



Universidade Federal do Rio Grande
Escola de Química e Alimentos
Engenharia Agroindustrial Agroquímica

PROJETO DE COLUNAS DE DESTILAÇÃO SUJEITO A INCERTEZAS

Lais Soares dos Santos

Orientador: Prof. Dr. Marcelo Escobar

Santo Antônio da Patrulha

2016

Universidade Federal do Rio Grande
Escola de Química e Alimentos
Engenharia Agroindustrial Agroquímica

PROJETO DE COLUNAS DE DESTILAÇÃO SUJEITO A INCERTEZAS

Lais Soares dos Santos

Projeto de conclusão de curso apresentado à Universidade Federal do Rio Grande, como parte dos requisitos necessários à graduação em Engenharia Agroindustrial Agroquímica.

Orientador: Prof. Dr. Marcelo Escobar

Santo Antônio da Patrulha
Dezembro de 2016

AGRADECIMENTOS

Agradeço à Deus, fonte de força e determinação, que me presenteou com a graça da realização desse sonho, me confortou nas horas difíceis, aconselhou nos momentos determinantes e encorajou nas tomadas de decisões.

À minha família que acreditou e investiu na minha realização; ao meu pai, Mario, que confiou e apoiou minha jornada; à minha mãe, Vera, que serviu-me como inspiração de garra e responsabilidade; à minha irmã, Lauren, que me foi espelho do caminho a seguir; ao meu companheiro de vida, Douglas, que trouxe um tanto de afago à trajetória.

Agradeço de forma especial e carinhosa ao meu orientador, Marcelo Escobar, não apenas pela orientação e amizade a mim presenteados no decorrer deste trabalho, mas pelo entusiasmo e amor dedicados à prática docente, pela dedicação em tempo integral, pelo brilho nos olhos que motiva.

À Universidade Federal do Rio Grande pelo amparo; ao campus Santo Antônio da Patrulha e à todos os profissionais que fazem parte dessa grande família que construímos juntos pela contribuição na minha formação acadêmica e pessoal; aos colegas com quem convivi e aos amigos que ganhei.

RESUMO

Um dos maiores desafios da indústria é reduzir custos e impactos ambientais através do gerenciamento eficiente dos recursos. Com esse intuito, técnicas de otimização têm sido extensivamente empregadas. Nos métodos convencionais de projeto/síntese de processos é assumida uma condição operacional fixa, para a qual o custo total anual inerente ao investimento e à operação é minimizado. No entanto, durante a operação, as condições operacionais estão sujeitas a incertezas, como variabilidade nas vazões, composições e temperaturas das correntes, podendo provocar um maior consumo energético. Nesse trabalho investigou-se o impacto da incerteza na síntese de projetos de colunas de destilação, com o objetivo de desenvolver uma metodologia sistemática para o projeto de colunas operacionalmente eficiente, ou seja, capaz de operar ainda que sujeito à incerteza nas variáveis de processo. A metodologia utilizada foi baseada em uma estratégia em dois estágios. O primeiro, estágio de projeto, foi realizado através de um problema de otimização multiperíodo, onde cada período corresponde a um cenário operacional e tem como objetivo minimizar simultaneamente o custo operacional e de investimento do projeto. O segundