conhecer o custo da separação somado aos custos de todos os seus possíveis componentes chave, como se somente eles estivessem entrando nas colunas de destilação consecutivas, nas quantidades existentes na mistura.

Ex: Avaliar a melhor seqüência para 4 componentes segundo o preditor de Gomez e Seader. As possíveis tarefas de separação para a mistura ABCD são :

Grupo de 4 componentes : A/BCD ; AB/CD; ABC/D

Grupo de 3 componentes : A/BC ; AB/C ; B/CD ; BC/D

Grupo de 2 componentes ; A/B ; B/C ; C/D

Aplicando a função $G(j)$ à tarefa ABCD, deve-se examinar as três funções de Gomez possíveis :

$$G1(j) = TAC(A/BCD) + TAC(B/C) + TAC(C/D)$$

$$G2(j) = TAC(AB/CD) + TAC(A/B) + TAC(C/D)$$

$$G3(j) = TAC(ABC/D) + TAC(B/C) + TAC(A/B)$$

A tarefa de separação a ser escolhida será aquela em que $G(j)$ for menor.

Passa-se, então, aos grupos de 3 e 2 componentes sucessivamente, sintetizando a seqüência ótima com poucas análises. A seqüência ótima será aquela que apresentar a menor somatória das funções $G(j)$ para cada tarefa de separação.

A função preditiva de Gomez e Seader pode ser considerada um heurístico, uma vez que pretende apontar as separações ótimas sem uma comprovação matemática rigorosa que garanta a sua infalibilidade.

A Função Marginal de Modi e Westerberg

Baseado no trabalho de Gomez e Seader, Modi e Westerberg (1992) apresentaram duas funções heurísticas denominadas Vazão de Vapor Marginal - MV (Marginal Vapor Rate) e Custo Total Anual Marginal - MTAC (Marginal Total Anual Cost).

Tomando-se as três funções $G(j)$ mencionadas e subtraindo o termo:

$TAC(A/B) + TAC(B/C) + TAC(C/D)$, tem-se :

$$W1(j) = TAC(A/BCD) - TAC(A/B)$$

$$W2(j) = TAC(AB/CD) - TAC(B/C)$$

$$W3(j) = TAC(ABC/D) - TAC(C/D)$$

, a qual é a função marginal da tarefa de separação sendo obtida da função preditiva de Gomez e Seader levando, no entanto, a uma avaliação de seqüências ainda menor.

No seu trabalho, Modi e Westerberg compararam o uso da função TAC, obtida a partir de análises "shortcut", com a somatória das vazões de vapor no topo da coluna - VRT, sugerida por Rod e Marek (1959), adaptando-as para o conceito de função marginal, como o ilustrado acima. Compararam os resultados obtidos com a aplicação de outros heurísticos demonstrando que o método por eles desenvolvido tem confiabilidade suficiente para ser utilizado para a geração de seqüências iniciais, estimativas e avaliações preliminares.

Pode-se definir o heurístico apresentado como segue :

"A seqüência mais econômica é aquela que possui a menor taxa marginal de vapor ou o menor custo total anual marginal".

Para o uso com a vazão de vapor, apresenta a seguinte equação, que é a avaliação matemática da taxa de vapor, incorporada na função marginal previamente definida :

$$MV_{ik/hk} = \Lambda \sum_{i=l}^{lk-1} \frac{\alpha_i f_i}{\alpha_i - \Phi} - (\Lambda - 1) \sum_{i=l}^{lk-1} f_i + (1 - \Lambda q) \sum_{i=l}^{lk-1} f_i + \Lambda(1 - q) \sum_{i=hk+1}^h f_i - \Lambda \sum_{i=hk+1}^h \frac{\alpha_i f_i}{\alpha_i - \Phi} \quad (IV.7)$$

$MV_{ik/hk}$ é a função marginal para uma tarefa específica de separação em termos da vazão de vapor

α_i é a volatilidade relativa do componente i

i é uma tarefa de separação

Λ = RR / RRmin

q é a condição térmica de alimentação

f_i é a vazão molar do componente na alimentação

Φ é a raiz da equação de Underwood (vide Anexo IV)

Restrições : Os autores aconselham o uso desta função para as misturas próximas da idealidade, ou seja, àquelas cujas volatilidades relativas são fracamente dependentes da pressão, da temperatura e da composição.

IV.2.5 - MÉTODOS ALGORÍTMICOS

São aqueles que determinam matematicamente a melhor seqüência de destilação, utilizando um computador. Normalmente, analisam uma grande quantidade de combinações ou todas, requerendo o uso de computadores de grande porte. Compõem-se de uma função objetivo que deve ser minimizada através de procedimentos de programação matemática, linear ou não linear. Tal função é composta por correlações obtidas através de simulações ("shortcut" e rigorosas) entre as variáveis de processo e o custo da separação.

A capacidade de avaliarem um grande número de combinações pode ser considerada como uma vantagem em relação aos demais, garantindo, em teoria, a obtenção da seqüência ótima. A desvantagem, porém, é que para poderem ser implementados, necessitam basicamente de análises e equações "shortcut", as quais podem não representar convenientemente a separação, particularmente se aplicadas em processos de obtenção de misturas multicomponentes em separações "sloppy", devido à influência da razão de refluxo na distribuição dos produtos. É possível utilizar análises rigorosas para compor a função objetivo e as diversas equações que relacionam custos com variáveis operacionais, no entanto, isto requer um maior trabalho e, mesmo assim, nenhum dos trabalhos verificados em literatura apresentou a otimização rigorosa do número de estágios (ou razão de refluxo) e posição de alimentação. O número de estágios foi sempre apontado por uma análise "shortcut" além de diversas outras simplificações particulares de cada trabalho.

Destacam-se os recentes trabalhos com formulações MINLP ("Mixed Integer Non Linear Programming") aplicadas à processos multialimentados e multiproduto.

IV.3 - APLICAÇÃO DE UMA METODOLOGIA DE SÍNTESE

É objetivo da metodologia proposta por este trabalho a obtenção de uma estrutura ótima de destilação a partir de uma mistura multicomponente inicial e da definição dos produtos desejados e suas especificações. Neste contexto, torna-se necessário utilizar algum método de síntese que permita uma busca eficiente entre o universo de combinações possíveis de colunas, para que a otimização rigorosa recaia sobre um conjunto bastante menor, minimizando o tempo e o trabalho sem sacrificar a qualidade do resultado obtido, em termos econômicos.

É interessante notar que na literatura a lista ordenada de seqüências é sempre obtida pela avaliação "shortcut" de cada coluna. Conforme é visto nas tabelas IV.1 e IV.2 e no capítulo V, isto poderá levar à resultados incorretos.

IV.3.1- Definição do Problema - *Alcanos 4*

COMPONENTE	ALIMENTAÇÃO	PUREZA DESEJADA
(A) PENTANO	30 Kmol / h	98,0 %
(B) HEXANO	25 Kmol / h	99,0 %
(C) HEPTANO	15 Kmol / h	99,5 %
(D) OCTANO	30 Kmol / h	98,0 %

Figura IV.3 - Composição de alimentação

As cinco possíveis seqüências para a separação da mistura (figura IV.3) são :

- 1) **A,B,C,D -----> A + B,C,D -----> B + C,D -----> C + D seqüência direta**
- 2) **A,B,C,D -----> A,B + C,D -----> A + B
-----> C + D**
- 3) **A,B,C,D -----> D + A,B,C -----> C + B,A -----> B + A seqüência indireta**
- 4) **A,B,C,D -----> A + B,C,D -----> D + B,C -----> B + C**
- 5) **A,B,C,D -----> D + A,B,C -----> A + B,C -----> B + C**

Os métodos de síntese necessitam avaliar as seqüências por alguma função objetivo que possa compara-las adequadamente. No caso das funções objetivo apresentadas na literatura e estudadas nesta metodologia, é necessário utilizar uma análise "shortcut" ou rigorosa para obtê-las.

Realizando-se um projeto preliminar para cada seqüência através da análise "shortcut" e admitindo-se que:

Razão de refluxo = 1,2 vezes RR_{min} (Underwood)
Recuperação dos componentes chave = 0,9990

, obtem-se o número de estágios através da equação de Gilliland (1940) e a posição da alimentação pelo método de Kirkbride (1944) utilizando o simulador PRO/II (Simulation Sciences, 1992). O diâmetro da coluna é calculado com base nas condições de topo, segundo a equação VI.27. A definição das variáveis de projeto e operação das colunas permite a sua avaliação econômica através da função TAC, conforme detalhado no capítulo VI.

Os resultados obtidos são mostrados na tabela IV.1.

Tabela IV.1 - Avaliação preliminar das seqüências possíveis

Seqüência		1	2	3	4	5
	$\sum VR / F_0$	1,9560	2,1856	2,5736	2,0814	2,2872
Função Objetivo	$\sum RR$	6,182	5,035	2,233	3,702	3,028
	$\sum Q_r$	1,4891	1,6462	1,9321	1,5764	1,7373
	TAC tr (US\$)	254.508	277.085	316.402	266.787	287.902

Verifica-se uma variação de 20% entre o pior e o melhor caso (relativa ao pior caso) para o Custo Total Anual, sendo a seqüência direta a mais econômica, ordenando-se 1,4,2,5,3. Este resultado só não é apontado pela função objetivo dada pela somatória das razões de refluxo.

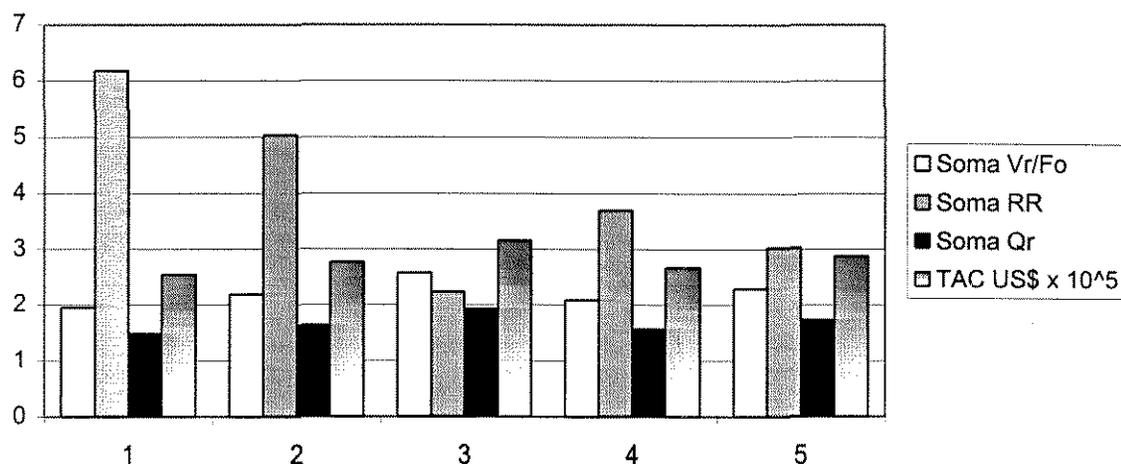


Gráfico I - Avaliação preliminar para as seqüências 1 a 5

Tabela IV.2 - Avaliação rigorosa das seqüências possíveis

Seqüência		1	2	3	4	5
	$\sum VR / F_0$	2,5970	2,3910	3,0690	2,7510	3,0720
Função Objetivo	$\sum RR$	9,0580	6,3565	2,9958	5,7364	4,7921
	$\sum Q_r$	1,9290	1,8014	2,3040	2,0399	2,2947
	TAC tr (US\$)	319.026	299.555	368.067	333.930	366.965

A ordem correta, que deveria ser obtida, é dada pela tabela IV.2 sendo 2,1,4,5,3. A segunda seqüência avaliada pela tabela IV.1 em terceiro lugar é, na realidade, a primeira, seguida pela mesma ordem apontada pela avaliação "shortcut". As demais funções objetivo, exceto RR, concordam com esta ordem.

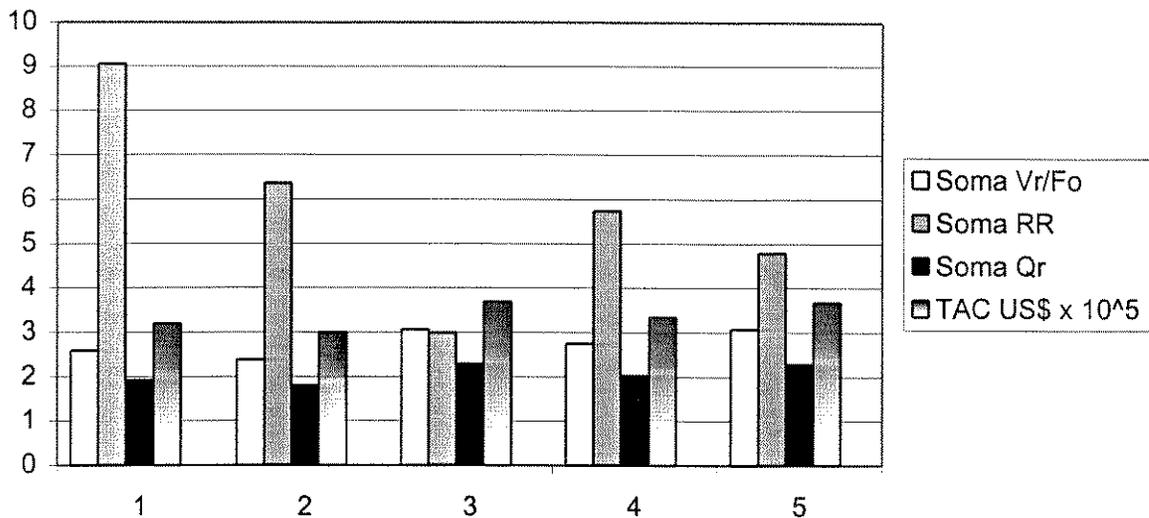


Gráfico II - Avaliação Rigorosa das Sequências 1 a 5

Propriedades da Alimentação

Muitas regras heurísticas baseiam-se nas propriedades dos componentes da mistura líquida a ser separada, como as volatilidades relativas e as diferenças entre pontos de ebulição.

Realizou-se uma simulação com um estágio em equilíbrio de fases (flash) para a corrente de alimentação, obtendo-se a composição de equilíbrio na fase vapor para cada componente a 760 mmHg abs e no ponto de bolha da mistura.

$$\alpha_{i,j} = K_i / K_j = (y_i / x_i) / (y_j / x_j)$$

$$\alpha_{A,B} = 2,63$$

$$\Delta t_{A,B} = 32,67 \text{ } ^\circ\text{C}$$

$$\alpha_{B,C} = 2,60$$

$$\Delta t_{B,C} = 29,69 \text{ } ^\circ\text{C}$$

$$\alpha_{C,D} = 2,56$$

$$\Delta t_{C,D} = 27,24 \text{ } ^\circ\text{C}$$

Observação: Na literatura, a volatilidade relativa obtida para a mistura de alimentação é aplicada para todas as colunas da seqüência. Tal tratamento é coerente com a utilização do método simplificado de Fenske, uma vez que assume-se a constância da volatilidade relativa ao longo da coluna. Na prática, entretanto, a volatilidade relativa entre os componentes varia com a composição da mistura. Isto significa que irá variar prato a prato e coluna a coluna na seqüência, efeito que pode ser ou não significativo, conforme a mistura considerada. Para uma determinação mais apropriada, seria interessante avaliar as propriedades para a alimentação, topo e fundo de cada coluna.

A correção sugerida é :

$$\alpha_{lk,hk} = \left(\alpha_{o lk,hk} \cdot \alpha_{d lk,hk} \cdot \alpha_{b lk,hk} \right)^{1/3} \quad (IV.8)$$

onde, F,D e B são as correntes de alimentação, topo e fundo respectivamente.

No entanto, a obtenção destas volatilidades a partir de simulações é trabalhosa e consome muito tempo, a menos que uma equação matemática possa ser utilizada, como a sugerida por Barduhn (1987).

Nesta metodologia, utilizou-se a avaliação da mistura de alimentação da seqüência, como realizado na literatura, por tratar-se de uma mistura de alcanos. Sugere-se, no entanto, o estudo destas correções para verificação de sua performance na síntese de seqüências.

IV.3.2 - ANÁLISE HEURÍSTICA

IV.3.2.1 - AVALIAÇÃO DOS HEURÍSTICOS ISOLADOS E ORDENADOS

D3) A aplicação isolada deste heurístico conduz diretamente à seqüência ótima, segundo a análise "shortcut", mas que não é a verdadeira, segundo a tabela IV.2, onde se utiliza a análise rigorosa. Podem-se considerar similares, tanto as composições molares de alimentação, quanto as volatilidades relativas similares entre os componentes, o mesmo se dá entre os pontos de ebulição.

D5) A aplicação deste heurístico conduz à seqüência direta (1), como verificado no projeto das seqüências, utilizando a análise "shortcut" (tabela IV.1) e à seqüência 2 utilizando a análise rigorosa.

S4) A rigor, não pode ser aplicado devido ao fato de que as volatilidades relativas e as diferenças entre os pontos de ebulição são muito próximas entre os pares de componentes, podendo haver uma diferente ordenação se considerarmos a variabilidade de composições entre o início e o final da seqüência, como observado no item IV.3.1. A aplicação, no entanto, conduz à seqüência direta (1), como mostrado abaixo :

- 1) **A / B** é escolhida pela volatilidade relativa e pela diferença entre os pontos de ebulição obtendo :

Primeira coluna: **A + B,C,D**

2) **B / C** idem, obtendo :

Segunda coluna: **B + C,D** e, conseqüentemente, **C + D** na terceira
coluna

A seqüência resultante é a seqüência direta (1): **A+B,C,D ----->B+C,D -----> C+D**

S5) Ordenando as separações pelo CES obtêm-se :

Alimentação : A=30 , B=25 , C=15 , D = 30 Kmol / h

Especificou-se igualmente todas as separações com $r_k = r_{hk} = 0,9990$.

Separações possíveis para a primeira coluna :

A / B,C,D;

$D \cong 30$; $B \cong 70$ Kmol / h

$CES_{A/BCD} = 32,67 * 30 / 70 = 14,0$

ou $100 (2,63 - 1) * 30 / 70 = 69,9$

AB / CD

Fazendo $d_A = 30$ Kmol/h e $d_D = 0$; $d_B = r_B * f_B = 0,999 * 25 = 24,975$

$d_C = f_C - b_C = 15 - 0,999 * 15 = 0.015$ Kmol/h

então : $D \cong 55$ e $B \cong 45$ Kmol / h

$CES_{AB/CD} = 29,69 * 45 / 55 = 24,3$

ou $100 (2,60 - 1) * 45 / 55 = 130,9$

ABC / D

$D \cong 70$; $B \cong 30$ Kmol / h

$CES_{ABC/D} = 27,24 * 30 / 70 = 11,7$

ou $100 (2,56 - 1) * 30 / 70 = 66,9$

Obtem-se, assim, a seqüência número 2, que é a melhor pela análise rigorosa e a terceira melhor entre as cinco na análise "shortcut".

A, B + C,D -----> A + B
-----> C + D

S6) O Coeficiente de Dificuldade de Separação pode ser utilizado para sintetizar uma seqüência inicial, servindo de base para um método evolucionário. A aplicação deste heurístico conduz à seguinte seqüência :

Determinação do CDS para a primeira separação :

A / B,C,D

$$\alpha_{A,B} = 2,63$$

Especificando $r_{lk} = r_{hk} = 0,999$ para todas as separações a fim de compara-las:

$$N_s \text{ min} = 14,3$$

$$D \cong 30 ; B \cong 70 \text{ Kmol / h}$$

$$\text{CDS} = 14,3 * 30 / 100 * (1 + 40 / 100) = 6,0$$

AB / CD

$$\alpha_{B,C} = 2,60$$

$$D \cong 55 \text{ e } B \cong 45 \text{ Kmol / h}$$

$$N_s \text{ min} = 14,5$$

$$\text{CDS} = 14,5 * 55 / 100 * (1 + 10 / 100) = 8,8$$

A,B,C / D

$$\alpha_{C,D} = 2,56$$

$$B \cong 30 ; D \cong 70 \text{ Kmol / h}$$

$$N_s \text{ min} = 14,7$$

$$\text{CDS} = 14,7 * 70 / 100 * (1 + 40 / 100) = 14,4$$

Conclusão: A separação inicial apontada é **A / B,C,D** . Prosseguindo :

B / CD Considerando o mesmo $\alpha_{B,C}$

$$D \cong 25 ; B \cong 45 \text{ Kmol / h}$$

$$N_s \text{ min} = 14,5$$

$$\text{CDS} = 14,5 * 25 / 70 * (1 + 20 / 70) = 6,7$$

B,C / D

$$D \cong 40 ; B \cong 30 \text{ Kmol / h}$$

$$N_s \text{ min} = 14,7$$

$$\text{CDS} = 14,7 * 40 / 70 * (1 + 10 / 70) = 9,6$$

A seqüência preliminar encontrada é a seqüência direta (1).

C1) Os componentes A, B e D podem ser considerados equivalentes diante deste heurístico, indicado quando há a predominância de um dos componentes na alimentação. Tomando-se os componentes A e D com 30 Kmol/h na alimentação tem-se :

- A) A / B,C,D seguido de D / B,C e B / C que é a seqüência número 4, a terceira melhor pela análise rigorosa e a segunda melhor pela análise "shortcut".
- B) D / C,B,A seguido de A / B,C e B / C que é a seqüência número 5, a pior seqüência, juntamente com a terceira.

A aplicação deste heurístico, portanto, não alcança um bom resultado.

C2) Liu et al. (1987) considera este heurístico como predominante, inclusive aos heurísticos S4, e D3, incluindo-o em seu método ordenado (Nadgir e Liu, 1983). Sua aplicação conduz diretamente à seqüência número 2, com A,B / C,D ocorrendo 55 e 45 Kmol/h nos produtos de topo e fundo, respectivamente, a situação mais equimolar possível. O heurístico S5, também baseado neste, apresenta o mesmo resultado, enquanto que S6, fracamente baseado (o terceiro termo da equação, fazendo-se $D = B$), já não é concordante. Portanto, a aplicação isolada deste heurístico conduz à seqüência número 2, a melhor segundo a análise rigorosa e a terceira melhor segundo a análise simplificada.

Método ordenado de Nadgir e Liu :

M1 - já considerado; M2 - já considerado; D1 - não se aplica; S1 - não se aplica;

S2 - não se aplica; C1 - não há um componente predominante;

C2 - Leva à seqüência número 2, a melhor segundo a análise rigorosa e a terceira segundo a análise simplificada.

Método ordenado de Seader e Westerberg :

M1,M2,S7 e S8 - já considerados;

S4, S3 - a rigor não podem ser aplicados, uma vez que as volatilidades relativas entre as espécies não variam consideravelmente;

C1 - não há um componente predominante;

D3 - leva à escolha da seqüência 1, a melhor no modo simplificado e a segunda melhor no modo rigoroso;

M3 - não se aplica

Aplicabilidade das regras heurísticas individuais e ordenadas.

No caso estudado, não houveram muitos heurísticos conflitantes, o que facilitou sobremaneira sua aplicação.

A primeira conclusão é que a solução exata do problema (a seqüência número 2) não pode ser universalmente obtida pela aplicação isolada ou ordenada dos heurísticos, como já esperado. Observa-se que o heurístico D5 conduz à diferentes respostas conforme a análise realizada: a seqüência direta (1) na análise simplificada e a seqüência 2 na rigorosa. Os heurísticos D3, S4 e S6 conduzem somente à seqüência direta e os heurísticos C2 e S5 conduzem somente à seqüência 2, que é a solução correta, dada pela tabela IV.2.

Pode-se considerar que os resultados obtidos foram excelentes, uma vez que as duas primeiras seqüências corretas (segundo a análise rigorosa) foram apontadas.

Entretanto, o trabalho aqui realizado não pretende parar na etapa da análise rigorosa mas realizar a otimização das seqüências selecionadas. Como se verifica na tabela V.60 a seqüência ótima final é a primeira e como se verifica no capítulo VI a análise heurística baseada em análise simplificada poderá ser satisfatória para a obtenção da lista ordenada inicial de seqüências. Um subgrupo composto de duas ou mais seqüências selecionadas incluiria as seqüências 2 e 1, correspondentes às duas primeiras posições da análise rigorosa inicial (tabela V.55) e a seqüência ótima final (tabela V.60), que é a primeira, obtida após a otimização das cinco combinações possíveis.

Para o exemplo escolhido, verificou-se a análise feita por Liu et al. (1987) indicando a predominância de C2 sobre D3. O método ordenado de Nadgir e Liu (1983) apontaria o resultado correto, o qual, apesar de não ter sido concebido originalmente para ser evolucionário, permite a aplicação de evoluções, como o método apresentado por Stephanopoulos e Westerberg (1976) e Seader e Westerberg (1977).

IV.3.2.2 - APLICAÇÃO DO MÉTODO HEURÍSTICO EVOLUCIONÁRIO DE SEADER E WESTERBERG

1) Obter a seqüência inicial aplicando os seguintes heurísticos ordenados :

- 1- M1,M2,S7 e S8 simultaneamente .
- 2- S4,S3
- 3- C1
- 4- D3
- 5- M3
- 6- D1

Comentários sobre a aplicação de cada passo (1 a 6):

1- Só a destilação ordinária será considerada (M1), permitida por S7. Não será avaliada neste trabalho a extração líquido-líquido, permitida aqui por S8. A refrigeração direta no condensador não é considerada (M2), porém, utilizou-se quando necessário, água resfriada a 4 °C, considerando, por simplificação, o seu custo equivalente à água de resfriamento normal (vide capítulo VI).

2 - Verificou-se que as volatilidades relativas entre os componentes são similares, não havendo uma separação mais fácil ou mais difícil. Serão desprezados.

3 - Não há uma predominância de composição para os componentes da mistura inicial. O heurístico não deverá ser aplicado inicialmente, há porém uma potencialidade de aplica-lo nas evoluções posteriores à síntese inicial.

4 - Utilizando a análise "shortcut", D3 favorece a seqüência direta, originando a síntese inicial para este método evolucionário.

5 e 6 - M3 e D1 não se aplicam.

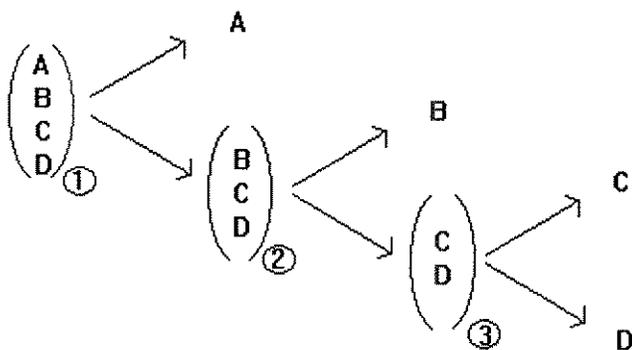


Figura IV.4 - Seqüência inicial: Seqüência Direta

2) Considerar os fluxogramas vizinhos :

Trocar : A/B com B/C (1 e 2) e B/C com C/D (2 e 3)

Análise :

Do ponto de vista dos heurísticos S4 e C1 as separações A/B e B/C são equivalentes; conforme a regra evolucionária número 2, a modificação deve ser pesquisada. O mesmo se dá entre B/C e C/D. A escolha inicial pode ser qualquer uma. Trocando-se as separações A/B e B/C, obtem-se o fluxograma da figura IV.5.

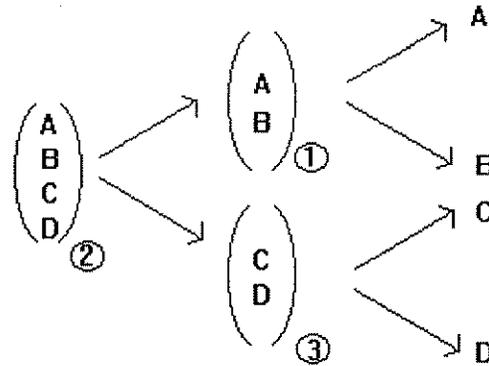


Figura IV.5 - Primeira evolução - seqüência número 2

3) A análise rigorosa de custos desta opção mostra que houve uma evolução, enquanto que a análise simplificada aponta o inverso, conforme as tabelas IV.1 e IV.2. A pesquisa, portanto, não deverá continuar, uma vez que a utilização da análise simplificada é desejada nesta metodologia. Se houver uma continuação o único vizinho possível será a troca de B/C com C/D, obtendo-se a seqüência indireta, número 3.

A,B,C,D -----> D + A,B,C -----> C + B,C -----> B + C seqüência indireta

Segundo as tabelas IV.1 e IV.2 nenhuma evolução foi alcançada.

4) Prosseguindo, a próxima alternativa a ser avaliada é a troca entre B/C (2) com C/D (3) na figura IV.4. O que conduz à seqüência número 4, sem evolução.

A,B,C,D -----> A + B,C,D -----> D + B,C -----> B + C

Resultado da aplicação do método

Se o método evolucionário de Seader e Westerberg for utilizado para obter o subgrupo inicial de seqüências este subgrupo pode assim ser ordenado :

Rigorosamente : **S = { S2, S1, S4, S3 }**

Simplificadamente **S = { S1, S4, S2 }**

Os sub-grupos obtidos atendem ao objetivo proposto selecionando as melhores seqüências, exceto S3, selecionada pela análise rigorosa. Ocorre, no entanto, que, dependendo da análise utilizada, a lista ordenada obtida será distinta.

- Caso 1

Supondo-se que nenhuma otimização seja feita posteriormente, como verificado em muitos trabalhos desenvolvidos na literatura, então o grupo apontado pela análise simplificada induzirá à uma escolha errada porque a ordem apontada não será obtida quando o projeto for realizado com o número de estágios sugerido (tabela IV.2). As razões de refluxo resultantes serão bastante diferentes das apontadas na análise "shortcut" (ex. tabela V.58) causando a alteração da lista ordenada.

A respeito da aplicação dos heurísticos, observa-se que o heurístico C2 indica melhor a seqüência ótima do que D3 para elevadas razões de refluxo, o que ocorreu na análise rigorosa sem otimização. Porém, para baixas razões de refluxo, como no caso inicial (análise "shortcut") e no caso otimizado, D3 apresenta melhor performance.

- Caso 2

O subgrupo de seqüências obtido deverá sofrer uma otimização posterior para a escolha da melhor seqüência.

Neste caso, verificar-se-á nos capítulos V e VI que a análise simplificada pode ser utilizada com vantagens para identificar o subgrupo de seqüências que poderão apresentar a melhor performance após um procedimento de otimização. Isto ocorrerá sempre que as razões de refluxo obtidas para as seqüências otimizadas forem próximas às admitidas na análise simplificada (ainda que irreais para o número de estágios obtido), e os custos de operação prevaleçam sobre os custos de investimento nas colunas.

IV.3.2.3 - MÉTODO EVOLUCIONÁRIO BASEADO NA METODOLOGIA DE NADGIR E LIU

Utilizando o método ordenado de Nadgir e Liu (1983) com a estratégia evolucionária de Seader e Westerberg (1977), como sugerido por Liu et al. (1987) :

1) Ordenação de Heurísticos

- 1- M1
- 2- M2
- 3- D1
- 4- S1
- 5- S2
- 6- C1
- 7- C2 (S5)

Nem sempre C2 pode ser aplicado. É o caso de ter-se, por exemplo, três componentes em partes iguais, qualquer que seja a divisão (split) o resultado não será equimolar. Neste caso, o conceito de CES (S5) será utilizado.

Seqüência inicial obtida: A segunda, conforme a figura IV.5.

2) Fluxogramas vizinhos :

A partir da figura IV.5 trocar 2 com 1 e 2 com 3 formando a seqüência de separadores 1-2-3 e 3-2-1 (A/B, B/C, C/D e C/D, B/C, A/B }.

Se, somente a análise rigorosa for utilizada, nenhuma das alternativas apresentará evolução e o conjunto obtido será :

S = { S2, S1, S3 }, que corresponde às duas melhores seqüências e a pior.

Se a análise simplificada for utilizada, como é objetivo deste trabalho, então ocorrerá uma involução, isto é, de uma seqüência correta inicial será obtida a seqüência 1 levando à pesquisa de um novo vizinho, a seqüência 4, que não apresentará evolução. A ordem obtida será:

S = { S1, S4, S2, S3 }

Resultado da aplicação do método

O subgrupo obtido pela análise rigorosa indica as duas primeiras posições, segundo a análise rigorosa e o número de iterações será menor, uma vez que a seqüência correta é obtida de início. Utilizando a análise simplificada, o número de iterações aumenta obtendo-se um subgrupo satisfatório, porém maior.

Se a síntese de seqüências de destilação for desejada sem que posteriormente seja realizada a otimização dos custos operacionais ou, possivelmente, para uma otimização onde a razão de refluxo desejada seja elevada, o uso do método de Nadgir e Liu parece ser indicado, junto à análise rigorosa das seqüências, que é muito mais trabalhosa do que a simplificada mas apresentará ao final do processo a lista ordenada real.

Se uma otimização for realizada posteriormente, reduzindo a razão de refluxo até os valores assumidos na análise simplificada, verifica-se pela análise realizada no capítulo VI, item VI.5.3, que haverá uma similaridade entre os custos previstos pela análise simplificada e a otimização final obtida, preferindo-se então a utilização do método de Seader e Westerberg (1977) o qual conduzirá à um número menor de iterações.

IV.3.3 - CONCLUSÃO

Realizou-se neste capítulo um estudo de todos os heurísticos existentes, de dois métodos ordenados e de uma estratégia evolucionária.

Muito embora existam outros métodos ordenados e evolucionários que também poderiam ser apresentados e analisados aqui, os resultados alcançados indicam que, de modo geral, um método heurístico evolucionário pode servir adequadamente para gerar um conjunto de seqüências iniciais que sofrerão uma otimização rigorosa posterior.

Em muitos trabalhos da literatura é normal que a síntese de uma seqüência de destilação seja feita com base em análises simplificadas. Viu-se aqui que os resultados obtidos não são satisfatórios pois, se o projeto das colunas for feito pelo número de estágios indicado neste tipo de análise, ocorrerá um grande aumento da razão de refluxo, como indicado na tabela V.57 (capítulo V) e o TAC obtido não deverá ser o ótimo. Isto significa que os trabalhos em literatura baseados exclusivamente nesta análise são conceitualmente errados, mesmo para misturas aproximadamente ideais como a de alcanos. Só há sentido em utilizar-se a análise simplificada quando será realizada uma otimização rigorosa posterior das colunas das seqüências pré-selecionadas, como apresentado neste trabalho.

A tabela A.1.4.3 (anexo 1) indica que a ordem obtida após a otimização de todas as estruturas é : 1,4,2,5,3 que coincide com a obtida pela análise simplificada e o método de Seader e Westerberg (1977). O prevailecimento de C2 sobre D3 com o aumento da razão de refluxo, necessita ser comprovado com o estudo de um maior número de casos, podendo indicar a conveniência do método de Nadgir e Liu (1983) para estudo de casos não otimizados ou com maiores razões de refluxo do que a assumida na análise "shortcut" inicial, juntamente à uma estratégia evolucionária e à uma análise rigorosa.

No capítulo V será visto que a utilização da análise "shortcut" para a síntese de seqüências de destilação só é recomendada quando for realizada uma otimização rigorosa posterior, de modo que a razão de refluxo admitida na análise simplificada coincida com a da seqüência otimizada final. Isto porque, sendo de modo geral predominantes os custos operacionais, ocorrerá então uma similaridade de custos entre a análise simplificada e a otimizada; não ocorrerá, porém, uma similaridade de projeto (N_s e Φ).

A metodologia de síntese utilizada neste trabalho para a escolha do sub-grupo inicial de seqüências pode ser resumida nas seguintes etapas:

- Definição do problema de separação.
- Obtenção de volatilidades relativas e/ou pontos de bolha dos componentes na mistura inicial.
- Aplicação do método evolucionário de Seader e Westerberg.
- Avaliação de TAC tr por análise "shortcut", considerando $RR = 1,2$ a $1,3$ RR_{min} ; $r_{ik,hk} = 0,999$ mais as purezas desejadas para os produtos puros ou semi-puros. A faixa ótima de razões de refluxo obtida deverá ser similar à admitida na análise simplificada, se não for, deve-se reiniciar o procedimento.
- Obtenção do grupo de seqüências sub-ótimas a ser investigado.

Capítulo V

OTIMIZAÇÃO DE SEQÜÊNCIAS DE DESTILAÇÃO

V.1 - INTRODUÇÃO

As atividades envolvidas no projeto e na otimização de colunas de destilação podem se tornar extremamente complexas se não houver um critério que permita selecionar as variáveis que são importantes para a otimização e proporcionar a efetivação de possíveis simplificações.

Conforme abordado no capítulo III, verifica-se nos trabalhos desenvolvidos na literatura que a otimização de variáveis operacionais e de projeto, ou não é realizada durante a síntese de uma seqüência, ou é abordada a partir de análises simplificadas, como as de Fenske, Underwood e Kirkbride. Observa-se também que a otimização das especificações realizadas nas colunas, particularmente a recuperação entre os componentes chave, não é realizada em trabalhos que envolvem a separação "sharp". É usual que na literatura uma seqüência seja projetada a partir de duas especificações de recuperação para os componentes chave em cada coluna. Isto é limitante ao projeto pois, em muitos casos, deseja-se fixar a composição de saída dos produtos.

Neste capítulo, propõem-se uma metodologia para efetuar a otimização rigorosa e um projeto final para uma seqüência de colunas de destilação, para qualquer mistura multicomponente, resultando em produtos puros ou semi-puros e apresentando simplificações para o caso estudado: uma mistura de alcanos com três e quatro componentes. As combinações possíveis entre as seqüências são investigadas utilizando-se o Custo Total Anual (TAC), desenvolvido no capítulo VI, e que fornece uma estimativa realista dos custos operacionais e de investimento, e as somatórias das razões de refluxo, cargas térmicas de fundo e vazões de vapor, como funções objetivo.

Este capítulo é dividido em duas partes. Na primeira, é realizado um estudo preliminar, qualitativo, no intuito de fixar as bases para a metodologia apresentada. Para isto, uma mistura de três componentes é analisada em uma seqüência de duas colunas. Na segunda parte, item V.6, analisa-se quantitativamente cinco seqüências para a separação de quatro componentes, estabelecendo-se critérios e simplificações possíveis para o estudo da otimização. Os resultados obtidos são também utilizados no capítulo IV.

V.2 - ESPECIFICAÇÃO DOS PRODUTOS EM COLUNAS DE DESTILAÇÃO

Como visto no capítulo II, uma separação pode ser classificada do ponto de vista do processo em quatro categorias diferentes. Para cada uma delas existe um objetivo distinto quanto aos produtos obtidos, exigindo diferentes abordagens de síntese e otimização.

A especificação dos produtos em uma coluna está diretamente associada aos objetivos da separação. Se dois produtos são requeridos (topo e fundo), conforme visto no ítem II.6, serão necessárias duas especificações.

Neste trabalho, abordam-se as seqüências onde ocorrem a produção de produtos puros ou semi-puros através de separações "sharp" com uma alimentação multicomponente. O objetivo dos processos baseados neste tipo de separação é normalmente a pureza de um único componente e/ou o controle das impurezas em produtos, para comercialização, reciclo de processo ou para o reaproveitamento de matéria prima. A razão de não serem estudados os demais objetivos de separação está relacionada ao fato de que, para cada um, exige-se uma abordagem distinta.

É natural que a especificação de uma coluna de destilação, para a separação de uma alimentação multicomponente em produtos puros ou semi-puros esteja baseada na especificação de pureza (fração molar do componente). Como se observa no capítulo III, não é o que ocorre na literatura quanto à síntese de seqüências de destilação, utilizando-se, via de regra, o par recuperação / recuperação entre os componentes chave.

As duas especificações de produto requeridas para uma coluna podem ser :

Pureza do componente chave / Vazão de produto (topo ou fundo)

Pureza do LK / Pureza do HK

Pureza do componente chave / Pureza de um componente não chave (a limitar).

Pureza do componente chave / Recuperação do componente chave

Recuperação do LK / Recuperação do HK

Razão de Refluxo / Pureza do componente chave

Razão de Refluxo / Recuperação do componente chave

Apresenta-se no capítulo II (tabela II.3, caso 1) a opção de especificação do par razão de refluxo / pureza, obtendo-se Ns. Não será possível realiza-la neste trabalho, pois o simulador utilizado exige previamente a definição do número de estágios e da posição da alimentação.

V.2.1 - Recuperação Limite do Componente Chave

Sabe-se que a separação absoluta entre dois componentes é impossível, o que pode ser ilustrado pela equação de Fenske :

$$N_{s \text{ mín}} = \frac{\log \left[\left(\frac{d}{b} \right)_{lk} \cdot \left(\frac{b}{d} \right)_{hk} \right]}{\log \alpha_{lk,hk}} \quad (V.1)$$

para $b_{lk} \rightarrow 0$ e $d_{hk} \rightarrow 0$:

$$N_{s \text{ mín}} = \frac{\log \left[\left(\frac{d}{\rightarrow 0} \right)_{lk} \cdot \left(\frac{b}{\rightarrow 0} \right)_{hk} \right]}{\log \alpha_{lk,hk}}$$

portanto, $NS \rightarrow \infty$

Deve existir, portanto, um limite prático de recuperação de um componente tal que uma nova coluna seja requerida se a recuperação ou pureza desejadas forem superiores a ele, quer por razões de projeto, quer por razões econômicas.

Neste trabalho, esta questão é abordada apenas qualitativamente. Sugere-se que seja efetuada uma investigação posterior, para precisar mais adequadamente os limites de recuperação aos quais estão sujeitos os componentes chave.

Adotou-se o limite de 99,9 % de recuperação de um componente chave para uso em qualquer simulador comercial conforme analisado no item a seguir.

V.2.2 - Uso da Especificação de Vazões em Seqüências de Colunas

Objetivando-se avaliar a importância da escolha adequada das especificações, realizou-se uma simulação utilizando a especificação de vazão da corrente de produto e a pureza do componente desejado.

Verifica-se que, numa seqüência de colunas, a especificação de vazão (molar ou mássica) em uma corrente não é conveniente. As equações V.2 e V.3, provenientes de um balanço de massa na coluna, indicam que, especificando-se a vazão de topo ou fundo e um segundo parâmetro, o terceiro fica determinado, dado que a composição de alimentação é sempre conhecida.

$$B = f_i \cdot \frac{r_{ib}}{x_i} \quad (V.2) \quad \text{ou} \quad D = f_i \cdot \frac{r_{it}}{y_i} \quad (V.3)$$

A especificação de vazão e pureza (ou recuperação) para uma mesma corrente podem ser incompatíveis. Há dificuldades na convergência de uma simulação quando a variável não especificada (calculada), pureza ou recuperação, for maior ou muito próxima a 100 %, conforme se verificou em diversas simulações realizadas. A utilização da vazão como especificação também não permite o controle adequado do limite máximo de recuperação de um componente chave (aqui adotado como 99,9%) ou de sua pureza.

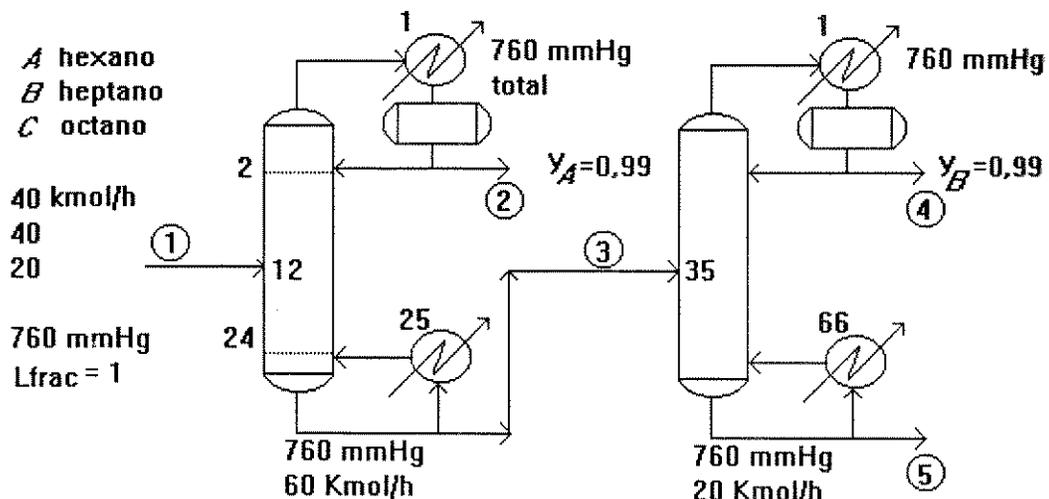
Observou-se nos casos simulados que a especificação da vazão acarreta diferentes valores de pureza ou recuperação em cada coluna da seqüência podendo ser impossível alcançar uma especificação de pureza ou recuperação definida em uma das colunas. Neste caso, não se obterá convergência na simulação. Isto pode ocorrer porque o componente não chave que passa de uma coluna para outra dificulta a tarefa de alcançar as especificações nas colunas posteriores da seqüência.

Uma simulação rigorosa realizada com este tipo de especificação ilustra as dificuldades mencionadas, conforme a figura V.1 e a tabela V.1.

Especificações:

Coluna 1 - pureza A = 99% ; vazão de fundo = 60 Kmol/h.

Coluna 2 - pureza B = 99% ; vazão de fundo = 20 Kmol/h.



VLE=SRK Entr=SRK Enth = SRK Dens (v)= SRK Dens (l)=API

Figura V.1 - Seqüenciamento Direto para três componentes

Tabela V.1 - Simulação Rigorosa para três componentes

	RR	y_A	y_B	x_C	r_A	r_B	r_C
coluna1	1,94	0,99	-----	-----	0,99	-----	-----
coluna2	1,54	-----	0,99	0,99996	-----	0,99	~ 1

A pureza obtida para o componente C no fundo da segunda coluna é muito maior que a dos demais produtos A e B. Haveria um consumo de energia maior se a pureza requerida para o componente C fosse igual às demais. Para conseguir-se uma pureza menor deve-se alterar o valor das especificações ou utilizar o par pureza / pureza na segunda coluna.

A recuperação do componente C na coluna 2 está acima do limite proposto (99,9%). Percebe-se que a especificação da vazão dificulta o controle do parâmetro "recuperação limite do componente chave".

Sobre o limite proposto, constatou-se nas simulações rigorosas realizadas que, acima de 99,95% de recuperação de um componente chave, ocorre um aumento exponencial da razão de refluxo necessária para um determinado número de pratos. Na análise "shortcut" ocorre um aumento exponencial do número de pratos requeridos. Isto significa que, acima de uma determinada recuperação, as tolerâncias utilizadas para a convergência e a incerteza nas predições de propriedades passam a ser importantes na simulação da coluna. Uma vez que, na prática, existe erro entre as propriedades estimadas e as reais, principalmente devido às impurezas na mistura, conclui-se que a utilização de limites de pureza ou recuperação elevados podem causar imprecisão nas simulações levando a resultados que, ou não poderão se alcançados na prática, ou serão economicamente inviáveis.

Adotou-se um limite de 99,9 % de recuperação do componente chave para todos os componentes na sequência devido ao fato de que, abaixo deste valor, o aumento observado da razão de refluxo com a recuperação do componente chave foi linear e porque verificou-se que todas as simulações convergiram para um número de estágios qualquer acima do mínimo teórico (Fenske).

A recuperação de um componente chave é a variável que define a quantidade deste componente que será retida na coluna em que é processado, ou, inversamente, é a variável que define a quantidade deste componente que passará para a coluna posterior. Ocorre, no entanto, que existe um limite para a passagem de um componente não chave para uma coluna posterior, onde ocorrerá a impossibilidade de se atingir a pureza especificada para o componente chave desta coluna. Esta quantidade limite, que é denominada não chave na coluna posterior leva à uma restrição de pureza dos componentes chave desta coluna dada por :

$$y_{lk \text{ MAX}|j} = 1 - \frac{f_{lk} (1 - r_{ilk}) |_{j-1}}{D_j} \quad (\text{V.4}) \quad , \text{ para uma separação direta em } j-1$$

$$x_{hk \text{ MAX}|j} = 1 - \frac{f_{hk} (1 - r_{bhk}) |_{j-1}}{B_j} \quad (\text{V.5}) \quad , \text{ para uma separação indireta em } j-1$$

Enunciando :

A máxima pureza permitida como especificação para o componente chave em uma coluna j é função da razão entre as variáveis de alimentação e recuperação do componente chave da coluna anterior e a vazão da corrente onde este componente é o principal produto.

Se um valor de pureza especificado em uma coluna posterior à primeira for superior ao dado pelas equações acima não haverá convergência nesta coluna, por impossibilidade matemática de uma solução. Nota-se pelas equações apresentadas, que à medida que um componente não chave proveniente da coluna anterior entra em uma coluna, ele vai limitando a pureza que pode ser obtida para o componente chave.

A utilização de qualquer outra variável que a recuperação de um componente chave não proporcionará o controle adequado dos limites de pureza e recuperação dos componentes na coluna posterior.

Aplicando-se para o problema da figura V.1 tem-se :

Coluna 1 :

$$r_A = \frac{y_A \cdot D}{f_A} = 0,99 \cdot 40 / 40 = 0,99 ; \text{ no topo}$$

$$D_2 = 40 \text{ Kmol / h}$$

Aplicando-se a equação (V.4):

$$y_{lk \text{ max}} = y_{B \text{ max}} = 1 - 40 (1 - 0,99) / 40 = 0,99$$

O valor especificado no exemplo foi o máximo possível para a pureza do componente B na segunda coluna. Se fosse especificado, 0,995 ocorreria que :

$$r_B = \frac{y_B \cdot D}{f_B} = 0,995 \cdot 40 / 39,6 = 1,005$$

no topo, o que é impossível pelo balanço de massa na coluna.

Mostrou-se por este exemplo simples que a especificação de vazão em uma seqüência de colunas pode levar à purezas ou recuperações indesejáveis para a convergência da simulação ou do ponto de vista econômico. Pode-se, é claro, fixar outras vazões de fundo obtendo-se resultados adequados. A vazão é, no entanto, uma variável de difícil utilização para a simulação de seqüências com purezas de produtos previamente definidas.

Conclui-se que a adequada especificação das colunas é um parâmetro fundamental na otimização da seqüência.

A especificação de vazão só deve ser realizada se existir uma necessidade de processo. Neste caso, deve-se desenvolver uma metodologia de otimização adequada para que as purezas desejadas sejam obtidas dentro dos limites permitidos de recuperação entre os componentes chave, não sendo objeto deste trabalho.

Verificou-se pelas equações V.2 e V.3 apresentadas, que relacionam vazão de produto, vazão de alimentação do componente, recuperação e pureza, a estreita relação entre estas variáveis, de modo que as especificações de pureza ou vazão de produto podem gerar recuperações impossíveis. Verificou-se também que, dependendo da recuperação considerada para um componente, pode haver ou não convergência em uma coluna posterior, conforme sua especificação.

Para colunas com um único produto de saída, sugere-se a especificação baseada nas variáveis pureza e recuperação do componente chave, no intuito de amarrar a especificação desejada para o produto (pureza) com a sua própria restrição (recuperação) para a coluna posterior.

V.2.3 - Especificação de Pureza (Fração Molar) e Recuperação

Voltando ao exemplo anterior e especificando agora três das quatro variáveis necessárias para os produtos (duas colunas) tem-se o fluxograma ilustrado na figura V.2.

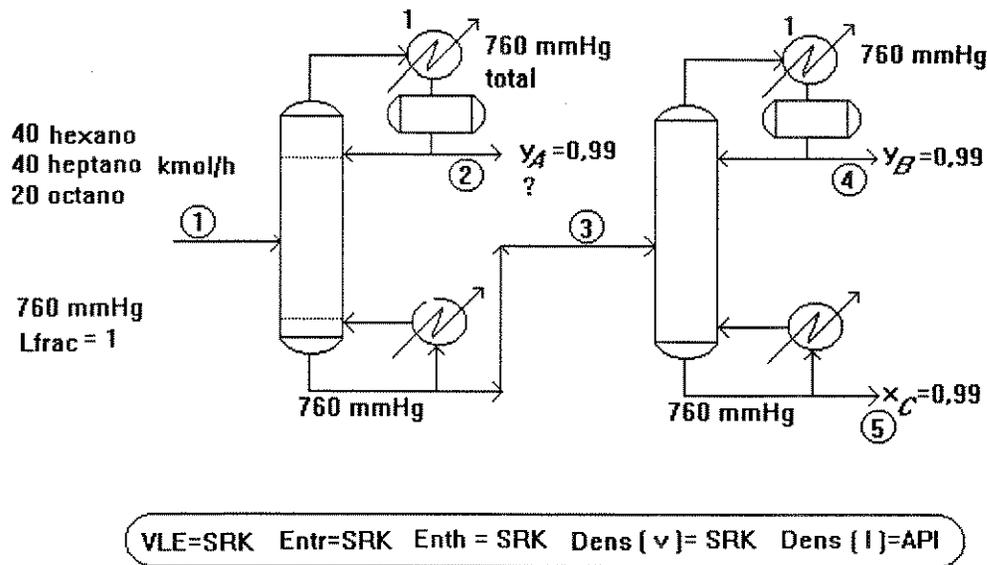


Figura V.2 - Seqüenciamento utilizando especificações de pureza

Uma vez que se deseja controlar a pureza nos três produtos, então, só falta uma especificação para simular a seqüência, a ser definida para a primeira coluna do exemplo.

Mas, que especificação utilizar ?

Em função da seleção escolhida para a especificação faltante os seguintes resultados podem ser obtidos :

Ocorre Convergência :

Resultados imprecisos devido à altas recuperações dos componentes chave. Observou-se nestes casos que o número de estágios ou a razão de refluxo variavam consideravelmente com o fator de amortecimento utilizado para a convergência (denominado "damp factor" no PRO/II).

Resultados confiáveis. Pode-se variar a especificação escolhida para obter colunas menores com o mesmo resultado.

Não Ocorre Convergência :

Solução possível : É necessário fornecer outro valor à especificação faltante de maneira a serem obtidas recuperações permitidas.

Solução impossível: Pode ser impossível obter as purezas desejadas nos limites de recuperação permitidos.

Na coluna 1 pode-se, em princípio, utilizar a recuperação do componente chave leve no topo ou do pesado (no fundo).

Se for utilizado o componente chave leve controla-se a quantidade deste componente que entra na coluna seguinte (é o componente mais leve existente no fundo). Este será não chave leve na próxima coluna.

Se for utilizada a recuperação do componente chave pesado, problemas de incompatibilidade podem surgir, como a seguir demonstrado.

Verifica-se que, em separações "sharp" diretas ou indiretas, em geral, a quantidade de componentes não chave presentes num produto da coluna é desprezível, não importando o número de componentes da mistura ou sua composição .

Para o exemplo da figura V.2:

Dados C componentes de alimentação, no topo da primeira coluna :

$$y_A + y_B = 1 \quad \forall C \Rightarrow y_B = 1 - y_A \quad (V.6)$$

$$D = r_{Bt} * f_B / y_B \quad (V.3)$$

$$D = f_B * (1 - r_{Bb}) / (1 - y_A) \quad (V.7) \text{ pois,}$$

$$r_{Bb} + r_{Bt} = 1 \quad (V.8) \text{ mas,}$$

$$r_{At} = D * y_A / f_A \quad (V.3)$$

$$r_{At} = \frac{y_A}{(1 - y_A)} * \frac{f_B}{f_A} * (1 - r_{Bb}) \quad (V.9) \text{ ou}$$

$$r_{bb} = 1 - r_{At} * \frac{(1 - y_A)}{y_A} * \frac{f_A}{f_B} \quad (V.10)$$

As equações V.9 e V.10 relacionam a recuperação do componente chave leve A no topo com a recuperação do componente chave pesado B no fundo em função de suas quantidades na alimentação e da pureza especificada para o componente leve.

Observa-se que quanto menor for a recuperação desejada para o componente B no fundo (V.9), maior será a recuperação necessária a ser especificada para o componente A no topo. Ocorre que existe uma restrição de máximo tal que :

$$r_A \leq r_{A \text{ max}} = 0,999 < 1 \quad (V.11)$$

Isto implica em:

$$\boxed{r_{bb \text{ MIN}} = 1 - r_{At \text{ MAX}} * \frac{(1 - y_A)}{y_A} * \frac{f_A}{f_B}} \quad (V.12)$$

Utilizando-se como especificação o par pureza do componente chave leve e recuperação do chave pesado, conforme a equação V.9, se o valor de recuperação obtido para o componente chave leve estiver acima do limite (0,999), poderão ocorrer problemas de convergência na simulação.

Se a pureza e a recuperação do mesmo componente for inicialmente definida, no caso, o chave leve, não ocorrerá qualquer problema, devido ao fato de que a recuperação do componente pesado sempre será menor do que a unidade, como pode ser observado pela equação V.10. Exemplos :

1) $A,B,C = 20/70/10$ Kmol/h , $r_B = 0,90$ no fundo e $y_A = 0,99$ no topo
então : $y_B = 0,01$ no topo e $r_B = 0,10$ no topo
 $D = f_B (r_B / y_B) = 70 (0,1 / 0,01) = 700$ Kmol / h , o que é impossível.

2) $A,B,C = 25/30/45$ Kmol/h , $y_A = 0,990$ (topo) , $r_B = 0,990$ (fundo)
então : $r_B = 0,01$ no topo.
 $D = 30 (0,01 / 0,01) = 30$ Kmol/h

Aplicando agora a mesma equação para o componente chave leve (A):

$$30 = 25 (r_A / 0,99)$$

$r_A = 1,19$, o que é impossível.

Aplicando-se a equação V.12 com $r_{A \max} = 0,999$ encontraremos que a mínima recuperação que pode ser definida para o componente B é 0,992.

Conclui-se que o par "pureza do componente chave que é produto" e "recuperação do mesmo componente chave " é o mais apropriado para toda coluna que possua saída de um produto puro ou semi-puro, e que não seja a última.

Na última coluna da seqüência, existem sempre dois produtos puros ou semi-puros, portanto, fica melhor especificada com a pureza desejada para os dois componentes chave (duas especificações de pureza simultâneas).

V.2.4 - Otimização de Especificações

Voltando à figura V.2 conclui-se que a variável incógnita é a recuperação do componente chave leve. Especificar-se-á então as purezas dos componentes a separar como produto e a recuperação do chave leve na primeira coluna (no caso de uma seqüência direta).

Avaliação Rigorosa

Realizou-se uma simulação rigorosa variando-se a especificação de recuperação do componente A na primeira coluna (chave leve).

Deve-se escolher um determinado número de pratos e posição de alimentação, possivelmente sugerida pela análise "shortcut". Parte-se da hipótese que a escolha do par N_s/FT não influi na obtenção do valor de recuperação ótima da seqüência, podendo ser otimizado posteriormente sem modificar a recuperação ótima determinada. Sabe-se que a variação deste parâmetro pode influir na razão de refluxo das colunas e na distribuição dos componentes chave, particularmente nas separações "sloppy". Por hora, admite-se que esta influência não é significativa. Tal hipótese implica no fato de que a especificação da recuperação ótima na coluna é uma variável independente.

Realizando a análise rigorosa obteve-se os resultados mostrados na Tabela V.2.

Tabela V.2 - Análise Rigorosa da Variação da Especificação de Recuperação

	Rigoroso	1	2	3	4
	r_{A1}	0,999	0,995	0,991	0,9905
Coluna 1	N_s/FT	25/12	25/12	25/12	25/12
	RR	2,5707	2,0397	1,9467	1,9404
	VR (Kmol/h)	144,1	122,2	118,0	117,7
	Qc (Mkcal/h)	1,0080	0,8547	0,8252	0,8230
	Qr (Mkcal/h)	1,0444	0,8907	0,8610	0,8587
	TAC (US\$)	161.616	140.300	136.156	135.839
Coluna 2	N_s/FT	36/27	36/27	36/27	36/27
	RR	1,8920	1,9150	1,9522	1,9738
	VR	115,1	116,0	117,5	118,3
	Qc	0,8919	0,8984	0,9092	0,9158
	Qr	0,9022	0,9090	0,9201	0,9267
	TAC (US\$)	147.783	148.742	150.314	151.252
Resultados	d_{A2} (Kmol/h)	0,04	0,20	0,36	0,38
	F_2 (Kmol/h)	59,6365	59,7980	59,9603	59,9804
	D_2 (Kmol/h)	39,7960	39,7961	39,7967	39,7964
	B_2 (Kmol/h)	19,8405	20,0019	20,1636	20,1840
	r_{B2}	0,9950	0,9950	0,9950	0,9950
	r_{C2}	0,9820	0,9900	0,9981	0,9991
Função Objetivo	$\sum VR / F_0$	2,592	2,382	2,355	2,360
	$\sum RR$	4,463	3,955	3,899	3,914
	$\sum Q_r$	1,947	1,800	1,781	1,785
	TAC (US\$)	309.400	298.042	286.471	287.090
	% TAC	+8,00	+4,04	+0,00	+0,22

Como se definiu previamente N_s/FT , fixando-os, a otimização a ser realizada é relativa à energia consumida na coluna, representada por RR , Q_c , Q_r , VR , e seu custo operacional.

Para a recuperação de 99,0% ($r_A = 0,990$) do componente A (simulação 5) não houve convergência. O limite de recuperação ocorre no fundo da coluna 2, para o componente C, confirmando o limite prático de recuperação em 99,90% estabelecido para a realização deste trabalho.

Verificou-se para várias composições de entrada em separações "sharp" que a presença de contaminante não chave na coluna posterior faz com que um dos componentes chave seja deslocado, ocorrendo que a vazão molar da corrente que recebe o contaminante permanece constante enquanto a outra varia, recebendo o componente chave deslocado que tem sua recuperação aumentada.

Pode-se então enunciar: para qualquer composição de entrada em uma separação "sharp", com o aumento da entrada de um componente não chave contaminante, em uma das correntes de saída o componente não chave deslocará o chave permanecendo constante, enquanto a recuperação limite do componente chave deslocado se dará na outra corrente, que varia.

À medida que a recuperação do componente A vai diminuindo, aumenta sua composição na segunda coluna que vai retirando-o no topo. Nota-se que o componente A no topo da segunda coluna desloca o componente C para o fundo mantendo a recuperação de B inalterada. A recuperação do componente chave pesado C vai aumentando e o limite de recuperação estabelecido para C (99,9%) é obtido quando a recuperação especificada para o componente A na primeira coluna é de 99,05 %.

Partiu-se da máxima recuperação estabelecida para a componente chave leve A diminuindo até não haver mais convergência no simulador. Obteve-se diferentes custos para as colunas de destilação com as mesmas purezas desejadas para os componentes (especificadas inicialmente).

O custo da coluna 1 diminui com a diminuição da exigência de separação dos seus componentes chave, atingindo um valor limite.

Na coluna 2 observa-se o efeito inverso. O custo da coluna vai subindo com a diminuição da recuperação do componente leve da primeira coluna. O resultado das duas tendências é uma otimização apontada pela função TAC para $r_{A1} = 99,1\%$.

Submeteu-se a seqüência representada pela figura V.5 à variação de 1% na especificação de recuperação do componente chave leve da primeira coluna, entre 99,9% e 99,0%, o que representa uma pequena faixa permissível. Observa-se a existência de um valor ótimo de recuperação entre os limites possíveis variando, porém na faixa de 8%, o que é significativo.

Observa-se na tabela V.2 que os resultados indicados pelas diferentes funções objetivo apontam para a mesma resposta.

Comparação de Resultados "Shortcut" x Rigoroso

Realizando-se uma simulação "shortcut" da simulação número 4 para efeito comparativo, tem-se os resultados da Tabela V.3 (RR = 1,2 RRmin).

Tabela V.3 - Análise "Shortcut" da Variação da Especificação de recuperação

	"Shortcut"	4
	r _{A1}	0,9905
Coluna 1	Ns min	11,11
	Ns/FT	25/12
	RR min	1,510
	RR	1,812
	Q _r (Mkcal/h)	0,8227
	Q _c (Mkcal/h)	0,7869
	TAC (US\$)	130.784
Coluna 2	Ns min	16,40
	Ns/FT	36/27
	RR min	1,343
	RR	1,611
	Q _r (Mkcal/h)	0,8150
	Q _c (Mkcal/h)	0,8042
	TAC (US\$)	135.337
Resultado	d _{A2} (Kmol/h)	0,3801
	r _{B2}	0,9950
	r _{C2}	0,9992
Função Objetivo	$\sum VR / F_0$	2,165
	$\sum RR$	3,423
	$\sum Q_r$	1,638
	TAC (US\$)	266.121
	% TAC	+1,64

% TAC foi calculada comparando-se o custo do melhor caso com os demais.

Tabela V.4 - "Shortcut" x Rigoroso : Comparação de Funções Objetivo

Função Objetivo	4
$\% \sum VR / F_0$	-8,5
$\% \sum RR$	-12,5
$\% \sum Q_r$	-8,2
%TAC	-7,1

A Tabela V.4 foi realizada comparando-se os resultados obtidos para a simulação 4 nas análises "shortcut" e rigorosa, segundo a equação :

$$\% \text{ var} = 100 \cdot (\text{Shortcut} - \text{Rigoroso}) / \text{Rigoroso} \quad (\text{V.13})$$

A razão de refluxo apresenta a maior variação entre as duas análises.

Tabela V.5 - "Shortcut" X Rigoroso : Comparação de composições

		Rigoroso	"Shortcut"	Rigoroso	"Shortcut"
		Alim. 1	Alim. 1	Alim. 2	Alim. 2
hexano	Kmol / h	40,0000	40,0000	0,3800	0,3801
heptano		20,0000	20,0000	39,6004	39,5997
octano		20,0000	20,0000	20,0000	20,0000
		Topo1	Topo1	Topo2	Topo2
hexano	Kmol / h	39,6200	39,6199	0,3800	0,3801
heptano		0,3996	0,4003	39,3986	39,3998
octano		0,0000	0,0000	0,0178	0,0159
		Fundo 1	Fundo 1	Fundo 2	Fundo 2
hexano	Kmol / h	0,3800	0,3801	0,0000	0,0000
heptano		39,6004	39,5997	0,2013	0,1999
octano		20,0000	20,0000	19,9822	19,9840

A Tabela V.4 compara os resultados "shortcut" e rigoroso obtidos com o mesmo número de estágios e posição de alimentação nas duas colunas. Partiu-se de uma mistura com um comportamento próximo à idealidade (segundo a lei de Raoult) mas verificam-se desvios em relação aos resultados obtidos rigorosamente devido às hipóteses simplificativas da análise "shortcut". Nota-se neste exemplo um desvio de 7,1% para a avaliação mais criteriosa (TAC). O fato de todos os desvios serem negativos em relação ao modo rigoroso mostra que a análise "shortcut" é menos conservativa do que a rigorosa, para os componentes analisados e para o exemplo apresentado. Isto sempre representa algum inconveniente do ponto de vista de projeto pois é costumeiro calcular-se sistemas com algum superdimensionamento ("overdesign") nas etapas primárias de um projeto.

A tabela V.5 mostra que houve um desvio de 10,7 % na previsão da composição do octano no topo da segunda coluna, o que pode ser significativo se o número de colunas na seqüência for aumentado, havendo uma propagação de erros.

A especificação da variável recuperação na primeira coluna influi significativamente na otimização da seqüência de destilação propondo-se a otimização das especificações de recuperação.

Em uma coluna simples, com o aumento da entrada de componente não chave, a vazão molar da corrente onde este componente desloca o chave, permanecerá constante e a recuperação limite se dará na corrente que varia. Pode-se demonstrar matematicamente que isto ocorre para qualquer composição de entrada e, em uma separação "sharp". Generalizando :

Em seqüências diretas : O limite mínimo de recuperação do componente chave ocorrerá no fundo da coluna posterior.

Em seqüências inversas : O limite mínimo de recuperação do componente chave ocorrerá no topo da coluna posterior.

A diminuição da recuperação do componente leve a partir do seu máximo leva à otimização da primeira coluna e a não otimização da segunda.

Existe uma recuperação mínima, para o componente chave a recuperar como produto na primeira coluna abaixo da qual a convergência na coluna posterior é impossível, limite este que pode ser determinado segundo o procedimento realizado.

A avaliação "shortcut" normalmente realizada na literatura para a otimização de seqüências de destilação pode levar à obtenção de composições diferentes daquelas que seriam obtidas por uma análise rigorosa, estando os valores das funções objetivo abaixo de seu valor real.

V.3 - OTIMIZAÇÃO DA POSIÇÃO DA ALIMENTAÇÃO

Nos exemplos apresentados nas tabelas partiu-se dos dados Ns e FT sugeridos pela aplicação inicial da análise "shortcut".

Sabe-se, no entanto, e assim foi verificado no exemplo em estudo, que as previsões "shortcut" podem apresentar desvios em relação ao modo rigoroso, dependendo do comportamento da mistura multicomponente de alimentação.

O trabalho desenvolvido por Maciel (1988) mostra que a posição da alimentação tem uma influência significativa nos custos operacionais da coluna, elaborando um método rigoroso para determiná-la.

Sabe-se que o par (Ns;FT), juntamente às especificações e os dados relativos às propriedades na alimentação, determinam numa simulação o projeto de cada coluna. A melhor seqüência é aquela que minimiza uma determinada função objetivo, dentro das restrições existentes.

Obtidas as especificações ótimas em todas as colunas da seqüência, pode-se determinar uma posição ótima de alimentação para cada número de estágios possível nas colunas. Assim, fixando-se um número de estágios serão simuladas todas as possíveis posições de alimentação.

Utilizou-se o Módulo de Otimização existente no simulador PRO/II. Este módulo permite a definição da função objetivo, das restrições desta função, da variável de otimização e do seu passo. Escolheu-se :

Função Objetivo	:	Razão de Refluxo na Coluna : minimizar.
Restrições	:	RR > RRmin , dado pela análise "shortcut"
Variável de otimização	:	Posição da alimentação.

A razão de refluxo de cada coluna foi utilizada como uma função objetivo a ser minimizada, uma vez que representa o custo operacional da coluna. Como pode ser visto na equação 6.59 a função TAC está relacionada diretamente à Ns (H), RR e ϕ . Comparando-se diferentes posições de alimentação para um mesmo diâmetro e número de estágios então: TAC = TAC (RR), isto é, a função objetivo dependerá apenas dos custos operacionais.

O procedimento de otimização aqui sugerido implica na hipótese de que a otimização global da seqüência é a soma das otimizações individuais das colunas, quanto às variáveis Ns e FT, isto é, a determinação deste par de variáveis pode ser realizada para cada coluna individualmente sem influenciar significativamente a escolha do par da próxima coluna da seqüência. Se isto não ocorrer, será necessário otimizar o par (Ns,FT) simultaneamente, em todas as colunas, minimizando uma função objetivo global, o que só poderia ser conseguido por uma técnica de programação matemática.

Apesar da variação da RR influir na distribuição dos componentes não chave e, dessa forma, na coluna posterior da seqüência, particularmente para as separações "sloppy" (Cheng e Liu 1988), acredita-se que a hipótese de otimização assumida é satisfatória devido ao fato de que a faixa ótima de razões de refluxo será bastante próxima, digamos, abaixo de 2 vezes RR_{min} . Somado à esta restrição, pretende-se utilizar recuperações de componentes chave elevadas obtendo-se produtos com distribuições de componentes não chave desprezíveis. No item V.6.2.3 apresenta-se um estudo sobre esta hipótese confirmando-a.

V.4 - OTIMIZAÇÃO DO NÚMERO DE ESTÁGIOS

Colunas com iguais especificações apresentam custos operacionais diferentes, conforme o número de estágios utilizado.

Numa análise rigorosa não há como fixar conjuntamente as duas especificações dos produtos, o número de estágios e a razão de refluxo (cf. cap. 2). Destas quatro variáveis, deve-se escolher três. No Pro II, a determinação do número de estágios é obrigatória e nos casos simulados, a razão de refluxo não foi fixada como especificação. Dessa forma, a razão de refluxo será função do número de estágios escolhido.

A função objetivo TAC está diretamente relacionada à RR e ao N_s , de modo que o aumento de N_s gera uma diminuição de RR. Assim, um ponto de mínimo deverá ocorrer na função.

Diversos autores tem generalizado a razão de refluxo ótima numa faixa que vai de 1,2 a 1,4 do refluxo mínimo, no entanto, utilizando a análise "shortcut". Nesta faixa, a função objetivo apresenta um comportamento quase constante, levemente abaulado ("flat"). Propõe-se encontrar este ponto da maneira mais prática possível, investigando a possibilidade de utilização desta faixa para a minimização do número de simulações.

A figura V.3 ilustra a otimização efetuada referente à primeira coluna da seqüência para três componentes.

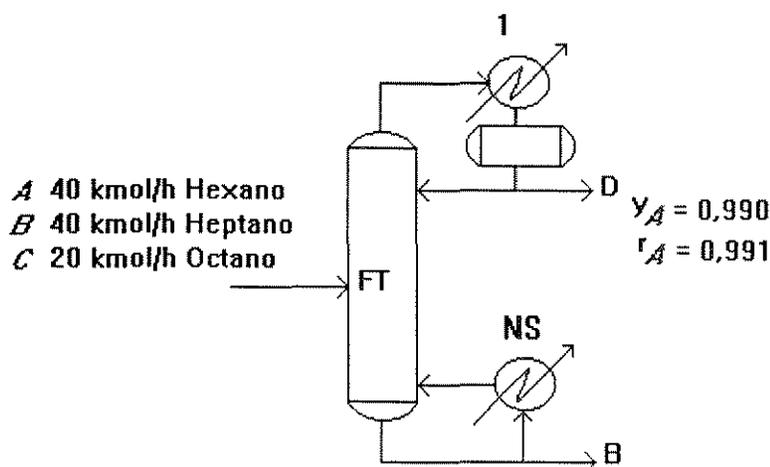


Figura V.3 - Separação do componente leve- Otimização da primeira coluna

Com a especificação ótima determinada para o problema em estudo ($r_A = 0,991$) realizou-se simulações na primeira coluna da seqüência, variando-se o número de estágios dentro dos limites possíveis que, em princípio, são fornecidos pela análise "shortcut" preliminar: N_s min ($RR \infty$) e RR min ($N_s \infty$). O resultado é apresentado na Tabela V.6. Utilizou-se para esta análise a função TAC pr, que é baseada no diâmetro da coluna obtido pelo simulador, realizando-se uma avaliação mais realista.

No simulador utilizado, existem dois modos rigorosos de simulação: Dimensionamento ("sizing") e Performance ("rating"). O primeiro fornece dados dimensionais da coluna a partir da escolha do tipo de estágio desejado, ajustando o diâmetro da coluna para alcançar o critério necessário ao fator de inundação ("flooding"), enquanto que o segundo realiza a simulação a partir de uma coluna já determinada. No caso utilizou-se a opção "Sizing/Rating" simultâneos juntamente ao módulo de otimização, obtendo em uma única simulação a posição ótima de alimentação, o diâmetro, a altura e as quedas de pressão nos estágios com as demais variáveis de processo. Utilizou-se aleatoriamente pratos valvulados modelo Glitsh com dois passes e espaçamento entre estágios de 609,60 mm (sugerido pelo simulador).

Tabela V.6 - Simulação Variando o Número de Estágios

Ns	FT op	Φ (m)	H (m)	RR	VR Kmol/h	Qr Mkcal/h	TAC pr (US\$)
13	6,97	2,286	12,2	14,4676	619,3	4,3829	568.596
14	7,58	1,676	12,8	7,7129	348,9	2,4890	333.675
15	7,84	1,524	13,4	5,3839	255,5	1,8371	253.506
16	7,99	1,372	14,0	4,2025	208,3	1,5077	211.757
17	8,28	1,372	14,6	3,5374	181,7	1,3201	189.762
18	8,96	1,300	15,2	3,0915	163,7	1,1977	173.852
19	9,20	1,219	15,9	2,7752	151,2	1,1093	162.501
20	9,80	1,219	16,5	2,5434	141,9	1,0437	155.144
21	10,08	1,219	17,1	2,3612	134,6	0,9924	149.513
23	11,12	1,067	18,3	2,1423	125,8	0,9382	140.685
24	11,41	1,067	18,9	2,0622	122,6	0,9156	138.466
26	12,28	1,067	20,1	1,9383	117,7	0,8814	135.341
27	12,92	1,067	20,7	1,8923	115,8	0,8689	134.336
28	13,32	1,067	21,4	1,8577	114,4	0,8593	133.695
29	13,90	1,067	22,0	1,8279	113,2	0,8514	133.251
30	14,18	1,067	22,6	1,8048	112,3	0,8455	133.046
33	15,48	1,067	24,4	1,7591	110,5	0,8343	133.221
36	16,75	1,067	26,2	1,7342	109,5	0,8292	134.143
39	16,76	1,067	28,1	1,7262	109,2	0,8290	135.604
44	17,77	1,067	31,1	1,7177	108,8	0,8300	138.200
52	17,81	1,067	36,0	1,7170	108,8	0,8351	142.704
62	16,81	1,067	42,1	1,7236	109,1	0,8440	148.502
77	17,00	1,067	51,2	1,7206	108,9	0,8524	156.411

A razão de refluxo mínima considerada pelo cálculo "shortcut" (Tabela V.2) é 1,51. O número mínimo de estágios 11,18.

Observa-se na tabela V.7 que os valores ótimos previstos pelas diferentes funções objetivo, exceto VR e RR, são diferentes.

Tabela V.7 - Valores ótimos referentes às funções objetivo estudadas

Ns/FT op	RR	VR	Qr (Mkcal/h)	TAC pr (US\$)
30	1,8048	112,3	0,8455	133.046
39	1,7262	109,2	0,8290	135.604
52	1,7170	108,8	0,8351	142.704

O valor ótimo encontrado para a função TAC é distinto dos demais porque leva em conta, além dos custos operacionais representados por RR, VR e QR, os custos de investimento, representados pelos diferentes números de estágios considerados.

Os valores preditos pelas funções RR e VR são equivalentes pois, *para a primeira coluna de qualquer seqüência existe uma relação matemática bem definida entre RR e VR*, como demonstrado :

$$VR = L + D \quad (V.14);$$

$$RR = L / D \quad (V.15)$$

$$\therefore RR = \frac{VR}{D} - 1 \quad (V.16)$$

$$\text{sendo :} \quad D = f_i \frac{r_i}{y_i} \quad (V.17)$$

onde :
 f_i é a alimentação molar de um componente qualquer na coluna.
 r_i é a sua recuperação no topo.
 y_i é a sua fração molar na corrente de topo ou pureza.

Agregando as duas equações têm-se :

$$VR = f_i \cdot \left(\frac{r_i}{y_i} \right) \cdot (RR + 1) \quad (V.18)$$

, que é uma função do primeiro grau VR (RR).

Como nesta primeira coluna f_i , r_i , e y_i são constantes para um componente especificado (o chave leve), VR será função de RR.

Aplicando para o problema, fazendo i o componente chave leve (Hexano, A):

$$D = 40 (0,991 / 0,990) = 40,0404 \quad \text{observado em todas as simulações.}$$

$$\text{Nos estágios 44 a 52 :} \quad VR = 40,0404 (1,717) = 108,8 \text{ Kmol / h}$$

Sendo que VR, RR e Q_r estão diretamente relacionadas com os custos operacionais da coluna dever-se-ia esperar que as três funções objetivo apontassem o mesmo número de estágios ótimo, como observado na análise a seguir.

Um balanço de energia na coluna fornece:

$$Q_r - Q_c = H_t + H_b - H_o \quad (\text{V.19})$$

$$Q_c = VR \cdot \Delta h \quad (\text{V.20})$$

$$H_t = D \cdot C_{pt} \cdot T_t \quad (\text{V.21})$$

$$H_b = B \cdot C_{pb} \cdot T_b \quad (\text{V.22})$$

Considerou-se a carga térmica de topo (resfriador) como positiva.

Nas simulações realizadas observou-se uma variação desprezível de composição no topo e no fundo da coluna. Isto significa obter entalpias de entrada e saídas de produtos e entalpia de condensação Δh constantes com a variação do número de estágios. A equação (V.19) relaciona assim diretamente as duas cargas térmicas através de uma função do primeiro grau. Aplicando a equação (V.20) verifica-se que a carga térmica de fundo será proporcional à vazão de vapor no topo (VR) e, conseqüentemente, à RR, isto é, os resultados obtidos na tabela V.7 para estas três funções objetivo deveriam apontar o mesmo número de estágios.

$$Q_r = VR \cdot \Delta h + \sum H \quad (\text{V.23}), \text{ uma função do primeiro grau } Q_r \text{ (VR), ou } Q_r \text{ (RR).}$$

Isto não ocorreu porém, uma vez que a perda de carga nos estágios foi considerada, ocorrendo uma modificação das entalpias de fundo (temperatura de bolha) conforme o número de estágios utilizado, como observado na tabela V.9.

Observou-se pelos resultados obtidos que acima de 52 estágios houve uma oscilação inesperada nos valores calculados para VR e RR. Estes deveriam decrescer continuamente com o aumento do número de estágios tendendo à RR_{\min} para $N_s \rightarrow \infty$. Observa-se que este valor limite está aqui em torno de $RR = 1,70$.

Isto ocorreu porque o módulo de otimização da posição de alimentação obteve uma *posição limite superior de alimentação* em torno dos estágios 16 e 18 oscilando entre eles após 52 estágios e influenciando no cálculo das demais propriedades da coluna. Também obteve-se um *limite inferior da posição de alimentação* abaixo do qual não houve convergência, não relatado na tabela. Quando isto ocorreu, modificou-se no programa de simulação o valor de início para a varredura da posição de alimentação, iniciando com este novo valor. O limite mínimo, no entanto, é muito próximo do topo da coluna (estágio 2) em todos os casos, mas nunca coincide com o estágio de topo.

Abaixo de 13 estágios não houve convergência, o que significa ser este o número mínimo de estágios real ou prático. Na Tabela V.8 realizou-se uma comparação destes valores.

Tabela V.8 - Comparação entre limites teóricos e práticos para RR e Ns

	RR min	Ns min
"Shortcut" (Teórico)	1,51	11,18 (12)
Rigorous (Prático)	1,70	13,00

Existe, portanto, uma razão de refluxo mínima para a simulação rigorosa diferente da obtida pelo procedimento "shortcut". Denominou-se a primeira "prática" e a segunda "teórica" (cf. Maciel 1988).

Identificando na tabela V.6 a faixa entre 1,2 e 1,3 RRmin teórico, observa-se que o ponto de mínimo da função está neste intervalo, como apontado por diversos autores, no caso, em 1,2 RRmin teórico. Se as hipóteses realizadas na planilha de custos (capítulo VI) forem modificadas; por exemplo, havendo menores custos de utilidades, o ponto de mínimo da função será distinto.

A tabela V.9 ilustra o problema de otimização obtendo-se diversos projetos para uma mesma tarefa de separação. Vide planilhas de custos no anexo II. Verifica-se que os valores obtidos a partir das extremidades da faixa identificada para RR_{op} apresentam custos de investimento progressivamente elevados. Acima de 1,3 RRmin o custo operacional vai aumentando continuamente, bem como o diâmetro da coluna e a área dos refeedores devido ao aumento da vaporização, atingindo 5 vezes o valor ótimo. Abaixo de RR = 1,2 RRmin teórico (RR < 1,8) a altura da coluna aumenta significativamente, duplicando com RR ≈ RRmin (entre 62 e 77 estágios), apesar de manter o mesmo diâmetro. Tal fato constitui um inconveniente para o "Lay-out" da unidade exigindo estruturas mais robustas.

Tabela V.9 - Comparação entre diferentes projetos possíveis

Ns	13	30	77
Λ	9,58	1,2	1,1
T_{bo} (°C)	108	111	119
H (m)	12,2	22,6	51,2
Φ (m)	2,29	1,07	1,16
A_{rf} (m²)	143,6	27,71	27,93
Cot pr (US\$)	505.658	99.792	103.218
Cti pr (US\$)	640.711	332.534	531.927
TAC pr (US\$)	568.596	133.046	156.411

O procedimento desenvolvido forneceu o projeto e a otimização completa de uma coluna processando três componentes com resultados significativos em termos econômicos.

Os resultados observados pelos diversos autores, relativamente à faixa ótima de razões de refluxo, são concordantes com esta simulação rigorosa para separações "sharp".

A estimativa da faixa ótima de razão de refluxo é importante para a metodologia a ser desenvolvida pois, podendo ser identificada, não será necessário realizar todas as simulações praticadas na Tabela V.6, o que pode ser excessivo para muitas colunas por seqüência e para aplicação em um conjunto de seqüências a serem otimizadas.

Verificou-se a existência de limites superior e inferior da posição de alimentação e limites de números de estágios e razões de refluxo distintos dos apontados pelas equações de Fenske e Underwood.

Observou-se que a perda de carga nos estágios influi nos resultados apontados pelas diversas funções objetivo, havendo modificação na temperatura de bolha no fundo da coluna.

Como se verificará na seção V.6 o par (Ns,FT) pode ser tomada como uma variável de otimização independente em uma seqüência de colunas, ou seja, numa separação "sharp" esta otimização realizada em uma coluna não influencia significativamente as demais.

Constatou-se que a única função objetivo que pode ser utilizada satisfatoriamente para a otimização de Ns e FT é o TAC (teórico ou prático).

V.5 - OTIMIZAÇÃO DA PRESSÃO

A pressão influi na volatilidade relativa entre os componentes em maior ou menor grau, conforme a característica de cada mistura, ocorrendo que a separação seja facilitada ou dificultada. Influencia também no perfil de temperaturas da coluna, pela alteração dos pontos de bolha no topo e fundo.

Rathore et al. (1974 b) obtiveram uma redução de 24% no TAC de uma seqüência de destilação através da otimização de pressão em cada uma das colunas. Neste trabalho, utilizou-se cinco componentes que possuem comportamento próximo da idealidade : propano, isobutano, normalbutano, isopentano e normal pentano.

A variação da razão de refluxo em uma coluna, ou do número de estágios, por outro lado, altera a composição nos estágios da coluna conforme a separação se distancie do ponto "sharp". Se a volatilidade relativa entre os componentes é altamente dependente da composição e/ou da temperatura, isto é, desviar-se da lei de Raoult, prevê-se então que nestas colunas a escolha do número de estágios ótimo seja dependente da pressão. Inversamente, é possível que para misturas aproximadamente ideais a otimização do par (Ns,FT) seja independente da pressão das colunas.

Também no caso de misturas mais afastadas do comportamento ideal, é possível que a especificação ótima de recuperação, determinada para as colunas que retiram um produto puro ou semi-puro, seja afetada pela pressão especificada.

Neste trabalho analisa-se o comportamento das variáveis de otimização submetidas à uma mesma pressão, eliminando-se a influência desta variável. O estudo da otimização da pressão deve ser tratado em um trabalho específico, que pode levar em consideração também a integração energética entre as correntes, configurando redes de trocadores de calor entre as colunas.

V.6 - OTIMIZAÇÃO DE UMA SEQÜÊNCIA DE COLUNAS PARA QUATRO COMPONENTES

V.6.1 - INTRODUÇÃO :

Para uma mistura de quatro componentes são possíveis cinco combinações de seqüências de destilação, utilizando colunas simples.

Inicialmente, avalia-se detalhadamente a seqüência direta, obtendo-se suas especificações ótimas e, a partir delas, os números de estágios e posições ótimas de alimentação segundo diversas funções objetivo, dentre as quais o Custo Total Anual (TAC). Posteriormente, analisa-se cada uma das cinco combinações possíveis obtendo rigorosamente a seqüência ótima de destilação. Tal resultado proporciona a obtenção de uma metodologia para a otimização e projeto de seqüências de destilação e, no capítulo IV, a comparação com a seqüência obtida por um método de síntese heurístico (evolucionário).

A mistura multicomponente escolhida para o estudo possui um comportamento próximo ao ideal no intuito de restringir variáveis que possam interferir nos resultados obtidos. Todas as correntes são tratadas como líquido saturado no ponto de bolha a 1 ata.

V.6.2 - ESTUDO DO SEQÜENCIAMENTO DIRETO

V.6.2.1 - INFLUÊNCIA DA PERDA DE CARGA NOS ESTÁGIOS

Verificou-se nas simulações realizadas que a perda de carga entre os estágios influi significativamente na razão de refluxo das colunas de maneira que, quanto maior for, maior será a razão de refluxo necessária à coluna.

No trabalho desenvolvido, realiza-se a otimização baseada na estimativa da perda de carga entre os estágios, de modo que cada coluna é otimizada individualmente levando em consideração esta variável ("sizing" e "rating" simultâneos).

Na obtenção das especificações ótimas de recuperação, e para toda a simulação com as colunas interligadas, não será realizada a determinação de perdas de carga. Procede-se assim, devido ao fato de que, quando a perda de carga é considerada, ocorrem diferentes pressões entre as colunas seqüenciadas gerando uma modificação da condição térmica na corrente de entrada em cada coluna. Observou-se que tal fato influencia os resultados obtidos impossibilitando uma comparação apropriada entre eles, uma vez que a condição térmica da alimentação fica sujeita à perda de carga nos estágios que é uma variável dependente, conseqüência das condições impostas nas colunas e varia de simulação para simulação.

V.6.2.2 - OTIMIZAÇÃO DAS ESPECIFICAÇÕES DAS COLUNAS

Para a verificação das hipóteses e da metodologia proposta no estudo para três componentes, avaliou-se detalhadamente o seqüenciamento direto cujo fluxograma é apresentado na figura V.4.

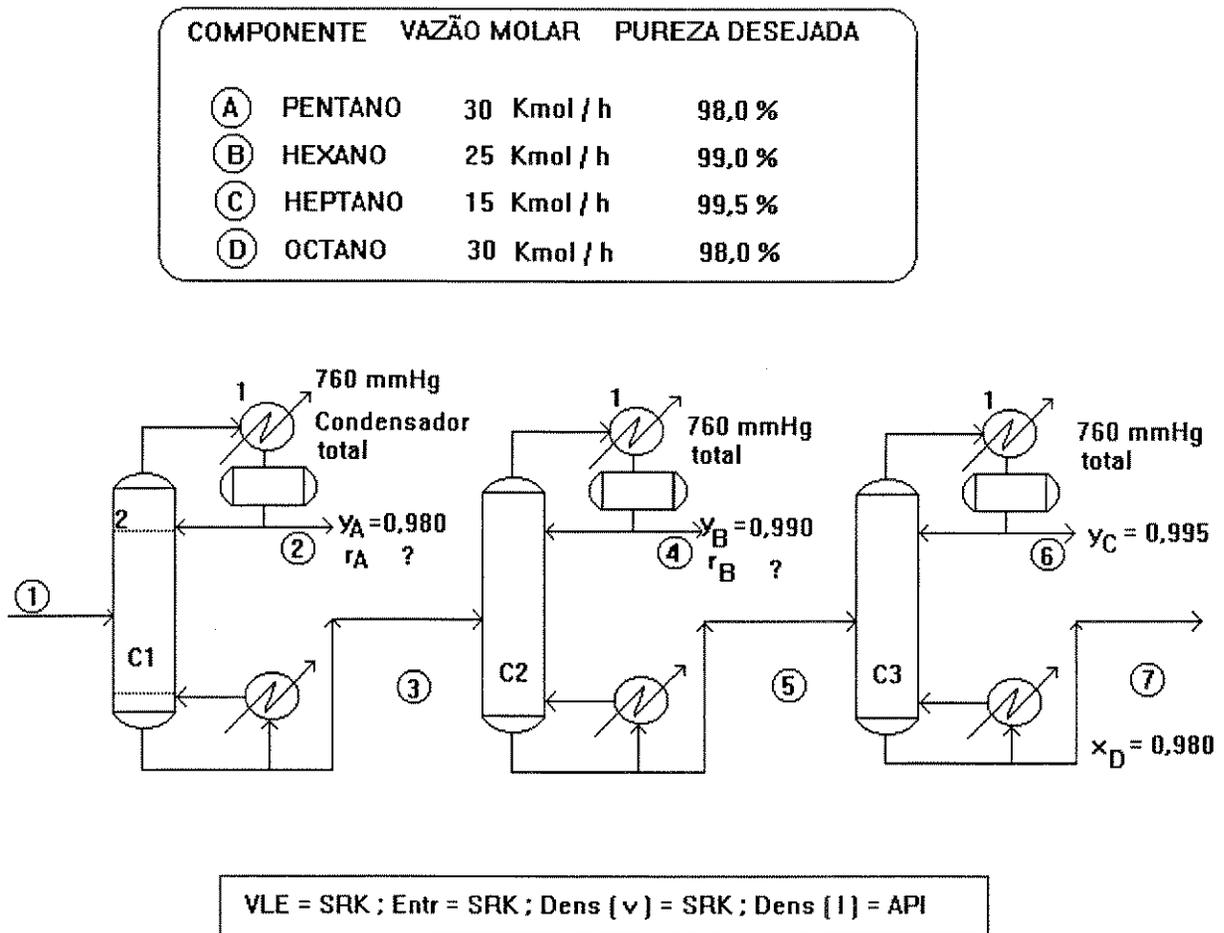


Figura V.4 - Seqüenciamento direto para quatro componentes

Como analisado para a mistura de três componentes, a especificação faltante para a simulação do seqüenciamento é um parâmetro de otimização.

Sabe-se que a definição da recuperação do componente A (r_A) na coluna C1 influi na composição de topo da coluna C2 e desloca o componente C, aí presente, para o fundo. Prevê-se, no entanto, que em separações "sharp", a variação de r_A em C1, induzida como especificação de produto, não influencie significativamente o TAC das colunas não adjacentes, isto é, aquelas posteriores à sua próxima. Tal previsão baseia-se na observação de que o produto leve proveniente da coluna C1, pela especificação de r_A , passa à C2 mas não à C3 ou posteriores. A alteração da razão de refluxo em C2, para atingir a sua especificação a partir de uma nova composição de entrada, deve acarretar alguma influência em C3 que é, no entanto, minimizada pela pequena variação induzida em r_A , dentro do permitido para uma separação "sharp".

Metodologia :

Partindo-se de uma simulação baseada em análise "shortcut" obtém-se o número de estágios inicial para a otimização das especificações nas colunas, como apresentado na tabela V.10. Escolheu-se uma razão de refluxo igual à 1,2 vezes o refluxo mínimo teórico (equação de Underwood), no intuito de obter-se uma base inicial mais próxima possível do ponto ótimo. Utilizou-se a máxima recuperação dos componentes chave especificando-se os pares r_{1k} / y_{1k} (C1 e C2) e y_{1k} / y_{hk} (C3).

Tabela V.10 - Seqüência Direta - Simulação inicial - "shortcut"

Coluna 1	Espec $r_{A1} = 0,999$	Espec $y_{A1} = 0,980$
	Ns / FT	26 / 5
	Ns min	11,55
	VR	70,58
	RR	1,308
	RRmin	1,090
	Qr (Mkcal /h)	0,522
Coluna 2	Espec $r_{B2} = 0,999$	Espec $y_{B2} = 0,990$
	Ns / FT	31 / 8
	Ns min	13,85
	VR	64,38
	RR	1,616
	RRmin	1,347
	Qr (Mkcal /h)	0,4894
Coluna 3	Espec $y_{C3} = 0,995$	Espec $x_{D3} = 0,980$
	Ns / FT	28 / 21
	Ns min	13,14
	VR	60,64
	RR	3,258
	RRmin	2,715
	Qr (Mkcal /h)	0,4777
Função Objetivo	$\sum VR / F_0$	1,9560
	$\sum RR$	6,182
	$\sum Q_r$	1,4891
	TAC tr (US\$)	254.508

Com os dados obtidos inicia-se a simulação rigorosa sem a determinação mecânica e hidráulica dos estágios (sem determinar Φ e as perdas de carga), por simplificação.

A planilha desenvolvida para a obtenção da função TAC (pr e tr) calcula o diâmetro e a altura das colunas com resultados equivalentes aos do PRO/II, conforme analisado no item VI.5, tabela VI.9. A especificação da recuperação do componente chave leve A na primeira coluna é variada e os resultados obtidos são ilustrados nas tabelas V.11, V.12 e V.13 a seguir, computando-se as três colunas.

Tabela V.11 - Obtenção da especificação ótima para a primeira coluna Seqüência Direta

SIMULAÇÃO		1	2	3	4	5
	rA	0,999	0,998	0,997	0,995	0,992
COLUNA 1	Ns / FT	26 / 5	26 / 5	26 / 5	26 / 5	26 / 5
	RR	2,352	2,352	2,353	2,354	2,357
	VR	102,5	102,4	102,3	102,2	101,9
	Qc Mkal/h	0,6463	0,6457	0,6451	0,6441	0,6427
	Qr Mkal/h	0,7234	0,7225	0,7218	0,7206	0,7186
COLUNA 2	Ns / FT	31 / 8	31 / 8	31 / 8	31 / 8	31 / 8
	RR	2,207	2,298	2,417	2,803	10,377
	VR	78,9	81,2	84,1	93,6	280,1
	Qc Mkal/h	0,5520	0,5676	0,5880	0,6540	1,9553
	Qr Mkal/h	0,5912	0,6069	0,6274	0,6937	1,9954
COLUNA 3	Ns / FT	28 / 21	28 / 21	28 / 21	28 / 21	28 / 21
	RR	4,499	4,493	4,488	4,477	4,460
	VR	78,3	78,4	78,5	78,6	78,9
	Qc Mkal/h	0,6060	0,6067	0,6073	0,6086	0,6106
	Qr Mkal/h	0,6144	0,6155	0,6158	0,6171	0,6191
RESULTADOS especificado ->	rB2 (topo)	0,9990	0,9990	0,9990	0,9990	0,9990
	rC2 (fundo)	0,9856	-----	0,9896	0,9936	0,9996
	rC3 (topo)	0,9586	0,9587	0,9588	0,9590	0,9592
	rD3 (fundo)	0,9984	0,9984	0,9984	0,9984	0,9984
	\sum VR / F0	2,597	2,620	2,649	2,744	4,609
	\sum RR	9,058	9,144	9,258	9,634	17,194
	\sum Qr	1,929	1,945	1,964	2,031	3,333
	TAC tr (US\$)	319.026	321.381	325.621	334.136	514.208

Pesquisou-se toda a faixa possível para a recuperação do componente A na primeira coluna. Obteve-se a restrição mínima igual a 0,992, abaixo da qual não houve convergência na coluna C2.

Observa-se em C1 que, à medida que VR, Qc e Qr diminuem continuamente, como se esperava para o relaxamento da recuperação do componente A, ocorre um efeito contrário na razão de refluxo.

Este resultado pode ser aceito levando-se em consideração que :

$$RR = \frac{VR}{f_i \frac{r_i}{y_i}} - 1 \quad (V.18)$$

Aplicando-a para o problema em estudo, entre os casos 1 e 4, coluna 1, e referente ao componente A (tabela V.12), têm-se :

$$RR1 = 102,5 / (30 * 0,9990 / 0,98) - 1 = 2,352$$

$$RR4 = 102,2 / (30 * 0,9950 / 0,98) - 1 = 2,355$$

A aplicação destas equações mostra que o aumento de RR com a diminuição de VR é possível se a taxa de decréscimo em VR for menor do que a taxa de decréscimo na vazão de destilado, representada pelo denominador na equação. Há, portanto, um decréscimo nas duas variáveis, como esperado, resultando porém em um aumento de RR.

Na coluna C3 porém, RR diminui com a diminuição da recuperação do componente chave leve na primeira coluna.

$$RR1 = 78,3 / (14,78 * 0,9586 / 0,995) - 1 = 4,499$$

$$RR4 = 78,6 / (14,90 * 0,9590 / 0,995) - 1 = 4,473$$

Tal comportamento é uma característica da mistura e da composição analisada. O pequeno desvio encontrado para RR4, relativo ao obtido na tabela V.11, deve-se ao número de algarismos significativos (um) fornecido pelo simulador para VR.

Observando na tabela V.11 a recuperação do heptano no fundo da segunda coluna (r_{C2}), identifica-se seu deslocamento do topo para o fundo à medida que o componente não chave leve da primeira coluna passa para a segunda.

Tal ocorrência gera um limite de recuperação na segunda coluna, o qual foi definido como 99,9 %, para uma determinada recuperação limite especificada para o componente chave leve na primeira coluna. A partir de uma nova redução não ocorre convergência na segunda coluna devido à dificuldade de separação entre os seus componentes chave, para atingir uma recuperação próxima a 100 %.

Observa-se na tabela V.11 que a variação das funções objetivo na coluna 3, entre r_A max e r_A min é menor que 1% enquanto na coluna 2 esta variação atinge em torno de 20% para $r_A = 0,995$. Isto implica no fato da variação de r_A da primeira coluna influir significativamente apenas na coluna posterior, conforme inicialmente previsto. Tal conclusão pode ser confirmada pelas tabelas V.12 e V.13.

Tabela V.12 - Valor das funções objetivo para as três Colunas

	r_A	$\Sigma VR / F_0$	ΣRR	ΣQ_r	TAC tr (US\$)
C1+C2+C3	0,999	2,597	9,058	1,929	319.026
	0,998	2,620	9,144	1,944	321.381
	0,997	2,649	9,258	1,953	325.621
	0,995	2,744	9,634	2,031	334.136
	0,992	4,609	17,194	3,333	514.208

Tabela V.13 - Valor das funções objetivo para as duas primeiras colunas

	r_A	$\Sigma VR / F_0$	ΣRR	ΣQ_r	TAC tr (US\$)
C1+C2	0,999	1,814	4,559	1,315	216.832
	0,998	1,836	4,650	1,329	219.023
	0,997	1,864	4,770	1,338	221.956
	0,995	1,958	5,157	1,414	231.523
	0,992	3,820	12,734	2,714	411.345

A recuperação ótima do componente A predita por todas as funções objetivo é a mesma com ou sem a avaliação da última coluna e igual à 0,999.

Determinação de recuperação ótima para a segunda coluna da seqüência.

Conforme o procedimento adotado, e partindo-se dos dados obtidos através da especificação da recuperação ótima do componente A na primeira coluna (0,999), obtém-se a tabela V.14 onde apenas as duas últimas colunas são simuladas.

Tabela V.14 - Obtenção da especificação ótima para a segunda coluna
-Seqüência Direta

SIMULAÇÃO		1	2
		rB	0,999
COLUNA 2	Ns / FT	31 / 8	31 / 8
	RR	2,207	2,206
	VR	78,9	78,8
	Qc Mkal/h	0,5520	0,5512
	Qr Mkal/h	0,5912	0,5903
COLUNA 3	Ns / FT	28 / 21	28 / 21
	RR	4,499	4,522
	VR	78,3	78,6
	Qc Mkal/h	0,6060	0,6084
	Qr Mkal/h	0,6144	0,6169
RESULTADOS	rB2 (topo)	0,9990	0,9980
	rC3 (topo)	0,9856	0,9586
	rD3 (fundo)	0,9984	0,9993
	\sum VR / F0	1,527	1,574
	\sum RR	6,706	6,728
	\sum Qr	1,2056	1,2072
	TAC tr (US\$)	202.824	203.666

A presença de um componente não chave leve na alimentação de uma coluna aumenta a recuperação do componente chave pesado no seu produto de fundo (tabela V.11). Generalizando :

"O aumento de componentes não chave em um grupo de componentes (ex. leves) na alimentação de uma coluna aumenta a recuperação do componente chave do outro grupo (ex. pesados)".

Propõem-se a simplificação que em separações "sharp" a especificação ótima rik op pode ser obtida sem a avaliação das colunas não adjacentes, conforme se verifica comparando-se as tabelas V.12 e V.13. Tal procedimento pode, em princípio, ser aplicado para misturas de alcanos, uma vez que a generalização não pode ser assegurada para outras misturas, devido à necessidade de análise de um maior estudo de casos.

A recuperação ótima de cada coluna foi obtida através da metodologia apresentada, válida para separações "sharp", resultando em rA = 0,999 e rB = 0,999 , isto é, a máxima recuperação possível para os componentes chave em cada coluna.

Destaca-se que a recuperação mínima que pode ser especificada em uma coluna da seqüência é aquela que acarreta na coluna posterior uma recuperação de um componente chave em torno de 0,999, como pode ser observado nas tabelas V.11 e V.14 para os componentes C (r_{C2} no fundo da coluna 2) e D (r_{D3} no fundo da coluna 3), respectivamente. Abaixo de tal recuperação ocorre um aumento exponencial da razão de refluxo na coluna (custo operacional) e não convergência no simulador, como já abordado anteriormente.

Verificou-se que a otimização das variáveis de especificação em cada coluna é sempre um processo **seqüencial**, visto que tais variáveis modificam radicalmente a composição de saída das colunas afetando, no entanto, somente as colunas adjacentes posteriores. A otimização de uma coluna depende, portanto, da definição da especificação da coluna anterior.

V.6.2.3 - OTIMIZAÇÃO INDIVIDUAL DO NÚMERO DE ESTÁGIOS E DA POSIÇÃO DE ALIMENTAÇÃO

- Metodologia

Em um simulador comercial, existem duas possibilidades de realizar a otimização das variáveis de projeto (N_s , FT , Q_r , Q_c , H , Φ) em uma seqüência de colunas, de modo a minimizarem uma dada função objetivo, estando definidas as especificações ótimas.

A primeira possibilidade, e a mais simples, é supor que, acima de um determinado grau de separação entre os componentes chave, a otimização global da seqüência, é dada pela otimização individual e independente de suas colunas. Ou ainda: em uma separação "sharp", a otimização de uma coluna não afeta a composição dos produtos de saída suficientemente para que a otimização da coluna adjacente posterior seja influenciada.

A segunda possibilidade é admitir a hipótese de que a otimização global da seqüência pode ser realizada seqüencialmente a partir da primeira coluna sendo a otimização em cada coluna posterior função da coluna anterior. Partindo-se da primeira coluna, cuja composição de alimentação é conhecida, obtêm-se então a otimização de cada uma individualmente a partir da composição de saída das colunas anteriores. Tal procedimento pode ser realizado nesta metodologia, para qualquer mistura inicial, observando que os modelos termodinâmicos selecionados representem apropriadamente o seu comportamento.

Avaliou-se tais hipóteses para a mistura aproximadamente ideal (alcanos) com quatro componentes em um seqüenciamento direto onde se realizou os dois procedimentos de otimização discutidos.

No primeiro, não seqüencial ou simplificado, partiu-se à otimização de cada coluna em função da composição de alimentação obtida pela análise rigorosa da seqüência com suas especificações ótimas (tabela V.11, simulação 1), lembrando-se que foi utilizada em cada uma um número de estágios e posição da alimentação não otimizados baseados nos valores apontados pelo análise "shortcut" inicial (tabela V.10), com 1,2 vezes RR_{min} .

A hipótese neste caso é que a otimização de cada coluna é independente da otimização na coluna anterior e, assim, uma composição fixa de alimentação, tomada a partir de uma caso base, poderá ser utilizada.

No segundo procedimento, realizou-se a otimização seqüencial das colunas, a partir da composição de saída da coluna anterior, já otimizada. O objetivo do teste é verificar se, neste caso, com separação "sharp" de alcanos e poucas colunas, pode-se assumir a primeira hipótese de otimização. Objetiva-se também verificar a propagação dos desvios de composição da primeira para a terceira coluna.

V.6.2.3.1 - OTIMIZAÇÃO NÃO SEQÜENCIAL

A partir da determinação das especificações ótimas, cada corrente de produto é obtida (tabela V.11, simulação 1), realizou-se então a otimização de cada uma das colunas separadamente, segundo as tabelas V.15 a V.20.

- Tabela V.15 - Otimização da Coluna 1

S	Ns	FT op	Φ (m)	H (m)	RR	VR Kmol/h	Qr Mkcal/h	TAC pr (US\$)
1	18	6,94	0,914	15,25	2,2938	100,7	0,7312	109.617
2	19	6,99	0,914	15,86	2,0312	92,7	0,6794	103.628
3	20	6,98	0,914	16,47	1,8598	87,5	0,6456	99.878
4	21	8,00	0,914	17,08	1,7185	83,1	0,6180	96.822
5	22	8,04	0,914	17,69	1,6191	80,1	0,5993	94.981
6	23	8,42	0,914	18,30	1,5523	78,1	0,5865	93.829
7	24	9,13	0,914	18,91	1,4835	75,9	0,5729	92.584
8	25	9,64	0,914	19,52	1,4427	74,7	0,5651	92.059
9	26	9,99	0,914	20,13	1,4011	73,4	0,5575	91.543
10	27	10,08	0,914	20,74	1,3750	72,6	0,5529	91.407
11	28	10,93	0,914	21,35	1,3531	72,0	0,5491	91.369
12	29	11,24	0,914	21,96	1,3377	71,5	0,5466	91.492
13	30	11,52	0,914	22,57	1,3282	71,2	0,5453	91.765
14	31	12,68	0,914	23,18	1,3170	70,9	0,5436	91.984
15	32	12,12	0,914	23,79	1,3081	70,6	0,5424	92.266
16	34	13,36	0,914	25,01	1,2975	70,3	0,5414	93.000
17	37	13,57	0,914	26,84	1,2937	70,1	0,5424	94.395
18	42	12,83	0,914	29,89	1,2966	70,2	0,5461	96.942
19	52	14,00	0,914	35,99	1,2875	70,0	0,5498	101.477

A única função objetivo que pode ser utilizada é o TAC, uma vez que o número de estágios é variável e a razão de refluxo tende a um valor mínimo para $N_s \rightarrow \infty$.

Como analisado anteriormente, a carga térmica de fundo acompanharia RR e VR, sendo mínima com o aumento do número de estágios, se não houvesse a influência da perda de carga entre os estágios. A aplicação das equações V.19 a V.22 conduziria a esta conclusão uma vez que se observa na tabela V.16 que a distribuição dos componentes não muda significativamente com a variação do número de estágios fazendo com que as temperaturas de bolha e entalpias sejam muito próximas. Com a variação da pressão no fundo da coluna ocorre um aumento em Q_r , observado a partir do estágio 34.

Observa-se que, até 32 estágios, todos os valores, exceto TAC, apresentam uma variação contínua crescente ou decrescente com o aumento do número de estágios. A função objetivo TAC apresenta o ponto de mínimo para 28 estágios, obtendo-se os valores ótimos para a primeira coluna. Observa-se um comportamento contínuo na posição ótima de alimentação abaixo de 31 estágios, acima deste valor ocorre uma oscilação entre os estágios 12 e 14, indicando que existe uma posição limite máxima de alimentação.

Na tabela V.15 destacou-se a faixa 1,3 RRmin tr a 1,2 RRmin tr obtendo-se o ponto ótimo da função TAC em seu interior. Na tabela V.11 compara-se a composição dos produtos da coluna número 1 para diversos números de estágios e razões de refluxo.

Tabela V.16 - Composições de saída para a primeira coluna

Fluxo (kmol/h)	topo		fundo			
	pentano	hexano	pentano	hexano	heptano	octano
Tabela / Simulação						
V.11 S1	29,97	0,6069	0,0300	24,3932	14,9954	29,9999
V.15 S1	29,97	0,6111	0,0300	24,3889	14,9995	30,0000
V.15 S3	29,97	0,6111	0,0300	24,3889	14,9994	30,0000
V.15 S4	29,97	0,6114	0,0300	24,3886	14,9998	30,0000
V.15 S6	29,97	0,6111	0,0300	24,3886	14,9998	30,0000
V.15 S7	29,97	0,6116	0,0300	24,3884	14,9999	30,0000
V.15 S11	29,97	0,6116	0,0300	24,3884	15,0000	30,0000
V.15 S15	29,97	0,6116	0,0300	24,3884	15,0000	30,0000
V.15 S19	29,97	0,6116	0,0300	24,3884	15,0000	30,0000

Observa-se que o único desvio "significativo" ocorre para o hexano na composição de topo, com um máximo de 0,8%, relativamente ao caso calculado para a tabela V.11 (simulação 1) onde a perda de carga nos estágios não foi computada. Prevê-se, portanto, que a otimização na coluna C2 não será afetada, qualquer que seja o número de estágios e posição ótima de alimentação utilizada na coluna C1.

Tabela V.17 - Otimização da Coluna 2

S	Ns	FT op	Φ (m)	H (m)	RR	VR Kmol/h	Qr Mkcal/h	TAC pr (US\$)
1	21	8,11	1,067	17,08	2,8997	96,0	0,7212	112.998
2	22	8,15	0,914	17,69	2,6768	90,5	0,6890	106.251
3	23	9,37	0,914	18,30	2,4168	84,1	0,6431	101.042
4	24	9,77	0,914	18,91	2,2479	79,9	0,6137	97.855
5	25	10,06	0,914	19,52	2,1052	76,4	0,5884	95.182
6	26	10,55	0,914	20,13	2,0094	74,1	0,5720	93.591
7	27	10,92	0,914	20,74	1,9196	71,9	0,5564	92.103
8	28	11,34	0,914	21,35	1,8553	70,3	0,5453	91.171
9	29	11,40	0,914	21,96	1,8096	69,2	0,5376	90.652
10	30	12,35	0,914	22,57	1,7532	67,8	0,5282	89.924
11	31	12,37	0,914	23,18	1,7240	67,1	0,5234	89.764
12	32	13,77	0,914	23,79	1,6886	66,2	0,5176	89.476
13	33	13,38	0,914	24,46	1,6662	65,6	0,5140	89.465
14	34	14,12	0,914	25,01	1,6403	65,0	0,5098	89.375
15	35	14,38	0,914	25,62	1,6277	64,7	0,5080	89.583
16	36	14,71	0,914	26,23	1,6170	64,4	0,5065	89.824
17	37	15,29	0,914	26,84	1,6018	64,0	0,5042	89.966
18	39	16,20	0,914	28,06	1,5847	63,6	0,5017	90.511
19	42	17,73	0,914	29,89	1,5721	63,3	0,5006	91.639
20	47	18,00	0,914	32,94	1,5654	63,1	0,5019	93.870

Na tabela V.17 o número de estágios ótimo é obtido com 34 estágios.

O mínimo número de estágios e razão de refluxo é dado pela tabela V.10. Observe-se que o valor ótimo da função objetivo TAC está situado dentro da faixa 1,2 a 1,3 RR_{min} tr, destacando-se os seus valores.

Na tabela V.18 compara-se a composição dos produtos na coluna número 2 para diversos números de estágios e razões de refluxo.

Tabela V.18 - Composições de saída para a segunda coluna

Fluxo (kmol/h) Tabela / Simulação	topo			fundo		
	pentano	hexano	heptano	hexano	heptano	octano
V.11 S1	0,030	24,3687	0,2154	0,0244	14,7800	29,9991
V.17 S1	0,030	24,3688	0,2156	0,0244	14,7798	29,9994
V.17 S5	0,030	24,3688	0,2159	0,0244	14,7794	29,9998
V.17 S8	0,030	24,3688	0,2161	0,0244	14,7793	29,9999
V.17 S10	0,030	24,3688	0,2161	0,0244	14,7793	29,9999
V.17 S13	0,030	24,3688	0,2161	0,0244	14,7793	29,9999
V.17 S15	0,030	24,3688	0,2161	0,0244	14,7792	29,9999
V.17 S18	0,030	24,3688	0,2161	0,0244	14,7793	29,9999
V.17 S20	0,030	24,3688	0,2161	0,0244	14,7792	29,9999

O desvio máximo foi observado para a composição do heptano no topo da coluna sendo igual a 0,3 %, relativo ao caso base (tabela V.11 S1) no qual a perda de carga não foi computada, não havendo desvio significativo entre as colunas individuais entre si. Nota-se que a variação de composição diminuiu na segunda coluna em relação à primeira. Prevê-se que tal variação não afete a coluna C3, qualquer que seja a otimização em C2.

Tabela V.19 - Otimização da Coluna 3

S	Ns	FT op	Φ (m)	H (m)	RR	VR Kmol/h	Qr Mkcal/h	TAC pr (US\$)
1	20	12,45	1,067	16,47	5,713	95,6	0,7571	115.484
2	21	12,68	0,914	17,08	5,1556	87,7	0,6953	105.487
3	22	13,33	0,914	17,69	4,7833	82,4	0,6580	101.303
4	23	13,29	0,914	18,30	4,4748	78,0	0,6236	100.033
5	24	14,16	0,914	18,91	4,1975	74,0	0,5926	94.265
6	25	14,18	0,914	19,52	4,0097	71,3	0,5717	92.174
7	26	15,52	0,914	20,13	3,8577	69,2	0,5549	90.575
8	27	15,62	0,914	20,74	3,7169	67,2	0,5392	89.114
9	28	15,38	0,914	21,35	3,6151	65,7	0,5281	88.104
10	29	16,64	0,914	21,96	3,5242	64,4	0,5183	87.448
11	30	16,33	0,914	22,57	3,4479	63,3	0,5100	86.872
12	31	16,43	0,914	23,18	3,3929	62,6	0,5041	86.598
13	32	17,74	0,914	23,79	3,3349	61,7	0,4979	86.279
14	33	17,21	0,914	24,40	3,2942	61,1	0,4936	86.192
15	34	17,53	0,914	25,01	3,2606	60,7	0,4901	86.200
16	35	18,54	0,914	25,62	3,2236	60,1	0,4863	86.170
17	37	18,62	0,914	26,84	3,1806	59,5	0,4820	86.509
18	40	17,14	0,914	28,67	3,1972	59,8	0,4851	88.167
19	50	21,00	0,762	34,77	3,1039	58,4	0,4890	86.341

Para alguns estágios, a posição de alimentação não aumenta uniformemente. A variação em RR e VR no estágio 40 é atribuída a este efeito.

Observar que a função TAC apresenta três pontos de mínimo. Isto se deve ao fato dos valores de TAC serem muito próximos, ocorrendo a influência da variação da posição da alimentação no estágio 35 e do diâmetro obtido no estágio 19. Deve-se escolher, portanto, entre um dos pontos de mínimo.

Escolheu-se aqui o menor valor. Nota-se que o ponto de mínimo obtido em $N_s = 35$, para $RR = 1,19$ RR_{min} , está muito próximo à faixa 1,2 a 1,3 destacada na tabela.

Tabela V.20 - Composições de saída para a terceira coluna

Fluxo (kmol/h)	topo			fundo	
	pentano	hexano	heptano	heptano	octano
Tabela / Simulação					
V.11 S1	0,0244	14,1688	0,0468	0,6112	29,9523
V.19 S1	0,0244	14,1687	0,0468	0,6113	29,9523
V.19 S3	0,0244	14,1687	0,0468	0,6113	29,9523
V.19 S4	0,0244	14,1688	0,0468	0,6112	29,9523
V.19 S7	0,0244	14,1687	0,0468	0,6113	29,9523
V.19 S10	0,0244	14,1688	0,0468	0,6112	29,9523
V.19 S12	0,0244	14,1687	0,0468	0,6113	29,9523
V.19 S15	0,0244	14,1687	0,0468	0,6113	29,9523
V.19 S19	0,0244	14,1686	0,0468	0,6113	29,9523

Nesta coluna não há desvio significativo com a variação do número de estágios e razão de refluxo.

A variação de composição dos produtos de saída, para uma ampla faixa de estágios e razões de refluxo, não é significativa. Tal constatação aponta para a conclusão de que :

"Em uma separação "sharp", a otimização das variáveis de projeto de uma coluna é independente na otimização global da seqüência".

Para generalizar tal afirmação, no entanto, é necessário observar uma faixa mais ampla de composições de entrada, número e tipo de componentes.

Baseando-se nos resultados obtidos para dois e três componentes em seqüências diretas pode se estabelecer o seguinte heurístico:

"A otimização do custo de uma seqüência de destilação se dá quando a razão de refluxo de suas colunas aproxima-se da faixa 1,2 a 1,3 vezes a razão mínima teórica de refluxo, dada pela equação de Underwood".

Tal heurístico será utilizado para minimizar a busca do TAC ótimo nas simulações rigorosas das colunas, reduzindo-se o número de simulações realizadas. Se o ponto de mínimo estiver fora desta faixa deve-se reduzi-la ou aumentá-la gradativamente.

V.6.2.3.2 - OTIMIZAÇÃO SEQUENCIAL

Realizando a otimização a partir dos resultados ótimos obtidos em cada coluna anterior obtêm-se as tabelas V.21 a V.24 abaixo. Nestes casos, restringiu-se o número de simulações pesquisando-se em torno da faixa 1,2 a 1,3 RR min.

Tabela V.21 - Otimização da segunda coluna

S	Ns	FT op	Φ (m)	H (m)	RR	VR Kmol/h	Qr Mkcal/h	TAC pr (US\$)
1	31	12,37	0,914	23,18	1,7247	67,1	0,5235	89.774
2	32	13,76	0,914	23,79	1,6891	66,2	0,5175	89.463
3	33	13,38	0,914	24,46	1,6671	65,6	0,5141	89.475
4	34	14,11	0,914	25,01	1,6406	65,0	0,5098	89.371
5	35	14,43	0,914	25,62	1,6280	64,7	0,5080	89.577
6	36	14,76	0,914	26,23	1,6170	64,4	0,5064	89.809

Na tabela V.22 comparam-se os resultados obtidos pelos dois procedimentos distintos de otimização (tabelas V.17 e V.21), o não seqüencial e o seqüencial, A e B respectivamente, aplicados à segunda coluna da seqüência.

Tabela V.22 - Comparação entre diferentes estratégias - coluna 2

Ns	RR _A	RR _B	VR _A Kmol/h	VR _B Kmol/h	Qr _A Mkcal/h	Qr _B Mkcal/h	TAC _A (US\$)	TAC _B (US\$)
31	1,7240	1,7247	67,1	67,1	0,5234	0,5235	89.764	89.774
32	1,6886	1,6891	66,2	66,2	0,5176	0,5175	89.476	89.463
33	1,6662	1,6671	65,6	65,6	0,5140	0,5141	89.465	89.475
34	1,6403	1,6406	65,0	65,0	0,5098	0,5098	89.375	89.371
35	1,6277	1,6280	64,7	64,7	0,5080	0,5080	89.583	89.577
36	1,6170	1,6170	64,4	64,4	0,5065	0,5064	89.824	89.809

Os desvios observados não são significativos. *As estratégias de otimização são, portanto, equivalentes.*

Tabela V.23 - Otimização da terceira coluna

Ns	FT op	Φ (m)	H (m)	RR	VR Kmol/h	Qr Mkcal/h	TAC (US\$)	pr
31	16,43	0,914	23,18	3,3925	62,6	0,5042	86.610	
32	17,69	0,914	23,79	3,3341	61,7	0,4979	86.282	
33	17,20	0,914	24,40	3,2937	61,2	0,4937	86.204	
34	17,52	0,914	25,01	3,2601	60,7	0,4902	86.212	
35	18,59	0,914	25,62	3,2230	60,2	0,4863	86.170	
36	18,36	0,914	26,23	3,2005	59,8	0,4841	86.332	

Na tabela V.24 comparam-se os resultados obtidos pelos distintos procedimentos de otimização (tabelas V.19 e V.23), o não sequencial e o sequencial, A e B respectivamente, para a coluna 3.

Tabela V.24 - Comparação entre diferentes estratégias - coluna 3

Ns	RR _A	RR _B	VR _A Kmol/h	VR _B Kmol/h	Qr _A Mkcal/h	Qr _B Mkcal/h	TAC _A (US\$)	TAC _B (US\$)
31	3,3929	3,3925	62,6	62,6	0,5041	0,5042	86.598	86.610
32	3,3349	3,3341	61,7	61,7	0,4979	0,4979	86.279	86.282
33	3,2942	3,2937	61,1	61,2	0,4936	0,4937	86.192	86.204
34	3,2606	3,2601	60,7	60,7	0,4901	0,4902	86.200	86.212
35	3,2236	3,2230	60,1	60,2	0,4863	0,4863	86.170	86.170

Os resultados indicam estratégias de otimização equivalentes para a terceira coluna.

V.6.2.4 - SEQÜÊNCIA FINAL OTIMIZADA

Obtendo-se os parâmetros ótimos de projeto para a seqüência direta com quatro componentes, realizou-se então a interligação entre as colunas com dimensionamento hidráulico "sizing", sem o cálculo da perda de carga entre os estágios ("sizing" e "rating" simultâneos), evitando a influência desta variável no custo operacional das colunas para uma posterior comparação do TAC tr com as quatro outras possibilidades de seqüências. O TAC obtido com o diâmetro calculado pelo simulador é denominado TAC pr, enquanto o determinado pelas equações da planilha é denominado TAC tr.

O resultado final obtido representa o projeto ótimo para a seqüência direta e é dado pela tabela V.25 e representado pela figura V.5.

Tabela V.25 - Simulação para o projeto ótimo em seqüência direta

COLUNA 1	Ns / FT	28 / 11
rA= 0,999 yA= 0,980	RR	1,3442
	VR	71,7
	Qc Mkcal/h	0,4519
	Qr Mkcal/h	0,5290
COLUNA 2	Ns / FT	34 / 14
rB= 0,999 yB= 0,990	RR	1,6271
	VR	64,7
	Qc Mkcal/h	0,4521
	Qr Mkcal/h	0,4913
COLUNA 3	Ns / FT	35 / 19
yC= 0,995 xD= 0,980	RR	3,1893
	VR	59,7
	Qc Mkcal/h	0,4618
	Qr Mkcal/h	0,4702
Função Objetivo	$\sum VR / F0$	1,9610
	$\sum RR$	6,1606
	$\sum Qr$	1,4905
	TAC tr	260.941
	TAC pr	257.299

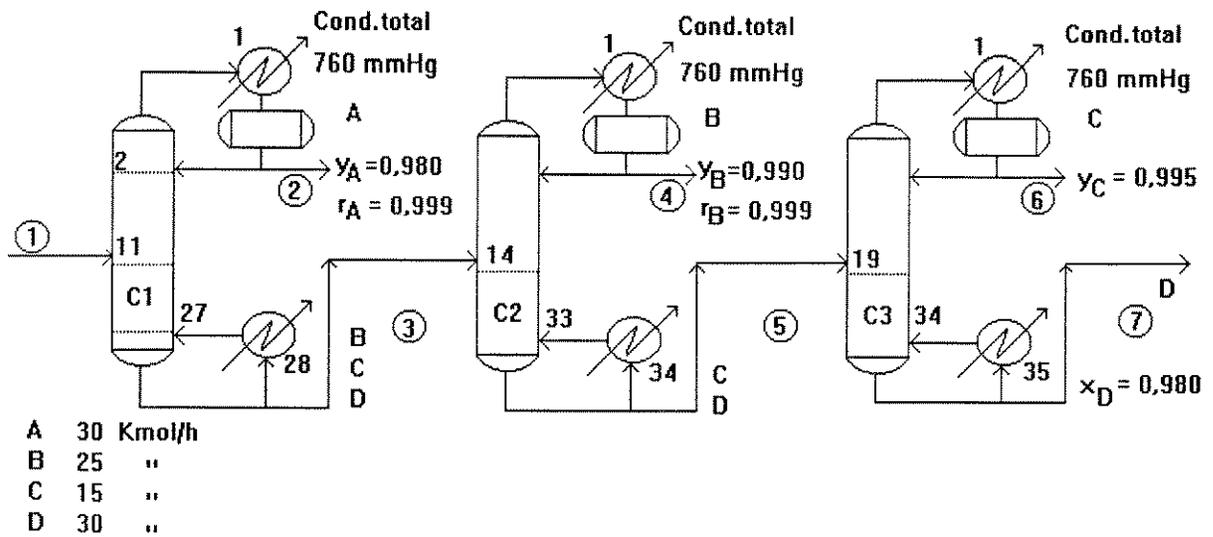


Figura V.5 - Resultado final para quatro componentes

Obeve-se os parâmetros ótimos de projeto para a seqüência direta com quatro componentes.

A otimização efetuada resultou em uma redução de custos (TAC tr) de 18,2 % em relação à simulação rigorosa inicial (tabela V.11, simulação 1) baseada em variáveis de projeto obtidas através de uma análise "shortcut" e com as especificações otimizadas, como apresentado na tabela V.26.

Tabela V.26 - Seqüência Otimizada x Inicial (Rigorosa)

		Otimizada	Inicial
Função Objetivo	$\sum VR / F_0$	1,9610	2,597
	$\sum RR$	6,1606	9,058
	$\sum Q_r$	1,4905	1,929
	$\sum TAC \text{ tr (US\$)}$	260.941	319.026

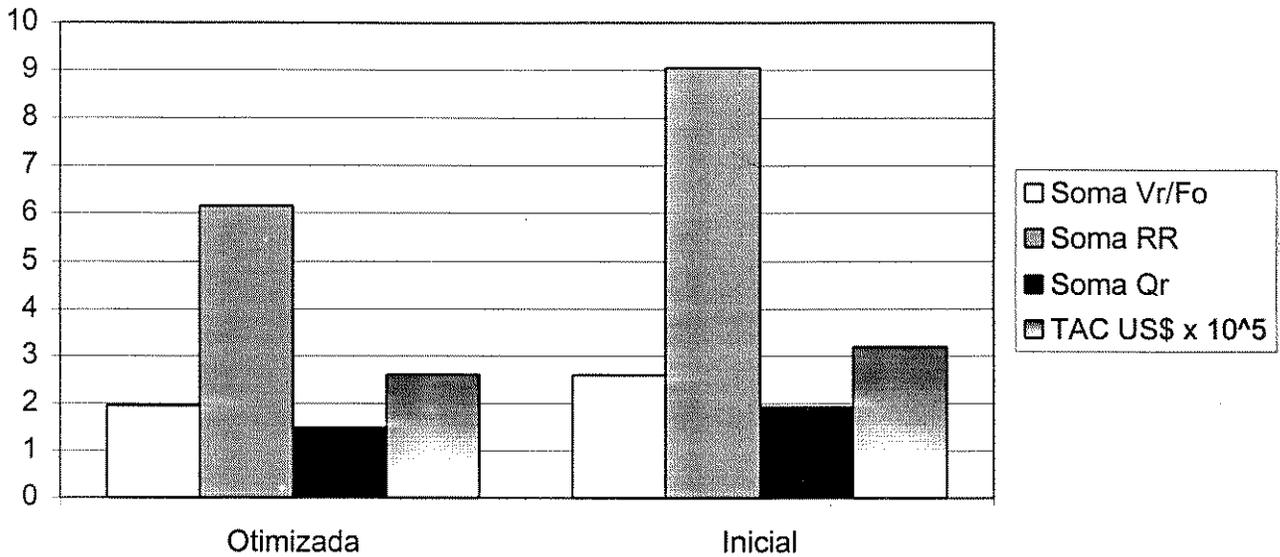


Gráfico III - Sequência Otimizada x Inicial (Rigorosa)

Verificou-se para a seqüência direta com quatro componentes, que a otimização de Ns e FT da seqüência global equivale à somatória da otimização das colunas individuais, sendo possível uma simulação não seqüencial a partir de um caso base, obtido rigorosamente com Ns e FT definidos por uma análise "shortcut" inicial. A vantagem de ser realizada a otimização não seqüencial é que todas as colunas podem ser otimizadas em uma mesma batelada de simulações ao invés de haver a necessidade de processar os dados obtidos em uma coluna anterior (obter o TAC de cada simulação e selecionar Ns / FT ótimos) para identificar a composição de entrada para a simulação da próxima coluna. Apesar de não ser rigorosa uma generalização dos resultados para qualquer mistura, os resultados obtidos apontam para a possibilidade de otimização não seqüencial, o que poderá ser verificado realizando uma análise para diferentes misturas.

Verificou-se que o número de simulações para a obtenção da coluna ótima pode ser reduzido para uma pequena faixa, baseando-se em uma faixa ótima de razões de refluxo obtida a partir da razão de refluxo mínima teórica.

Oteve-se a otimização das especificações de recuperação que, no caso, foram máximas. A importância desta variável é destacada pelos resultados obtidos onde, ao variar-se em 0,7% a recuperação do componente chave leve A na primeira coluna, resulta em um custo total 61% maior do que o caso ótimo, por conta da elevação dos custos operacionais na coluna 2 (tabela V.11). A otimização das variáveis de especificação é um processo seqüencial, visto que podem modificar significativamente a composição de saída das colunas. Entretanto, baseado no caso estudado, propõe-se para uma separação "sharp", que a especificação ótima possa ser obtida sem a avaliação das colunas não adjacentes.

V.6.3 - APLICAÇÃO DA METODOLOGIA PARA OS SEQÜENCIAMENTOS POSSÍVEIS

Para o estudo dos quatro seqüenciamentos restantes, adotou-se as simplificações propostas, exceto para a obtenção das recuperações ótimas onde foram utilizadas todas as colunas para se obter o custo total da seqüência e compara-lo com as otimizações posteriores. Utilizou-se, portanto, a simulação não seqüencial para a obtenção do par $(N_s, FT)_{op}$ e a faixa 1,2 a 1,3 RR_{min} para minimizar o número de simulações.

- SEGUNDO SEQÜENCIAMENTO

A otimização da segunda forma de seqüenciamento para três colunas é representada na figura V.6.

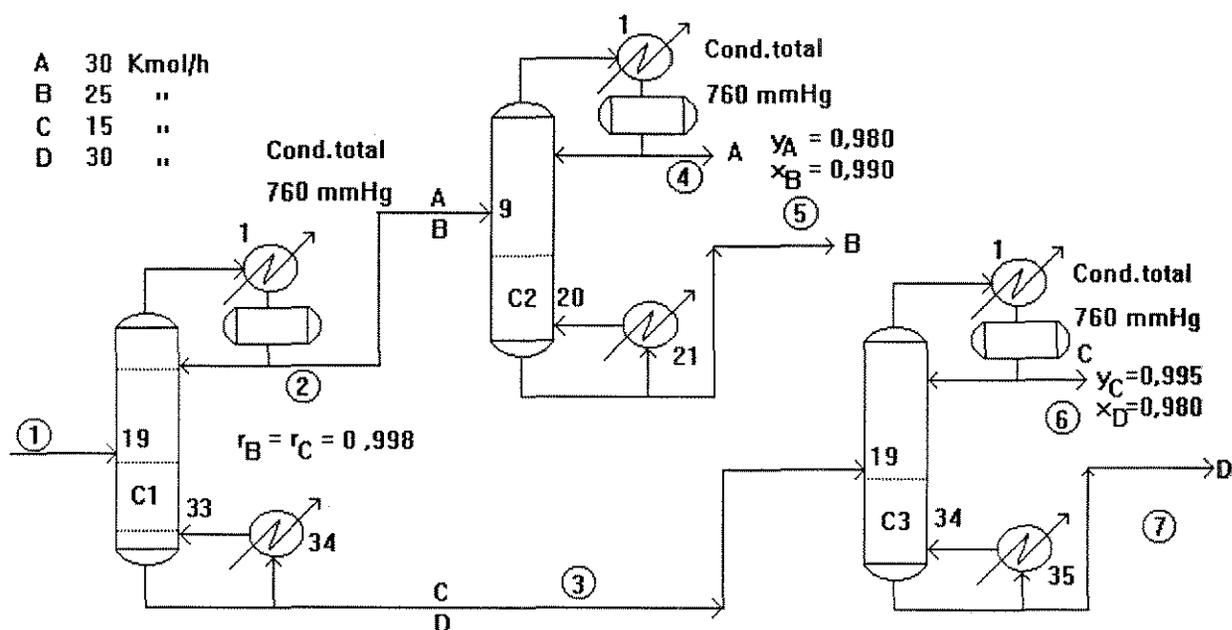


Figura V.6 - Segunda possibilidade de seqüenciamento

A primeira coluna da seqüência deve realizar a separação entre dois componentes. Neste caso, a especificação de pureza não é aplicável pois a primeira coluna não gera diretamente nenhum dos produtos desejados. A especificação adequada para este caso é a recuperação de cada componente chave que passa para a coluna posterior. Assim, o componente B deve ser controlado com uma especificação de recuperação para que a quantidade que passa para a segunda coluna e vai para o topo não venha a causar a impossibilidade de se atingir a pureza aí especificada para o chave leve.

Igualmente, a melhor especificação para o componente C é a sua recuperação, tendo em vista, o controle na outra coluna adjacente.

Qual o valor das recuperações a utilizar ?

Neste caso, existem muitas combinações possíveis para as duas especificações.

Diminuindo a recuperação de um componente otimiza-se esta coluna e aumenta-se o custo da coluna adjacente, como já verificado. A maneira rigorosa de obter os valores ótimos é variar uma das especificações mantendo constante a outra até que o ponto ótimo seja alcançado. Então, prosseguir utilizando um novo valor para a especificação constante e repetir o processo até que o par ótimo seja obtido. É possível que seja encontrada mais de uma solução.

Por simplificação, assumiu-se que $r_{lk} = r_{hk}$, como praticado na literatura, e variou-se as duas especificações simultaneamente.

Inicia-se com a análise "shortcut", tabela A.1.5.27, em busca de estimativas iniciais para a análise rigorosa.

Especificações iniciais: $r_{B1} = r_{C1} = 0,999$ (máxima estabelecida)
 $y_{A2} = 0,980$; $x_{B2} = 0,990$
 $y_{C3} = 0,995$; $x_{D3} = 0,980$
 $RR = 1,2$ RRmin

Realiza-se então a análise rigorosa com os dados de N_s, FT apontados pela análise "shortcut" que será utilizado como caso base para as otimizações das colunas.

A partir da máxima especificação possível para a recuperação dos componentes chave realiza-se a sua otimização para a primeira coluna que, neste caso, é a única que terá uma otimização de especificações.

Após isto, é realizado um procedimento não sequencial baseado nas composições de saída do caso base (especificações otimizadas) para a otimização individual de cada coluna com cálculo hidráulico e consideração de perdas de carga. Utilizou-se a faixa 1,2 a 1,3 RRmin para minimizar o número de simulações.

O projeto ótimo final é então realizado interligando-se as colunas e redimensionando-as (diâmetro e altura) sem levar em conta a perda de carga nos estágios. Isto deve ser feito para possibilitar uma adequada comparação entre as seqüências.

Analogamente, realiza-se a otimização das demais seqüências obtendo-se os dados apresentados nas tabelas do Anexo I.

As figuras V.7 a V.9 abaixo apresentam cada seqüenciamento possível já otimizados.

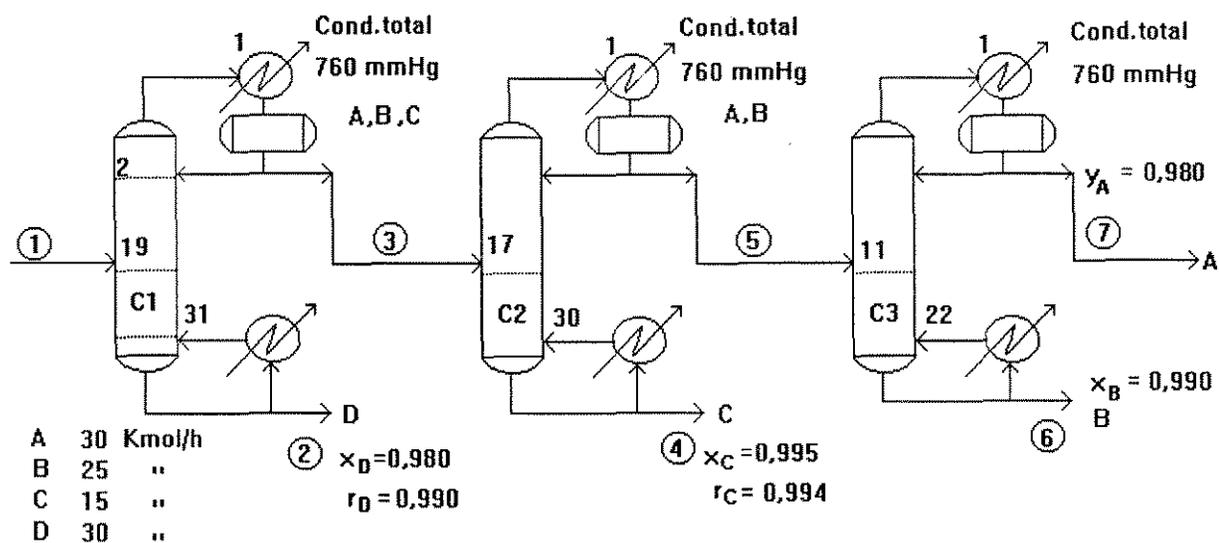


Figura V.7 - Terceira possibilidade de seqüenciamento

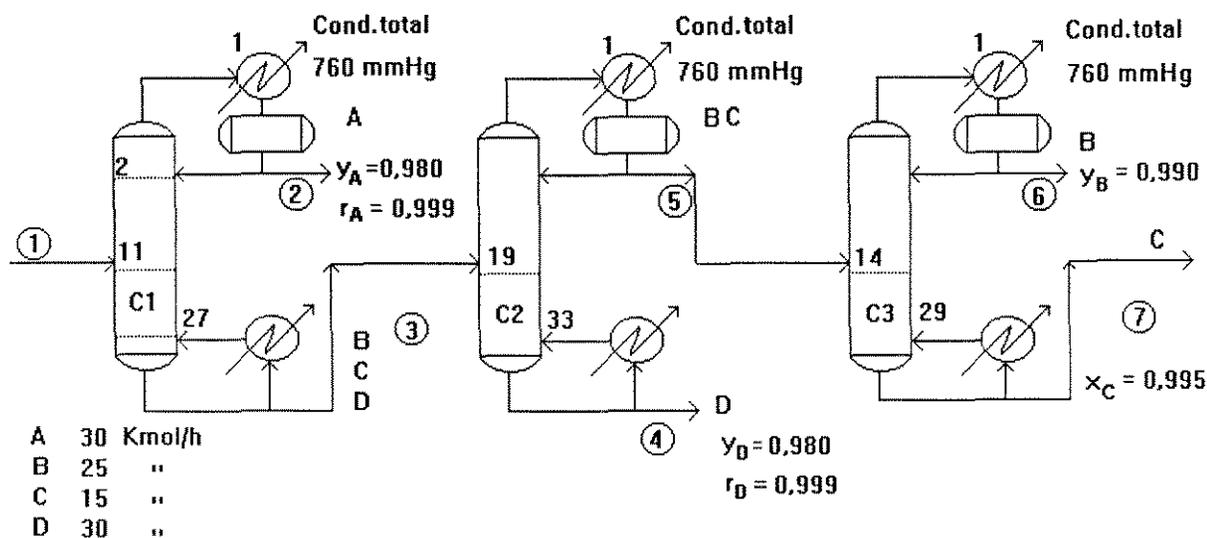


Figura V.8 - Quarta possibilidade de seqüenciamento

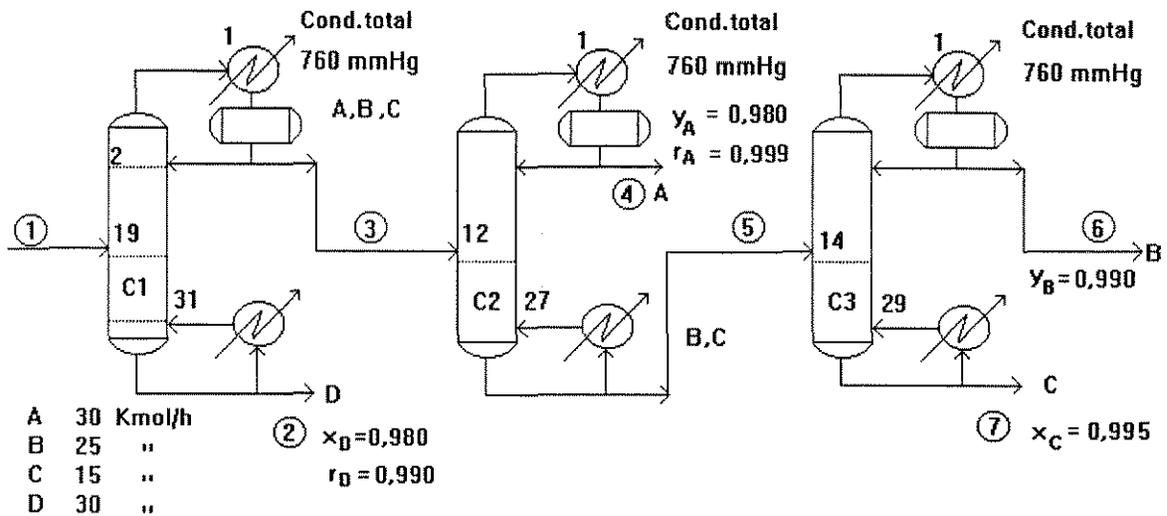


Figura V.9 - Quinta possibilidade de seqüenciamento

Resultaram cinco possíveis projetos ótimos distintos dos quais se escolherá o melhor.

V.7 - ANÁLISES E CONCLUSÕES

A metodologia desenvolvida inicia-se com um projeto preliminar baseado na análise "shortcut". A lista ordenada inicial é apresentada na tabela V.54 abaixo.

Tabela V.54* - Lista ordenada inicial - Análise "shortcut"

ordenação	seqüência	TAC tr (US\$)
1	1 direta	254.508
2	4	266.787
3	2	277.085
4	5	287.902
5	3 indireta	316.402

- Vide Tabelas V.27 a V. 53 no Anexo I

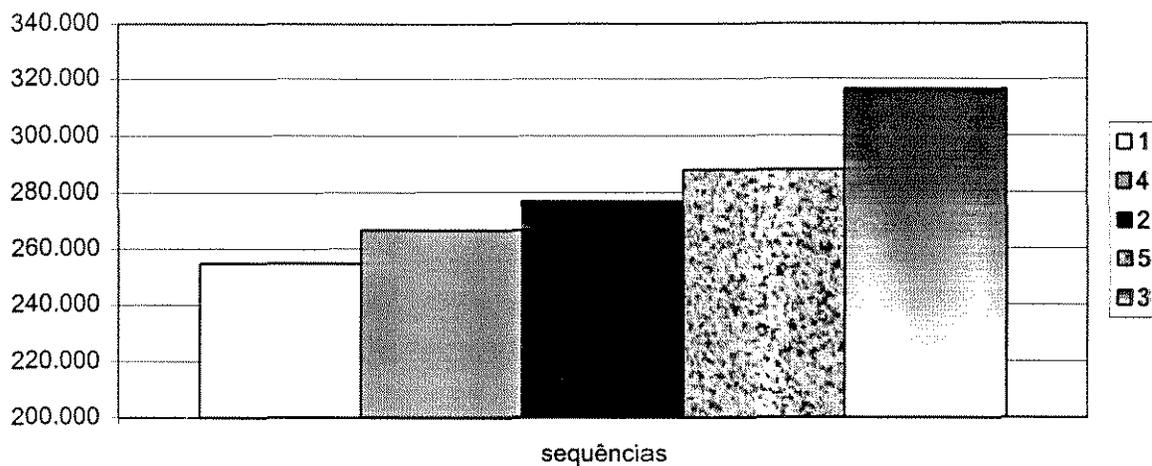


Gráfico IV - Lista Ordenada Inicial - Análise "shortcut"

O projeto obtido rigorosamente a partir de Ns e FT dado por esta análise, (sem qualquer otimização) conduz aos resultados apresentados na tabela V.55 abaixo.

Tabela V.55 - Lista ordenada inicial - Análise rigorosa

ordenação	seqüência	TAC tr (US\$)
1	2	299.555
2	1 direta	319.026
3	4	333.930
4	5	366.965
5	3 indireta	368.067

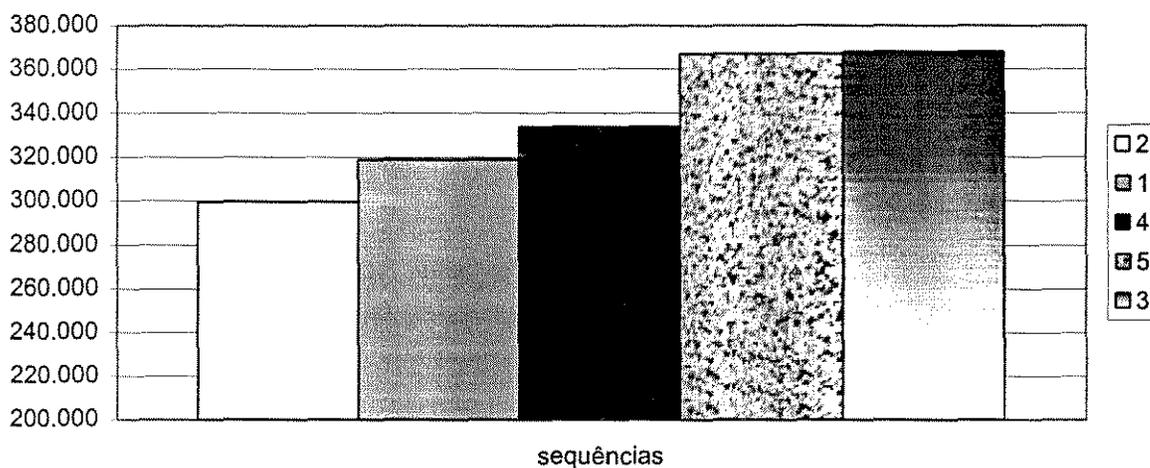


Gráfico V - Lista ordenada inicial - Análise Rigorosa

Verifica-se, que a lista ordenada se modifica; a seqüência número 2 ocupa agora o primeiro lugar no "ranking". Isto significa que ocorreu uma diferente avaliação das seqüências na análise "shortcut", onde algumas se desviaram mais do que outras de suas hipóteses simplificativas, sempre na direção de um menor custo que o real, ocorrendo uma alteração da lista ordenada. Este fato pode ser visualizado pela tabela V.56.

Tabela V.56 - Desvio entre as análises simplificada e rigorosa

seqüência	TAC tr s	TAC tr r	$100 (r - s) / (r)$
1 direta	254.508	319.026	20%
2	277.085	299.555	8%
3 indireta	316.402	368.067	14 %
4	266.787	333.930	20%
5	287.902	366.965	22%

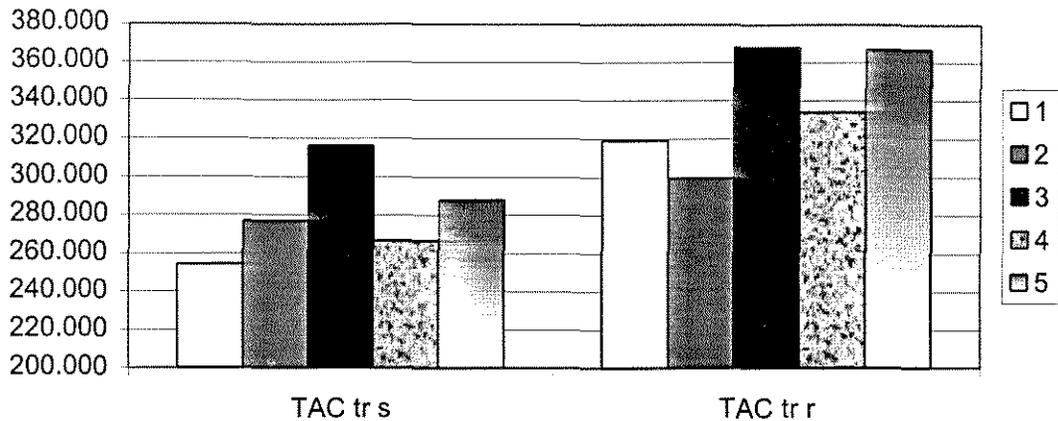


Gráfico VI - Desvio entre as análises simplificada e rigorosa

Observa-se que a seqüência 2 é avaliada com pouca diferença entre as duas análises (8%), enquanto para as demais seqüências o desvio é acentuado. Assim, a seqüência 2 "pula" para a ponta mantendo-se as demais na mesma ordem inicial; a seqüência 3, com 14% de diferença, aproxima-se muito da seqüência 5. Se o desvio entre as seqüências fosse mantido, a lista ordenada não se modificaria.

Comparando os resultados obtidos entre as duas análises ("shortcut" e rigorosa) para a seqüência 1, tem-se os resultados mostrados na tabela V.57.

Tabela V.57 - Comparação entre as análises para a seqüência direta

Simulação	"Shortcut "			Rigorosa			Otimizada		
	C1	C2	C3	C1	C2	C3	C1	C2	C3
Ns / FT	26/5	31/8	28/21	26/5	31/8	28/21	28/11	34/14	35/19
RR	1,308	1,616	3,258	2,352	2,207	4,499	1,3442	1,6271	3,1893
Φ^* (m) tr	0,875	0,894	0,919	1,055	0,990	1,044	0,882	0,896	0,941
Qr (MKcal/h)	0,522	0,489	0,478	0,723	0,591	0,614	0,5290	0,4913	0,4702
Qc (MKcal/h)	0,445	0,450	0,469	0,646	0,552	0,606	0,4519	0,4521	0,4618
VR (Kmol/h)	70,6	64,4	60,6	102,5	78,9	78,3	71,7	64,7	59,7
TAC tr (US\$)	86.713	85.382	82.412	116.201	100.631	102.193	88.636	87.033	85.271
Cti (US\$)	252.146	265.063	245.368	309.654	297.089	282.516	261.801	277.309	277.025
Cot (US\$)	61.499	58.876	57.875	85.236	70.922	73.941	62.456	59.302	57.569

* Diâmetro calculado pelas equações deduzidas no capítulo VI

A primeira observação é relativa ao valor das variáveis. A análise "shortcut" proporciona valores inferiores aos obtidos rigorosamente, ou seja, a análise "shortcut" apresenta valores subdimensionados das variáveis de custo e projeto.

A tabela V.58 fornece a variação das variáveis dadas pela equação V.13.

Quanto maior o desvio entre as variáveis, mais afastado está o comportamento da coluna das hipóteses simplificativas da análise "shortcut". Verifica-se que a maior variação de valores ocorre para a variável RR. Observa-se que a variação obtida para os custos operacionais é maior do que a obtida para os custos de investimento, o que é explicado pela menor variação das variáveis que atuam no custo de investimento (Φ e H) e pela maior variabilidade das variáveis que influem nos custos operacionais Qr, VR e RR.

Tabela V.58 - Desvio entre as análises para a seqüência direta

Seqüência 1	$\Delta\% C1$	$\Delta\% C2$	$\Delta\% C3$
RR	44	27	28
Φ (m) teórico	17	12	10
Qr (MKcal/h)	28	17	22
Qc (MKcal/h)	31	18	23
VR (Kmol/h)	31	18	23
TAC tr (US\$)	25	15	19
Cti (US\$)	19	11	13
Cot (US\$)	28	17	22

Conclui-se que a principal diferença entre as análises "shortcut" e rigorosa reside na estimativa da razão de refluxo. As hipóteses simplificativas desta análise influem significativamente nos resultados obtidos, mesmo para o exemplo estudado, cuja mistura é considerada próxima da idealidade, sendo comumente analisada em literatura através da análise simplificada.

Sendo :

$$VR = f_i (r/y)_i (1 + RR) \quad (V.18) \quad \text{ou} \quad VR = D * (RR + 1) \quad (V.16)$$

Para um mesmo caso de simulação, ao se comparar as duas análises, a vazão de destilado é a mesma; portanto, VR é função direta de RR.

Aplicando-se a equação V.13 para a variável VR, tem-se:

$$100 * (VR_r - VR_s) / (VR_r) = 100 * [1 - (RR + 1)_s / (RR + 1)_r]$$

A tabela V.57 confirma esta igualdade ao aplicar-se os pares de valores encontrados para VR e RR. Sendo também :

$$Q_r - Q_c = H_d + H_b - H_f \quad (V.19)$$

$$Q_c = VR \cdot \Delta h \quad (V.20)$$

$$H_d = D \cdot C_{pd} \cdot T_d \quad (V.21)$$

$$H_b = B \cdot C_{pb} \cdot T_b \quad (V.22)$$

Uma vez que as entalpias, calores específicos, temperaturas e fluxos de saída das colunas tem valores similares nas análises "shortcut" e rigorosa, os fluxos de energia no topo e fundo da coluna acompanharão a variabilidade em VR(RR) segundo a equação (V.20). Esta constatação é visualizada na tabela V.57 observando-se que a maior variabilidade de RR em C1 aumenta a variabilidade nas demais variáveis.

Conclui-se que a avaliação imprecisa de apenas uma variável de operação acarreta um desvio em todas as demais variáveis, como observado na tabela V.57. A análise "shortcut", portanto, pode falhar na determinação do seqüenciamento ótimo, mesmo para misturas de comportamento próximo ao ideal.

Observa-se a maior influência dos desvios na primeira coluna da seqüência 1. A explicação para este fato é que existe um desvio da idealidade diferente para cada trabalho de separação; por exemplo, a separação A / B,C,D. Seqüências que incorporam separações mais afastadas da idealidade terão variáveis globais mais afastadas da avaliação rigorosa.

A otimização rigorosa da recuperação dos componentes chave, utilizados como especificação para as colunas, leva à lista ordenada apresentada pela tabela V.59.

Tabela V.59 - Lista ordenada após otimização da especificação

ordenação	seqüência	TAC tr
1	2	298.497
2	1	319.026
3	4	333.930
4	3	366.388
5	5	366.965

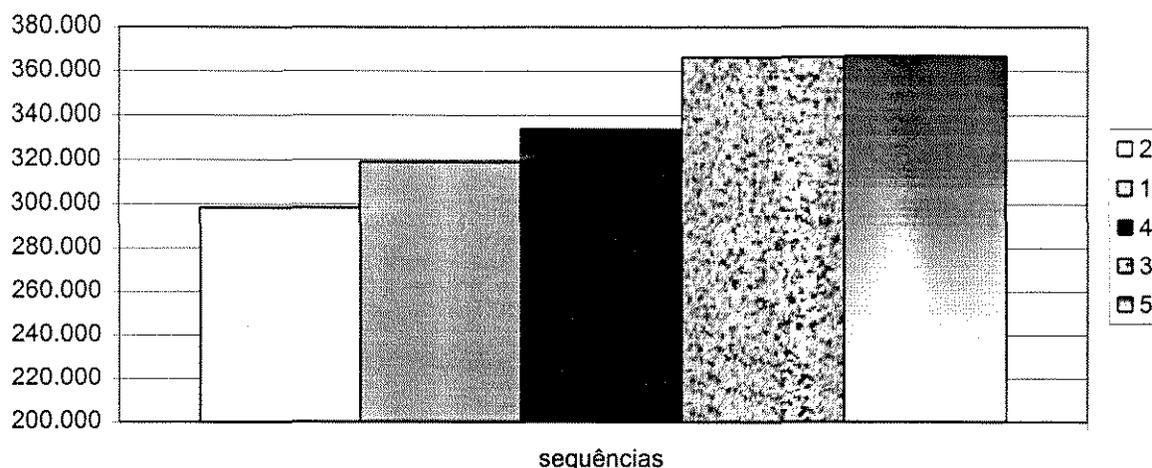


Gráfico VII - Lista ordenada após otimização da especificação

O que se observa agora é uma inversão entre as seqüências 3 e 5, muito embora possam ser consideradas equivalentes nas duas tabelas. Uma vez que a especificação das colunas nas seqüências é alterada, não há surpresa em haver uma nova modificação da lista ordenada. Houve otimização apenas nas seqüências 2 e 5, nas demais conservou-se a máxima separação proposta para os componentes chave.

A otimização do número de estágios em cada coluna e sua posição de alimentação conduz à seqüência ótima final, conforme apresentada na tabela V.60.

Tabela V.60 - Lista ordenada final com seqüências otimizadas

ordenação	seqüência	TAC tr	TAC pr
1	1	260.941	257.299
2	4	272.059	268.060
3	2	278.777	278.148
4	5	292.730	287.438
5	3	319.389	314.165

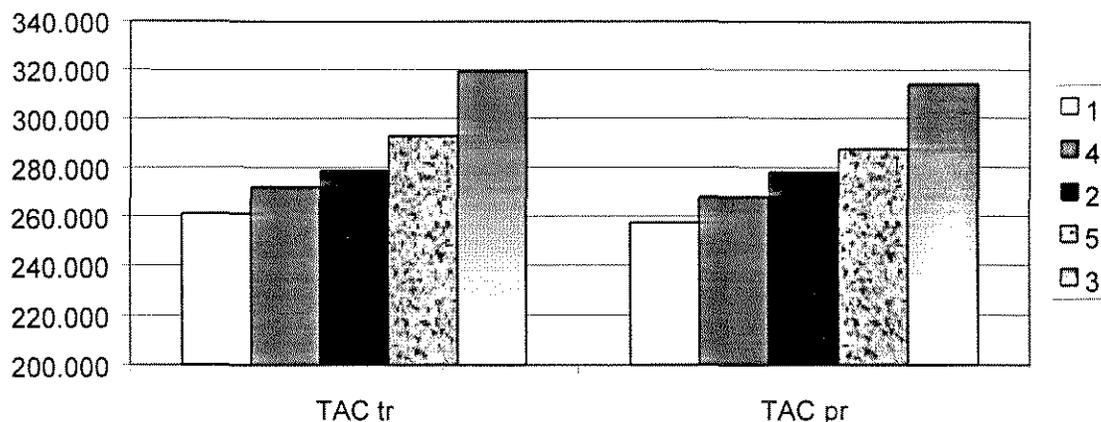


Gráfico VIII - Lista ordenada final com seqüências otimizadas

Observa-se que, curiosamente, o resultado final é igual ao da seqüência preliminar gerada pela análise "shortcut", tabela V.56, também com os valores de TAC muito próximos, como se compara na tabela V.61.

Tabela V.61 - Comparação entre as listas ordenadas inicial e final

ordenação	inicial	final	"shortcut"	rigoroso	Desvio s,r
			TAC tr s	TAC tr rop	
1	1 direta	1 direta	254.508	260.941	- 2,5 %
2	4	4	266.787	272.059	- 1,9 %
3	2	2	277.085	278.777	- 0,6 %
4	5	5	287.902	292.730	- 1,6 %
5	3 indireta	3 indireta	316.402	319.389	- 0,9 %

A análise matemática dos dados obtidos em todas as tabelas mostrará que o resultado encontrado não é uma simples coincidência (capítulo VI, item VI.5.3).

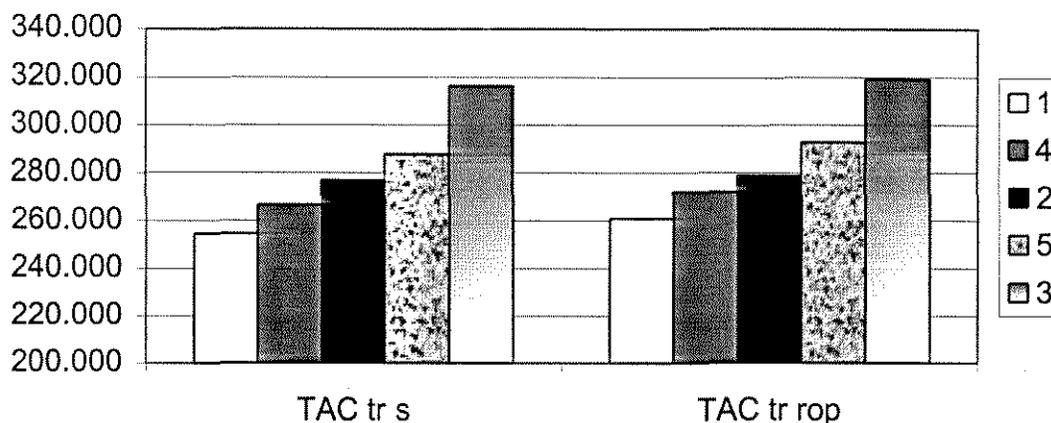


Gráfico IX - Comparação entre as listas ordenadas inicial e final

CONCLUSÃO

Uma vez que a lista ordenada entre as seqüências é alterada a cada etapa de otimização, conclui-se neste trabalho que *a otimização rigorosa das seqüências de destilação é uma etapa de síntese*, ou ainda, *a síntese de uma seqüência ótima de destilação pode ser dependente da otimização rigorosa de cada seqüência*.

Pelo exposto, as seguintes consequências são previstas:

- A síntese heurística evolucionária, como apresentada na literatura, possui avaliações de TAC baseadas em análise "shortcut". Este procedimento pode levar à escolha errada da melhor seqüência, apontando evoluções inexistentes. Isto ocorre principalmente por que o projeto obtido não é otimizado posteriormente, as colunas são projetadas exatamente com o número de estágios sugerido pela análise simplificada e as razões de refluxo obtidas não correspondem à realidade.
- Todos os trabalhos de síntese realizados na literatura a partir de uma análise "shortcut" estão sujeitos à uma otimização posterior, uma vez que o número de estágios e a posição da alimentação não corresponderão nem ao caso real e nem ao caso otimizado (cf. tabela V.57), o que indica que a síntese realizada não pode ser tomada como a seqüência final. Tais métodos podem, no entanto, serem convenientemente utilizados para a escolha de um pequeno grupo de seqüências sub-ótimas a serem otimizadas rigorosamente por esta metodologia.

- A otimização de variáveis de projeto e operação a partir de análise "shortcut", em uma metodologia algorítmica, pode não apresentar qualquer significado real, exigindo uma avaliação rigorosa posterior para conhecer o seu desvio das condições ideais postuladas pelas equações "shortcut", implícitas em sua função objetivo. Para isto, a utilização de um simulador comercial é recomendada.
- Os resultados obtidos por esta metodologia de síntese e otimização indicam a possibilidade de utilização de um simulador capaz de admitir o número de estágios das colunas como variável incógnita, assim, especificando-se uma razão de refluxo entre 1,2 e 1,3 RRmin juntamente à pureza e recuperação dos componentes chave (pureza/pureza ou recuperação/recuperação, dependendo do caso), um número de estágios bastante próximo ao ideal deverá ser obtido, minimizando-se o trabalho de otimização.

A evolução da otimização de custos pode ser acompanhada na tabela V.62.

Tabela V.62 - Evolução da otimização de custos

	1	2	Desempenho	3	Desempenho
	Otimização rigorosa baseada em análise "shortcut"	Otimização rigorosa de especificações	$\Delta 2,1$	Otimização rigorosa das variáveis	$\Delta 3,1$
Seqüência	TAC tr	TAC tr	%	TAC tr	%
1	319.026	319.026	0,00	260.941	18,2
2	299.555	298.497	0,35	278.777	6,9
3	368.067	366.388	0,46	319.389	13,2
4	333.930	333.930	0,00	272.059	18,5
5	366.965	366.965	0,00	292.730	20,2
Desempenho melhor / pior	18,4%	18,7%	-----	18,3%	-----

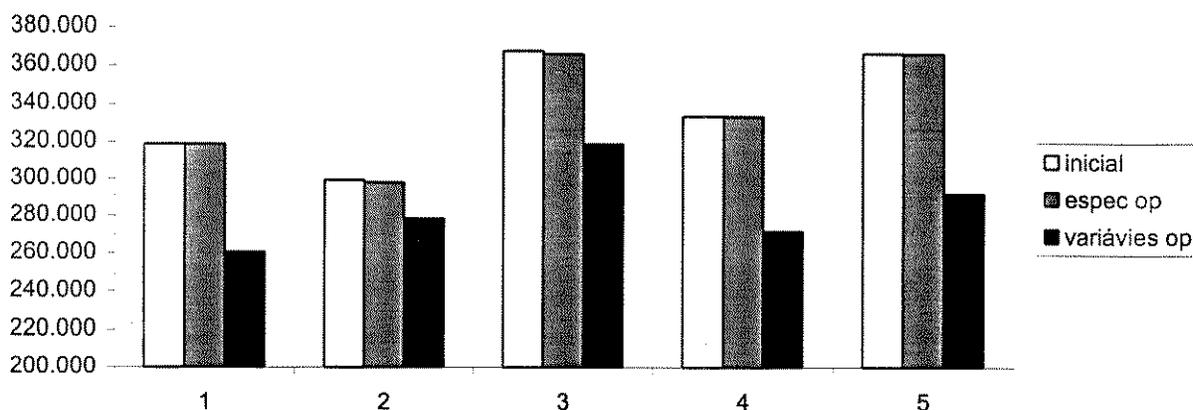


Gráfico X - Evolução da otimização de custos

Os números demonstram a efetividade de cada etapa. Primeiro, a necessidade da escolha da melhor seqüência entre as cinco possíveis. Em cada etapa, a otimização relativa ao pior caso foi de aproximadamente 18%. Tal índice revela que *a escolha da melhor seqüência a partir de uma metodologia de síntese apropriada é uma necessidade econômica.*

Segundo: entre cada seqüência, a variação de redução de custos entre um caso inicial baseado em análise "shortcut" e um caso otimizado foi de 7 a 20 %, o que é significativo. Portanto, a otimização rigorosa a partir de uma caso base projetado a partir da análise "shortcut" é fortemente recomendada economicamente.

Terceiro: a etapa de otimização de especificações não é efetiva economicamente para o exemplo escolhido, devido à reduções de custo menores que 0,5 %. Ocorre, como já analisado, que o relaxamento na especificação em uma coluna implica em sua otimização e em um aumento de custos na coluna posterior, ocorrendo um valor ótimo. Este valor ótimo não foi significativo para o exemplo escolhido. No caso estudado para três componentes, no entanto, obteve-se uma otimização significativa (6%) e um valor de recuperação diferente de r_{max} . Com a possibilidade de diminuição das purezas especificadas para os produtos ocorre conjuntamente a redução da recuperação dos componentes chave, diminuindo sua taxa de distribuição; neste caso, a contribuição da otimização de especificações poderá ser economicamente importante. Sugere-se uma investigação posterior aplicando e testando a metodologia desenvolvida para separações "pseudosharp" e "semisharp".

A faixa global de otimização compreende valores entre 261.000 a 367.000 dólares, revelando um potencial de 29% de economia. Isto demonstra que *a aplicação de uma metodologia apropriada de Síntese e Otimização de Seqüências de Destilação, utilizando a análise rigorosa, pode levar à uma economia efetiva de custos para o projeto e operação de trens de separação de misturas multicomponentes em produtos puros ou semi-puros.*

Capítulo VI

ANÁLISE DA FUNÇÃO OBJETIVO

VI.1 - INTRODUÇÃO

Rod e Marek (1959) propuseram que a vazão de vapor no topo de uma coluna é proporcional ao seu custo total anual, uma vez que está relacionada com o custo de investimento (diâmetro e número de estágios) e com o custo de operação da coluna.

Em sua formulação a vazão de vapor aparece da seguinte forma :

$$\Delta = \frac{\sum_1^j VR - \sum_1^j VRc}{F_0} \quad (VI.1)$$

onde :

- j é o número de colunas da seqüência
- Δ é a diferença entre o caso considerado e o caso padrão
- $\sum VRc$ é a vazão de vapor de uma seqüência padrão
- F_0 é a alimentação do início da seqüência.

A divisão pela vazão de alimentação torna o parâmetro Δ adimensional.

Douglas (1988) propõe que a vazão de vapor seja utilizada como uma alternativa de avaliação econômica.

Modi e Westerberg (1992) retomam o uso desta variável considerando que, para a necessidade de custo exatos, é melhor utilizar o TAC mas, para uma avaliação rápida, e nos casos onde não for requerida grande precisão, pode-se utilizar a vazão de vapor nas colunas como função objetivo. Neste trabalho, utiliza-se a equação proposta sem o termo de somatória das colunas para uma seqüência padrão.

$$VR_T = \frac{\sum_1^j VR_j}{F_0} \quad (VI.2)$$

Existem no entanto, outras variáveis que podem ser utilizadas como função objetivo.

A razão de refluxo (RR) está relacionada com a vazão de vapor na coluna, segundo a equação V.16

$$VR = D (1 + RR) \quad (V.16)$$

Isto significa que esta variável poderá ser utilizada para comparar colunas quando a vazão de destilado não variar entre elas, substituindo a vazão de vapor, o que é realizado no capítulo V quando a posição ótima de alimentação é pesquisada.

A carga térmica do condensador ou refeedor também poderá ser utilizada, como pode ser notado pelas equações V.19 e V.20 relacionando-se diretamente com VR. Ocorre, no entanto, a influência da pressão, da condição térmica de alimentação e do número de estágios utilizado, uma vez que as cargas térmicas estão também relacionadas com a composição das correntes e suas propriedades físicas.

$$Q_r - Q_c = H_d + H_b - H_o \quad (V.19)$$

$$Q_c = VR \cdot \Delta h \quad (V.20)$$

Neste trabalho analisa-se a aplicação destas funções objetivo através dos exemplos estudados buscando-se avaliar a possibilidade de substituição da função Custo Total Anual, para a simplificação do trabalho de síntese ou otimização.

Entre as funções objetivo utilizadas, o Custo Total Anual (TAC) é a mais utilizada na prática industrial.

Pode ser aplicado a um equipamento, a um conjunto de equipamentos ou a uma planta.

$$TAC = \frac{\text{Custo Total Instalado}}{\text{Vida Útil}} + \text{Custo Operacional Anual} \quad (VI.3)$$

A maneira exata de se obter o Custo Total Anual de um projeto de processo químico qualquer é realizar cotações no mercado obtendo os seguintes custos :

Custos de Investimento :

- Custo dos Equipamentos (FOB)
- Materiais
- Montagem
- Custos Indiretos (projeto, supervisão, taxas, aluguéis, seguro, frete, etc).

Custos Operacionais :

- Custos de Utilidades
- Custos de Manutenção
- Custos de Mão de Obra

Tais custos podem ser divididos em :

- Materiais (Cm):

- Concreto / Aço
- Elétricos (painéis, CCM's, cabos, eletrodutos, equipamentos, etc)
- Tubulação
- Estrutura Metálica
- Isolamento
- Tintas
- Instrumentação

- Mão de Obra / Serviços (L)

- Obras Civis
- Preparação do Terreno / Terraplanagem
- Fundação
- Montagem da Estrutura
- Montagem dos equipamentos
- Supervisão
- Pintura

Verifica-se, pela análise dos custos envolvidos na avaliação do TAC, que muitos deles serão função do tipo de indústria que está sendo implantado. Assim, se um seqüenciamento de colunas de destilação estiver inserido dentro de um projeto maior, como uma indústria petroquímica, a sua estrutura de custos será distinta daquela resultante de uma recuperação de solventes numa indústria de tintas. Pode-se citar como exemplo que os custos típicos de manutenção em uma refinaria podem ser considerados como 5% do custo do investimento realizado, enquanto que em uma planta de alquilação com ácido sulfúrico tem-se 7% (Douglas 1988). Tais custos serão também função do local a ser escolhido e do tempo, em casos de países de economia instável.

Para se obter os custos exatos das diversas atividades envolvidas na avaliação do TAC seria então necessário conhecer o tipo de planta na qual o seqüenciamento estará inserido ou se é o caso de um "revamp" (expansão de uma estrutura já existente) e colher um grande número de cotações e orçamentos visando desenvolver correlações entre as variáveis de projeto e o custo total anual.

Segue-se que a estimativa exata de custos a partir de orçamentos obtidos especificamente para tais avaliações é uma tarefa inviável de ser implantada em uma metodologia para a avaliação econômica de seqüências de destilação, dado o número elevado de informações a serem obtidas.

Visando obter dados de custos para estimativas de investimentos, diversos autores nos EUA obtiveram correlações para os mais variados equipamentos, para os serviços relacionados à montagem e para processos industriais completos, obtendo valores médios que podem ser aplicados a cada equipamento individual, como se somente ele estivesse sendo comprado, montado e operado, sem a necessidade de considerar a distribuição específica de custos de cada processo onde ele estará inserido. Estas correlações apresentam-se expressas em função de variáveis de operação ou de projeto apenas.

Dentre eles destacam-se os trabalhos de Peter e Timmerhaus (1980) e Kenneth Guthrie (1969), os mais citados na literatura pesquisada a respeito do seqüenciamento de colunas de destilação. Estes trabalhos foram desenvolvidos antes de 1980 e 1969 respectivamente. No entanto, devido à estabilidade econômica do mercado americano e, graças a um trabalho anual de atualização de custos desenvolvido por diversos órgãos independentes, torna-se possível utilizar tais correlações hoje para estimativas de custos de investimento, sem recorrer ao demorado ou impossível trabalho de colher cotações de mercado. Podem ser citados ainda os trabalhos de Jelen e Black (1983) e Ulrich (1984), como estimativas "shortcut" para os custos operacionais.

Pode-se observar que, não obstante exista um mercado internacional para os equipamentos utilizados na indústria química, os custos destes e, principalmente, os relacionados à mão de obra, variam de local para local. Torna-se evidente que tais estimativas de custo não se aplicam à maioria dos países fora dos EUA, o que é o caso do Brasil. A comunidade científica tem, no entanto, adotado estes trabalhos no intuito de obter grandezas relativas de comparação para as seqüências possíveis, utilizando o TAC como função objetivo.

Neste trabalho adota-se a mesma linha, quer para se obter uma medida relativa entre os seqüenciamentos possíveis, quer para uma comparação com os trabalhos da literatura. Portanto, não devemos esperar que os custos aqui apontados correspondam ao mercado brasileiro. Outrossim, a planilha aqui desenvolvida poderá vir a ser utilizada para a estimativa inicial de investimento se houver uma comparação dos valores apontados com os reais introduzindo-se alguma modificação nas correlações de custo, o que não pertence ao escopo desta dissertação.

VI.2 - ESTIMATIVA DE CUSTOS

Segundo Douglas (1988) a estimativa dos futuros custos operacionais e de investimento é uma importante etapa de projeto na engenharia química. Segundo o autor, as correlações de custos existentes possuem uma precisão variável entre -15% até +30% quando baseadas no fluxograma do processo e -5% a +15% quando baseadas nas especificações mecânicas completas dos equipamentos.

Como exemplo, uma fórmula típica para estimativa de investimento seria :

$$\log C_b = a_1 + a_2 \log S + a_3 (\log S)^2 \quad (\text{VI.4})$$

$$C_E = C_b \cdot f_d \cdot f_m \cdot f_v \quad (\text{VI.5})$$

onde,

C_b é o custo-base, tomado a partir de uma dada geometria.

C_E é o custo estimado do equipamento

S é um parâmetro de dimensão ou capacidade

a_1 , a_2 e a_3 são coeficientes a serem obtidos por orçamentos no mercado

f_d , f_m e f_v são os fatores de correção de custos associados às variações de projeto do equipamento (ex: cabeçote fixo ou flutuante em um trocador de calor), tipo de material utilizado e faixa de pressão de trabalho.

VI.2.1 - CUSTOS INSTALADOS DE EQUIPAMENTOS :

VI.2.1.1 - TROCADORES DE CALOR

- Equação de Guthrie :

O custo FOB de um trocador pode ser dado a partir de um caso base, obtido por um orçamento, segundo a expressão proposta por Guthrie (1969):

$$C = C_b \cdot \left(\frac{A}{A_b} \right)^{0,65} \quad (\text{VI.6})$$

onde,
 C é o custo a ser obtido
 C_b é o custo do caso base
 A é a área do trocador
 A_b é a área do caso base

Para obter o custo total instalado do equipamento a correlação aqui adotada e apresentada por Rathore et al. (1974) e Cheng e Liu (1988) baseia-se em um trocador tipo casco e tubo com cabeçote flutuante em aço carbono, apresentando a seguinte forma :

$$C_{TC} = 3,39 \cdot \left[9000 \cdot \left(\frac{A}{92,1} \right)^{0,65} \right] \quad (\text{VI.7})$$

A composição dos termos da equação é baseada no trabalho de Guthrie (1969) relativo à cotações obtidas em meados de 1968 no mercado americano (Gulf Coast). Nota-se o caso base adotado possuindo um custo de U\$ 9.000 para uma área de 92,1 m² (982 ft²), conforme aproximação obtida dos ábacos de custo apresentados pelo autor (Guthrie 1969, figura 3). O resultado obtido sem a constante multiplicadora é o custo FOB do equipamento naquela data.

A constante 3,39 refere-se aos custos associados à instalação de um trocador padrão (CS, cabeçote flutuante e pressão menor que 10 ata) segundo a estrutura de custos dada pela tabela VI.1 (Guthrie 1969, tabela III). É, no entanto, importante verificar que, havendo correção de custos devido à utilização de um material mais nobre, a estrutura da tabela não se altera pois não é função do tipo, pressão ou material utilizado no trocador. Assim, apesar do custo FOB do equipamento aumentar, o fator de custo de instalação apresentado deve ser aplicado somente sobre o custo do equipamento baseado no aço carbono (CS).

Tabela VI.1 - Estrutura de custos para equipamentos individuais (base CS)

	Trocadores de Calor	Vasos de Processo (verticais)
Custo FOB do equipamento (Ce)	100	100
Tubulação	46,1	60,6
Concreto	5,1	10,0
Aço	3,1	8,0
Instrumentação	10,2	11,5
Elétrica	2,0	5,0
Isolamento	4,9	8,0
Pintura	0,5	1,3
Total Materiais (Cm)	71,9	104,4
Custo Direto de Materiais $M = (Ce + Cm)$	171,9	204,4
Mão de Obra (montagem) (L)	64,3	100,0
Custo Direto (M + L)	236,2	304,4
Taxas, fretes, seguros	8,0	8,0
Custos Indiretos	94,4	121,6
Custo Total Instalado	338,6	434,0
Taxa L / M	0,37	0,49
Fator de Material	1,72	2,04
Fator de Custo Direto (M & L)	2,36	3,04
Fator de Custo Indireto	0,40	0,4
Fator Global	3,39	4,34

Exprimindo o custo FOB do equipamento em relação ao seu modelo mais simples (sem fatores de correção devido à material, tipo ou pressão de trabalho) :

$$C_e = C_b \cdot f_c \quad (\text{VI.8}) \quad \text{ou,} \quad C_e = C_b + \Delta \quad (\text{VI.9})$$

onde, f_c é um fator de correção de custo combinado (global).
 Δ é o valor de custo excedente do equipamento relativo ao seu custo base (CS , tipo padrão, baixas pressões).

Na tabela VI.1 apresenta-se o fator de custo de instalação do equipamento, baseado em um modelo-base. Para um modelo com diferentes materiais, projeto ou pressão de trabalho o fator de custo de instalação não deverá incidir sobre o custo FOB excedente.

$$C_{ti} = F C_b + \Delta \quad (\text{VI.10})$$

$$\Delta = C_e - C_b = C_b \cdot f_c - C_b = C_b (f_c - 1) \quad (\text{VI.11})$$

$$\therefore C_{ti} = F C_b + (C_b \cdot f_c - C_b) \quad (\text{VI.12})$$

$$\text{Assim :} \quad C_{ti} = C_b (f_c + F - 1) \quad (\text{VI.13})$$

onde : F é o fator de custo para a instalação do equipamento
 C_{ti} é o custo total instalado do equipamento

Aplicando-se (VI.13), a expressão (VI.7) devidamente simplificada e corrigida fica :

$$C_{TC} = 475,854 A^{0,65} [2,39 + (f_p + f_d) f_m] \quad (\text{VI.14})$$

$$f_p = 0,0147(P - 10,2) \quad ; \quad \text{se } P \leq 10,2 \text{ ata} \Rightarrow f_p = 0 \quad (\text{VI.15})$$

$$\text{onde :} \quad (f_p + f_d) \cdot f_m = f_c$$

- P é a pressão de operação
- f_p é o fator de correção de pressão.
- f_d é o fator de correção para o tipo de trocador
- f_m é o fator de correção para o material do trocador
- C_{TC} é o custo instalado do trocador em dólares
- A é a área de troca térmica em m^2

Os fatores de correção são dados pelas tabelas VI.2 e VI.3 abaixo.

Tabela VI.2 - Fator de correção para o tipo de trocador utilizado (fd)

Tipo do Trocador	fd
Cabeçote flutuante	1,00
Tubos fixos	0,80
Tubos em U	0,85
Refervedor com retorta (Kettle)	1,35

Tabela VI.3 - Fator de correção para o material utilizado (fm) - Casco / Tubo

Área (m ²)	CS / CS	CS / latão	CS / SS	SS / SS	CS / Monel	Monel / Monel	CS / Ti	Ti / Ti
até 9	1,00	1,05	1,54	2,50	2,00	3,20	4,10	10,28
9 a 46	1,00	1,10	1,78	3,10	2,30	3,50	5,20	10,60
46 a 93	1,00	1,15	2,25	3,26	2,50	3,65	6,15	10,75
93 a 464	1,00	1,30	2,81	3,75	3,10	4,25	8,95	13,05
464 a 929	1,00	1,52	3,52	4,50	3,75	4,95	11,10	16,60

VI.2.1.2 - COLUNAS DE DESTILAÇÃO

- Equações para dimensionamento das colunas :

- Altura da coluna

A altura de uma coluna de destilação pode ser dada pela equação VI.16.

$$H = e \cdot (N_s - 1) + e_v \quad (\text{VI.16})$$

onde:

- e é o espaçamento entre os estágios
- N_s é o número de estágios reais na coluna
- e_v é o espaço da coluna não ocupado pelos estágios

O simulador fornece, no procedimento rigoroso com cálculo hidráulico, o espaçamento dos estágios e o diâmetro; a altura, porém, será função do projeto da coluna e inclui outros detalhes que acarretam um espaço livre sem estágios. Segundo Douglas (1988) pode-se assumir um espaçamento entre 5 a 10 ft em cada extremidade da coluna ou 15% do espaço ocupado pelos estágios.

Heaven (1969) propôs equações "shortcut" para a estimativa da altura e do diâmetro das colunas de destilação tendo em vista a obtenção do Custo Total Anual. Neste trabalho, utilizou-se a equação proposta para o cálculo da altura, também utilizada por Cheng e Liu (1988), adaptando-a para a utilização de diferentes espaçamentos (na equação original $e = 0,61\text{m}$).

$$H = e \cdot N_s + 4,27 \quad (\text{VI.17})$$

onde : N_s é o número de estágios teóricos
 H é a altura da coluna em metros

- Diâmetro da coluna

Neste item é desenvolvida uma equação para o cálculo do diâmetro das colunas utilizada neste trabalho em simulações nas quais não é realizado o cálculo hidráulico da coluna. Isto ocorre nas simulações iniciais "shortcut" e em otimizações rigorosas para a obtenção da especificação ótima das colunas. Esta equação é também utilizada nas demais simulações para possibilitar a comparação de resultados, denominando-se o TAC obtido como TAC tr (teórico). O dimensionamento das colunas é realizado durante a otimização do número de estágios e posição de alimentação (com "sizing" e "rating" simultâneos) e na obtenção do projeto ótimo com as colunas interligadas ("sizing"). O TAC obtido a partir destes dados é aqui denominado TAC pr (prático) sendo utilizado para a comparação na otimização da posição de alimentação e do número de estágios. Nestas simulações, optou-se aleatoriamente por estágios valvulados, neste caso, o simulador PRO/II utiliza o método Glitsch (Glitsch, Inc., "Ballast Tray Design Manual", Bulletin No. 4900, 3rd Edition).

As comparações realizadas entre as seqüências são realizadas somente pela função objetivo TAC tr que, como analisado no item VI.5, resulta similar à TAC pr.

Assume-se uma coluna genérica onde ocorra corrente cruzada com um ou dois passes e que utilize "downcomers" com estágios do tipo campânula ("bubble cap"), valvulado (valve) ou perfurado (sieve).

Para uma determinada seção da coluna tem-se :

$$V_v = v \cdot A \quad (\text{VI.18}) \quad \text{e} \quad A = \frac{\pi \Phi_A^2}{4} \quad (\text{VI.19})$$

onde, V_v é a vazão de vapor na coluna (m^3/s)
 A é a área ocupada pela camada de líquido sobre o prato, denominada área ativa
 v é a velocidade superficial dos vapores na área ativa (m/s),
 Φ_A é o diâmetro ocupado pela área ativa

Definindo,:

$$v = v_f \cdot ff \quad (\text{VI.20})$$

sendo, v_f velocidade de inundação (flooding), acima da qual a operação da coluna poderá ser comprometida pelo arraste de líquido do fundo para o topo.

ff fator de inundação ("flooding"). Segundo diversos autores recomenda-se 60 a 80 % da velocidade de "flooding" para os vapores na coluna (Douglas, 1988). No caso do simulador PRO/II, utiliza como valores "default" os constantes da tabela VI.4.

Por simplificação, o diâmetro da coluna será calculado com base no fluxo de topo (Rathore et al. 1974; Cheng e Liu, 1988; Modi e Westerberg, 1992).

Sabe-se que :

$$w = V_v \cdot \rho_v \quad (\text{Kg/s}) \quad (\text{VI.21})$$

$$R = V_w \frac{1}{M} \cdot 3600 \quad (\text{Kmol/h}) \quad (\text{VI.22})$$

$$R = D \cdot (1 + RR) \quad (\text{V.16})$$

$$\rho_v = \frac{P}{\frac{R}{M} \cdot T} \quad (\text{assumindo-se gás ideal}) \quad (\text{VI.23})$$

onde, ρ_v é densidade do vapor (Kg/m^3)
 w é a vazão mássica de vapor (Kg/s)
 M é a massa molecular média do vapor (g)
 R é constante universal dos gases ($0,08206 \text{ atm m}^3 / \text{Kmol K}$)

Aplicando VI.19 até VI.23 e V.16 em VI.18 tem-se :

$$v \cdot \frac{\pi \Phi_A^2}{4} \cdot \rho_v \cdot \frac{1}{M} \cdot 3600 = D \cdot (1 + RR)$$

$$\Phi_A = \left[\frac{4}{\pi v} \cdot D \cdot (1 + RR) \cdot \frac{1}{3600} \cdot \frac{RT}{P} \right]^{1/2} \quad (\text{VI.24})$$

A área total da coluna deve incluir as áreas de passagem do fluxo líquido de entrada e saída nos pratos, ou seja, as áreas dos "downcomers" e das regiões de entrada e saída na bandeja e também a área inativa na periferia da coluna, onde não ocorre eficientemente o contato líquido-vapor. A área ativa assume, portanto, uma fração distinta da área total, conforme o tipo de estágio utilizado e o diâmetro da coluna.

Assume-se aqui a área ativa como sendo igual à 75 % (Perry and Chilton, 1984) da área total.

$$A_T = \frac{\pi \Phi^2}{4} = \frac{A_A}{0,75} = \frac{\pi \Phi_A^2}{4} \cdot \frac{1}{0,75} \quad (\text{VI.25})$$

$$\Phi = \Phi_A \cdot 1,155 \quad (\text{VI.26})$$

$$\Phi = 6,22 \cdot 10^{-3} \left[\frac{1}{v} D (1 + RR) \frac{T_t}{P_t} \right]^{1/2} \quad (\text{VI.27})$$

onde :

- RR é a razão de refluxo na coluna
- D é a vazão de destilado em Kmol/h
- v é a velocidade média dos vapores em m/s
- Tt é a temperatura de topo (segundo estágio) em Kelvin
- Pt é a pressão no topo (ata)

Conforme os valores assumidos para o fator de "flooding" e para a área total da coluna, existem variações na constante da equação para o cálculo do diâmetro (VI.27), como se verifica na literatura.

Tabela VI.4 - Fatores de Inundação utilizados pelo simulador PRO/II

Diâmetro da coluna (m)	Fator de inundação
0,00 a 0,61	0,70
0,61 a 1,22	0,75
1,22 a 3,05	0,78
3,05 a 15,24	0,80

- Cálculo da velocidade de inundação

A inundação pode ser causada por arraste de líquido para o topo (entrainment flooding) ou por excesso de líquido, acima da capacidade dos "downcomers" (downflow flooding). A restrição de máximo fluxo de vapor ocasiona o dimensionamento do diâmetro da coluna através da velocidade de inundação, enquanto a restrição por fluxo máximo de líquido relaciona-se ao espaçamento entre os estágios e à área dos "downcomers".

A velocidade de inundação relaciona-se a uma condição limite que é a máxima capacidade permissível de um prato para um determinado fluxo gás-líquido, fixando nesta condição um diâmetro mínimo para a coluna. O projeto de uma coluna de destilação deve assegurar que a operação esteja abaixo deste valor com uma determinada margem de segurança.

Souders e Brown (1934) apresentaram uma definição para este parâmetro de capacidade relacionando-o à velocidade dos vapores (K_i). Fair (1961) apresenta uma correlação entre o máximo valor permissível para este parâmetro de capacidade e um parâmetro adimensional distribuição de fluxo (K_j).

$$K_i = \frac{1}{0,3048} \cdot v_f \cdot \left(\frac{20}{\sigma} \right)^{0,2} \cdot \left(\frac{\rho_v}{\rho_L - \rho_v} \right)^{0,5} \quad (\text{VI.28})$$

$$K_j = \frac{L_w}{V_w} \cdot \left(\frac{\rho_v}{\rho_L} \right)^{0,5} \quad (\text{VI.29})$$

onde, L_w / V_w é a taxa de vazão mássica entre líquido e vapor na seção considerada .

σ é a tensão superficial do líquido (dinas/cm)

Tal correlação pode ser utilizada para obter a velocidade de inundação com $\pm 10\%$ de erro para pratos perfurados, valvulados ou campânulas (Fair et al. 1973) sujeita às seguintes restrições:

- Baixa ou nenhuma formação de espuma
- Comprimento do vertedor menor do que 15 % do espaçamento entre os estágios
- Perfuração para estágios perfurados menor do que 0,25 polegadas.
- Área das aberturas (slots) nas campânulas, perfurações ou das válvulas (totalmente abertas) maior do que 10% da área ativa.

Para o cálculo da velocidade de inundação utiliza-se aqui uma simplificação da correlação proposta, conforme Douglas (1988) e um fator de inundação igual a 75%.

Observa-se que entre K_j igual a 0,01 e 0,2 a variação de K_i é mínima. Considerando K_j igual a 0,1 obtém-se, em função do espaçamento entre os estágios, os valores de K_i conforme a tabela VI.5.

Tabela VI.5 - Relação entre os parâmetros de capacidade e de fluxo

Espaçamento (ft\m)	1,0 \ 0,30	1,5 \ 0,46	2,0 \ 0,61	3,0 \ 0,91
Fator de capacidade K_i	0,19	0,26	0,33	0,425
Fator de fluxo K_j	0,1	0,1	0,1	0,1

Realizando-se as seguintes simplificações na equação VI.28:

$$\rho_L \gg \rho_V \text{ (VI.30)}, \quad \left(\frac{20}{\sigma}\right)^{0,2} \cong 1 \quad \text{(VI.31)} \quad \text{tem-se,}$$

$$K_i = \frac{1}{0,3048} \cdot v_f \cdot \left(\frac{\rho_V}{\rho_L}\right)^{0,5} \quad \text{(VI.32);} \quad \text{(VI.23) } \Rightarrow \text{(VI.32):}$$

$$v_f = 0,0873 \cdot K_i \cdot \left(\frac{\rho_L T_t}{MP}\right)^{0,5} \quad \text{(VI.33)}$$

considerando (VI.20) e fazendo $f_f = 0,75$

$$v = 0,0655 K_i \left(\frac{\rho_L T_t}{MP_t}\right)^{0,5} \quad \text{(VI.34)}$$

Custo dos Estágios

A correlação aqui utilizada é baseada no trabalho de Guthrie (1969), conforme apresentada por Douglas (1988), o qual obteve a equação de custo a partir do gráfico apresentado no trabalho original. Esta equação representa os pontos originais com um desvio máximo de aproximadamente $\pm 20\%$.

$$C_s = 4,7 \cdot \Phi^{1,55} \cdot H \cdot f_c \text{ (unidades inglesas)} \quad \text{(VI.35)}$$

ou

$$C_s = 97,243 \cdot \Phi^{1,55} \cdot H \cdot f_c \text{ (unidades métricas)} \quad \text{(VI.36)}$$

$$f_c = f_e + f_i + f_m \quad (\text{VI.37})$$

onde : C_s é o custo instalado dos estágios na coluna

Φ é o diâmetro da coluna

H é a altura da coluna

f_c é o fator global de correção de custos

Os fatores de correção que compõem f_c são dados pela tabela VI.1. Considerou-se estágios valvulados em aço inox espaçados 24" (0,61m).

Tabela VI.6 - Correção de custos em colunas de destilação - Estágios

Espaçamento (in)	24	18	12		
f_e	1,0	1,4	2,2		
Material do estágio	aço carbonado	aço inox	monel		
f_m	0,0	1,7	8,9		
Tipo de estágio	Grade *	Perfurada **	Válvula **	Campânula **	Koch **
f_i	0,0	0,0	0,4	1,8	3,9

* Sem "downcomer"

** Com "downcomer"

Custo da Coluna de Destilação :

A) Correlação de Guthrie

Correlação apresentada por Douglas (1988) baseada nos dados de Guthrie (FOB) com aproximadamente $\pm 6\%$ de desvio em relação aos dados de custo originais. O fator 4,34 refere-se à transformação do custo FOB para custo instalado conforme explicitado na tabela VI.1. Douglas utiliza um fator igual a 3,18; preferiu-se manter o valor sugerido por Guthrie (1969).

$$C_c = 101,9 \cdot \Phi^{1,066} \cdot H^{0,802} \cdot [4,34 + (f_c - 1)] \quad (\text{VI.38}) \quad (\text{em unidades inglesas})$$

$$C_c = 937,636 \cdot \Phi^{1,066} \cdot H^{0,802} \cdot [4,34 + (f_c - 1)] \quad (\text{VI.39}) \quad (\text{em unidades métricas}) ; \text{ ou}$$

$$C_c = 937,636 \cdot \Phi^{1,066} \cdot H^{0,802} \cdot [3,34 + f_c] \quad (\text{VI.40})$$

onde, f_c é o fator de custo da coluna dado por $f_c = f_m \cdot f_p$ e obtido pelas tabelas VI.7 e VI.8

Tabela VI.7 - Correção de custos em colunas de destilação - Materiais

Material	aço carbono	aço inox 316	monel	titânio
f_m clad	1,00	2,25	3,89	4,23
f_m normal	1,00	3,67	6,34	7,89

Tabela VI.8 - Correção de custos em colunas de destilação - Pressão

Pressão (ata)	$\leq 3,4$	6,8	13,6	20,4	27,2	34,0	40,8	47,6	54,4	61,2	68,0
f_p	1,00	1,05	1,15	1,20	1,35	1,45	1,60	1,80	1,90	2,03	2,50

A correção de pressão pode ser correlacionada para a seguinte equação, válida até 34 ata :

$$f_p = 1 + 0,0147(\bar{P} - 3,4) \quad (\text{VI.41})$$

B) Correlação de Peter e Timmerhaus :

Para comparação, utilizou-se também a equação de Peter e Timmerhaus (1980) a qual já inclui o custo dos estágios :

$$C_c = 4263,67 \cdot \Phi^{1,1292} \cdot H \quad (\text{VI.42}) \quad (\text{unidades métricas})$$

Custo Total Instalado dos Equipamentos

É a somatória dos custos instalados individuais. No caso de uma seqüência de destilação :

$$C_{Ti} = \sum C_c + \sum C_{rv} + \sum C_{rf} + \sum C_l + \sum C_s \quad (\text{VI.43})$$

onde: C_l é o custo de instrumentação

C_{rv} é o custo do aquecedor

C_{rf} é o custo do resfriador

O custo de instrumentação pode ser estimado como uma porcentagem do custo total instalado dos equipamentos, no entanto, para seqüências de destilação, é mais prático estimar os instrumentos de cada coluna individualmente, considerando-as equivalentes.

VI.2.2 - CUSTO OPERACIONAL TOTAL ANUAL

É a somatória dos custos operacionais de todos os equipamentos. Para uma seqüência de destilação :

$$C_{ot} = \sum C_{orf} + \sum C_{orv} + \sum C_{oc} \quad (VI.44)$$

Os custos Operacionais dos equipamentos são dados pelas seguintes equações :

$$C_{orv} = C_{rv} \cdot \left(\frac{C_{\%mn}}{100} \right)_{rv} + H_o \cdot C_u \cdot Q_{rv} \quad (VI.45)$$

$$C_{orf} = C_{rf} \cdot \left(\frac{C_{\%mn}}{100} \right)_{rf} + H_o \cdot C_u \cdot Q_{rf} \quad (VI.46)$$

$$C_{oc} = \left(\frac{C_{\%mn}}{100} \right)_c \cdot C_c \quad (VI.47)$$

onde:

C_{orv} é o custo operacional do aquecedor

C_{orf} é o custo operacional do resfriador

C_{oc} é o custo operacional da coluna, relativo à sua manutenção somente

C_{rv} é o custo instalado do refervedor

$C_{\%mn}$ é o custo de manutenção como porcentagem do custo instalado do equipamento

C_u é o custo da utilidade consumida por M_kcal (vapor, fluido térmico, água de resfriamento, etc)

Q_{rv} é a carga térmica do refervedor em MKcal/h

Q_{rf} é o custo operacional do resfriador

H_o é o número de horas anuais de operação do equipamento

Os custos de manutenção estão, assim, estimados como uma porcentagem do custo total instalado dos equipamentos.

VI.3 - CORREÇÕES DE CUSTO DEVIDO À INFLAÇÃO

Para a possibilidade de aplicação das equações de custo deve-se atualizar os valores obtidos relativos à data em que foram publicados. Para isto existem nos EUA diversos índices que medem a inflação específica dos custos de processos, instalações, serviços e equipamentos. Pode-se citar :

- ENR** Engineering News Record Construction and Building Indexes (1967 = 100)
- CE** Chemical Engineering Plant Cost Index (1958 = 100)
- M&S** Marshall and Swift Equipment Index (1926 = 100)
- NRC** Nelson Refinery Construction Index (1946 = 100)

Para a estimativa de custos de equipamentos individuais, utilizou-se o índice M & S (Douglas 1980), sendo em 1992 = 943,1.

Para obter-se o custo atualizado basta aplicar a seguinte equação:

$$C = C_b \cdot \frac{I}{I_b} \quad (\text{VI.48})$$

onde, "Cb" representa o custo ou o índice existente na data em que a correlação foi publicada

VI.4 - PLANILHA DE CÁLCULO DAS FUNÇÕES OBJETIVO

Para se obter o valor das funções objetivo utilizadas neste trabalho desenvolveu-se uma planilha de cálculo com o aplicativo LOTUS 123.

O objetivo desta planilha é obter os valores totais das funções objetivo para toda a seqüência de destilação através de dados fornecidos pelas análises "shortcut" ou rigorosa.

A planilha é apresentada abaixo orientando-se o preenchimento de cada campo e apontando-se os valores assumidos nos cálculos realizando alguns comentários.

As letras em *itálico* são os comentários e explicações realizadas.

=====

Cálculo do Custo Total Anual de uma Seqüência de Colunas de Destilação.

Equações de Guthrie.

=====

COMANDOS DA PLANILHA

Nesta área de trabalho são definidos valores de projeto para a troca térmica. O comando ALT D leva a linha de trabalho até o fim da planilha onde se encontram informações "default" a respeito de critérios de projeto que podem ser utilizados para preencher este campo.

Preencher com zeros as colunas inexistentes para evitar mensagens de erro no final da planilha.

ALT D - VALORES DE DEFAULT

Sugestão de valores ao final da planilha.

ALT R - PARA RETORNAR AO INÍCIO

Macro Comando criado para levar a linha de trabalho para o final da planilha

ALT C - PARA RECALCULAR A PLANILHA

* especificação opcional

Os dados com esta marca podem ser fornecidos opcionalmente

* ÁREAS AQUECEDORES

Fornecer para cada coluna C1 até Cn um par de informações constituído por área/coeficiente, área/área ou coeficiente/coeficiente. Adotou-se fornecer as áreas através dos valores calculados ao final da planilha. Neste caso, esta região é preenchida por último, após todos os dados de entrada serem fornecidos.

* ÁREAS DOS RESFRIADORES

ou

* COEFICIENTE GLOBAL TOPO

Consultar, se desejado, os valores sugeridos pelo comando ALT D. Adotou-se 488 Kcal / hm² °C (Douglas 1988).

* COEFICIENTE GLOBAL FUNDO

* MÉDIA LOGARÍTMICA DE TEMPERATURAS CORRIGIDA - AQUECEDOR

* MÉDIA LOGARÍTMICA DE TEMPERATURAS CORRIGIDA - RESFRIADOR

O cálculo padrão da planilha assume resfriador 1-1 em contracorrente e aquecedor 1-1 em paralelo (ex. termosifão). Se o usuário desejar outro tipo de trocador poderá entrar com as MLDT corrigidas. Para aquecimento com vapor saturado a MLDT resulta em simples Δt .

Atenção :

*1 Fornecer áreas ou coeficientes apenas (0 ou valor)

*2 Após preencher ou modificar os valores deste campo utilizar ALT C

*3 Entrar com as MLDT corrigidas, se desejado, para trocadores com mais de um passe nos tubos ou casco.

=====

ENTRADA DE DADOS :

=====

NOME DO PROJETO : Fornecer um nome para identificar e salvar o programa

C1 C2 C3 C4 C5 C6 C7

Composição Molar da corrente de topo (%)

Propano *Definindo-se a composição de saída no topo da coluna, a massa molecular da corrente é calculada. Tal valor será utilizado para a avaliação da densidade do vapor no topo, para o cálculo do diâmetro da coluna (baseado no produto de topo). Poderá ser fornecido opcionalmente.*

Hexano

Pentano

Butano

Heptano

Octano

Nonano

Decano

TOTAL 100%

Mc *Massa molecular calculada; este valor será calculado se TOTAL for diferente de zero*

* Mf *Massa Molecular, fornecida opcionalmente.*

Densidade do vapor no topo *Valor calculado*

Densidade do líquido no topo *Valor fornecido*

Coluna

* Espaçamento entre os estágios *Se não for fornecido, a planilha utiliza o valor 0,61 m.*

* Altura da coluna : *Não obrigatório, poderá ser calculado pela equação proposta.*

* Diâmetro : *Pode ser fornecido quando obtido em uma simulação rigorosa. Não obrigatório.*

Carga térmica de topo (Mkcal/h) : *Fornecida pelas análises "shortcut" ou rigorosa.*

Carga térmica de fundo (Mkcal/h) *Idem*

Razão de Refluxo (Kmol/h) : *Idem*

Vazão de Destilado (Kmol/h) *Idem*

Vazão de Alimentação (Kmol/h): *Normalmente 100 Kmol/h*

Número de estágios real *Fornecido pela análise "shortcut" em função da razão de refluxo desejada ou assumido para a simulação rigorosa.*

Pressão de Topo (atm absoluta) *Fornecida para as simulações realizadas; considerou-se a*

pressão no primeiro estágio ,isto é, após os resfriador.

Pressão de Fundo : *É conseqüência da perda de carga entre os estágios a partir da geração de vapor pelo refeedor no fundo da coluna, uma vez definida a pressão de topo. Sendo que, normalmente, a perda de carga entre os estágios é baixa, poderá ser considerada, em situações normais, igual à pressão de topo ou fornecido o seu valor exato a partir de simulações rigorosas.*

Vazão de Vapor de Topo (Kmol/h) *Fornecida pela análise rigorosa. No caso da análise "shortcut" poderá ser calculada através de um balanço de massa na coluna : $VR = L + D = RR * D + D = D (RR + 1)$.*

Ki *Parâmetro de capacidade do prato em receber um fluxo de vapor, consultar a tabela para os valores assumidos, ao final da planilha.*

Kj *Parâmetro de fluxo, relacionado à taxa L / V no estágio. Assumiu-se constante e igual à 0,1.*

Trocadores

Temperatura entrada do fluido refrigerante (°C) :

Para fluidos ou correntes com $T_{bub} \geq 68$ °C adotou-se 28 °C, um valor comumente utilizado na saída das torres de resfriamento brasileiras. Para $T_{bub} < 68$ °C utilizou-se água resfriada a 4 °C, de maneira a manter os custos operacionais e de investimento com as mesmas ordens de grandeza, evitando áreas de troca elevadas ocasionadas por baixas diferenças terminais de temperatura.

Temperatura saída fluido refrigerante (°C) : *Adotou-se um delta T de 8 °C considerado como econômico para o projeto de sistemas de resfriamento*

Temperatura processo entrada do resfriador (°C) :

Fornecida pela análise rigorosa ou "shortcut"

Temperatura de processo na saída do resfriador (°C):

Depende do delta T fornecido na simulação da coluna para o subresfriamento. Adotou-se condensador total com delta igual a zero.

Temperatura entrada fluido de aquecimento (°C):

Adotou-se vapor como meio de aquecimento na pressão de 18 ata ou 206 °C.

Temperatura saída fluido aquecimento (°C):

Adotou-se igual à de entrada, fluido saturado.

Temperatura processo entrada aquecedor (°C):

Fornecida pela simulação.

Temperatura processo saída aquecedor (°C):

Adotou-se vapor saturado sendo igual à temperatura de entrada.

Coefficiente Global troca térmica topo (Kcal / h m² °C) :

Será calculado ou fornecido conforme o preenchimento da área de Comandos da Planilha. No caso de cálculo tem-se : $Q = U A MLDT$. Adotou-se 488 Kcal/h m² °C.

Coefficiente Global troca térmica fundo (Kcal / h m² °C):

Idem. Adotou-se a equação : $U_{rv} = 30.515,625 / MLDT$

Área de Topo :

Idem

Área da base :

Idem

MLDT de topo :

$MLDT = [(T - t)_s - (T - t)_o] / \ln [(T - t)_s / (T - t)_o]$
onde, "o", "s", representam a seção de entrada e a saída do trocador baseada no fluxo de utilidade; T e t representam as temperaturas de processo e utilidade respectivamente.

MLDT ou delta T de fundo :

$MLDT = [(t - T)_o - (t - T)_s] / \ln [(t - T)_o / (t - T)_s]$
em caso de vapores saturados : $MLDT = (t - T)$

Parâmetros de Custo

Dados para cálculo de custos

Fator correção custo espaçamento estágios *Consultar tabela (ALT D). Adotou-se 0,61 m.*

Fator correção custo tipo de estágio

Idem. Adotou-se pratos valvulados tipo V1 (Glitsh) ; fts=0,4 .

Fator correção custo material do estágio

Consultar tabela. Adotou-se o aço inox (default do simulador; fms = 1,7).

Fator correção global estágios

Valor Calculado : $f_c = f_e + f_t + f_m = 3,1$

Fator correção custo material coluna

Consultar tabela (ALT D). Adotou-se o aço carbono (fator = 1).

Fator correção custo pressão coluna

$f_p = 1 + 0,0147 (P - 3,4)$ para $P > 3,4$ ata onde P é a média de pressões na coluna.

Fator correção custo coluna (Guthrie)

*$f_c = f_m * f_p$ Valor calculado pela planilha.*

Fator correção custo pressão trocadores

$f_p = 1 + 0,0147 (P - 10,2)$ para $P > 10,2$ ata .

Fator correção custo tipo de trocador

Consultar tabela. Adotou-se cabeçote flutuante $f_d \tau_c = 1,00$.

Fator correção custo material trocador

Adotou-se o aço carbono no casco e tubos.

Fator correção global trocadores de calor

*Valor Calculado : $f_c = (f_p + f_d) * f_m$*

Custo utilidades resfriamento (US\$/Mkcal)

Adotou-se um custo de US\$ 2,66 por Mkcal para água de resfriamento proveniente de uma torre de resfriamento ou a água resfriada proveniente de uma unidade frigorífica (Modi e Westerberg 1992).

Custo utilidades aquecimento (US\$/Mkcal)	<i>Adotou-se o vapor a 206 °C (18 ata) a um custo de US\$ 10,6 por Mkcal (Modi e Westerberg 1992).</i>
Horas de operação anual (Ho)	<i>Normalmente 8500 horas equivalentes à 10 dias de parada para manutenção por ano em plantas químicas.</i>
Vida Útil do Projeto (anos)	<i>Adotou-se 10 anos.</i>
Custo de Instrumentação (US\$)	<i>Adotou-se US\$ 15.000 por coluna.</i>
Custo percentual manutenção coluna (%)	<i>Adotou-se 2% ao ano do custo instalado total.</i>
Custo perc. manutenção trocadores (%)	<i>Adotou-se 2% ao ano do custo instalado total.</i>
Taxa Atualização custos (Guthrie)	<i>Adotou-se o índice M & S de 1992 = 943,1 sendo o índice relativo à meados de 1968 assumido como 280,0 (Douglas 1988); o valor da taxa será 3,4.</i>
Taxa Atualização custos Peter. e Timm.	<i>M & S em 1979 = 599,4 (Cheng e Liu 1988); o valor da taxa será igual a 1,57.</i>

=====

SAÍDA DE DADOS

=====

C1 C2 C3 C4 C5 C6 C7

Projeto

Para simulações com análise "shortcut", onde as informações sobre o diâmetro e altura das colunas não são disponíveis utilizaremos estas equações denominando os custos obtidos de "teóricos" (tr).

Altura da Coluna (m) *Assumiu-se o espaçamento igual a 0,61 m.*

Diâmetro da Coluna (m)

Velocidade do vapor no topo da coluna (m/s)

Pressão média (ata)

$$P = (P_2 + P_n) / 2$$

Para uso em equações onde a pressão é requerida (absoluta). Utilizou-se o valor médio entre as pressões de topo e fundo.

Custos Parciais (US\$)**TOTAL**

Os cálculos parciais de custos são computados neste campo totalizando os valores para todas as colunas, quando aplicável.

C1+C2+...Cn

Custo instalado teórico coluna
(Peter e Timmerhaus)

Para o valor teórico, utilizou-se o diâmetro e a altura calculados pela equação apresentada, para uso em dados obtidos a partir de análises "shortcut", corrigindo-se o valor do custo pelo índice de correção apropriado.

Custo instalado prático coluna

Utilizou-se o diâmetro fornecido e a altura fornecida ou a

(Peter e Timmerhaus)	<i>calculada. Se a altura não for fornecida na entrada de dados a planilha utiliza a altura determinada pela equação de Heaven. Utilizou-se o índice de correção de custo.</i>
Custo instalado prático coluna (Guthrie)	Idem
Custo instalado teórico coluna (Guthrie)	Idem
Custo instalado teórico estágios (Guthrie)	<i>Para o custo teórico utiliza-se o diâmetro e a altura teóricos. Utilizou-se a taxa de correção de custo.</i>
Custo instalado prático estágios (Guthrie)	<i>Utilizou-se a altura e o diâmetro fornecidos. Se a altura não for fornecida a planilha calculará pela equação teórica. Utilizou-se a taxa de correção de custo.</i>
Custo instalado do aquecedor	<i>Utilizou-se a taxa de correção de custo</i>
Custo instalado do resfriador	<i>Idem</i>
Custo operacional anual teórico da coluna	
Custo operacional anual prático da coluna	
Custo operacional anual do resfriador:	
Custo operacional anual do aquecedor :	
Custo total instalado teórico de Guthrie	
Custo total instalado prático de Guthrie	
Custo operacional total anual teórico de Guthrie	
Custo operacional total anual prático de Guthrie	

=====

VALORES TOTAIS

=====

Custo Total Anual Teórico de Guthrie :	
Custo Total Anual Prático de Guthrie :	
Vazão Total de Vapor	<i>Além do Custo Anual Total calculou-se também outras funções objetivo para comparação.</i>
Carga térmica Total dos Aquecedores	
Taxa de Refluxo Total	

=====

VALORES DEFAULT

=====

ALT R - para retornar *Para retornar ao início apertar as teclas ALT + R.*

Nesta região, são fornecidos opcionalmente os valores dos parâmetros adotados para as estimativas de custo da planilha .

Coeficiente global do Resfriador : 488 Kcal / hm² °C - Douglas (1988)
 Coeficiente global do Aquecedor U_{rv} * MLDT = 30.515,625 Kcal/hm² - Douglas (1988)

Fornecer Q_r na linha 70 para obter as áreas sugeridas.

Área de Troca do Aquecedor 1

*Ao fornecer-se Q_r na linha 70 esta área calcula as áreas tal que U * MLDT=30.515,625 que podem ser utilizadas como sugestão (valor default). As áreas também podem ser fornecidas na primeira região da planilha, caso os coeficientes default para a troca térmica não sejam assumidos.*

$$A = Q / U \text{ MLDT} = Q / 30.515,625$$

Área de Troca do Aquecedor 2

•

•

Área de Troca do Aquecedor N

* Após preencher a área de comando no início da planilha, utilizar **ALT C**

Vida Útil do Projeto: Rathore 1974(a,b): 10 anos

UTILIDADE CUSTO (US\$ / Mkcal) - Modi e Westerberg (1992)

Vapor a 18 ata (206 °C) 10,6

Água de Resfriamento 2,66

Fatores de correção de custos para Materiais de Vasos de Pressão (Guthrie)

Material	Aço Carbono	Aço Inox	Monel	Titânio
Fm Clad	1,00	2,25	3,89	4,23
Fm integral	1,00	3,67	6,34	7,89

Fatores de correção de custos para o tipo de trocador utilizado (fd)

Tipo do Trocador	fd
Cabeçote flutuante	1.00
Tubos fixos	0.80
Tubos em U	0.85
Refervedor com retorta (Kettle)	1.35

Fatores de correção de custos para o material utilizado (fm)- Casco / Tubo

Área (m ²)	CS / CS	CS / latão	CS / SS	SS / SS	CS / Monel	Monel /Monel	CS / Ti	Ti / Ti
até 9	1,00	1,05	1,54	2,50	2,00	3,20	4,10	10,28
9 a 46	1,00	1,10	1,78	3,10	2,30	3,50	5,20	10,60
46 a 93	1,00	1,15	2,25	3,26	2,50	3,65	6,15	10,75
93 a 464	1,00	1,30	2,81	3,75	3,10	4,25	8,95	13,05
464 a 929	1,00	1,52	3,52	4,50	3,75	4,95	11,10	16,60

Fatores de correção de custos em colunas de destilação - Estágios

Espaçamento entre os estágios (in)	24	18	12		
f_s	1,0	1,4	2,2		
Tipo de estágio	Grade *	Perfurada **	Válvula **	Campânula **	Koch **
f_t	0,0	0,0	0,4	1,8	3,9
Material do estágio	aço carbono	aço inox	monel		
f_m	0,0	1,7	8,9		

* Sem downcomer

** Com downcomer

Velocidade do vapor nas colunas.

Espaçamento (ft \ m)	1,0 \ 0,30	1,5 \ 0,46	2,0 \ 0,61	3,0 \ 0,91
fator de capacidade Ki	0,19	0,26	0,33	0,425
fator de fluxo Kj	0,1	0,1	0,1	0,1

=====

=====

VI.5 - ANÁLISE DAS FUNÇÕES OBJETIVO

VI.5.1 - REPRESENTATIVIDADE E VARIABILIDADE DA FUNÇÃO TAC tr

As conclusões obtidas nos capítulos IV e V advêm basicamente da comparação entre as funções objetivo TAC de cada seqüência. Esta função é composta pelos custos de investimento e operação de uma coluna. Assim, para uma dada coluna operando com uma razão de refluxo qualquer :

$$TAC = TAC(\Phi, H, RR) \quad (\text{VI.49}) \quad \text{ou seja,}$$

$$TAC = \frac{C_{ii}}{PL} + C_{ot} \quad (\text{VI.3})$$

$$C_{ii} = C_c + C_{TC} + C_I + C_S \quad (\text{VI.43}) \quad \text{onde:}$$

$$C_{TC} = C_{rf} + C_{rv} \quad (\text{VI.50})$$

$$C_{ot} = C_{orv} + C_{orf} + C_{oc} \quad (\text{VI.44})$$

O custo de instrumentação aqui considerado é constante para todas as colunas e o custo dos estágios representa cerca de 13% do custo das colunas e 2,5% do custo total anual, podendo ser desprezado nesta análise, conforme se poderá verificar na planilha A.2.4 (Anexo II). As equações a seguir apresentadas são válidas ao comparar-se dois diferentes projetos de uma coluna mas com misturas de entrada, topo e fundo semelhantes.

O custo dos trocadores de calor depende diretamente da área de troca térmica.

$$Q_{TC} = U A MLDT \quad (\text{VI.51})$$

$$A = f(Q_{TC}) \quad (\text{VI.52})$$

Das equações V.19 e V.20 :

$$Q_c = VR \cdot \Delta h = D \cdot (RR + 1) \cdot \Delta h = K'_2 \cdot RR + K'_3 \quad (\text{VI.53})$$

$$Q_r = Hd + Hb - Ho + D \cdot RR \cdot \Delta h + D \cdot \Delta h = K'_4 \cdot RR + K'_5 \quad (\text{VI.54})$$

Substituindo-se as equações VI.14, VI.36, VI.40 e VI.55 em VI.43 tem-se:

$$C_{TC} = C_{rf} + C_{rv} = K'_6 \cdot RR^{0,65} + K'_7 \quad (\text{VI.55})$$

$$C_{ii} = K_1' H^{0,802} \phi^{1,066} + K_6' RR^{0,65} + K_7' \quad (\text{VI.56})$$

onde K_i' é uma constante

sendo,

$$C_{ot} = \frac{C\%mn}{100} (C_{rv} + C_{rf} + C_c) + H_o \frac{C_u}{100} (Q_{rv} + Q_{rf}) \quad (\text{VI.57})$$

O custo de manutenção é normalmente avaliado como uma porcentagem dos custos dos equipamentos, representando cerca de 2% ao ano do seu custo instalado (Rathore et al., 1974 a,b; Jelen e Black, 1983). Isto significa cerca de 6% do TAC da seqüência, segundo se pode observar na planilha A.2.4 (Anexo II) ou na tabela V.57 (análise rigorosa). Desprezando-se os custos de manutenção:

$$C_{ot} = K_{10}' Q_r + K_{11}' Q_c = K_{12}' RR + K_{13}' RR + K_{14}' = K_4' RR + K_{14}' \quad (\text{VI.58})$$

Aplicando-se VI.58 e VI.56 em VI.3 tem-se:

$$\boxed{TAC = K_1 \cdot H^{0,802} \cdot \phi^{1,066} + K_6 \cdot RR^{0,65} + K_4 \cdot RR + K_7} \quad (\text{VI.59})$$

Portanto, $TAC = TAC(\Phi, H, RR)$

A função TAC tr possui uma particularidade. Nela, $\Phi = \Phi(RR)$.

Em TAC pr isto não ocorre pois o diâmetro da coluna é obtido por um processo particular do simulador, considerando as propriedades em cada estágio e calculando-os com diâmetros diferentes, de modo a manter um fator de "flooding" constante (tabela VI.4) e recalculando posteriormente toda a coluna para o maior diâmetro encontrado que é convertido no diâmetro comercial mais próximo.

Em todas as comparações entre TAC tr realizadas entre diferentes projetos de uma mesma seqüência ocorrerá :

$$TAC \text{ tr} = TAC(H, RR) \quad (\text{VI.60})$$

Sendo:

$$H = N_s \cdot 0,61 + 4,27 = K'_8 \cdot N_s + K'_9 \quad (\text{VI.61})$$

$$\Phi = 6,22 \cdot 10^{-3} \left[\frac{1}{v} D (1 + RR) \frac{T_t}{P_t} \right]^{1/2} \quad (\text{VI.27})$$

$$v = 0,0655 K_i \left(\frac{\rho_l T_t}{M P_t} \right)^{0,5} \quad (\text{VI.34})$$

então,

$$C_{ii} = K_1 H^{0,802} + K_2 H^{0,802} RR^{0,533} + K_3 RR^{0,65} + K_4 \quad (\text{VI.62})$$

que, juntamente a VI.68 resulta em:

$$TAC_{tr,j} = \left[K_1 H^{0,802} + K_2 H^{0,802} RR^{0,533} + K_3 RR^{0,65} + K_4 \right] + \left[K_5 RR + K_6 \right] \quad (\text{VI.63})$$

ou

$$TAC_{tr,j} = \left[k_1 N_s^{0,802} + k_2 N_s^{0,802} RR^{0,533} + k_3 RR^{0,65} + k_4 \right] + \left[k_5 RR + k_6 \right] \quad (\text{VI.64})$$

Como pode ser visto pela equação VI.63 a função TAC tr pode ser expressa como:

TAC tr = TAC (H, RR). Sendo RR = RR (Φ), pode-se escrever também:

$$TAC_{tr} = TAC_{tr} (H, \Phi) \quad (\text{VI.65}) \quad \text{pois,}$$

$$RR = K_8 \cdot \Phi^2 - 1 \quad (\text{VI.66})$$

Uma vez que a altura é avaliada igualmente nas funções TAC pr e TAC tr, elas diferirão basicamente no cálculo do diâmetro; a razão de refluxo é a mesma entre os dois casos mas, no primeiro, ela não é computada para o cálculo do diâmetro.

Na tabela VI.9 compara-se o desvio entre as funções TAC tr e TAC pr obtidas através da escolha aleatória de 10 casos de simulação rigorosa com dimensionamento hidráulico dos estágios. O índice pr (prático) refere-se aos valores baseados nos diâmetros apresentados pelo simulador PRO/II, o índice tr (teórico) refere-se aos baseados na equação VI.27.

A aplicação desta equação mostra-se bastante satisfatória. Os diâmetros obtidos geram uma diferença média de 1% com variabilidade possível entre +5% e -3% entre as funções TAC tr e TAC pr. De acordo com a tabela V.62 verifica-se que a % de otimização alcançada é maior do que esta variabilidade, indicando segurança quanto às conclusões obtidas. Nesta mesma tabela verifica-se que a otimização de especificações não poderá ser considerada para o exemplo estudado, uma vez que a variabilidade da função TAC tr relativa ao padrão TAC pr é superior à economia encontrada.

Em algumas simulações ocorre uma maior divergência entre os diâmetros porque o simulador PRO/II possui uma rotina de cálculo substancialmente diferente. O resultado global é, contudo, satisfatório.

Tabela VI.9 - Comparação entre as funções TAC tr e TAC pr

Tabela	Ns / FT	Φ tr	Φ pr	Δ %	TAC tr	TAC pr	Δ %
A.1.5.53 *	32 / 19	1,133	1,067	+6,2	142.093	140.333	+1,25
A.1.5.32 **	35 / 19	0,920	0,914	+0,7	85.768	85.603	+0,2
A.1.5.52	27 / 12	0,848	0,762	+11,3	74.323	72.375	+2,30
A.1.5.44	29 / 17	1,060	1,067	-0,7	114.890	115.060	-0,15
A.1.5.44	34 / 19	1,039	0,914	+13,7	114.446	111.035	+3,10
A.1.5.36	34 / 20	1,137	1,067	+6,6	145.479	143.549	+1,40
V.6	36 / 17	1,166	1,067	+9,3	136.994	134.143	+2,10
V.15	27 / 10	0,888	0,914	-2,8	90.800	91.407	-0,70
V.21	34 / 14	0,898	0,914	-1,8	88.936	89.371	-0,50
V.19	26 / 16	0,981	0,914	+7,3	92.106	90.575	+1,70
Média $\pm 3\sigma$				4,9 \pm 16,6			1,1 \pm 3,7
OBS:	* Utilizou-se os dados da primeira coluna ** Utilizou-se os dados da terceira coluna						

VI.5.2 - ANÁLISE DA APLICAÇÃO E "PERFORMANCE" DAS FUNÇÕES OBJETIVO

As tabelas IV.1, IV.2, A.1.4.3 e V.57 podem ser tomadas como uma amostragem representativa das principais simulações realizadas para as cinco alternativas de seqüências. Os resultados apontados por cada função objetivo são indicados na tabela VI.10.

Tabela VI.10 - Ordenações de seqüências apontadas pelas funções objetivo

Tabelas	TAC tr (US\$)	TAC pr (US\$)	$\Sigma VR / Fo$	ΣQr (Mkcal/h)	ΣRR
IV.1 Simplificada	1,4,2,5,3	-----	1,4,2,5,3	1,4,2,5,3	3,5,4,2,1
IV.2 Rigorosa	2,1,4,5,3	-----	2,1,4,3,5	2,1,4,5,3	3,5,4,2,1
A.1.4.3 Otimizada	1,4,2,5,3	1,4,2,5,3	1,4,2,5,3	1,4,2,5,3	5,3,4,2,1
V.57 Simplificada	C3,C2,C1	-----	C3,C2,C1	C3,C2,C1	C1,C2,C3
V.57 Rigorosa	C2,C3,C1	-----	C3,C2,C1	C2,C3,C1	C2,C1,C3

Os resultados obtidos indicam que a função objetivo "somatória das cargas térmicas dos revedores" poderia ser utilizada convenientemente para substituir a função TAC.

A única ressalva a ser feita é para a otimização individual de colunas quanto à Ns e FT onde, sendo considerada a perda de carga entre os estágios, a única função objetivo satisfatória é o TAC, conforme a tabela V.6, por exemplo. Sugere-se avaliar posteriormente a real importância da consideração da perda de carga, verificando se nestes casos a função objetivo Qr indicaria o melhor projeto.

Uma vez que Qr, VR e RR refletem os custos operacionais, os quais são dominantes, seria de se esperar um comportamento satisfatório de todas essas funções.

A função ΣRR , no entanto, fracassa em todas as simulações e a função ΣVR fracassa em algumas. Ambas são fortemente dependentes da quantidade de destilado que sai na coluna, isto significa que a seqüência direta deverá apresentar melhor performance com ΣVR e pior com ΣRR , como se verifica na tabela VI.10 e conforme as equações VI.67 a VI.69 abaixo, baseadas nas equações V.16, V.19 e V.20.

$$\sum_{j=1}^{C-1} RR = (1-C) + \sum_{j=1}^{C-1} \frac{VR}{D} \quad (VI.67)$$

$$\sum_{j=1}^{C-1} VR = \sum_{j=1}^{C-1} D + \sum_{j=1}^{C-1} D \cdot RR \quad (VI.68)$$

$$\sum_{j=1}^{C-1} Qr = \sum_{j=1}^{C-1} Hd + \sum_{j=1}^{C-1} Hb - \sum_{j=1}^{C-1} Ho + \sum_{j=1}^{C-1} (VR \cdot \Delta h) \quad (VI.69)$$

Nota-se que as três funções objetivo são distintas. A função Qr possui a vantagem de contemplar quase todas as variáveis envolvidas, faltando o número de estágios ou a altura das colunas que é responsável por apenas 2,5% do TAC.

VI.5.3 - ANÁLISE DOS RESULTADOS OBTIDOS NOS CAPÍTULO IV e V

Comparação entre as seqüências iniciais e as otimizadas

De acordo com a expressão deduzida no item VI.5.1:

$$TAC_j = [K_1 H^{0,802} + K_2 H^{0,802} RR^{0,533} + K_3 RR^{0,65} + K_4] + [K_5 RR + K_6] \quad (VI.63)$$

$$TAC_j = TAC(H, RR)_j \quad (VI.64)$$

ou,

$$TAC_j = [k_1 NS^{0,802} + k_2 NS^{0,802} RR^{0,533} + k_3 RR^{0,65} + k_4] + [k_5 RR + k_6] \quad (VI.65)$$

$$TAC_j = TAC(NS, RR)_j \quad (VI.66)$$

Quando se compara duas seqüências avaliadas pela função TAC tr tem-se:

$$\frac{TAC_{s1}}{TAC_{s2}} = \frac{\sum_{j=1}^{C-1} TAC_j}{\sum_{k=1}^{C-1} TAC_k} = \frac{\sum_{j=1}^{C-1} TAC(H, RR)_j}{\sum_{j=1}^{C-1} TAC(H, RR)_k} = \frac{\sum_{j=1}^{C-1} TAC(NS, RR)_j}{\sum_{j=1}^{C-1} TAC(NS, RR)_k}$$

onde j e k representam cada coluna da seqüência

Entre dois diferentes projetos de uma mesma seqüência de destilação se $\Lambda_j \approx \Lambda_k$ e $Co \gg Ci$ ou $Ns_j \approx Ns_k$ então :

$$\sum_{j=1}^{C-1} TAC_j \approx \sum_{k=1}^{C-1} TAC_k$$

Verifica-se, para a mistura aproximadamente ideal estudada, em separações "sharp" entre os componentes chave, que entre duas seqüências iguais submetidas a diferentes números de estágios e razões de refluxo ("shortcut" e otimizada por exemplo), a variabilidade das composições e das propriedades das correntes de topo, fundo e alimentação é pequena.

Assim, ocorre que:

$$K_j \approx K_k \text{ e } RR_{min\ j} \approx RR_{min\ k} \Rightarrow (RR / RR_{min})_j \approx (RR / RR_{min})_k \text{ ou } \Lambda_j \approx \Lambda_k$$

Nos exemplos estudados (Capítulo V), ocorre uma pequena variabilidade entre os diâmetros obtidos nas duas análises (inicial e otimizada) e na variável RR, que se situa entre 1,2 e 1,4 RRmin. Além disto, os custos de investimento representam menos de 30% da função TAC tr (cf. Anexo II) e a variabilidade entre o número de estágios nas análises inicial e final é pequena, como se observa na tabela V.57.

Conclui-se que o uso da análise "shortcut" para a síntese do conjunto inicial de seqüências a serem otimizadas é recomendado devido à sua simplicidade e devido à boa performance que pode ser alcançada se a razão de refluxo escolhida para a análise "shortcut" for semelhante à faixa ótima de razões de refluxo obtidas na análise rigorosa otimizada. Neste caso, como verificado no capítulo IV, o método evolucionário de Seader e Westerberg (1977) é recomendado.

Se houver um maior peso dos custos de investimento ou um desvio acentuado da idealidade da mistura então, provavelmente, ocorrerá que a razão de refluxo das sequências finais otimizadas estarão afastadas da faixa 1,2 a 1,4 RRmin e, assim, da hipótese inicial utilizada na análise "shortcut" (1,2 RRmin). Isto implica em uma não similaridade na função ΣTAC tr entre as duas análises e, possivelmente, ocorrerá a obtenção de uma falsa lista ordenada inicial e que não corresponda à lista obtida após a otimização das sequências. Este problema pode ser resolvido realizando-se duas ações:

1) O conjunto de seqüências selecionado pela síntese heurística em análise simplificada, deverá possuir uma maior dimensão para evitar a exclusão de seqüências que, após a otimização, evoluam para a condição de mínimo custo.

2) Após a otimização das sequências selecionadas deve-se verificar se há similaridade entre a razão de refluxo obtida na análise simplificada e a das sequências finais encontradas (cf. tabela V.57). Se isto não ocorrer, dois caminhos podem ser pesquisados:

A) Reiniciar o processo com o método evolucionário de Seader e Westerberg (1977) partindo de uma maior razão de refluxo na análise "shortcut". Uma vez que as sequências otimizadas finais não terão qualquer modificação de variáveis, então deverá ocorrer novamente uma similaridade entre o custo global nas duas análises se o número de estágios entre as duas não for muito diferente.

B) Manter a mesma razão de refluxo utilizada para a análise "shortcut" inicial e utilizar uma análise rigorosa posterior com o método de Nadgir e Liu (1983) associado à uma estratégia evolucionária.

A melhor estratégia para a abordagem destes casos, entretanto, só poderá ser conhecida realizando-se um estudo posterior com diversas misturas e pesos distintos na função TAC.

VI.6 - CONCLUSÃO

Apresentou-se diversas funções objetivo utilizadas na literatura e desenvolveu-se uma planilha de cálculo para a função objetivo TAC, gerando estimativas que poderão ser utilizadas na análise de investimentos.

Conforme apontado na tabela VI.9 as hipóteses assumidas para o dimensionamento das colunas, apesar de não rigorosas, apresentam um desvio médio de 5% e um acentuado desvio padrão, no entanto, a diferença entre o TAC gerado por estas hipóteses e o TAC real é muito pequeno ($1,1 \pm 3,7\%$) devido ao menor peso dos custos de investimento.

A função objetivo somatória das cargas térmicas de fundo representou adequadamente as simulações realizadas. Esta função não contempla a variável altura da coluna (ou o número de estágios), por isto, quando houver um maior peso dos custos de investimento é possível que haja falha nos resultados previstos. Isto também poderá ocorrer se a condição térmica de alimentação das colunas for diferente daquela aqui praticada (líquido saturado), uma vez que esta função objetivo é dependente da entalpia de entrada da coluna.

É bastante plausível supor a generalização desta conclusão sempre que houver uma preponderância dos custos operacionais sobre os custos de investimento de modo que a razão de refluxo varie entre 1,2 e 1,4 RR_{min}.

A análise da função objetivo TAC permitiu demonstrar porque os resultados apontados pela análise "shortcut" no capítulo IV, juntamente à um método heurístico evolucionário, foram equivalentes à seqüência otimizada final. Isto significa que a metodologia heurística evolucionária pode ser útil em apontar as melhores seqüências finais após a etapa de otimização, mesmo utilizando uma análise simplificada, quando as razões de refluxo assumidas forem semelhantes às encontradas ao final da otimização. Isto é previsível que aconteça sempre que houver uma preponderância dos custos operacionais sobre os de investimento e a mistura alimentada não tenha seu comportamento muito afastado da idealidade. Sugere-se o estudo destes casos para a verificação do impacto gerado na previsão do método evolucionário.

Capítulo VII

METODOLOGIA, CONCLUSÃO E SUGESTÕES

O estudo aqui realizado da síntese e otimização de sequências de destilação utilizando um simulador comercial resulta em uma metodologia a qual pode ser resumida nas seguintes etapas:

A) Síntese Inicial

1) Considerando os componentes a separar, obter através de um simulador comercial a diferença entre os pontos de ebulição e as volatilidades relativas entre cada componente adjacente.

2) Aplicar o método heurístico evolucionário de Seader e Westerberg obtendo uma lista ordenada inicial de sequências selecionadas. Utilizar para a avaliação das sequências a análise simplificada a partir de um programa de computador ou um simulador comercial. Considerar uma razão de refluxo entre 1,2 e 1,3 RR_{min}. *Ordenar as sequências pela somatória das cargas térmicas de seus refeedores.*

3) Obter um conjunto inicial de sequências a partir da seleção na lista ordenada obtida das melhores sequências, ou seja, aquelas cuja diferença entre a função objetivo relativa ao melhor caso não seja muito grande.

B) Otimização e Síntese Final

Aplicar as etapas abaixo relacionadas a cada uma das sequências do conjunto inicial.

1) Utilizar na especificação das colunas o par recuperação/ recuperação entre os componentes chave para colunas cujos produtos alimentam outras colunas, com $r_{lk} = r_{hk}$ para simplificação. Utilizar o par pureza/ pureza dos componentes que são produto na coluna final de cada sequência. Utilizar o par recuperação/ pureza do componente chave que é produto final da coluna.

2) Realizar uma análise simplificada inicial especificando-se uma razão de refluxo entre 1,2 a 1,3 vezes a razão de refluxo mínima, obtendo-se N_s e FT .

3) Realizar uma análise rigorosa em um simulador comercial a partir dos dados apontados pela análise simplificada, que servirão como estimativas iniciais.

4) Se a separação desejada para os componentes chave for "sharp" então a otimização de especificações não necessita ser considerada, as equações apresentadas no capítulo V podem ser utilizadas para o cálculo da recuperação dos componentes chave a partir das especificações fornecidas. Se em uma dada coluna for requerida uma menor pureza para um produto final então recomenda-se realizar a otimização da especificação de recuperação desta coluna, conforme o seguinte procedimento:

- Parte-se da coluna onde a otimização será realizada, utilizando as composições de entrada obtidas pela análise rigorosa (ou de alimentação, se for a primeira coluna) podendo-se considerar somente a coluna posterior, desprezando-se as demais para o caso de separações "sharp".

- Inicia-se com a máxima especificação de recuperação admitida (considerou-se $r_k = 0,9990$) e realiza-se uma análise rigorosa com a progressiva diminuição da recuperação dos componentes até que não seja mais possível a convergência na coluna posterior, pode-se utilizar as equações apresentadas no capítulo V para prever-se a mínima recuperação do componente chave que pode ser admitida.

- Utilizar a somatória das cargas térmicas de fundo das duas colunas como função objetivo. Se for desejado, pode-se utilizar a função TAC tr segundo a planilha apresentada neste trabalho.

- Selecionar a recuperação ótima obtida nesta coluna. Prosseguir a otimização na coluna posterior realizando o mesmo procedimento descrito, porém utilizando os dados de saída (composição, vazão e temperatura) obtidos nesta etapa através de um procedimento sequencial.

5) A partir do caso base gerado pela otimização rigorosa das especificações, obtem-se as propriedades de todas as correntes de alimentação e saída de cada coluna. Realiza-se então a otimização individual de cada coluna da sequência em um procedimento não sequencial. Efetuar as seguintes etapas:

- Considerar somente a coluna que será otimizada, com os dados estimativos do caso base onde foi retirada. Realizar uma simulação rigorosa com dimensionamento e avaliação hidráulica simultânea ("sizing" e "rating"), obtendo-se o valor do diâmetro e das perdas de carga, não considerar restrições para a eficiência. Por tentativa e erro, ir variando o número de estágios até que um valor qualquer da razão de refluxo seja obtido dentro da faixa 1,2 a 1,3 RRmin. Se o simulador utilizado permitir, especificar esta faixa e obter diretamente o número de estágios.

- Obtendo-se um caso inicial, onde a razão de refluxo esteja na faixa indicada, realizar um progressivo aumento do número de estágios, utilizando o módulo de otimização do simulador para encontrar a posição ótima de alimentação a cada estágio pesquisado. Prosseguir até 1,2 RRmin.

- Partir novamente do caso inicial, regredindo o número de estágios e otimizando a cada etapa a posição da alimentação até obter uma razão de refluxo em torno de 1,3 RRmin.

- Avaliar todas as simulações realizadas através da função TAC com programa ou planilha, encontrando o par (Ns,FT) ótimo. Se não for obtido o ponto ótimo, prosseguir a pesquisa fora da faixa 1,2 a 1,3 RRmin aumentando ou diminuindo o número de estágios conforme a direção da otimização.

- Realizar esta etapa para cada coluna da sequência. As variáveis ótimas obtidas para cada coluna são: H, Ns, RR, FT e rk.

6) Obtendo-se o conjunto de todas as variáveis ótimas da sequência (exceto a pressão, não considerada neste trabalho) realizar uma análise rigorosa considerando estas variáveis para cada coluna com redimensionamento de diâmetros, sem considerar a perda de carga (utilizar "sizing") ou eficiências.

7) *Comparar todas as sequências otimizadas do conjunto inicial com a função objetivo somatória das cargas térmicas, encontrando a sequência ótima.*

8) Se desejado, pode-se então realizar uma avaliação considerando, tipo de estágio, eficiências, perdas de carga, condição térmica da alimentação, pressões e influência da variação da composição de alimentação (flexibilidade) entre duas ou mais sequências com valores similares na função objetivo.

No trabalho apresentado, estudou-se um grupo reduzido de componentes com propriedades próximas da idealidade através de separação "sharp" e destilação convencional, obtendo-se produtos semi-puros. Em princípio, qualquer mistura poderá ser utilizada, em uma faixa mais ampla de separações ("semisharp") e em qualquer tipo de separador incorporado ao simulador. A mistura de alcanos foi escolhida devido ao fato de ser bem conhecida e representada pelo método termodinâmico escolhido e para evitar a possibilidade de obtenção de resultados particulares. A utilização de misturas pouco ideais requer uma análise de todas as etapas envolvidas na metodologia, o que poderá ser realizado como prosseguimento deste trabalho. Existe também a possibilidade de utilizar qualquer outro processo de separação difusional, como a destilação azeotrópica, extração líquido-líquido, stripping, etc. Nestes casos, deve-se analisar a utilização de outras especificações para as colunas e verificar sua adequação em cada etapa da metodologia apresentada.

A compilação de termos usuais, a análise da literatura e as conclusões e regras obtidas, proporcionam uma base sólida para a continuação do estudo, onde se sugere a aplicação em processos químicos e petroquímicos existentes, verificando-se as regras e princípios gerais apresentados. Uma vez que tais regras visam gerar simplificações para problemas de maior porte, sugere-se a aplicação desta metodologia na separação de misturas com um maior número de componentes, como as encontradas em processos de separação alimentícios, como os óleos vegetais e essenciais.

O assunto relativo à separação de uma única mistura multicomponente é mais extenso do que o abordado por este trabalho, onde se preocupou com a obtenção de produtos puros ou multicomponentes através de separações "sharp". Sugere-se assim, o prosseguimento deste estudo realizando progressivamente uma redução das purezas e das recuperações assumidas nas separações, verificando-se os limites que podem ser assumidos, a validade das simplificações obtidas e as novas restrições à convergência das colunas adjacentes que deverão aparecer.

O método aqui desenvolvido inclui a otimização rigorosa das seqüências como uma etapa de síntese, cuja base é um conjunto inicial de seqüências quase-ótimas pré-selecionadas.

Em princípio, para a escolha do sub-grupo inicial de seqüências, qualquer método existente em literatura poderia ter sido utilizado. Optou-se aqui pelo método heurístico evolucionário, sendo adotado devido à sua simplicidade e grande capacidade de seleção, tendo-se verificado uma excelente concordância com os resultados finais obtidos após a otimização das seqüências.

A metodologia heurística evolucionária apresenta uma série de critérios para a pesquisa de seqüências candidatas à evolução. Esta pesquisa deve ser preferencialmente realizada através de uma análise "shortcut" para não inviabilizar a praticidade do método.

Mostrou-se nos capítulos IV e V que o procedimento apresentado na literatura não apresenta resultados confiáveis na forma como é conduzido. Após a análise rigorosa das seqüências apontadas pela análise simplificada poderá ocorrer uma completa inversão do "ranking" de seqüências candidatas. Na literatura, não se realiza a otimização posterior do número de estágios e da posição da alimentação de cada coluna, assim, o projeto gerado dificilmente levará à obtenção da seqüência ótima. Uma vez que a lista ordenada entre as seqüências é alterada a cada etapa da metodologia, conclui-se que a otimização rigorosa das seqüências de destilação é uma etapa de síntese.

O estudo aqui realizado sugere, a exemplo da literatura, que para separações "sharp" a otimização de especificações possa não ser realizada para a síntese das seqüências ótimas. A etapa de otimização de especificações não foi efetiva economicamente para o estudo de quatro componentes, obtendo-se reduções de custo menores que 0,5 %, e no caso de estudo com três componentes, uma redução de 6%. Recomenda-se a otimização das especificações se houver a possibilidade de diminuição das purezas especificadas para os produtos, neste caso, a contribuição da otimização das especificações poderá ser economicamente importante.

Pode-se considerar a abordagem proposta como uma metodologia de síntese, otimização e projeto final de uma seqüência de destilação, apresentando-se estimativas de custos reais. É recomendável, no entanto, verificar e implementar as correlações de custo utilizadas através de alguns orçamentos no mercado brasileiro de equipamentos e serviços, e verificar os custos de energia. Os dados utilizados referem-se aos obtidos na literatura e não se verificou se existe uma equivalência ao mercado brasileiro.

A extensiva análise das funções objetivo mostrou a possibilidade de substituição da função TAC pela função somatória das cargas térmicas de fundo simplificando-se a metodologia, exceto para a otimização de N_s e FT. É plausível supor a generalização desta conclusão sempre que houver uma preponderância dos custos operacionais sobre os custos de investimento, o líquido de entrada nas colunas seja saturado e a razão de refluxo varie entre 1,2 e 1,4 RR_{min}. Esta função não contempla a variável altura da coluna (ou o número de estágios), por isto, quando houver um maior peso dos custos de investimento é possível que haja falha no resultado previsto. Isto também poderá ocorrer se a condição térmica de alimentação das colunas for diferente daquela aqui praticada (zero), uma vez que esta função é dependente da entalpia de entrada da coluna.

A análise da função objetivo TAC permitiu demonstrar porque os resultados apontados pela análise "shortcut" (capítulo IV), relativa à aplicação do método evolucionário, foram equivalentes à seqüência otimizada final. Isto significa que a metodologia heurística evolucionária pode tornar-se útil em apontar a seqüência ótima final, após sua otimização, mesmo utilizando uma análise simplificada, quando as razões de refluxo assumidas forem semelhantes às encontradas ao final da otimização. Isto é previsível que aconteça sempre que houver uma preponderância dos custos operacionais sobre os de investimento e a mistura alimentada não tenha seu comportamento muito afastado da idealidade.

O uso da análise "shortcut" para a síntese do conjunto inicial de seqüências a serem otimizadas é recomendado devido à sua simplicidade e devido à boa performance que pode ser alcançada se a razão de refluxo escolhida for semelhante à faixa ótima de razões de refluxo da análise rigorosa otimizada. Entretanto, a sua utilização, não garante que a lista ótima final de seqüências seja obtida. Para encontrar efetivamente a melhor seqüência de destilação e obter o seu projeto otimizado é necessário realizar o procedimento descrito neste trabalho, passando pela análise rigorosa e pela otimização.

Nos casos de misturas pouco ideais e/ou com um diferente peso de custos na função TAC, que não proporcione que as razões de refluxo ótimas ocorram numa faixa estreita e próxima da razão mínima de refluxo, não é possível prever antecipadamente se o método gerará bons resultados. Somente a experiência de sua aplicação demonstrará seus limites e potencialidades, o que é uma característica de toda metodologia baseada em heurísticos.

Existe uma tendência cada vez maior de utilização de uma análise rigorosa nas colunas mediante o uso de um simulador comercial. Neste trabalho, é realizada uma otimização de variáveis que inclui o par (N_s , FT), a posição de alimentação e a recuperação entre os componentes chave. A pressão não foi considerada por ser uma variável importante apenas quando se deseja a integração térmica entre as correntes, o que não foi avaliado neste trabalho.

O avanço no desenvolvimento dos simuladores de processo deverá proporcionar no futuro a possibilidade de aplicar os conceitos aqui apresentados para projeto e otimização rigorosa em uma única etapa no próprio simulador, através de rotinas de comandos definidas pelo usuário (macro comandos), realizando-se uma programação de cálculos e a interação com subrotinas feitas pelo usuário.

BIBLIOGRAFIA

- Aggarwal, A. e Floudas, C.A., "Optimal Synthesis of Nonsharp Separation Sequences", Computer Application in Chemical Engineering, Bussemaker, H. Th., Iedema P.D., Elsevier Science Publishers B.V., Amsterdam, pg 243-248 (1990 a).
- Aggarwal, A. e Floudas, C.A., "Synthesis of General Distillation Sequences-Nonsharp Separations", Computers Chem. Engng., 14, 6, 631 (1990 b)
- Andrecovich M. J. e Westerberg, A. W., "A Simple Synthesis Method Based on Utility Bounding for Heat Integrated Distillation", AIChEJ., 31, 363 (1985 a).
- Andrecovich M. J. e Westerberg, A. W., "An MILP formulation for heat-integrated distillation sequence synthesis", AIChEJ., 31, 1461 (1985 b).
- Bamopoulos, G., Nath, R. e Motard, R. L., "Heuristic Synthesis of Nonsharp Separation Sequences", AIChEJ., 34, 5, 763 (1988).
- Barduhn, A.J., "Estimating Relative Volatility of Close-Boiling Species", Chem. Engng. Education (Summer 1987)
- Bezzina, M., Pibouleau, L., Domenech S., "A Statistical Approach to the Synthesis of Separation Sequences", Computers Chem. Engng., 13, 6, 651 (1989).
- Chan, W. K. e Prince, R. G. H., "Heuristic evolutionary synthesis with non-sharp separators", Computers Chem. Engng. 13, 11 e 12 (1989).
- Cheng, S. H. e Liu, Y. A., "Studies in Chemical Process Design and Synthesis, 8A Simple Heuristic Method for the Synthesis of Initial Sequences for Sloppy Multicomponent Separations", Ind. Eng. Chem. Res., 27, 2304 (1988).
- Coulson, J. M., Richardson, J. F., Backhurst, J. R., Harker, J. H., Chemical Engineering Vol. 2, Unit Operations, Pergamon: Oxford, United Kingdom, 1980.
- Dhallu, N. S. e Johns, W. R., "Synthesis of Distillation Trains with Heat Integration", I Chem. E. Symposium Series No. 109, 23 (1988)
- Douglas, J. M. "Conceptual Design of Chemical Processes"; McGraw Hill, San Francisco, CA, 1988.
- Fair, J. R., Petro. Chem. Eng., 33 (10); 45 (setember 1961), citado em Perry, R.H. and Chilton, C.H., Chemical Engineer's Handbook, 5th ed., McGraw-Hill, New York, 1973.
- Fenske, M. R., Ind. Eng. Chem., 24, 482-485 (1932).
- Floudas, C., "Multicomponent Multifeed Multiproduct Synthesis of Distillation Sequences", I Chem. E. Symposium Series No. 109, 61.
- Gilliland, E. R., Ind. Eng. Chem., 32, 1101-1106 / 1220 - 1223 (1940).
- Glinos, K. e Malone, M. F., "Net Work Consumption in Distillation-Short-cut Evaluation and Applications to Synthesis", Comput. Chem. Eng., 13 (3), 295 (1989).

- Gomez, M. A. e J. D. Seader, "Separation Sequence Synthesis by a Predictor-Based Ordered Search", *AIChEJ.*, 22, 970 (1976).
- Gomez, M. A. e J. D. Seader, "Synthesis of Distillation Trains by Thermodynamic Methods", *Comput. Chem. Eng.*, 9, 311 (1985).
- Guthrie, K. M., "Capital Cost Estimating", *Chem. Eng.*, 76 (6). 114 (1969).
- Harbert, V. D., "Which Tower Goes Where ?", *Petroleum Refiner*, 36, No. 3, 169 (1957).
- Heaven, D. L., "Optimum Sequencing of Distillation Columns in Multicomponent Fractionation", Tese de Mestrado, Universidade da California, Berkeley, 1969.
- Hendry, J. E. e R. R. Hughes, "Generating Separation Process Flowsheets", *Chem. Eng. Prog.*, 68 (6), 71 (1972).
- Henley, E. J. e J. D. Seader, *Equilibrium-Stage Separation Operations in Chemical Engineering*, Wiley, New York, 1981.
- Jelinek, J. e Ptacnick, "Synthesis of Heat Integrated Rectification Systems", *Proc. CEF'87*, 727 (1987).
- Jelen, F. C. e Black, J. H., *Cost and Optimization Engineering*, McGraw-Hil, New York, 1983.
- King, C. J., *Separation Processes*, McGraw-Hill Book Co., New York, 1971.
- King, C. J., *Separation Processes*, 2nd ed., McGraw-Hill, New York, 1980.
- Kirkbride, C. G., *Petroleum Refiner*, 23 (9), 87-102 (1944).
- Kraslawsky, A. e Gorak, A., "Fuzzy Dynamic Programming in the Synthesis of Distillation Column Systems", *Comp. Chem. Eng.*, 13, No. 4/5, 611 (1989).
- Lockhart, F. J., "Multicolumn Distillation of Natural Gasoline", *Petroleum Refiner.*, 26 (8), 104 (1947).
- Liu, Y. A., McGee e Epperly, "Recent Developments in Chemical Process and Plant Design", pg. 147-260, John Wiley, 1987.
- Lu, M. D. e Motard R. L., "An Expert System for Computer-Aided Flowsheet Synthesis", *I Chem. E. Symposium Series 92*, 517 (1985 a).
- Lu, M. D. e Motard R. L., "Computer-Aided Total Flowsheet Synthesis", *Comp. Chem. Eng.* 9, 431 (1985 b).
- Maciel, M. R. W., Tese de Doutorado, Universidade de Leeds, Leeds 1988.
- Mahalec, V. e Motard, R. L., "Procedures for the Initial Design of Chemical Processing Systems", *Comput. Chem. Eng.*, 1, 57 (1977 a).
- Mahalec, V. e Motard, R. L., "Evolutionary Search for an Optimal Limiting Process Flowsheet", *Comput. Chem. Eng.*, 1. 149 (1977 b).
- Mocsny, D. e Govind, R., "Multiple-feed, pure-product separation system synthesis", *Comput. Chem. Engng.*, 13, 7 (1989).
- Modi e A. W. Westerberg, "Distillation Column Sequencing Using Marginal Price", (1992).

- Molokanov et al., *Int. Chem. Eng.*, 12 (2), 209 -212 (1972).
- Nadgir, V. M. e Y. A. Liu, "Studies in Chemical Process Design and Synthesis: Part V "A Simple Heuristic Method for Systematic Synthesis of Initial Sequences for Multicomponent Separations", *AIChEJ.*, 29, 926 (1983).
- Nath, R e R. L. Motard, "Evolutionary Synthesis of Separation Processes", 85th National Meeting, Philadelphia, June 1978.
- Nath, R e R. L. Motard, "Evolutionary Synthesis of Separation Processes", *AIChEJ.*, 27, 578 (1981).
- Nishimura, H. e Y. Hiraizumi, "Optimal System Pattern for Multicomponent Distillation Systems", *Int. Chem. Eng.*, 11, 188 (1971).
- Perry, R. H. and Chilton C.H., *Chemical Engineer's Handbook*, McGraw-Hill, sexta edição, 1984
- Peters, M. S. e K. D. Timmerhaus, *Plant Design and Economics for Chemical Engineers*, 3rd ed., McGraw-Hill, New York (1980).
- Powers, G. J., "Recognizing Patterns in the Synthesis of Chemical Processing Systems", Tese de Doutorado, Universidade de Wisconsin, Madison (1971).
- Rathore, R. N. S., Wormer, K. A. V. e G. J. Powers, "Synthesis Strategies for Multicomponent Separation Systems with Energy Integration", *AIChEJ.*, 20 (3), 491 (1974a).
- Rathore, R. N. S., Wormer, K. A. V. e G. J. Powers, "Synthesis of Distillation Systems with Energy Integration", *AIChEJ.*, 20 (5), 491 (1974 b).
- Rod, V. e Marek, J., "Separation Sequences in Multicomponent Rectification", *Collect. Czech. Chem. Commun.*, 24. 3240 (1959).
- Rodrigo, B. F. R. e J. D. Seader, "Synthesis of Separation Sequences by Ordered Branch Search", *AIChEJ.*, 21, 785 (1975).
- Rudd, D. F., G. J. Powers, e J. J. Sirola, *Process Synthesis*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ (1973).
- Seader, J. D. e A. W. Westerberg, "A Combined Heuristic and Evolutionary Strategy for the Synthesis of Simple Separation Sequences", *AIChEJ.*, 23, 951 (1977).
- Simulation Sciences, Inc., *PROCESS*, 1051 West Bastanchury Road, Fullerton, CA 92633, USA, 1985.
- Simulation Sciences, Inc., *PRO/II*, 1051 West Bastanchury Road, Fullerton, CA 92633, USA, versão 3.02, 1992.
- Smith, R. e Linnhoff, B., "The Design of Separators in the Context of Overall Process", *Chem. Eng. Res. Des.*, 66 (may 1988).
- Souders, M., "The Countercurrent Separation Processes", *Chem. Eng. Prog.*, 62 (2), 75 (1964).
- Souders, M. e Brown G.G., *Ind. Eng. Chem.*, 26, 98, 1934.

- Stephanopoulos, G., "Optimization of Nonconvex Systems and the Synthesis of Optimum Process Flowsheets", Tese de Doutorado, Universidade da Flórida, 1974.
- Stephanopoulos, G. e A. W. Westerberg, "Studies in Process Synthesis - II. Evolutionary Synthesis of Optimal Process Flowsheets", Chem. Eng. Sci., 31, 195 (1976).
- Thompson, R. W. e King, C. J., "Systematic Synthesis of Separation Schemes", AIChEJ., 18, No. 5, 941 (1972).
- Ulrich, G. D., A Guide to Chemical Engineering Process Design and Economics, Wiley, New York, 1984.
- Underwood, A. J. V., Trans. Inst. Chem. Eng. (London), 10, 112-158 (1932).
- Underwood, A. J. V., J. Inst. Petrol., 32, 614-626 (1946).
- Van Winkle, M., Distillation, McGraw-Hill, New York, 1967.
- Westerberg, A. W. e Stephanopoulos, G., "Studies in Process Synthesis - I. Branch and bound strategy with list techniques for the synthesis of separation schemes", Chem. Eng. Sci., 30, 963 (1975).

ANEXOS

ANEXO I - SIMULAÇÕES - TABELAS DE RESULTADOS

Simbologia : A - Anexo
 n1 - Referente ao anexo
 n2 - Referente ao capítulo
 n3 - Referente à seqüência dentro do capítulo

Ex: Tabela A.1.4.3 - anexo I referente ao capítulo IV, no contexto após a tabela IV.2.

OBS: O TAC apontado nas tabelas deste anexo é a somatória dos TAC das colunas da seqüência.

Tabela A.1.4.3 - Avaliação otimizada das seqüências possíveis

Seqüência		1	2	3	4	5
	$\sum VR / F_0$	1,9610	2,1830	2,5860	2,0920	2,2960
Função Objetivo	$\sum RR$	6,1606	5,0220	2,2105	3,7088	1,9626
	$\sum Q_r$	1,4905	1,6441	1,9448	1,5846	1,7475
	TAC tr (US\$)	260.941	278.777	319.389	272.059	292.730
	TAC pr (US\$)	257.299	278.148	314.165	268.060	287.438

Tabela A.1.5.27 - Segunda Seqüência - Simulação inicial - "Shortcut"

	Espec $r_{B1} = 0,999$	Espec $r_{C1} = 0,999$
Coluna 1	Ns / FT	38 / 20
	Ns min	15,96
	VR	93,318
	RR	0,697
	RRmin	0,5805
	Qr (Mkcal /h)	0,7486
	Espec $y_{A2} = 0,980$	Espec $x_{B2} = 0,990$
Coluna 2	Ns / FT	19 / 8
	Ns min	8,29
	VR	64,246
	RR	1,115
	RRmin	0,9288
	Qr(Mkcal /h)	0,4170
	Espec $y_{C3} = 0,995$	Espec $x_{D3} = 0,980$
Coluna 3	Ns / FT	28 / 21
	Ns min	13,18
	VR	61,00
	RR	3,223
	RRmin	2,6857
	Qr (Mkcal /h)	0,4806
Função Objetivo	$\sum VR / F_0$	2,1856
	$\sum RR$	5,035
	$\sum Qr$	1,6462
	TAC tr (US\$)	277.085

Tabela A.1.5.28 Segunda Seqüência - Obtenção da especificação ótima para a primeira coluna

SIMULAÇÃO		1	2	3
rB = rC		0,999	0,998	0,9975
COLUNA 1	Ns / FT	38 / 20	38 / 20	38 / 20
	RR	0,700	0,674	0,667
	VR	93,5	92,0	91,6
	Qc Mkal/h	0,6459	0,6358	0,6332
	Qr Mkal/h	0,7499	0,7397	0,7371
COLUNA 2	Ns / FT	19 / 8	19 / 8	19 / 8
	RR	1,195	1,198	1,200
	VR	66,7	66,8	66,9
	Qc Mkal/h	0,4203	0,4211	0,4215
	Qr Mkal/h	0,4324	0,4332	0,4336
COLUNA 3	Ns / FT	28 / 21	28 / 21	28 / 21
	RR	4,4615	4,4889	4,5320
	VR	78,9	79,2	79,8
	Qc Mkal/h	0,6106	0,6128	0,6172
	Qr Mkal/h	0,6191	0,6214	0,6258
Função Objetivo	$\sum VR / F_0$	2,3910	2,3800	2,3830
	$\sum RR$	6,3563	6,3609	6,3990
	$\sum Qr$	1,8014	1,7943	1,7965
	TAC tr (US\$)	299.555	298.497	298.801

Tabela A.1.5.29 - Segunda Seqüência - Otimização da Coluna 1

Ns	FT op	Φ (m)	H (m)	RR	VR Kmol/h	Qr Mkal/h	TAC pr
31	17	1,067	23,18	0,7585	96,7	0,7880	124.451
32	18	1,067	23,79	0,7422	95,8	0,7821	124.248
34	19	1,067	25,01	0,7173	94,4	0,7733	124.202
35	20	1,067	25,62	0,7068	93,8	0,7695	124.257
36	20	1,067	26,23	0,6975	93,3	0,7663	124.378
37	21	1,067	26,84	0,6899	92,9	0,7639	123.535
38	21	1,067	27,45	0,6845	92,6	0,7621	124.880

Tabela A.1.5.30 - Segunda Seqüência - Otimização da Coluna 2

Ns	FT op	Φ (m)	H (m)	RR	VR Kmol/h	Qr Mkcal/h	TAC pr (US\$)
16	7	0,762	14,03	1,4894	75,7	0,4936	78.625
17	8	0,762	14,64	1,3535	71,5	0,4675	75.708
18	8	0,762	15,25	1,2659	68,9	0,4507	73.966
19	9	0,762	15,86	1,2054	67,0	0,4391	72.881
20	9	0,762	16,47	1,1522	65,4	0,4290	71.980
21	9	0,762	17,08	1,2227	64,5	0,4235	71.664
22	9	0,762	17,69	1,1217	64,5	0,4235	72.044

Tabela A.1.5.31 - Segunda Seqüência - Otimização da Coluna 3

Ns	FT op	Φ (m)	H (m)	RR	VR Kmol/h	Qr Mkcal/h	TAC pr (US\$)	TAC tr (US\$)
30	17	0,914	22,57	3,5354	65,4	0,5269	88.942	88.948
31	18	0,914	23,18	3,4568	64,3	0,5182	88.323	89.140
32	18	0,914	23,79	3,3885	63,3	0,5107	87.845	88.490
33	19	0,914	24,40	3,3370	62,6	0,5051	87.600	88.112
34	19	0,914	25,01	3,2888	61,9	0,4999	87.400	87.781
35	19	0,914	25,62	3,2504	61,3	0,4959	87.342	87.616
36	20	0,914	26,23	3,2202	60,9	0,4928	87.394	87.581
37	20	0,914	26,84	3,1878	60,4	0,4894	87.410	87.499
38	20	0,914	27,45	3,1671	60,1	0,4873	87.584	87.608

Tabela - A.1.5.32 - Projeto ótimo para a segunda seqüência

COLUNA 1	Ns / FT	34 / 19
rB = 0,998 rC = 0,998	RR	0,6967
	VR	93,3
	Qc Mkal/h	0,6446
	Qr Mkal/h	0,7485
COLUNA 2	Ns / FT	21 / 09
yA = 0,980 xB = 0,990	RR	1,1115
	VR	64,2
	Qc Mkal/h	0,4045
	Qr Mkal/h	0,4166
COLUNA 3	Ns / FT	35 / 19
yC = 0,995 xD = 0,980	RR	3,2138
	VR	60,8
	Qc Mkal/h	0,4704
	Qr Mkal/h	0,4790
Função Objetivo	$\sum VR / F0$	2,1830
	$\sum RR$	5,0220
	$\sum Qr$	1,6441
	TAC tr	278.777
	TAC pr	278.148

Tabela A.1.5.33 - Terceira Seqüência - Simulação inicial - "Shortcut"

	Espec r D1 = 0,999	Espec x D1 = 0,980
Coluna 1	Ns / FT	30 / 25
	Ns min	12,09
	VR	104,20
	RR	0,501
	RRmin	0,4173
	Qr (Mkcal /h)	0,8776
	Espec x C2 = 0,995	Espec r C2 = 0,999
Coluna 2	Ns / FT	34 / 22
	Ns min	14,06
	VR	88,94
	RR	0,618
	RRmin	0,5147
	Qr(Mkcal /h)	0,6376
	Espec y A3 = 0,980	Espec x B3 = 0,990
Coluna 3	Ns / FT	19 / 8
	Ns min	8,29
	VR	64,22
	RR	1,114
	RRmin	0,9284
	Qr (Mkcal /h)	0,4169
Função Objetivo	$\sum VR / F_0$	2,5736
	$\sum RR$	2,233
	$\sum Qr$	1,9321
	TAC tr	316.402

Tabela A.1.5.34 Terceira Seqüência
Obtenção da especificação ótima para a primeira coluna

SIMULAÇÃO		1	2
rC2=0,999	rD1	0,999	0,998
COLUNA 1	Ns / FT	30 / 25	30 / 25
	RR	1,1689	1,2284
	VR	150,6	150,5
	Qc Mkcal/h	1,1394	1,1393
	Qr Mkcal/h	1,2286	1,2284
COLUNA 2	Ns / FT	34 / 22	34 / 22
	RR	0,6328	0,7206
	VR	89,7	94,6
	Qc Mkcal/h	0,6200	0,6537
	Qr Mkcal/h	0,6432	0,6771
COLUNA 3	Ns / FT	19 / 8	19 / 8
	RR	1,1941	1,1951
	VR	66,6	66,7
	Qc Mkcal/h	0,4201	0,4203
	Qr Mkcal/h	0,4322	0,4324
Função Objetivo	$\sum VR / F0$	3,0690	3,1180
	$\sum RR$	2,9958	3,0826
	$\sum Qr$	2,3040	2,3379
	TAC tr	368.067	373.011

Tabela A.1.5.35 - Terceira Seqüência
Obtenção da especificação ótima para a segunda coluna

SIMULAÇÃO		3	4	5	6
r1D = 0,999	r2C	0,997	0,995	0,994	0,993
COLUNA 1	Ns / FT	30 / 25	30 / 25	30 / 25	30 / 25
	RR	1,1689	1,1689	1,1689	1,1689
	VR	150,6	150,6	150,6	150,6
	Qc Mkcal/h	1,1394	1,1394	1,1394	1,1394
	Qr Mkcal/h	1,2286	1,2286	1,2286	1,2286
COLUNA 2	Ns / FT	34 / 22	34 / 22	34 / 22	34 / 22
	RR	0,6009	0,5889	0,5846	0,5810
	VR	88,0	87,4	87,2	87,0
	Qc Mkcal/h	0,6084	0,6043	0,6030	0,6018
	Qr Mkcal/h	0,6315	0,6275	0,6261	0,6249
COLUNA 3	Ns / FT	19 / 8	19 / 8	19 / 8	19 / 8
	RR	1,2018	1,2120	1,2180	1,2254
	VR	66,9	67,3	67,5	67,8
	Qc Mkcal/h	0,4220	0,4244	0,4257	0,4274
	Qr Mkcal/h	0,4341	0,4366	0,4380	0,4396
Função Objetivo	$\sum VR / F0$	3,0550	3,0530	3,0530	3,0540
	$\sum RR$	2,9716	2,9698	2,9715	2,9753
	$\sum Qr$	2,2942	2,2927	2,2927	2,2931
	TAC tr (US\$)	366.630	366.394	366.388	366.450

Tabela A.1.5.36 - Terceira Seqüência
Otimização da Coluna 1

Ns	FT op	Φ (m)	H (m)	RR	VR Kmol/h	Qr Mkcal/h	TAC pr (US\$)	TAC tr (US\$)
30	18	1,067	22,57	0,6093	111,7	0,9497	143.597	145.697
31	18	1,067	23,18	0,5970	110,9	0,9433	143.351	145.383
32	19	1,067	23,79	0,5880	110,2	0,9390	143.346	145.336
33	20	1,067	24,40	0,5807	109,7	0,9354	143.433	145.393
34	20	1,067	25,01	0,5737	109,2	0,9321	143.549	145.479
35	21	1,067	25,62	0,5700	109,0	0,9306	143.882	145.814
36	21	1,067	26,23	0,5643	108,6	0,9279	144.069	145.979

**Tabela A.1.5.37 - Terceira Seqüência
Otimização da Coluna 2**

Ns	FT op	Φ (m)	H (m)	RR	VR Kmol/h	Qr Mkcal/h	TAC pr (US\$)
26	13	0,914	20,13	0,6870	92,8	0,6701	109.800
27	14	0,914	20,74	0,6618	91,5	0,6606	109.167
28	15	0,914	21,35	0,6440	90,5	0,6539	108.878
29	16	0,914	21,96	0,6290	89,6	0,6290	108.723
30	16	0,914	22,57	0,6156	88,9	0,6432	108.640
31	17	0,914	23,18	0,6061	88,4	0,6397	104.802
32	18	0,914	23,79	0,5980	87,9	0,6368	104.886
33	18	0,914	24,40	0,5901	87,5	0,6339	104.970

**Tabela A.1.5.38 - Terceira Seqüência
Otimização da Coluna 3**

Ns	FT op	Φ (m)	H (m)	RR	VR Kmol/h	Qr Mkcal/h	TAC pr (US\$)
18	8	0,762	15,25	1,3031	70,1	0,4589	75.004
19	8	0,762	15,86	1,2372	68,1	0,4463	73.790
20	9	0,762	16,47	1,1723	66,1	0,4338	72.590
21	10	0,762	17,08	1,1363	65,0	0,4270	72.104
22	10	0,762	17,69	1,1013	64,0	0,4204	71.645
23	11	0,762	18,30	1,0800	63,3	0,4164	71.515
24	11	0,762	18,91	1,0662	62,9	0,4140	71.583
25	12	0,762	19,52	1,0477	62,4	0,4105	71.511
26	12	0,762	20,13	0,7620	62,2	0,4095	71.754

Tabela - A.1.5.39 - Projeto ótimo para a terceira seqüência

COLUNA 1	Ns / FT	32 / 19
r_D = 0,999 x_D = 0,980	RR	0,5642
	VR	108,6
	Qc Mkcal/h	0,8217
	Qr Mkcal/h	0,9109
COLUNA 2	Ns / FT	31 / 17
r_C = 0,994 y_C = 0,995	RR	0,5837
	VR	87,2
	Qc Mkcal/h	0,6027
	Qr Mkcal/h	0,6258
COLUNA 3	Ns / FT	23 / 11
y_A = 0,980 x_B = 0,990	RR	1,0626
	VR	62,8
	Qc Mkcal/h	0,3959
	Qr Mkcal/h	0,4081
Função Objetivo	\sum VR / F0	2,5860
	\sum RR	2,2105
	\sum Qr	1,9448
	TAC tr	319.389
	TAC pr	314.165

Tabela A.1.5.40 - Quarta Seqüência - Simulação inicial - "Shortcut"

Coluna 1	Espec r A1 = 0,999	Espec y A1 = 0,980
	Ns / FT	26 / 5
	Ns min	11,48
	VR	70,58
	RR	1,308
	RRmin	1,0898
	Qr (Mkcal /h)	0,5219
Coluna 2	Espec y D2 = 0,980	Espec r D2 = 0,999
	Ns / FT	30 / 24
	Ns min	12,89
	VR	80,44
	RR	1,071
	RRmin	0,8925
	Qr(Mkcal /h)	0,6474
Coluna 3	Espec y B3 = 0,990	Espec x C3 = 0,995
	Ns / FT	27 / 09
	Ns min	12,06
	VR	57,12
	RR	1,323
	RRmin	1,1026
	Qr (Mkcal /h)	0,4071
Função Objetivo	$\sum VR / F_0$	2,0814
	$\sum RR$	3,7020
	$\sum Qr$	1,5764
	TAC tr	266.787

Tabela A.1.5.41 - Quarta Seqüência
Obtenção da especificação ótima para a primeira coluna

SIMULAÇÃO		1	2	3
rD2 = 0,999	rA1	0,999	0,998	0,997
COLUNA 1	Ns / FT	26 / 5	26 / 5	26 / 5
	RR	2,3522	2,3524	2,3530
	VR	102,5	102,4	102,3
	Qc Mkal/h	0,6464	0,6457	0,6452
	Qr Mkal/h	0,7234	0,7226	0,7219
COLUNA 2	Ns / FT	30/24	30/24	30/24
	RR	1,8245	1,8225	1,8205
	VR	109,7	109,7	109,7
	Qc Mkal/h	0,8285	0,8287	0,8289
	Qr Mkal/h	0,8684	0,8687	0,8690
COLUNA 3	Ns / FT	27 / 9	27 / 9	27 / 9
	RR	1,5597	1,6213	1,6987
	VR	62,9	64,5	66,4
	Qc Mkal/h	0,4402	0,4507	0,4639
	Qr Mkal/h	0,4478	0,4584	0,4716
Função Objetivo	$\sum VR / F0$	2,7510	2,7660	2,7840
	$\sum RR$	5,7364	5,7960	5,8722
	$\sum Qr$	2,0399	2,0497	2,0625
	TAC tr (US\$)	333.930	335.439	337.354

Tabela A.1.5.42 - Quarta Seqüência
Obtenção da especificação ótima para a segunda coluna

SIMULAÇÃO		1	2
YD2 = 0,980 rA1 = 0,999		rD2 = 0,999	rD2 = 0,998
COLUNA 1	Ns / FT	26 / 5	26 / 5
	RR	2,3522	2,3522
	VR	102,5	102,5
	Qc Mkal/h	0,6464	0,6464
	Qr Mkal/h	0,7234	0,7234
COLUNA 2	Ns / FT	30/24	30/24
	RR	1,8245	1,8182
	VR	109,7	109,5
	Qc Mkal/h	0,8285	0,8276
	Qr Mkal/h	0,8684	0,8675
COLUNA 3	Ns / FT	27 / 9	27 / 9
	RR	1,5597	1,5794
	VR	62,9	63,5
	Qc Mkal/h	0,4402	0,4441
	Qr Mkal/h	0,4478	0,4518
Função Objetivo	$\sum VR / F0$	2,7510	2,7550
	$\sum RR$	5,7364	5,7498
	$\sum Qr$	2,0399	2,0427
	TAC pr	333.930	334.390

Tabela A.1.5.43 - Quarta Seqüência
Otimização da Coluna 1

Ns	FT op	Φ (m)	H (m)	RR	VR Kmol/h	Qr Mkal/h	TAC pr (US\$)
25	10	0,914	19,52	1,4431	74,7	0,5583	92.074
26	10	0,914	20,13	1,4049	73,5	0,5583	91.642
27	11	0,914	20,74	1,3786	72,7	0,5536	91.492
28	11	0,914	21,35	1,3548	72,0	0,5494	91.404
29	11	0,914	21,96	1,3397	71,6	0,5470	91.541
30	12	0,914	22,57	1,3245	71,1	0,5445	91.663

**Tabela A.1.5.44 - Quarta Seqüência
Otimização da Coluna 2**

Ns	FT op	Φ (m)	H (m)	RR	VR Kmol/h	Qr Mkcal/h	TAC pr (US\$)	TAC tr (US\$)
29	17	1,067	21,96	1,2454	87,2	0,7092	115.060	114.890
30	17	1,067	22,57	1,2191	86,2	0,7016	114.660	114.329
31	18	0,914	23,18	1,2108	85,9	0,7055	111.569	115.106
32	16	0,914	23,79	1,2411	87,0	0,7155	113.220	117.025
33	16	0,914	24,40	1,2216	86,3	0,7100	112.984	116.745
34	19	0,914	25,01	1,1566	83,8	0,6905	111.035	114.446
35	20	0,914	25,62	1,1465	83,4	0,6880	111.159	114.570
36	20	0,914	26,23	1,1342	82,9	0,6847	111.182	114.575
37	21	0,914	26,84	0,1279	82,6	0,6832	111.428	114.842

**Tabela A.1.5.45 - Quarta Seqüência
Otimização da Coluna 3**

Ns	FT op	Φ (m)	H (m)	RR	VR Kmol/h	Qr Mkcal/h	TAC pr (US\$)
25	11	0,762	19,52	1,4487	60,2	0,4334	73.637
26	13	0,762	20,13	1,3985	59,0	0,4247	72.954
27	12	0,762	20,74	1,3545	57,9	0,4172	72.381
28	14	0,762	21,35	1,3190	57,0	0,4112	71.992
29	14	0,762	21,96	1,2930	56,4	0,4068	71.806
30	14	0,762	22,57	1,2670	55,8	0,4023	71.603
31	15	0,762	23,18	1,2508	55,4	0,3996	71.626
32	15	0,762	23,79	1,2355	55,0	0,3971	71.637

Tabela - A.1.5.46 - Projeto ótimo para a quarta seqüência

COLUNA 1	Ns / FT	28 / 11
r_A = 0,999 y_A = 0,980	RR	1,3454
	VR	71,7
	Qc Mkal/h	0,4522
	Qr Mkal/h	0,5292
COLUNA 2	Ns / FT	34 / 19
r_D = 0,999 y_D = 0,980	RR	1,1213
	VR	82,4
	Qc Mkal/h	0,6222
	Qr Mkal/h	0,6622
COLUNA 3	Ns / FT	30 / 14
y_B = 0,990 x_C = 0,995	RR	1,2421
	VR	55,1
	Qc Mkal/h	0,3856
	Qr Mkal/h	0,3932
Função Objetivo	\sum VR / F0	2,0920
	\sum RR	3,7088
	\sum Qr	1,5846
	TAC tr	272.059
	TAC pr	268.060

Tabela A.1.5.47 - Quinta Seqüência - Simulação inicial - "Shortcut"

	Espec r D1 = 0,999	Espec x D1 = 0,980
Coluna 1	Ns / FT	30 / 25
	Ns min	12,09
	VR	104,20
	RR	0,501
	RRmin	0,4173
	Qr (Mkcal /h)	0,8776
	Espec y A2 = 0,980	Espec x B2 = 0,990
Coluna 2	Ns / FT	25 / 5
	Ns min	10,70
	VR	67,40
	RR	1,204
	RRmin	1,0031
	Qr(Mkcal /h)	0,4526
	Espec y B3 = 0,990	Espec x C3 = 0,995
Coluna 3	Ns / FT	27 / 9
	Ns min	12,06
	VR	57,12
	RR	1,323
	RRmin	1,1026
	Qr (Mkcal /h)	0,4071
Função Objetivo	$\sum VR / F_0$	2,2872
	$\sum RR$	3,028
	$\sum Qr$	1,7373
	TAC tr	287.902

Tabela A.1.5.48 - Quinta Seqüência
Obtenção da especificação ótima para a primeira coluna

SIMULAÇÃO		1	2
$r_{A2} = 0,999$	r_{D1}	0,999	0,998
COLUNA 1	Ns / FT	30 / 25	30 / 25
	RR	1,1689	1,1762
	VR	150,6	150,5
	Qc Mkal/h	1,1394	1,1395
	Qr Mkal/h	1,2286	1,2286
COLUNA 2	Ns / FT	25 / 5	25 / 5
	RR	2,063	2,063
	VR	93,7	93,7
	Qc Mkal/h	0,5906	0,5906
	Qr Mkal/h	0,6183	0,6183
COLUNA 3	Ns / FT	27 / 9	27 / 9
	RR	1,5602	1,5800
	VR	62,9	63,5
	Qc Mkal/h	0,4402	0,4441
	Qr Mkal/h	0,4478	0,4518
Função Objetivo	$\sum VR / F_0$	3,0720	3,0770
	$\sum RR$	4,7921	4,8102
	$\sum Qr$	2,2947	2,2987
	TAC tr (US\$)	366.965	367.556

Tabela A.1.5.49 Quinta Seqüência
Obtenção da especificação ótima para a segunda coluna

SIMULAÇÃO		1	3	4
$r_{D1} = 0,999$	r_{A2}	0,999	0,998	0,997
COLUNA 1	Ns / FT	30 / 25	30 / 25	30 / 25
	RR	1,1689	1,1689	1,1689
	VR	150,6	150,6	150,6
	Qc Mkal/h	1,1394	1,1394	1,1394
	Qr Mkal/h	1,2286	1,2286	1,2286
COLUNA 2	Ns / FT	25 / 5	25 / 5	25 / 5
	RR	2,063	2,0627	2,0631
	VR	93,7	93,6	93,5
	Qc Mkal/h	0,5906	0,5899	0,5894
	Qr Mkal/h	0,6183	0,6176	0,6170
COLUNA 3	Ns / FT	27 / 9	27 / 9	27 / 9
	RR	1,5602	1,6219	1,6998
	VR	62,9	64,5	66,4
	Qc Mkal/h	0,4402	0,4507	0,4640
	Qr Mkal/h	0,4478	0,4584	0,4717
Função Objetivo	$\sum VR / F_0$	3,0720	3,0870	3,1050
	$\sum RR$	4,7921	4,8535	4,9318
	$\sum Qr$	2,2947	2,3046	2,3173
	TAC tr (US\$)	366.965	368.446	370.348

Tabela A.1.5.50 - Quinta Seqüência - Otimização da Coluna 1

Ns	FT op	Φ (m)	H (m)	RR	VR Kmol/h	Qr Mkal/h	TAC pr (US\$)
26	16	1,219	20,13	0,6760	116,6	0,9791	153.339
27	16	1,219	20,74	0,6489	114,5	0,9651	152.207
28	16	1,067	21,35	0,6499	114,5	0,9707	149.672
29	17	1,067	21,96	0,6217	112,6	0,9558	148.341
30	18	1,067	22,57	0,6097	111,7	0,9499	148.127
31	18	1,067	23,18	0,5971	110,9	0,9434	147.844
32	19	1,067	23,79	0,5879	110,2	0,9389	143.337
33	19	1,067	24,40	0,5821	109,8	0,9363	143.537
34	20	1,067	25,01	0,5738	109,3	0,9322	143.561

Tabela A.1.5.51 - Quinta Seqüência
Otimização da Coluna 2

Ns	FT op	Φ (m)	H (m)	RR	VR Kmol/h	Qr Mkcal/h	TAC pr (US\$)
23	8	0,762	18,30	1,3188	70,8	0,4738	78.490
24	10	0,762	18,91	1,2567	69,0	0,4628	77.474
25	10	0,762	19,52	1,2196	67,9	0,4556	76.936
26	10	0,762	20,13	1,1926	67,1	0,4504	76.651
27	11	0,762	20,74	1,1715	66,4	0,4464	76.513
28	12	0,762	21,35	1,1564	65,9	0,4434	76.507
29	11	0,762	21,96	1,1460	65,6	0,4414	76.623

Tabela A.1.5.52 - Quinta Seqüência
Otimização da Coluna 3

Ns	FT op	Φ (m)	H (m)	RR	VR Kmol/h	Qr Mkcal/h	TAC pr (US\$)	TAC tr (US\$)
25	11	0,762	19,52	1,4492	60,2	0,4333	73.660	75.881
26	13	0,762	20,13	1,3977	59,0	0,4245	72.924	74.997
27	12	0,762	20,74	1,3549	57,9	0,4172	72.375	74.323
28	14	0,762	21,35	1,3175	57,0	0,4109	71.950	73.787
29	14	0,762	21,96	1,2934	56,4	0,4068	71.802	73.578
30	14	0,762	22,57	1,2674	55,7	0,4023	71.603	73.302
31	15	0,762	23,18	1,2507	55,3	0,3995	71.614	73.274
32	15	0,762	23,79	1,2358	55,0	0,3970	71.661	73.287

Tabela - A.1.5.53 - Projeto ótimo para a quinta seqüência

COLUNA 1	Ns / FT	32 / 19
$r_D = 0,990$ $x_D = 0,980$	RR	0,5642
	VR	108,6
	Qc Mkcal/h	0,8217
	Qr Mkcal/h	0,9109
COLUNA 2	Ns / FT	28 / 12
$r_A = 0,999$ $y_A = 0,980$	RR	1,1563
	VR	65,9
	Qc Mkcal/h	0,4157
	Qr Mkcal/h	0,4434
COLUNA 3	Ns / FT	30 / 14
$y_B = 0,990$ $x_C = 0,995$	RR	1,2421
	VR	55,1
	Qc Mkcal/h	0,3856
	Qr Mkcal/h	0,3932
Função Objetivo	$\sum VR / F_0$	2,2960
	$\sum RR$	1,9626
	$\sum Qr$	1,7475
	TAC tr	292.730
	TAC pr	287.438

ANEXO II - PLANILHAS DE CÁLCULO TÍPICAS DAS FUNÇÕES OBJETIVO

A.2.1 - Referente à TABELA V.6 - 13 estágios

A.2.2 - Referente à TABELA V.6 - 30 estágios

A.2.3 - Referente à TABELA V.6 - 77 estágios

A.2.4 - Referente à TABELA V.25

fd TC	1,00	---	---	---	---	---	---
fm TC	1,00	---	---	---	---	---	---
fc TC	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00
Cut (U\$/Mkcal)	2,66	2,66	2,66	0,00	0,00	0,00	0,00
Cub (U\$/MKcal)	10,60	10,60	10,60	0,00	0,00	0,00	0,00
Ho (h)	8500	---	---	---	---	---	---
PL (anos)	10	---	---	---	---	---	---
CI (U\$)	15000	---	---	---	---	---	---
C%mn c	2,0	---	---	---	---	---	---
C%mn TC	2,0	---	---	---	---	---	---
Atualiz. G (base = 1968)	3,4000	---	---	---	---	---	---
Atualiz. PT (base = 1979)	1,5700	---	---	---	---	---	---

=====

SAIDA DE DADOS

=====

	C1	C2	C3	C4	C5	C6	C7
Projeto							
H calc. (m)	12,20	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Diam. (m)	2,772	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
v vap (m/s)	1,066	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
P media (ata)	1,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00

Custos parciais (US\$)

TOTAL

Cc tr PT	258278	0	0	0	0	0	0	258278
Cc pr PT	207736	0	0	0	0	0	0	207736
Cc pr	248335	0	0	0	0	0	0	248335
Cc tr	305015	0	0	0	0	0	0	305015
Cs tr	60736	0	0	0	0	0	0	60736
Cs pr	45043	0	0	0	0	0	0	45043
Crv	138472	0	0	0	0	0	0	138472
Crf	193861	0	0	0	0	0	0	193861
Coc tr	6100	0	0	0	0	0	0	6100
Coc pr	4967	0	0	0	0	0	0	4967
Corf	101889	0	0	0	0	0	0	101889
Corv	397669	0	0	0	0	0	0	397669
Cti tr	713084	0	0	0	0	0	0	713084
Cti pr	640711	0	0	0	0	0	0	640711
Cot tr	505658	0	0	0	0	0	0	505658
Cot pr	504525	0	0	0	0	0	0	504525

=====

Valores Totais

=====

TAC tr (U\$)	576967	0	0	0	0	0	0	576967
TAC pr (U\$)	568596	0	0	0	0	0	0	568596
VR	6,1930	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	6,1930
Qr (Mkcal/h)	4,3829	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	4,3829
RR	14,47	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	14,4676

=====

(> 10,2 ata)							
fd TC	1,00	---	---	---	---	---	---
fm TC	1,00	---	---	---	---	---	---
fc TC	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00
Cut (U\$/Mkcal)	2,66	2,66	2,66	0,00	0,00	0,00	0,00
Cub (U\$/MKcal)	10,60	10,60	10,60	0,00	0,00	0,00	0,00
Ho (h)	8500	---	---	---	---	---	---
PL (anos)	10	---	---	---	---	---	---
CI (U\$)	15000	---	---	---	---	---	---
C%mn c	2,0	---	---	---	---	---	---
C%mn TC	2,0	---	---	---	---	---	---
Atualiz. G (base = 1968)	3,4000	---	---	---	---	---	---
Atualiz. PT (base = 1979)	1,5700	---	---	---	---	---	---

=====

SAIDA DE DADOS

=====

	C1	C2	C3	C4	C5	C6	C7
Projeto							
H calc. (m)	22,57	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Diam. (m)	1,181	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
v vap (m/s)	1,066	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
P media (ata)	1,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00

Custos parciais (US\$)

TOTAL

Cc tr PT	182220	0	0	0	0	0	0	182220
Cc pr PT	162562	0	0	0	0	0	0	162562
Cc pr	180534	0	0	0	0	0	0	180534
Cc tr	201077	0	0	0	0	0	0	201077
Cs tr	29919	0	0	0	0	0	0	29919
Cs pr	25579	0	0	0	0	0	0	25579
Crv	47519	0	0	0	0	0	0	47519
Crf	63902	0	0	0	0	0	0	63902
Coc tr	4022	0	0	0	0	0	0	4022
Coc pr	3611	0	0	0	0	0	0	3611
Corf	19052	0	0	0	0	0	0	19052
Corv	77130	0	0	0	0	0	0	77130
Cti tr	357417	0	0	0	0	0	0	357417
Cti pr	332534	0	0	0	0	0	0	332534
Cot tr	100203	0	0	0	0	0	0	100203
Cot pr	99792	0	0	0	0	0	0	99792

=====

Valores Totais

=====

TAC tr (U\$)	135945	0	0	0	0	0	0	135945
TAC pr (U\$)	133046	0	0	0	0	0	0	133046
VR	1,1230	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	1,1230
Qr (Mkcal/h)	0,8455	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,8455
RR	1,80	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	1,8048

=====

TOTAL	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Mc	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Mf	86,32	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Dens vap t	3,08	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Dens liq t (Kg/m3)	614,17	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00

Coluna

*e (m)	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
*H (m)	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
*Diametro (m)	1,067	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
Qc (Mkcal/h)	0,7625	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
Qr (Mkcal/h)	0,8524	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
RR	1,721	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
D (Kmol/h)	40,04	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Fo (Kmol/h)	100,00	-----	-----	-----	-----	-----	-----
NSr	77	0	0	0	0	0	0
Pt (ata)	1,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Pb (ata)	1,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
VR (kmol/h)	108,90	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Ki	0,330	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
Kj	0,100	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000

Trocadores

tto (C)	28,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
tts (C)	36,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Tto (C)	69,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Tts (C)	69,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
tbo (C)	206,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
tbs (C)	206,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Tbo (C)	119,10	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Tbs (C)	119,10	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Ut (Kcal/hm2C)	488	0	0	0	0	0	0
Ub (Kcal/hm2C)	351	0	0	0	0	0	0
At (m2)	42,40	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Ab (m2)	27,93	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
MLDT t (C)	36,86	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
MLDT b (C)	86,90	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
(ou delta t)							

Parametros de custo

fes	1,0	---	---	---	---	---	---
fts	0,4	---	---	---	---	---	---
fms	1,7	---	---	---	---	---	---
fcs	3,1	---	---	---	---	---	---
fmc	1,00	---	---	---	---	---	---
fpc	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00
(3,4 a 34 ata)							
fc G	1,00	---	---	---	---	---	---
fp TC	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
(> 10,2 ata)							

fd TC	1,00	---	---	---	---	---	---
fm TC	1,00	---	---	---	---	---	---
fc TC	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00
Cut (U\$/Mkcal)	2,66	2,66	2,66	0,00	0,00	0,00	0,00
Cub (U\$/MKcal)	10,60	10,60	10,60	0,00	0,00	0,00	0,00
Ho (h)	8500	---	---	---	---	---	---
PL (anos)	10	---	---	---	---	---	---
CI (U\$)	15000	---	---	---	---	---	---
C%mn c	2,0	---	---	---	---	---	---
C%mn TC	2,0	---	---	---	---	---	---
Atualiz. G (base = 1968)	3,4000	---	---	---	---	---	---
Atualiz. PT (base = 1979)	1,5700	---	---	---	---	---	---

=====

SAIDA DE DADOS

=====

	C1	C2	C3	C4	C5	C6	C7
Projeto							
H calc. (m)	21,35	25,01	25,62	0,00	0,00	0,00	0,00
Diam. (m)	0,882	0,896	0,941	0,000	0,000	0,000	0,000
v vap (m/s)	1,104	1,066	0,968	0,000	0,000	0,000	0,000
P media (ata)	1,00	1,00	1,00	0,00	0,00	0,00	0,00

Custos parciais (US\$)

TOTAL

Cc tr PT	124024	147807	160154	0	0	0	0	431985
Cc pr PT	129116	151251	126173	0	0	0	0	406540
Cc pr	146403	166211	139588	0	0	0	0	452201
Cc tr	140946	162635	174832	0	0	0	0	478413
Cs tr	18013	21605	23904	0	0	0	0	63522
Cs pr	19035	22299	17231	0	0	0	0	58565
Crv	35038	33388	32451	0	0	0	0	100876
Crf	52805	44681	30838	0	0	0	0	128324
Coc tr	2819	3253	3497	0	0	0	0	9568
Coc pr	2928	3324	2792	0	0	0	0	9044
Corf	11274	11116	11058	0	0	0	0	33447
Corv	48364	44934	43014	0	0	0	0	136312
Cti tr	261801	277309	277025	0	0	0	0	816135
Cti pr	268281	281579	235107	0	0	0	0	784966
Cot tr	62456	59302	57569	0	0	0	0	179327
Cot pr	62565	59374	56864	0	0	0	0	178803

=====

Valores Totais

=====

TAC tr (U\$)	88636	87033	85271	0	0	0	0	260941
TAC pr (U\$)	89393	87532	80375	0	0	0	0	257299
VR	0,7170	0,6470	0,5970	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	1,9610
Qr (Mkcal/h)	0,5290	0,4913	0,4702	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	1,4905
RR	1,34	1,63	3,19	0,00	0,00	0,00	0,00	6,1606

=====

ANEXO III - SAÍDA DE DADOS TÍPICA DAS SIMULAÇÕES NO PRO/II

A.3.1 - Primeira seqüência otimizada

```

PPPP  RRRR  OOO  /  III  III  R
P  P  R  R  O  O  /  I  I
P  P  R  R  O  O  /  I  I
PPPP  RRRR  O  O  /  I  I
P      R R  O  O  /  I  I
P      R R  O  O  /  I  I
P      R  R  OOO /  III  III

```

VERSION 3.02

```

*****
*
*
*          SIMULATION SCIENCES INC.
*          -----
*
* HEADQUARTERS                                MID-USA
* -----
* FULLERTON, CALIF, USA                        HOUSTON, TEXAS, USA
* PHONE (714) 879-9180                          PHONE (713) 683-1710
* (800) 854-3198 (USA)                          (800) 231-2754 (USA)
* (800) 427-4672 (CALIF.)                       FAX (713) 683-6613
* (800) 874-6724 (CANADA)
* TELEX 4722053 OR 685547                        DENVER
* CABLE SSI, FULLERTON, CALIF.                  -----
* FAX (714) 447-4107                            DENVER, COLORADO, USA
*                                               PHONE (303) 758-6862
* EAST USA/EAST CANADA/S AMERICA                FAX (303) 692-0757
* -----
* NEWTOWN SQUARE, PA, USA                       EUROPE/MID-EAST/AFRICA
* PHONE (215) 359-0801                          -----
* (800) 237-4371 (USA)                          STOCKPORT, CHESHIRE, UK
* (800) 648-8883 (CANADA)                       PHONE 61-429-6744
* TELEX 405097 OR 62918713                      TELEX 666127
* FAX (215) 359-0806                            FAX 61-480-9063
*
* PACIFIC RIM                                    SIMSCI (SM) JAPAN OPERATIONS
* -----
* BREA, CALIF, USA                               TOKYO, JAPAN
* PHONE (714) 579-0412                          PHONE 3-3585-3191
* (800) 827-7999 (USA)                          TELEX J22274
* (800) 443-4418 (CANADA)                       FAX 3-3589-0516
* TELEX 413692 OR 62053595
* FAX (714) 579-7468
*
*****

```

R - PRO/II IS A REGISTERED MARK OF SIMULATION SCIENCES INC.

SM - SIMSCI IS A SERVICE MARK OF SIMULATION SCIENCES INC.

(c) COPYRIGHT 1988, UPDATED 1989, 1990, AND 1991,

SIMULATION SCIENCES INC.

ALL RIGHTS RESERVED

SIMULATION SCIENCES INC.

R

PAGE S-1

PROJECT

PRO/II VERSION 3.02

386/EM

PROBLEM

INPUT

SOURCE LISTING

```

=====
*****
***** PRO/II Keyword File *****
***** 3.02 *****
TITLE PROJECT=T1-1RH,PROBLEM=Alcanos 4, *
      USER=CAIO,DATE=19/08/93
DESC Sequenciamento otimizado para quatro componentes.
DIMEN METRIC, TIME=HR, WT=KG, TEMP=C, PRES=MMHG, *
      ENER=KCAL, WORK=KW, LIQV=M3, VAPV=M3, VISC=CP, *
      COND=KCH, SURF=DYNE, PBAS=760, XDEN=SPGR
PRINT FRACTION=M, RATE=M, STREAM=ALL, INPUT=ALL
DBASE DATA=PC1, IDATA=10, SDATA=T1-1RH
*
COMPONENT DATA
  LIBID 1, PENTANE/2, HEXANE/3, HEPTANE/4, OCTANE
*
THERMODYNAMIC DATA
*
  METHOD KVALUE (VLE) =SRK, ENTH (V) =SRK, ENTH (L) =SRK, *
        ENTR (V) =SRK, ENTR (L) =SRK, DENS (V) =SRK, *
        DENS (L) =API, SET=SET01, DEFAULT
*
STREAM DATA
  PROP STREAM=1, PRES=760, PHASE=M, RATE (M) =100, LFRAC (M) =1, *
        COMP (M) =1, 30/2, 25/3, 15/4, 30, *
        NORMALIZE
  NAME 1, feed
*
UNIT OPERATIONS
  COLUMN UID=C1, NAME=col1
  PARAM TRAY=28, IO=30, DAMP=0.7
  FEED 1, 11, NOTSEP
  PROD OVHD=2, 30, BTMS=3
  COND TYPE=BUBB, PRESS=760
  DUTY 1, 1/2, 28
  PSPEC TOP=760
  ESTI MODEL=CONVENTIONAL, CTEMP=36.6, RTEMP=69.4, RRATIO=1.4
  SPEC STREAM=2, FRAC (M) , COMP=1, 1, *
        VALUE=0.98, *
        ATOL=0.0001
  SPEC STREAM=2, RATE (M) , COMP=1, 1, *
        RATIO, *
        REFFEED, RATE (M) , COMP=1, 1, *
        VALUE=0.999, *
        ATOL=1e-005
  VARY DUTY=1, 2
  TOLER ENTH=0.001
  TSIZE SECTION=2, 27, VALV, PASSES=2, SPACING (TRAY) =609.6, *
        DMIN=381
  METHOD SET=SET01 $ SET01
  COLUMN UID=C2, NAME=COL2
  PARAM TRAY=34, IO=30, DAMP=0.9

```

SIMULATION SCIENCES INC.
 PROJECT T1-1RH
 PROBLEM Alcanos 4

R
 PRO/II VERSION 3.02
 INPUT
 SOURCE LISTING

PAGE S-2
 386/EM
 CAIO
 19/08/93

```
=====
FEED    3, 14, NOTSEP
PROD    OVHD=4, 25, BTMS=5
COND    TYPE=BUBB, PRESS=760
DUTY    1, 1/2, 34
PSPEC   TOP=760
ESTI    MODEL=CONVENTIONAL, CTEMP=68.95, RTEMP=120.58, RRATIO=2.3
SPEC    STREAM=4, FRAC (M) , COMP=2, 2, *
        VALUE=0.99, *
        ATOL=0.0001
SPEC    STREAM=4, RATE (M) , COMP=2, 2, *
        RATIO, *
        REFFEED, RATE (M) , COMP=2, 2, *
        VALUE=0.999, *
        ATOL=1e-005
VARY    DUTY=1, 2
TSIZE   SECTION=2, 33, VALV, PASSES=2
*
COLUMN  UID=C3, NAME=COL3
PARAM   TRAY=35, IO=30, DAMP=0.9
FEED    5, 19, NOTSEP
PROD    OVHD=6, 14.5, BTMS=7
COND    TYPE=BUBB, PRESS=760
DUTY    1, 1/2, 35
PSPEC   TOP=760
ESTI    MODEL=CONVENTIONAL, CTEMP=98.5, RTEMP=131.4, RRATIO=4.7
SPEC    STREAM=6, FRAC (M) , COMP=3, 3, *
        VALUE=0.995, *
        ATOL=1e-005
SPEC    STREAM=7, FRAC (M) , COMP=4, 4, *
        VALUE=0.98, *
        ATOL=0.0001
VARY    DUTY=1, 2
TSIZE   SECTION=2, 27, VALV, PASSES=2
```

SIMULATION SCIENCES INC.
 PROJECT T1-1RH
 PROBLEM Alcanos 4

R
 PRO/II VERSION 3.02
 INPUT
 COMPONENT DATA

PAGE R-1
 386/EM
 CAIO
 19/08/93

NO.	COMPONENT NAME	COMP. TYPE	PHASE	MOL. WEIGHT	SPGR
1	PENTANE	LIBRARY	VAP/LIQ	72.151	0.63100
2	HEXANE	LIBRARY	VAP/LIQ	86.178	0.66400
3	HEPTANE	LIBRARY	VAP/LIQ	100.206	0.68820
4	OCTANE	LIBRARY	VAP/LIQ	114.233	0.70680

NO.	COMPONENT NAME	NBP C	CRIT. TEMP. C	CRIT. PRES. MM HG	CRIT. VOLM. M3/KG-MOL
1	PENTANE	36.074	196.500	25270.100	0.3040
2	HEXANE	68.740	234.200	22268.040	0.3700
3	HEPTANE	98.430	267.000	20520.020	0.4320
4	OCTANE	125.670	295.600	18620.030	0.4920

NO.	COMPONENT NAME	ACEN. FACT.	HEAT FORM. KCAL/KG-MOL	G FORM. KCAL/KG-MOL
1	PENTANE	0.25060	-34982.57	-2040.48
2	HEXANE	0.29430	-39872.93	-19.11
3	HEPTANE	0.34990	-44829.70	1931.67
4	OCTANE	0.39770	-49874.13	3793.64

SIMULATION SCIENCES INC.
 PROJECT T1-1RH
 PROBLEM Alcanos 4

R
 PRO/II VERSION 3.02
 INPUT
 THERMODYNAMIC DATA

PAGE R-2
 386/EM
 CAIO
 19/08/93

VLE K-VALUE DATA FOR SET 'SET01'

SRK PURE COMPONENT DATA

COMP	CRITICAL TEMPERATURE DEG C	CRITICAL PRESSURE MM HG	ALPHA TYPE	C1	C2	C3
1	196.50	25270.10	1	0.8634	N/A	N/A
2	234.20	22268.04	1	0.9280	N/A	N/A
3	267.00	20520.02	1	1.0092	N/A	N/A
4	295.60	18620.03	1	1.0781	N/A	N/A

SRK INTERACTION PARAMETERS

$$K_{IJ} = A(I,J) + B(I,J)/T + C(I,J)/T^{**2}$$

ALL PAIRS HAVE BEEN DEFAULTED TO IDEAL

SIMULATION SCIENCES INC.
 PROJECT T1-1RH
 PROBLEM Alcanos 4

R
 PRO/II VERSION 3.02
 INPUT
 CALCULATION SEQUENCE AND RECYCLES

PAGE R-3
 386/EM
 CAIO
 19/08/93

=====

CALCULATION SEQUENCE

1. UNIT 1, C1 2. UNIT 2, C2 3. UNIT 3, C3

SIMULATION SCIENCES INC.
 PROJECT T1-1RH
 PROBLEM Alcanos 4

R
 PRO/II VERSION 3.02
 CALCULATION
 HISTORY

PAGE H-1
 386/EM
 CAIO
 19/08/93

=====

Sequenciamento otimizado para quatro componentes.

*** PROBLEM SOLUTION BEGINS
 FEED FLASH COMPLETE

SCALING 0 FACTORS = 9.323E-01 ERROR = -7.518E-03
 INNER 0 : E(ENTH+SPEC) = 3.703E-02
 CALCULATING NEW MATRIX
 INNER 1 : E(ENTH+SPEC) = 9.749E-03 ALPHA = 1.0000
 ITER 1 E(K) = 1.456E-02 E(ENTH+SPEC) = 9.749E-03 E(SUM) = 1.536E-01
 INNER 0 : E(ENTH+SPEC) = 1.175E-02
 INNER 1 : E(ENTH+SPEC) = 3.514E-03 ALPHA = 1.0000
 INNER 2 : E(ENTH+SPEC) = 4.279E-04 ALPHA = 1.0000
 ITER 2 E(K) = 5.181E-03 E(ENTH+SPEC) = 4.279E-04 E(SUM) = 4.731E-02
 INNER 0 : E(ENTH+SPEC) = 8.722E-04
 INNER 1 : E(ENTH+SPEC) = 4.332E-04 ALPHA = 1.0000
 INNER 2 : E(ENTH+SPEC) = 8.662E-06 ALPHA = 1.0000
 ITER 3 E(K) = 1.945E-03 E(ENTH+SPEC) = 8.662E-06 E(SUM) = 1.542E-02
 INNER 0 : E(ENTH+SPEC) = 2.833E-04
 INNER 1 : E(ENTH+SPEC) = 1.204E-05 ALPHA = 1.0000
 ITER 4 E(K) = 7.659E-04 E(ENTH+SPEC) = 1.204E-05 E(SUM) = 5.194E-03
 UNIT 1 SOLVED - 'C1' - 'col1'
 SCALING 0 FACTORS = 9.375E-01 ERROR = -3.911E-03
 INNER 0 : E(ENTH+SPEC) = 3.680E-02
 CALCULATING NEW MATRIX
 INNER 1 : E(ENTH+SPEC) = 2.363E-02 ALPHA = 0.2500
 INNER 2 : E(ENTH+SPEC) = 1.473E-02 ALPHA = 0.2500
 INNER 3 : E(ENTH+SPEC) = 5.733E-03 ALPHA = 1.0000
 ITER 1 E(K) = 8.273E-03 E(ENTH+SPEC) = 5.733E-03 E(SUM) = 1.206E-01
 INNER 0 : E(ENTH+SPEC) = 3.244E-03
 INNER 1 : E(ENTH+SPEC) = 1.651E-03 ALPHA = 1.0000
 INNER 2 : E(ENTH+SPEC) = 4.334E-04 ALPHA = 1.0000
 ITER 2 E(K) = 1.599E-03 E(ENTH+SPEC) = 4.334E-04 E(SUM) = 1.695E-02
 INNER 0 : E(ENTH+SPEC) = 4.323E-04
 INNER 1 : E(ENTH+SPEC) = 1.449E-04 ALPHA = 0.2500
 INNER 2 : E(ENTH+SPEC) = 6.029E-05 ALPHA = 1.0000
 INNER 3 : E(ENTH+SPEC) = 5.889E-06 ALPHA = 1.0000
 ITER 3 E(K) = 3.597E-04 E(ENTH+SPEC) = 5.889E-06 E(SUM) = 2.131E-03
 UNIT 2 SOLVED - 'C2' - 'COL2'
 SCALING 0 FACTORS = 1.006E+00 ERROR = 9.369E-03

```

INNER 0 : E(ENTH+SPEC) = 1.348E-01
CALCULATING NEW MATRIX
INNER 1 : E(ENTH+SPEC) = 4.552E-02 ALPHA = 0.2500
INNER 2 : E(ENTH+SPEC) = 3.162E-02 ALPHA = 0.2500
INNER 3 : E(ENTH+SPEC) = 1.710E-02 ALPHA = 0.2500
INNER 4 : E(ENTH+SPEC) = 1.654E-02 ALPHA = 0.2500
INNER 5 : E(ENTH+SPEC) = 7.480E-03 ALPHA = 1.0000
ITER 1 E(K) = 5.477E-03 E(ENTH+SPEC) = 7.480E-03 E(SUM) = 7.218E-02
INNER 0 : E(ENTH+SPEC) = 1.358E-02
INNER 1 : E(ENTH+SPEC) = 3.608E-03 ALPHA = 1.0000
INNER 2 : E(ENTH+SPEC) = 1.354E-04 ALPHA = 1.0000
ITER 2 E(K) = 4.826E-04 E(ENTH+SPEC) = 1.354E-04 E(SUM) = 4.147E-03
INNER 0 : E(ENTH+SPEC) = 1.201E-04
INNER 1 : E(ENTH+SPEC) = 7.872E-05 ALPHA = 0.2500
    
```

```

SIMULATION SCIENCES INC.                R                PAGE H-2
PROJECT T1-1RH                          PRO/II VERSION 3.02          386/EM
PROBLEM Alcanos 4                        CALCULATION                CAIO
                                         HISTORY                      19/08/93
    
```

=====

```

INNER 2 : E(ENTH+SPEC) = 4.564E-05 ALPHA = 1.0000
INNER 3 : E(ENTH+SPEC) = 9.647E-06 ALPHA = 1.0000
ITER 3 E(K) = 0.000E+00 E(ENTH+SPEC) = 9.647E-06 E(SUM) = 4.817E-04
UNIT 3 SOLVED - 'C3 ' - 'COL3 '
    
```

*** PROBLEM SOLUTION REACHED

*** SIMSCI ROYALTY FOR THIS PROBLEM IS 294.00 PRO/II CHARGE UNITS

*** RUN STATISTICS

```

STARTED 23:06:41 09/01/93          NO ERRORS
FINISHED 23:07:33 09/01/93        NO WARNINGS
RUN TIME 0 MIN, 52.24 SEC
    
```

```

SIMULATION SCIENCES INC.                R                PAGE I-1
PROJECT T1-1RH                          PRO/II VERSION 3.02          386/EM
PROBLEM Alcanos 4                        OUTPUT                      CAIO
                                         INDEX                       19/08/93
    
```

=====

PAGE CONTENTS

COLUMN SUMMARY

```

1 UNIT 1, 'C1', 'COL1'
3 TRAY RATES AND DENSITIES
5 TRAY SIZING
8 UNIT 2, 'C2', 'COL2'
10 TRAY RATES AND DENSITIES
12 TRAY SIZING
15 UNIT 3, 'C3', 'COL3'
17 TRAY RATES AND DENSITIES
19 TRAY SIZING
22 STREAM MOLAR COMPONENT RATES
23 STREAM MOLAR COMPONENT FRACTIONS
24 STREAM SUMMARY
    
```

SIMULATION SCIENCES INC.
 PROJECT T1-1RH
 PROBLEM Alcanos 4

R
 PRO/II VERSION 3.02
 OUTPUT
 COLUMN SUMMARY

PAGE P-1
 386/EM
 CAIO
 19/08/93

UNIT 1, 'C1', 'coll'

TOTAL NUMBER OF ITERATIONS

IN/OUT METHOD 4

COLUMN SUMMARY

TRAY	TEMP DEG C	PRESSURE MM HG	NET FLOW RATES			HEATER DUTIES M*KCAL/HR
			LIQUID	VAPOR	FEED PRODUCT	
			KG-MOL/HR			
1	36.6	760.00	41.1		30.6L	-0.4519
2	37.4	760.00	40.6	71.7		
3	38.6	760.00	39.9	71.2		
4	40.4	760.00	39.1	70.5		
5	42.6	760.00	38.4	69.7		
6	44.8	760.00	37.7	68.9		
7	46.8	760.00	37.2	68.3		
8	48.5	760.00	36.7	67.8		
9	50.2	760.00	35.6	67.3		
10	53.2	760.00	32.7	66.2		
11	61.6	760.00	132.1	63.2	100.0L	
12	62.0	760.00	132.1	62.6		
13	62.6	760.00	132.1	62.6		
14	63.6	760.00	132.1	62.6		
15	65.1	760.00	132.2	62.7		
16	67.1	760.00	132.5	62.8		
17	69.6	760.00	133.1	63.1		
18	72.3	760.00	133.9	63.7		
19	74.8	760.00	134.9	64.5		
20	76.9	760.00	135.8	65.5		
21	78.4	760.00	136.5	66.3		
22	79.4	760.00	136.9	67.0		
23	80.1	760.00	137.3	67.5		
24	80.5	760.00	137.4	67.8		
25	81.0	760.00	137.3	68.0		
26	81.9	760.00	136.6	67.9		
27	84.4	760.00	134.4	67.2		
28	91.8	760.00		65.0	69.4L	0.5290

FEED AND PRODUCT STREAMS

TYPE	STREAM	PHASE	FROM TRAY	TO TRAY	LIQUID FRACTION	FLOW RATES KG-MOL/HR	HEAT RATES M*KCAL/HR
FEED	1	LIQUID		11	1.0000	100.00	0.3105
PRODUCT	2	LIQUID	1			30.58	0.0388
PRODUCT	3	LIQUID	28			69.42	0.3487

SIMULATION SCIENCES INC.
 PROJECT T1-1RH
 PROBLEM Alcanos 4

R
 PRO/II VERSION 3.02
 OUTPUT
 COLUMN SUMMARY

PAGE P-2
 386/EM
 CAIO
 19/08/93

=====

UNIT 1, 'C1', 'col1' (CONT)

OVERALL MASS BALANCE, (FEEDS - PRODUCTS) 0.00
 OVERALL HEAT BALANCE, (H(IN) - H(OUT)) 2.8922E-07

SPECIFICATIONS

PARAMETER TYPE	TRAY NO	COMP NO	SPECIFICATION TYPE	SPECIFIED VALUE	CALCULATED VALUE
STRM 2	1	1	MOL FRACTION	9.800E-01	9.800E-01
STRM 2	1	1	MOL RATIO	9.990E-01	9.990E-01

REFLUX RATIOS

	REFLUX RATIOS		
	MOLAR	WEIGHT	STD L VOL
REFLUX / FEED STREAM 1	0.4111	0.3219	0.3438
REFLUX / LIQUID DISTILLATE	1.3442	1.3442	1.3442

SIMULATION SCIENCES INC.
 PROJECT T1-1RH
 PROBLEM Alcanos 4

R
 PRO/II VERSION 3.02
 OUTPUT
 COLUMN SUMMARY

PAGE P-3
 386/EM
 CAIO
 19/08/93

=====

UNIT 1, 'C1', 'coll' (CONT)

TRAY NET VAPOR RATES AND DENSITIES

TRAY	MW	ACTUAL DENS KG/M3	Z FROM K	RATES		
				K*KG/HR	STD VAP K*M3/HR	ACTUAL K*M3/HR
2	72.432	2.95235	0.96279	5.193	1.607	1.759
3	72.738	2.95254	0.96289	5.179	1.596	1.754
4	73.196	2.95398	0.96300	5.162	1.581	1.747
5	73.798	2.95762	0.96309	5.146	1.563	1.740
6	74.476	2.96359	0.96313	5.135	1.545	1.733
7	75.125	2.97061	0.96313	5.131	1.531	1.727
8	75.672	2.97663	0.96312	5.130	1.520	1.723
9	76.131	2.97897	0.96320	5.122	1.508	1.719
10	76.663	2.97044	0.96367	5.077	1.484	1.709
11	77.860	2.93671	0.96519	4.923	1.417	1.676
12	78.018	2.93952	0.96515	4.888	1.404	1.663
13	78.284	2.94428	0.96509	4.903	1.404	1.665
14	78.717	2.95228	0.96498	4.931	1.404	1.670
15	79.397	2.96533	0.96480	4.976	1.405	1.678
16	80.394	2.98550	0.96449	5.049	1.408	1.691
17	81.718	3.01386	0.96402	5.158	1.415	1.711
18	83.268	3.04886	0.96342	5.304	1.428	1.740
19	84.832	3.08583	0.96275	5.473	1.446	1.774
20	86.199	3.11917	0.96213	5.643	1.467	1.809
21	87.251	3.14541	0.96163	5.788	1.487	1.840
22	87.988	3.16402	0.96127	5.898	1.503	1.864
23	88.476	3.17633	0.96103	5.975	1.514	1.881
24	88.802	3.18427	0.96088	6.024	1.521	1.892
25	89.066	3.18971	0.96079	6.054	1.524	1.898
26	89.427	3.19469	0.96076	6.070	1.521	1.900
27	90.298	3.20315	0.96081	6.068	1.506	1.895
28	93.045	3.23353	0.96082	6.049	1.457	1.871

SIMULATION SCIENCES INC.
PROJECT T1-1RH
PROBLEM Alcanos 4

R
PRO/II VERSION 3.02
OUTPUT
COLUMN SUMMARY

PAGE P-4
386/EM
CAIO
19/08/93

=====

UNIT 1, 'C1', 'coll' (CONT)

TRAY NET LIQUID RATES AND DENSITIES

TRAY	MW	ACTUAL DENS KG/M3	Z FROM K	RATES		
				K*KG/HR	STD LIQ M3/HR	ACTUAL M3/HR
1	72.432	610.060	0.00513	2.978	4.718	4.881
2	72.969	610.764	0.00515	2.964	4.686	4.853
3	73.781	611.766	0.00520	2.947	4.643	4.817
4	74.866	612.982	0.00525	2.931	4.598	4.781
5	76.106	614.192	0.00531	2.920	4.559	4.754
6	77.308	615.177	0.00536	2.916	4.532	4.740
7	78.335	615.889	0.00541	2.915	4.513	4.733
8	79.213	616.500	0.00545	2.907	4.486	4.715
9	80.293	617.562	0.00549	2.862	4.401	4.635
10	82.944	620.916	0.00561	2.708	4.128	4.362
11	90.270	629.064	0.00593	11.922	17.789	18.951
12	90.397	628.993	0.00593	11.937	17.807	18.979
13	90.603	628.870	0.00594	11.965	17.837	19.026
14	90.922	628.654	0.00595	12.010	17.888	19.104
15	91.384	628.285	0.00596	12.083	17.973	19.232
16	91.989	627.697	0.00598	12.192	18.105	19.423
17	92.686	626.858	0.00599	12.338	18.286	19.682
18	93.382	625.830	0.00601	12.507	18.502	19.985
19	93.985	624.767	0.00602	12.677	18.722	20.290
20	94.449	623.832	0.00603	12.822	18.914	20.554
21	94.774	623.115	0.00604	12.932	19.060	20.755
22	94.990	622.618	0.00604	13.009	19.162	20.894
23	95.137	622.298	0.00605	13.058	19.227	20.984
24	95.261	622.110	0.00605	13.088	19.265	21.039
25	95.444	622.033	0.00605	13.104	19.279	21.066
26	95.902	622.117	0.00607	13.102	19.256	21.061
27	97.322	622.580	0.00611	13.083	19.163	21.014
28	101.327	623.332	0.00625	7.034	10.211	11.285

SIMULATION SCIENCES INC.
PROJECT T1-1RH
PROBLEM Alcanos 4

R
PRO/II VERSION 3.02
OUTPUT
COLUMN SUMMARY

PAGE P-5
386/EM
CAIO
19/08/93

=====

UNIT 1, 'C1', 'coll' (CONT)

TRAY SIZING MECHANICAL DATA

SECTION	TRAY NUMBERS	TRAY PASSES	TRAY SPACING MM	SYSTEM FACTOR	TRAY TYPE	MIN DIAMETER MM
1	2 - 27	2	609.60	1.00	VALVE	381.00

TRAY SIZING RESULTS

TRAY	VAPOR	LIQUID	VLOAD	-- DESIGN --		NEXT SMALLER		NEXT LARGER		NP
	CFS	HOTGPM	CFS	DIA, MM	FF	DIA, MM	FF	DIA, MM	FF	
2	17.21	21.36	1.199	691.5	75.0	610.	100.1	762.	60.5	2
3	17.14	21.21	1.194	690.0	75.0	610.	99.6	762.	60.2	2
4	17.07	21.05	1.188	688.3	75.0	610.	99.0	762.	59.8	2
5	17.00	20.93	1.184	686.9	75.0	610.	98.6	762.	59.6	2
6	16.94	20.87	1.180	685.9	75.0	610.	98.2	762.	59.4	2
7	16.91	20.84	1.178	685.3	75.0	610.	98.0	762.	59.3	2
8	16.87	20.76	1.175	684.4	75.0	610.	97.8	762.	59.1	2
9	16.77	20.40	1.166	681.5	75.0	610.	96.8	762.	58.6	2
10	16.45	19.20	1.134	671.8	75.0	610.	93.6	762.	56.7	2
11	16.31	83.43	1.118	735.6	75.0	610.	126.0	762.	68.6	2
12	16.34	83.55	1.120	736.4	75.0	610.	126.4	762.	68.8	2
13	16.38	83.76	1.125	737.9	75.0	610.	127.1	762.	69.1	2
14	16.46	84.11	1.133	740.3	75.0	610.	128.3	762.	69.7	2
15	16.59	84.67	1.146	744.2	75.0	610.	130.3	762.	70.6	2
16	16.79	85.51	1.166	750.0	75.0	610.	133.2	762.	72.0	2
17	17.06	86.65	1.193	757.9	75.0	610.	137.3	762.	74.0	2
18	17.40	87.99	1.225	767.0	75.0	762.	76.3	914.	49.2	2
19	17.75	89.33	1.257	776.2	75.0	762.	78.6	914.	50.6	2
20	18.05	90.49	1.285	784.1	75.0	762.	80.7	914.	51.8	2
21	18.29	91.37	1.306	790.1	75.0	762.	82.3	914.	52.7	2
22	18.45	91.99	1.321	794.3	75.0	762.	83.4	914.	53.4	2
23	18.56	92.38	1.331	796.9	75.0	762.	84.1	914.	53.8	2
24	18.62	92.62	1.337	798.5	75.0	762.	84.5	914.	54.1	2
25	18.64	92.74	1.339	799.2	75.0	762.	84.7	914.	54.2	2
26	18.58	92.72	1.337	798.7	75.0	762.	84.6	914.	54.1	2
27	18.35	92.52	1.326	796.0	75.0	762.	83.8	914.	53.7	2

TRAY SIZING DOWNCOMER WIDTH CALCULATION

TRAY	NEXT LARGER	DOWNCOMER WIDTHS		
	DIAMETER	SIDE	CENTER	OFF-CENTER
	MM	MM	MM	MM
2	762.	45.543	29.158	N/A
3	762.	45.399	29.021	N/A
4	762.	45.244	28.874	N/A
5	762.	45.112	28.749	N/A

SIMULATION SCIENCES INC.
 PROJECT T1-1RH
 PROBLEM Alcanos 4

R
 PRO/II VERSION 3.02
 OUTPUT
 COLUMN SUMMARY

PAGE P-6
 386/EM
 CAIO
 19/08/93

=====

UNIT 1, 'C1', 'coll' (CONT)

=====

TRAY	NEXT LARGER	DOWNCOMER WIDTHS		
	DIAMETER	SIDE	CENTER	OFF-CENTER
	MM	MM	MM	MM
6	762.	45.026	28.668	N/A
7	762.	44.971	28.616	N/A
8	762.	44.891	28.541	N/A
9	762.	44.616	28.282	N/A
10	762.	43.688	27.415	N/A
11	762.	80.996	68.218	N/A
12	762.	81.079	68.321	N/A
13	762.	81.221	68.498	N/A
14	762.	81.461	68.794	N/A
15	762.	81.848	69.276	N/A
16	762.	82.431	70.002	N/A
17	762.	83.219	70.986	N/A
18	914.	78.772	60.075	N/A
19	914.	79.636	61.047	N/A
20	914.	80.375	61.889	N/A
21	914.	80.940	62.532	N/A
22	914.	81.331	62.978	N/A
23	914.	81.584	63.267	N/A
24	914.	81.737	63.442	N/A
25	914.	81.814	63.529	N/A
26	914.	81.797	63.510	N/A
27	914.	81.654	63.347	N/A

TRAY SELECTION FOR TRAY RATING

VALVE DIAMETER 47.625 MM

SECTION	DESIGN	DIAMETER	NP	NUMBER	DOWNCOMER WIDTHS		
	TRAY			OF VALVES	SIDE	CENTER	OFF-CENTER
	NUMBER	MM		OR CAPS	MM	MM	MM
1	25	914.	2	69	81.814	63.529	N/A

TRAY RATING AT SELECTED DESIGN TRAY

TRAY	VAPOR	LIQUID	VLOAD	DIAM	FF	NP	PRES	GPM/LWI	DOWNCOMER
	CFS	HOTGPM	CFS	MM			DROP		
							MM HG	GPM/IN	BACKUP, MM
									CLEAR LIQD
2	17.21	21.36	1.199	914.	46.1	2	3.371	0.4	131.72
3	17.14	21.21	1.194	914.	45.9	2	3.356	0.4	131.24
4	17.07	21.05	1.188	914.	45.7	2	3.341	0.4	130.72
5	17.00	20.93	1.184	914.	45.5	2	3.329	0.4	130.28
6	16.94	20.87	1.180	914.	45.4	2	3.322	0.4	129.99
7	16.91	20.84	1.178	914.	45.3	2	3.318	0.4	129.81

SIMULATION SCIENCES INC.
 PROJECT T1-1RH
 PROBLEM Alcanos 4

R
 PRO/II VERSION 3.02
 OUTPUT
 COLUMN SUMMARY

PAGE P-7
 386/EM
 CAIO
 19/08/93

=====

UNIT 1, 'C1', 'coll' (CONT)

TRAY	VAPOR CFS	LIQUID HOTGPM	VLOAD CFS	DIAM MM	FF	NP	PRES DROP MM HG	GPM/LWI GPM/IN	DOWNCOMER BACKUP, MM CLEAR LIQD
8	16.87	20.76	1.175	914.	45.2	2	3.310	0.4	129.55
9	16.77	20.40	1.166	914.	44.8	2	3.278	0.4	128.65
10	16.45	19.20	1.134	914.	43.5	2	3.171	0.3	125.67
11	16.31	83.43	1.118	914.	45.4	2	3.536	1.5	143.88
12	16.34	83.55	1.120	914.	45.6	2	3.546	1.5	144.13
13	16.38	83.76	1.125	914.	45.7	2	3.563	1.5	144.56
14	16.46	84.11	1.133	914.	46.1	2	3.593	1.5	145.29
15	16.59	84.67	1.146	914.	46.6	2	3.640	1.5	146.48
16	16.79	85.51	1.166	914.	47.4	2	3.713	1.5	148.30
17	17.06	86.65	1.193	914.	48.4	2	3.814	1.5	150.82
18	17.40	87.99	1.225	914.	49.7	2	3.936	1.6	153.86
19	17.75	89.33	1.257	914.	51.0	2	4.062	1.6	157.01
20	18.05	90.49	1.285	914.	52.1	2	4.173	1.6	159.80
21	18.29	91.37	1.306	914.	52.9	2	4.260	1.6	161.98
22	18.45	91.99	1.321	914.	53.5	2	4.321	1.6	163.50
23	18.56	92.38	1.331	914.	53.9	2	4.361	1.6	164.50
24	18.62	92.62	1.337	914.	54.1	2	4.384	1.6	165.09
25	18.64	92.74	1.339	914.	54.2	2	4.395	1.6	165.36
26	18.58	92.72	1.337	914.	54.1	2	4.386	1.6	165.15
27	18.35	92.52	1.326	914.	53.7	2	4.342	1.6	164.08

SIMULATION SCIENCES INC.
 PROJECT T1-1RH
 PROBLEM Alcanos 4

R
 PRO/II VERSION 3.02
 OUTPUT
 COLUMN SUMMARY

PAGE P-8
 386/EM
 CAIO
 19/08/93

UNIT 2, 'C2', 'COL2'

TOTAL NUMBER OF ITERATIONS

IN/OUT METHOD 3

COLUMN SUMMARY

TRAY	TEMP DEG C	PRESSURE MM HG	NET FLOW RATES			HEATER DUTIES M*KCAL/HR
			LIQUID	VAPOR KG-MOL/HR	FEED PRODUCT	
1	68.9	760.00	40.0		24.6L	-0.4521
2	69.3	760.00	39.9	64.7		
3	69.7	760.00	39.7	64.5		
4	70.3	760.00	39.4	64.3		
5	71.1	760.00	39.0	64.0		
6	72.2	760.00	38.5	63.6		
7	73.5	760.00	38.0	63.1		
8	75.0	760.00	37.5	62.6		
9	76.6	760.00	37.0	62.1		
10	78.2	760.00	36.4	61.6		
11	79.9	760.00	35.7	61.0		
12	82.1	760.00	34.6	60.3		
13	85.3	760.00	33.2	59.2		
14	89.8	760.00	102.4	57.8	69.4L	
15	90.0	760.00	102.4	57.6		
16	90.4	760.00	102.3	57.6		
17	90.9	760.00	102.3	57.5		
18	91.7	760.00	102.2	57.4		
19	92.9	760.00	102.1	57.4		
20	94.5	760.00	102.1	57.3		
21	96.4	760.00	102.2	57.3		
22	98.6	760.00	102.4	57.4		
23	100.9	760.00	102.7	57.6		
24	102.9	760.00	103.2	57.9		
25	104.5	760.00	103.6	58.3		
26	105.8	760.00	103.9	58.8		
27	106.7	760.00	104.2	59.1		
28	107.4	760.00	104.3	59.3		
29	107.9	760.00	104.4	59.5		
30	108.3	760.00	104.4	59.6		
31	108.9	760.00	104.2	59.6		
32	109.9	760.00	104.0	59.4		
33	111.6	760.00	103.5	59.1		
34	114.6	760.00		58.7	44.8L	0.4913

SIMULATION SCIENCES INC.
 PROJECT T1-1RH
 PROBLEM Alcanos 4

R
 PRO/II VERSION 3.02
 OUTPUT
 COLUMN SUMMARY

PAGE P-9
 386/EM
 CAIO
 19/08/93

UNIT 2, 'C2', 'COL2' (CONT)

FEED AND PRODUCT STREAMS

TYPE	STREAM	PHASE	FROM TRAY	TO TRAY	LIQUID FRACTION	FLOW RATES KG-MOL/HR	HEAT RATES M*KCAL/HR
FEED	3	LIQUID		14	1.0000	69.42	0.3487
PRODUCT	4	LIQUID	1			24.61	0.0780
PRODUCT	5	LIQUID	34			44.81	0.3099
OVERALL MASS BALANCE, (FEEDS - PRODUCTS)						-1.6764E-06	
OVERALL HEAT BALANCE, (H(IN) - H(OUT))							1.8445E-06

SPECIFICATIONS

PARAMETER TYPE	TRAY NO	COMP NO	SPECIFICATION TYPE	SPECIFIED VALUE	CALCULATED VALUE
STRM 4	1	2	MOL FRACTION	9.900E-01	9.900E-01
STRM 4	1	2	MOL RATIO	9.990E-01	9.990E-01

REFLUX RATIOS

	REFLUX RATIOS		
	MOLAR	WEIGHT	STD L VOL
REFLUX / FEED STREAM 3	0.5769	0.4912	0.5099
REFLUX / LIQUID DISTILLATE	1.6271	1.6271	1.6271

SIMULATION SCIENCES INC.
 PROJECT T1-1RH
 PROBLEM Alcanos 4

R
 PRO/II VERSION 3.02
 OUTPUT
 COLUMN SUMMARY

PAGE P-10
 386/EM
 CAIO
 19/08/93

=====

UNIT 2, 'C2', 'COL2' (CONT)

TRAY NET VAPOR RATES AND DENSITIES

TRAY	MW	ACTUAL DENS KG/M3	Z FROM K	RATES		
				K*KG/HR	STD VAP K*M3/HR	ACTUAL K*M3/HR
2	86.284	3.20116	0.95933	5.579	1.449	1.743
3	86.405	3.20164	0.95937	5.573	1.446	1.741
4	86.578	3.20226	0.95942	5.565	1.441	1.738
5	86.824	3.20334	0.95948	5.554	1.434	1.734
6	87.159	3.20520	0.95956	5.540	1.425	1.728
7	87.584	3.20813	0.95963	5.525	1.414	1.722
8	88.080	3.21220	0.95969	5.512	1.403	1.716
9	88.611	3.21703	0.95975	5.500	1.391	1.710
10	89.147	3.22181	0.95980	5.489	1.380	1.704
11	89.694	3.22552	0.95989	5.473	1.368	1.697
12	90.326	3.22732	0.96007	5.446	1.351	1.688
13	91.193	3.22790	0.96036	5.400	1.327	1.673
14	92.445	3.23127	0.96069	5.341	1.295	1.653
15	92.556	3.23316	0.96067	5.332	1.291	1.649
16	92.724	3.23596	0.96064	5.338	1.290	1.650
17	92.984	3.24032	0.96060	5.348	1.289	1.651
18	93.381	3.24712	0.96052	5.365	1.288	1.652
19	93.969	3.25751	0.96041	5.391	1.286	1.655
20	94.798	3.27274	0.96022	5.431	1.284	1.660
21	95.886	3.29366	0.95994	5.492	1.284	1.667
22	97.191	3.31990	0.95957	5.574	1.286	1.679
23	98.597	3.34940	0.95913	5.677	1.291	1.695
24	99.948	3.37874	0.95866	5.790	1.298	1.714
25	101.115	3.40471	0.95824	5.900	1.308	1.733
26	102.034	3.42553	0.95789	5.995	1.317	1.750
27	102.712	3.44103	0.95763	6.069	1.324	1.764
28	103.197	3.45205	0.95745	6.124	1.330	1.774
29	103.552	3.45989	0.95732	6.162	1.334	1.781
30	103.852	3.46596	0.95722	6.188	1.336	1.785
31	104.184	3.47184	0.95714	6.206	1.335	1.788
32	104.680	3.47976	0.95705	6.222	1.332	1.788
33	105.548	3.49338	0.95688	6.242	1.326	1.787
34	107.087	3.51892	0.95654	6.283	1.315	1.785

SIMULATION SCIENCES INC.
 PROJECT T1-1RH
 PROBLEM Alcanos 4

R
 PRO/II VERSION 3.02
 OUTPUT
 COLUMN SUMMARY

PAGE P-11
 386/EM
 CAIO
 19/08/93

=====

UNIT 2, 'C2', 'COL2' (CONT)

TRAY NET LIQUID RATES AND DENSITIES

TRAY	MW	ACTUAL DENS KG/M3	Z FROM K	RATES		
				K*KG/HR	STD LIQ M3/HR	ACTUAL M3/HR
1	86.284	614.173	0.00571	3.455	5.207	5.626
2	86.480	614.320	0.00571	3.450	5.196	5.616
3	86.760	614.553	0.00572	3.441	5.179	5.600
4	87.162	614.880	0.00574	3.430	5.156	5.579
5	87.712	615.307	0.00575	3.417	5.128	5.553
6	88.416	615.812	0.00578	3.402	5.096	5.524
7	89.244	616.351	0.00580	3.388	5.064	5.497
8	90.140	616.870	0.00583	3.376	5.034	5.473
9	91.054	617.352	0.00586	3.365	5.005	5.451
10	91.999	617.854	0.00589	3.350	4.970	5.422
11	93.113	618.537	0.00593	3.323	4.916	5.372
12	94.684	619.625	0.00599	3.276	4.828	5.287
13	97.018	621.190	0.00608	3.217	4.715	5.179
14	100.009	622.777	0.00620	10.242	14.911	16.446
15	100.106	622.748	0.00620	10.249	14.917	16.457
16	100.256	622.704	0.00620	10.259	14.927	16.475
17	100.484	622.632	0.00621	10.275	14.943	16.503
18	100.819	622.513	0.00622	10.301	14.970	16.548
19	101.289	622.314	0.00623	10.342	15.014	16.618
20	101.901	622.000	0.00624	10.402	15.081	16.724
21	102.629	621.538	0.00626	10.485	15.178	16.869
22	103.408	620.931	0.00628	10.588	15.301	17.051
23	104.153	620.234	0.00629	10.701	15.440	17.253
24	104.796	619.538	0.00631	10.810	15.578	17.449
25	105.303	618.924	0.00632	10.905	15.698	17.620
26	105.678	618.437	0.00632	10.980	15.794	17.754
27	105.947	618.080	0.00633	11.034	15.864	17.853
28	106.146	617.834	0.00633	11.073	15.912	17.922
29	106.315	617.672	0.00634	11.099	15.944	17.968
30	106.505	617.570	0.00634	11.117	15.965	18.001
31	106.790	617.511	0.00635	11.133	15.979	18.028
32	107.290	617.470	0.00637	11.153	15.992	18.062
33	108.171	617.390	0.00640	11.193	16.024	18.130
34	109.590	617.118	0.00646	4.911	7.011	7.957

SIMULATION SCIENCES INC.
 PROJECT T1-1RH
 PROBLEM Alcanos 4

R
 PRO/II VERSION 3.02
 OUTPUT
 COLUMN SUMMARY

PAGE P-12
 386/EM
 CAIO
 19/08/93

=====

UNIT 2, 'C2', 'COL2' (CONT)

TRAY SIZING MECHANICAL DATA

SECTION	TRAY NUMBERS	TRAY PASSES	TRAY SPACING MM	SYSTEM FACTOR	TRAY TYPE	MIN DIAMETER MM
1	2 - 33	2	609.60	1.00	VALVE	381.00

TRAY SIZING RESULTS

TRAY	VAPOR CFS	LIQUID HOTGPM	VLOAD CFS	-- DESIGN -- DIA, MM FF		NEXT SMALLER DIA, MM FF		NEXT LARGER DIA, MM FF		NP
2	17.08	24.72	1.236	703.3	75.0	610.	104.2	762.	62.8	2
3	17.05	24.65	1.234	702.7	75.0	610.	104.0	762.	62.6	2
4	17.01	24.56	1.231	701.8	75.0	610.	103.7	762.	62.5	2
5	16.96	24.45	1.227	700.7	75.0	610.	103.3	762.	62.2	2
6	16.90	24.32	1.223	699.4	75.0	610.	102.8	762.	62.0	2
7	16.83	24.20	1.218	698.1	75.0	610.	102.4	762.	61.7	2
8	16.77	24.10	1.214	697.0	75.0	610.	102.0	762.	61.5	2
9	16.71	24.00	1.210	695.8	75.0	610.	101.6	762.	61.3	2
10	16.65	23.87	1.206	694.5	75.0	610.	101.2	762.	61.0	2
11	16.55	23.65	1.199	692.5	75.0	610.	100.5	762.	60.6	2
12	16.41	23.28	1.187	689.1	75.0	610.	99.3	762.	60.0	2
13	16.21	22.80	1.172	684.6	75.0	610.	97.8	762.	59.1	2
14	16.18	72.40	1.169	734.9	75.0	610.	122.7	762.	68.7	2
15	16.18	72.45	1.170	735.2	75.0	610.	122.8	762.	68.7	2
16	16.19	72.53	1.171	735.7	75.0	610.	123.0	762.	68.8	2
17	16.21	72.65	1.173	736.4	75.0	610.	123.4	762.	69.0	2
18	16.23	72.85	1.177	737.7	75.0	610.	123.9	762.	69.3	2
19	16.28	73.16	1.184	739.6	75.0	610.	124.8	762.	69.7	2
20	16.36	73.63	1.193	742.5	75.0	610.	126.2	762.	70.4	2
21	16.47	74.27	1.207	746.6	75.0	610.	128.2	762.	71.4	2
22	16.63	75.07	1.224	751.9	75.0	610.	130.7	762.	72.6	2
23	16.81	75.96	1.244	757.7	75.0	610.	133.5	762.	74.0	2
24	17.00	76.82	1.264	763.3	75.0	762.	75.3	914.	49.1	2
25	17.17	77.57	1.281	768.3	75.0	762.	76.5	914.	49.8	2
26	17.30	78.16	1.294	772.2	75.0	762.	77.5	914.	50.4	2
27	17.40	78.60	1.304	775.1	75.0	762.	78.2	914.	50.8	2
28	17.47	78.90	1.311	777.0	75.0	762.	78.7	914.	51.1	2
29	17.51	79.11	1.316	778.3	75.0	762.	79.0	914.	51.3	2
30	17.54	79.25	1.319	779.2	75.0	762.	79.2	914.	51.5	2
31	17.54	79.37	1.320	779.8	75.0	762.	79.4	914.	51.6	2
32	17.53	79.52	1.322	780.4	75.0	762.	79.5	914.	51.6	2
33	17.51	79.82	1.326	781.6	75.0	762.	79.9	914.	51.8	2

SIMULATION SCIENCES INC.
 PROJECT T1-1RH
 PROBLEM Alcanos 4

R
 PRO/II VERSION 3.02
 OUTPUT
 COLUMN SUMMARY

PAGE P-13
 386/EM
 CAIO
 19/08/93

=====

UNIT 2, 'C2', 'COL2' (CONT)

TRAY SIZING DOWNCOMER WIDTH CALCULATION

TRAY	NEXT LARGER	DOWNCOMER WIDTHS		
	DIAMETER	SIDE	CENTER	OFF-CENTER
	MM	MM	MM	MM
2	762.	46.842	30.398	N/A
3	762.	46.781	30.340	N/A
4	762.	46.698	30.260	N/A
5	762.	46.594	30.157	N/A
6	762.	46.477	30.048	N/A
7	762.	46.357	29.932	N/A
8	762.	46.248	29.828	N/A
9	762.	46.145	29.730	N/A
10	762.	46.022	29.613	N/A
11	762.	45.828	29.428	N/A
12	762.	45.510	29.126	N/A
13	762.	45.090	28.729	N/A
14	762.	73.799	59.494	N/A
15	762.	73.835	59.537	N/A
16	762.	73.891	59.603	N/A
17	762.	73.980	59.708	N/A
18	762.	74.122	59.878	N/A
19	762.	74.346	60.144	N/A
20	762.	74.680	60.542	N/A
21	762.	75.142	61.094	N/A
22	762.	75.721	61.787	N/A
23	762.	76.359	62.555	N/A
24	914.	72.102	52.723	N/A
25	914.	72.605	53.267	N/A
26	914.	73.001	53.696	N/A
27	914.	73.290	54.011	N/A
28	914.	73.492	54.231	N/A
29	914.	73.629	54.380	N/A
30	914.	73.724	54.484	N/A
31	914.	73.802	54.569	N/A
32	914.	73.898	54.675	N/A
33	914.	74.091	54.885	N/A

TRAY SELECTION FOR TRAY RATING

VALVE DIAMETER 47.625 MM

SECTION	DESIGN	DIAMETER	NP	NUMBER	DOWNCOMER WIDTHS		
	TRAY			OF VALVES	SIDE	CENTER	OFF-CENTER
	NUMBER	MM		OR CAPS	MM	MM	MM
1	33	914.	2	71	74.091	54.885	N/A

SIMULATION SCIENCES INC.
 PROJECT T1-1RH
 PROBLEM Alcanos 4

R
 PRO/II VERSION 3.02
 OUTPUT
 COLUMN SUMMARY

PAGE P-14
 386/EM
 CAIO
 19/08/93

=====

UNIT 2, 'C2', 'COL2' (CONT)

TRAY RATING AT SELECTED DESIGN TRAY

TRAY	VAPOR CFS	LIQUID HOTGPM	VLOAD CFS	DIAM MM	FF	NP	PRES DROP MM HG	GPM/LWI GPM/IN	DOWNCOMER BACKUP, MM CLEAR LIQD
2	17.08	24.72	1.236	914.	46.3	2	3.425	0.4	133.20
3	17.05	24.65	1.234	914.	46.2	2	3.417	0.4	133.00
4	17.01	24.56	1.231	914.	46.1	2	3.408	0.4	132.73
5	16.96	24.45	1.227	914.	46.0	2	3.395	0.4	132.38
6	16.90	24.32	1.223	914.	45.8	2	3.382	0.4	131.99
7	16.83	24.20	1.218	914.	45.6	2	3.368	0.4	131.61
8	16.77	24.10	1.214	914.	45.5	2	3.356	0.4	131.25
9	16.71	24.00	1.210	914.	45.3	2	3.344	0.4	130.91
10	16.65	23.87	1.206	914.	45.2	2	3.330	0.4	130.51
11	16.55	23.65	1.199	914.	44.9	2	3.307	0.4	129.89
12	16.41	23.28	1.187	914.	44.5	2	3.270	0.4	128.87
13	16.21	22.80	1.172	914.	43.9	2	3.222	0.4	127.54
14	16.18	72.40	1.169	914.	45.7	2	3.515	1.3	142.62
15	16.18	72.45	1.170	914.	45.8	2	3.518	1.3	142.71
16	16.19	72.53	1.171	914.	45.8	2	3.524	1.3	142.85
17	16.21	72.65	1.173	914.	45.9	2	3.532	1.3	143.07
18	16.23	72.85	1.177	914.	46.1	2	3.546	1.3	143.43
19	16.28	73.16	1.184	914.	46.3	2	3.569	1.3	144.01
20	16.36	73.63	1.193	914.	46.7	2	3.603	1.3	144.90
21	16.47	74.27	1.207	914.	47.2	2	3.652	1.3	146.16
22	16.63	75.07	1.224	914.	47.9	2	3.716	1.4	147.78
23	16.81	75.96	1.244	914.	48.7	2	3.788	1.4	149.63
24	17.00	76.82	1.264	914.	49.4	2	3.860	1.4	151.47
25	17.17	77.57	1.281	914.	50.1	2	3.924	1.4	153.11
26	17.30	78.16	1.294	914.	50.6	2	3.975	1.4	154.43
27	17.40	78.60	1.304	914.	51.0	2	4.013	1.4	155.40
28	17.47	78.90	1.311	914.	51.2	2	4.039	1.4	156.08
29	17.51	79.11	1.316	914.	51.4	2	4.057	1.4	156.53
30	17.54	79.25	1.319	914.	51.5	2	4.068	1.4	156.82
31	17.54	79.37	1.320	914.	51.6	2	4.076	1.4	157.02
32	17.53	79.52	1.322	914.	51.7	2	4.083	1.4	157.22
33	17.51	79.82	1.326	914.	51.8	2	4.099	1.4	157.64

SIMULATION SCIENCES INC.
 PROJECT T1-1RH
 PROBLEM Alcanos 4

R
 PRO/II VERSION 3.02
 OUTPUT
 COLUMN SUMMARY

PAGE P-15
 386/EM
 CAIO
 19/08/93

=====

UNIT 3, 'C3', 'COL3'

TOTAL NUMBER OF ITERATIONS

IN/OUT METHOD 3

COLUMN SUMMARY

TRAY	TEMP DEG C	PRESSURE MM HG	NET FLOW RATES			HEATER DUTIES M*KCAL/HR
			LIQUID	VAPOR	FEED PRODUCT	
			KG-MOL/HR			
1	98.5	760.00	45.4		14.2L	-0.4618
2	98.6	760.00	45.4	59.7		
3	98.8	760.00	45.3	59.6		
4	99.0	760.00	45.2	59.6		
5	99.3	760.00	45.0	59.4		
6	99.9	760.00	44.7	59.3		
7	100.7	760.00	44.3	59.0		
8	101.9	760.00	43.8	58.6		
9	103.5	760.00	43.3	58.1		
10	105.4	760.00	42.7	57.5		
11	107.5	760.00	42.3	57.0		
12	109.4	760.00	41.9	56.5		
13	111.0	760.00	41.7	56.2		
14	112.3	760.00	41.6	56.0		
15	113.2	760.00	41.5	55.8		
16	113.9	760.00	41.5	55.7		
17	114.3	760.00	41.4	55.7		
18	114.6	760.00	41.4	55.7		
19	114.7	760.00	86.2	55.6	44.8L	
20	114.9	760.00	86.2	55.6		
21	115.2	760.00	86.1	55.6		
22	115.6	760.00	86.1	55.6		
23	116.0	760.00	86.1	55.6		
24	116.5	760.00	86.0	55.5		
25	117.2	760.00	86.0	55.5		
26	117.9	760.00	86.0	55.4		
27	118.8	760.00	86.0	55.4		
28	119.7	760.00	86.0	55.4		
29	120.6	760.00	86.1	55.4		
30	121.6	760.00	86.1	55.5		
31	122.4	760.00	86.2	55.6		
32	123.2	760.00	86.3	55.6		
33	123.9	760.00	86.4	55.7		
34	124.5	760.00	86.4	55.8		
35	124.9	760.00		55.9	30.6L	0.4702

SIMULATION SCIENCES INC.
 PROJECT T1-1RH
 PROBLEM Alcanos 4

R
 PRO/II VERSION 3.02
 OUTPUT
 COLUMN SUMMARY

PAGE P-16
 386/EM
 CAIO
 19/08/93

UNIT 3, 'C3', 'COL3' (CONT)

FEED AND PRODUCT STREAMS

TYPE	STREAM	PHASE	FROM TRAY	TO TRAY	LIQUID FRACTION	FLOW RATES KG-MOL/HR	HEAT RATES M*KCAL/HR
FEED	5	LIQUID		19	1.0000	44.81	0.3099
PRODUCT	6	LIQUID	1			14.24	0.0757
PRODUCT	7	LIQUID	35			30.56	0.2427
OVERALL MASS BALANCE, (FEEDS - PRODUCTS)						-8.3819E-06	
OVERALL HEAT BALANCE, (H(IN) - H(OUT))							3.8927E-06

SPECIFICATIONS

PARAMETER TYPE	TRAY NO	COMP NO	SPECIFICATION TYPE	SPECIFIED VALUE	CALCULATED VALUE
STRM 6	1	3	MOL FRACTION	9.950E-01	9.950E-01
STRM 7	35	4	MOL FRACTION	9.800E-01	9.800E-01

REFLUX RATIOS

		REFLUX RATIOS		
		MOLAR	WEIGHT	STD L VOL
REFLUX / FEED STREAM 5		1.0138	0.9272	0.9445
REFLUX / LIQUID DISTILLATE		3.1893	3.1893	3.1893

SIMULATION SCIENCES INC.
 PROJECT T1-1RH
 PROBLEM Alcanos 4

R
 PRO/II VERSION 3.02
 OUTPUT
 COLUMN SUMMARY

PAGE P-17
 386/EM
 CAIO
 19/08/93

=====

UNIT 3, 'C3', 'COL3' (CONT)

TRAY NET VAPOR RATES AND DENSITIES

TRAY	MW	ACTUAL DENS KG/M3	Z FROM K	RATES		
				K*KG/HR	STD VAP K*M3/HR	ACTUAL K*M3/HR
2	100.228	3.43251	0.95715	5.981	1.337	1.742
3	100.281	3.43297	0.95715	5.980	1.337	1.742
4	100.354	3.43346	0.95716	5.977	1.335	1.741
5	100.471	3.43419	0.95718	5.972	1.332	1.739
6	100.657	3.43541	0.95720	5.964	1.328	1.736
7	100.947	3.43752	0.95722	5.954	1.322	1.732
8	101.379	3.44107	0.95725	5.940	1.313	1.726
9	101.980	3.44678	0.95726	5.924	1.302	1.719
10	102.745	3.45513	0.95723	5.911	1.290	1.711
11	103.614	3.46592	0.95716	5.904	1.277	1.704
12	104.490	3.47796	0.95705	5.906	1.267	1.698
13	105.274	3.48961	0.95692	5.915	1.259	1.695
14	105.909	3.49955	0.95680	5.927	1.254	1.694
15	106.384	3.50725	0.95670	5.939	1.251	1.693
16	106.717	3.51280	0.95662	5.949	1.249	1.693
17	106.942	3.51661	0.95657	5.956	1.248	1.694
18	107.090	3.51913	0.95653	5.961	1.248	1.694
19	107.186	3.52076	0.95651	5.965	1.247	1.694
20	107.304	3.52285	0.95648	5.970	1.247	1.695
21	107.455	3.52549	0.95644	5.976	1.247	1.695
22	107.649	3.52888	0.95639	5.984	1.246	1.696
23	107.895	3.53324	0.95633	5.994	1.245	1.696
24	108.204	3.53876	0.95624	6.007	1.244	1.698
25	108.582	3.54561	0.95614	6.024	1.244	1.699
26	109.032	3.55388	0.95601	6.046	1.243	1.701
27	109.548	3.56355	0.95585	6.072	1.242	1.704
28	110.118	3.57442	0.95568	6.103	1.242	1.707
29	110.721	3.58611	0.95548	6.139	1.243	1.712
30	111.329	3.59811	0.95528	6.177	1.244	1.717
31	111.915	3.60985	0.95508	6.217	1.245	1.722
32	112.455	3.62082	0.95489	6.256	1.247	1.728
33	112.933	3.63064	0.95471	6.292	1.249	1.733
34	113.342	3.63910	0.95456	6.325	1.251	1.738
35	113.680	3.64615	0.95444	6.352	1.252	1.742

SIMULATION SCIENCES INC.
 PROJECT T1-1RH
 PROBLEM Alcanos 4

R
 PRO/II VERSION 3.02
 OUTPUT
 COLUMN SUMMARY

PAGE P-18
 386/EM
 CAIO
 19/08/93

UNIT 3, 'C3', 'COL3' (CONT)

TRAY NET LIQUID RATES AND DENSITIES

TRAY	MW	ACTUAL DENS KG/M3	Z FROM K	RATES		
				K*KG/HR	STD LIQ M3/HR	ACTUAL M3/HR
1	100.228	615.336	0.00609	4.553	6.622	7.399
2	100.297	615.355	0.00609	4.552	6.620	7.398
3	100.394	615.403	0.00609	4.549	6.614	7.392
4	100.547	615.486	0.00610	4.544	6.605	7.384
5	100.792	615.619	0.00611	4.537	6.591	7.370
6	101.176	615.818	0.00613	4.526	6.570	7.350
7	101.749	616.096	0.00615	4.512	6.541	7.324
8	102.550	616.444	0.00618	4.497	6.508	7.294
9	103.573	616.816	0.00623	4.483	6.476	7.269
10	104.742	617.135	0.00627	4.477	6.451	7.254
11	105.925	617.338	0.00632	4.479	6.439	7.255
12	106.988	617.410	0.00636	4.487	6.438	7.268
13	107.849	617.387	0.00639	4.499	6.445	7.288
14	108.492	617.321	0.00642	4.511	6.454	7.308
15	108.944	617.249	0.00643	4.521	6.463	7.325
16	109.250	617.187	0.00644	4.529	6.470	7.337
17	109.450	617.142	0.00645	4.534	6.475	7.346
18	109.579	617.110	0.00646	4.537	6.478	7.352
19	109.662	617.088	0.00646	9.453	13.495	15.318
20	109.760	617.059	0.00646	9.459	13.501	15.329
21	109.885	617.022	0.00647	9.467	13.509	15.342
22	110.045	616.973	0.00647	9.477	13.520	15.360
23	110.245	616.908	0.00648	9.490	13.534	15.383
24	110.490	616.822	0.00649	9.507	13.552	15.413
25	110.780	616.712	0.00650	9.529	13.576	15.451
26	111.113	616.572	0.00651	9.555	13.605	15.497
27	111.481	616.401	0.00652	9.586	13.641	15.552
28	111.869	616.203	0.00654	9.622	13.682	15.615
29	112.261	615.982	0.00655	9.660	13.727	15.683
30	112.638	615.749	0.00656	9.700	13.775	15.753
31	112.986	615.517	0.00657	9.739	13.821	15.822
32	113.294	615.297	0.00658	9.775	13.866	15.887
33	113.558	615.098	0.00659	9.807	13.905	15.944
34	113.776	614.925	0.00660	9.835	13.940	15.994
35	113.952	614.780	0.00660	3.483	4.935	5.665

SIMULATION SCIENCES INC.
 PROJECT T1-1RH
 PROBLEM Alcanos 4

R
 PRO/II VERSION 3.02
 OUTPUT
 COLUMN SUMMARY

PAGE P-19
 386/EM
 CAIO
 19/08/93

=====

UNIT 3, 'C3', 'COL3' (CONT)

=====

TRAY SIZING MECHANICAL DATA

SECTION	TRAY NUMBERS	TRAY PASSES	TRAY SPACING MM	SYSTEM FACTOR	TRAY TYPE	MIN DIAMETER MM
1	2 - 27	2	609.60	1.00	VALVE	381.00

TRAY SIZING RESULTS

TRAY	VAPOR CFS	LIQUID HOTGPM	VLOAD CFS	-- DESIGN --		NEXT SMALLER		NEXT LARGER		NP
				DIA, MM	FF	DIA, MM	FF	DIA, MM	FF	
2	17.09	32.57	1.280	718.6	75.0	610.	109.6	762.	65.8	2
3	17.08	32.55	1.279	718.4	75.0	610.	109.6	762.	65.8	2
4	17.06	32.51	1.278	718.0	75.0	610.	109.4	762.	65.7	2
5	17.03	32.45	1.276	717.4	75.0	610.	109.2	762.	65.6	2
6	16.99	32.36	1.273	716.6	75.0	610.	108.9	762.	65.4	2
7	16.93	32.24	1.269	715.5	75.0	610.	108.5	762.	65.2	2
8	16.86	32.11	1.264	714.1	75.0	610.	108.0	762.	64.9	2
9	16.78	32.00	1.260	712.8	75.0	610.	107.6	762.	64.6	2
10	16.71	31.94	1.256	711.8	75.0	610.	107.2	762.	64.4	2
11	16.66	31.94	1.254	711.2	75.0	610.	107.0	762.	64.3	2
12	16.63	32.00	1.254	711.2	75.0	610.	107.0	762.	64.3	2
13	16.61	32.08	1.254	711.4	75.0	610.	107.1	762.	64.4	2
14	16.61	32.17	1.256	711.8	75.0	610.	107.2	762.	64.4	2
15	16.61	32.25	1.257	712.2	75.0	610.	107.3	762.	64.5	2
16	16.61	32.30	1.258	712.5	75.0	610.	107.4	762.	64.6	2
17	16.62	32.34	1.258	712.7	75.0	610.	107.5	762.	64.6	2
18	16.62	32.37	1.259	712.8	75.0	610.	107.6	762.	64.6	2
19	16.62	67.44	1.260	751.1	75.0	610.	128.1	762.	72.5	2
20	16.63	67.49	1.260	751.4	75.0	610.	128.2	762.	72.5	2
21	16.63	67.55	1.262	751.7	75.0	610.	128.4	762.	72.6	2
22	16.64	67.62	1.263	752.2	75.0	610.	128.6	762.	72.7	2
23	16.65	67.73	1.265	752.8	75.0	610.	128.9	762.	72.8	2
24	16.67	67.86	1.267	753.5	75.0	610.	129.2	762.	73.0	2
25	16.69	68.02	1.270	754.5	75.0	610.	129.7	762.	73.2	2
26	16.72	68.23	1.274	755.7	75.0	610.	130.3	762.	73.5	2
27	16.75	68.47	1.279	757.1	75.0	610.	130.9	762.	73.9	2

TRAY SIZING DOWNCOMER WIDTH CALCULATION

TRAY	NEXT LARGER	DOWNCOMER WIDTHS		
	DIAMETER MM	SIDE MM	CENTER MM	OFF-CENTER MM
2	762.	48.844	32.344	N/A
3	762.	48.824	32.324	N/A
4	762.	48.790	32.291	N/A
5	762.	48.736	32.239	N/A

SIMULATION SCIENCES INC.
 PROJECT T1-1RH
 PROBLEM Alcanos 4

R
 PRO/II VERSION 3.02
 OUTPUT
 COLUMN SUMMARY

PAGE P-20
 386/EM
 CAIO
 19/08/93

UNIT 3, 'C3', 'COL3' (CONT)

TRAY	NEXT LARGER	DOWNCOMER WIDTHS		
	DIAMETER	SIDE	CENTER	OFF-CENTER
	MM	MM	MM	MM
6	762.	48.658	32.162	N/A
7	762.	48.553	32.059	N/A
8	762.	48.429	31.938	N/A
9	762.	48.307	31.818	N/A
10	762.	48.213	31.727	N/A
11	762.	48.168	31.683	N/A
12	762.	48.169	31.684	N/A
13	762.	48.199	31.713	N/A
14	762.	48.238	31.751	N/A
15	762.	48.275	31.787	N/A
16	762.	48.304	31.816	N/A
17	762.	48.325	31.836	N/A
18	762.	48.339	31.850	N/A
19	762.	70.550	55.677	N/A
20	762.	70.584	55.717	N/A
21	762.	70.628	55.768	N/A
22	762.	70.686	55.835	N/A
23	762.	70.761	55.922	N/A
24	762.	70.858	56.035	N/A
25	762.	70.980	56.178	N/A
26	762.	71.131	56.353	N/A
27	762.	71.309	56.562	N/A

TRAY SELECTION FOR TRAY RATING

VALVE DIAMETER 47.625 MM

SECTION	DESIGN	DIAMETER	NP	NUMBER	DOWNCOMER WIDTHS		
	TRAY			OF VALVES	SIDE	CENTER	OFF-CENTER
	NUMBER	MM		OR CAPS	MM	MM	MM
1	27	762.	2	47	71.309	56.562	N/A

TRAY RATING AT SELECTED DESIGN TRAY

TRAY	VAPOR	LIQUID	VLOAD	DIAM	FF	NP	PRES	GPM/LWI	DOWNCOMER
	CFS	HOTGPM	CFS	MM			DROP		
							MM HG	GPM/IN	BACKUP, MM
									CLEAR LIQD
2	17.09	32.57	1.280	762.	72.2	2	6.763	0.7	209.63
3	17.08	32.55	1.279	762.	72.1	2	6.757	0.7	209.48
4	17.06	32.51	1.278	762.	72.1	2	6.747	0.7	209.22
5	17.03	32.45	1.276	762.	71.9	2	6.731	0.7	208.82
6	16.99	32.36	1.273	762.	71.8	2	6.707	0.7	208.24
7	16.93	32.24	1.269	762.	71.6	2	6.676	0.7	207.45

SIMULATION SCIENCES INC.
 PROJECT T1-1RH
 PROBLEM Alcanos 4

R
 PRO/II VERSION 3.02
 OUTPUT
 COLUMN SUMMARY

PAGE P-21
 386/EM
 CAIO
 19/08/93

=====

UNIT 3, 'C3', 'COL3' (CONT)

TRAY	VAPOR CFS	LIQUID HOTGPM	VLOAD CFS	DIAM MM	FF	NP	PRES DROP MM HG	GPM/LWI GPM/IN	DOWNCOMER BACKUP, MM CLEAR LIQD
8	16.86	32.11	1.264	762.	71.3	2	6.639	0.7	206.52
9	16.78	32.00	1.260	762.	71.0	2	6.602	0.7	205.60
10	16.71	31.94	1.256	762.	70.8	2	6.574	0.7	204.88
11	16.66	31.94	1.254	762.	70.7	2	6.559	0.7	204.51
12	16.63	32.00	1.254	762.	70.7	2	6.558	0.7	204.48
13	16.61	32.08	1.254	762.	70.8	2	6.565	0.7	204.66
14	16.61	32.17	1.256	762.	70.8	2	6.575	0.7	204.91
15	16.61	32.25	1.257	762.	70.9	2	6.584	0.7	205.16
16	16.61	32.30	1.258	762.	71.0	2	6.592	0.7	205.36
17	16.62	32.34	1.258	762.	71.0	2	6.598	0.7	205.50
18	16.62	32.37	1.259	762.	71.0	2	6.602	0.7	205.60
19	16.62	67.44	1.260	762.	72.7	2	6.833	1.4	217.89
20	16.63	67.49	1.260	762.	72.8	2	6.840	1.4	218.06
21	16.63	67.55	1.262	762.	72.8	2	6.849	1.4	218.29
22	16.64	67.62	1.263	762.	72.9	2	6.861	1.4	218.58
23	16.65	67.73	1.265	762.	73.0	2	6.877	1.4	218.97
24	16.67	67.86	1.267	762.	73.2	2	6.898	1.4	219.48
25	16.69	68.02	1.270	762.	73.3	2	6.924	1.4	220.13
26	16.72	68.23	1.274	762.	73.6	2	6.958	1.4	220.95
27	16.75	68.47	1.279	762.	73.9	2	6.998	1.4	221.95

SIMULATION SCIENCES INC.
 PROJECT T1-1RH
 PROBLEM Alcanos 4

R
 PRO/II VERSION 3.02
 OUTPUT
 STREAM MOLAR COMPONENT RATES

PAGE P-22
 386/EM
 CAIO
 19/08/93

```

=====
STREAM ID          1          2          3          4
      NAME          feed
      PHASE          LIQUID      LIQUID      LIQUID      LIQUID

FLUID RATES, KG-MOL/HR
  1  PENTANE        30.0000      29.9700      0.0300      0.0300
  2  HEXANE         25.0000        0.6116      24.3884      24.3640
  3  HEPTANE        15.0000      1.2504E-05    15.0000      0.2161
  4  OCTANE         30.0000      7.6643E-10    30.0000      4.9185E-06

TOTAL RATE, KG-MOL/HR          100.0000      30.5816      69.4184      24.6101

TEMPERATURE, C          64.4660      36.5818      91.8172      68.9446
PRESSURE, MM HG          760.0000      760.0000      760.0000      760.0000
ENTHALPY, M*KCAL/HR          0.3105        0.0388        0.3487        0.0780
MOLECULAR WEIGHT          92.4906      72.4315      101.3274      86.2841
MOLE FRAC VAPOR          0.0000        0.0000        0.0000        0.0000
MOLE FRAC LIQUID         1.0000        1.0000        1.0000        1.0000
  
```

```

STREAM ID          5          6          7
      NAME
      PHASE          LIQUID      LIQUID      LIQUID

FLUID RATES, KG-MOL/HR
  1  PENTANE        1.2213E-12    1.2202E-12    1.0919E-15
  2  HEXANE         0.0244        0.0244        7.1497E-09
  3  HEPTANE        14.7839      14.1726        0.6114
  4  OCTANE         30.0000        0.0468        29.9532

TOTAL RATE, KG-MOL/HR          44.8083      14.2438      30.5645

TEMPERATURE, C          114.5638      98.5077      124.9437
PRESSURE, MM HG          760.0000      760.0000      760.0000
ENTHALPY, M*KCAL/HR          0.3099        0.0757        0.2427
MOLECULAR WEIGHT          109.5897      100.2281      113.9524
MOLE FRAC VAPOR          0.0000        0.0000        0.0000
MOLE FRAC LIQUID         1.0000        1.0000        1.0000
  
```

SIMULATION SCIENCES INC.
 PROJECT T1-1RH
 PROBLEM Alcanos 4

R
 PRO/II VERSION 3.02
 OUTPUT
 STREAM MOLAR COMPONENT FRACTIONS

PAGE P-23
 386/EM
 CAIO
 19/08/93

=====

STREAM ID	1	2	3	4
NAME	feed			
PHASE	LIQUID	LIQUID	LIQUID	LIQUID

FLUID MOLAR FRACTIONS

1	PENTANE	0.3000	0.9800	4.3219E-04	1.2191E-03
2	HEXANE	0.2500	0.0200	0.3513	0.9900
3	HEPTANE	0.1500	4.0889E-07	0.2161	8.7802E-03
4	OCTANE	0.3000	2.5062E-11	0.4322	1.9986E-07

TOTAL RATE, KG-MOL/HR	100.0000	30.5816	69.4184	24.6101
TEMPERATURE, C	64.4660	36.5818	91.8172	68.9446
PRESSURE, MM HG	760.0000	760.0000	760.0000	760.0000
ENTHALPY, M*KCAL/HR	0.3105	0.0388	0.3487	0.0780
MOLECULAR WEIGHT	92.4906	72.4315	101.3274	86.2841
MOLE FRAC VAPOR	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
MOLE FRAC LIQUID	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000

STREAM ID	5	6	7
NAME			
PHASE	LIQUID	LIQUID	LIQUID

FLUID MOLAR FRACTIONS

1	PENTANE	2.7256E-14	8.5666E-14	3.5723E-17
2	HEXANE	5.4416E-04	1.7118E-03	2.3392E-10
3	HEPTANE	0.3299	0.9950	0.0200
4	OCTANE	0.6695	3.2881E-03	0.9800

TOTAL RATE, KG-MOL/HR	44.8083	14.2438	30.5645
TEMPERATURE, C	114.5638	98.5077	124.9437
PRESSURE, MM HG	760.0000	760.0000	760.0000
ENTHALPY, M*KCAL/HR	0.3099	0.0757	0.2427
MOLECULAR WEIGHT	109.5897	100.2281	113.9524
MOLE FRAC VAPOR	0.0000	0.0000	0.0000
MOLE FRAC LIQUID	1.0000	1.0000	1.0000

SIMULATION SCIENCES INC.
 PROJECT T1-1RH
 PROBLEM Alcanos 4

R
 PRO/II VERSION 3.02
 OUTPUT
 STREAM SUMMARY

PAGE P-24
 386/EM
 CAIO
 19/08/93

```

=====
STREAM ID          1          2          3          4
NAME              feed
PHASE             LIQUID     LIQUID     LIQUID     LIQUID

----- TOTAL STREAM -----
RATE, KG-MOL/HR   100.000    30.582    69.418    24.610
  K*KG/HR         9.249      2.215     7.034     2.123
STD LIQ RATE, M3/HR 13.721     3.510    10.211     3.200
TEMPERATURE, C    64.466     36.582    91.817    68.945
PRESSURE, MM HG   760.000    760.000    760.000    760.000
MOLECULAR WEIGHT   92.491     72.432    101.327    86.284
ENTHALPY, M*KCAL/HR 0.311      3.884E-02 0.349      7.796E-02
  KCAL/KG         33.574     17.536    49.577     36.715
MOLE FRACTION LIQUID 1.0000     1.0000    1.0000     1.0000
REDUCED TEMP (KAYS RULE) 0.6500     0.6584    0.6747     0.6740
  PRES (KAYS RULE) 0.0348     0.0301    0.0374     0.0341
ACENTRIC FACTOR   0.3206     0.2515    0.3510     0.2947
WATSON K (UOPK)   12.794     13.031    12.719     12.809
STD LIQ DENSITY, KG/M3 674.071    631.124    688.833    663.548
  SPECIFIC GRAVITY 0.6747     0.6317    0.6895     0.6642
  API GRAVITY      78.211     92.482    73.717     81.537

----- VAPOR -----
RATE, KG-MOL/HR   N/A        N/A        N/A        N/A
  K*KG/HR         N/A        N/A        N/A        N/A
  K*M3/HR         N/A        N/A        N/A        N/A
STD VAP RATE(1), K*M3/HR N/A        N/A        N/A        N/A
SPECIFIC GRAVITY (AIR=1.0) N/A        N/A        N/A        N/A
MOLECULAR WEIGHT   N/A        N/A        N/A        N/A
Z (FROM K)         N/A        N/A        N/A        N/A
ENTHALPY, KCAL/KG  N/A        N/A        N/A        N/A
CP, KCAL/KG-C     N/A        N/A        N/A        N/A
DENSITY, KG/K*M3  N/A        N/A        N/A        N/A

----- LIQUID -----
RATE, KG-MOL/HR   100.000    30.582    69.418    24.610
  K*KG/HR         9.249      2.215     7.034     2.123
  M3/HR           14.659     3.631    11.285     3.457
  GAL/MIN         64.540     15.986    49.684    15.223
STD LIQ RATE, M3/HR 13.721     3.510    10.211     3.200
SPECIFIC GRAVITY (H2O=1.0) 0.6747     0.6317    0.6895     0.6642
MOLECULAR WEIGHT   92.491     72.432    101.327    86.284
Z (FROM K)         6.0173E-03 5.1265E-03 6.2476E-03 5.7066E-03
ENTHALPY, KCAL/KG  33.574     17.536    49.577     36.715
CP, KCAL/KG-C     0.580      0.572     0.605     0.592
DENSITY, KG/M3     630.963    610.060    623.332    614.173

```

(1) STD VAPOR VOLUME IS 22.414 M3/KG-MOLE (0 C AND 1 ATM)

SIMULATION SCIENCES INC.
 PROJECT T1-1RH
 PROBLEM Alcanos 4

R
 PRO/II VERSION 3.02
 OUTPUT
 STREAM SUMMARY

PAGE P-25
 386/EM
 CAIO
 19/08/93

```

=====
STREAM ID          5          6          7
NAME
PHASE             LIQUID     LIQUID     LIQUID

----- TOTAL STREAM -----
RATE, KG-MOL/HR   44.808     14.244     30.565
  K*KG/HR         4.911      1.428      3.483
STD LIQ RATE, M3/HR 7.011      2.076      4.935
TEMPERATURE, C    114.564    98.508    124.944
PRESSURE, MM HG   760.000    760.000    760.000
MOLECULAR WEIGHT  109.590    100.228    113.952
ENTHALPY, M*KCAL/HR 0.310      7.565E-02  0.243
  KCAL/KG         63.117     52.993     69.689
MOLE FRACTION LIQUID 1.0000     1.0000     1.0000
REDUCED TEMP (KAYS RULE) 0.6932     0.6880     0.7006
  PRES (KAYS RULE) 0.0395     0.0370     0.0407
ACENTRIC FACTOR   0.3819     0.3500     0.3967
WATSON K (UOPK)   12.680     12.708     12.669
STD LIQ DENSITY, KG/M3 700.373    687.552    705.768
  SPECIFIC GRAVITY 0.7011     0.6882     0.7065
  API GRAVITY     70.336     74.100     68.793

----- VAPOR -----
RATE, KG-MOL/HR   N/A        N/A        N/A
  K*KG/HR         N/A        N/A        N/A
  K*M3/HR         N/A        N/A        N/A
STD VAP RATE(1), K*M3/HR N/A        N/A        N/A
SPECIFIC GRAVITY (AIR=1.0) N/A        N/A        N/A
MOLECULAR WEIGHT  N/A        N/A        N/A
Z (FROM K)        N/A        N/A        N/A
ENTHALPY, KCAL/KG N/A        N/A        N/A
CP, KCAL/KG-C     N/A        N/A        N/A
DENSITY, KG/K*M3  N/A        N/A        N/A

----- LIQUID -----
RATE, KG-MOL/HR   44.808     14.244     30.565
  K*KG/HR         4.911      1.428      3.483
  M3/HR           7.957      2.320      5.665
  GAL/MIN         35.034     10.215     24.943
STD LIQ RATE, M3/HR 7.011      2.076      4.935
SPECIFIC GRAVITY (H2O=1.0) 0.7011     0.6882     0.7065
MOLECULAR WEIGHT  109.590    100.228    113.952
Z (FROM K)        6.4562E-03 6.0869E-03 6.6042E-03
ENTHALPY, KCAL/KG 63.117     52.993     69.689
CP, KCAL/KG-C     0.627      0.616      0.636
DENSITY, KG/M3    617.118    615.336    614.780
  
```

(1) STD VAPOR VOLUME IS 22.414 M3/KG-MOLE (0 C AND 1 ATM)

ANEXO IV - Equações Simplificadas ("Shortcut") para o Cálculo de Separações Multiestágios

A.4.1 - Equação de Fenske (1932) para a determinação do mínimo número de estágios

$$N_{S_{\min}} = \frac{\log[(d/b)_{lk} \cdot (b/d)_{hk}]}{\log \alpha_{lk,hk}}$$

A.4.2 - Equação de Underwood para a determinação da mínima razão de refluxo

A) Se todos os componentes se distribuem entre o topo e o fundo (para separações não sharp ou para espécies com ponto de ebulição muito próximos)

$$RR_{\min} = F_l / D \cdot \frac{(d_{lk} / f_{lk})_l - \alpha_{lk/hk} (d_{hk} / f_{hk})_l}{\alpha_{lk/hk} - 1}$$

B) Se um ou mais componentes aparecem em somente um dos produtos:

$$\sum \frac{\alpha_{i,hk} y_i}{\alpha_{i,hk} - \Phi} = 1 + RR_{\min}$$

$$\sum \frac{\alpha_{i,hk} z_i}{\alpha_{i,hk} - \Phi} = 1 - q$$

A.4.3- Correlação de Gilliland para a determinação do número de estágios e razão de refluxo representada pela equação de Molokanov et al. (1972) :

$$\frac{N_S - N_{S_{\min}}}{N_S + 1} = 1 - \exp \left[\frac{1 + 54,4 \cdot \left(\frac{RR - RR_{\min}}{RR + 1} \right) \cdot \left(\frac{RR - RR_{\min}}{RR + 1} - 1 \right)}{11 + 117,2 \cdot \left(\frac{RR - RR_{\min}}{RR + 1} \right) \cdot \left(\frac{RR - RR_{\min}}{RR + 1} \right)^{0,5}} \right]$$

A.4.4- Equação de Kirkbride para a determinação do estágio de alimentação ótimo :

$$\frac{Nr}{Nst} = \left[\left(\frac{z_{hk}}{z_{lk}} \right) \cdot \left(\frac{x_{lk}}{y_{hk}} \right)^2 \cdot \left(\frac{B}{D} \right) \right]^{0,206}$$

ABSTRACT

The main of a distillation sequence is to split a multicomponent feed mixture to products which have a particular composition. In this work only one component has a particular importance in product mixture whose purity may be initially defined making then all the separation structure be designed in accordance with it. This feature allow more flexibility than others procedures proposed in literature where only a unique specification is possible to each column resulting in a high pure products.

The synthesis of a distillation sequence is made incorporating a rigorous behavior analysis of each separator including optimization of its more important variables. It demands elaboration of a methodology for use a commercial simulator since the multivariable problem's nature may make it extremely complex. So, a critical selection of variables and procedures can be done through analysis. In this context, the work consists in to get the specifications for simulation of each column for searched sequences, the number of stages, diameter, reflux rate, and optimal feed stage.

The result is a specially indicated procedure for choice of a final distillation sequence based on a pre-selected group of initial sequences and a final optimal design of each one with realistic estimates of operational and investment costs.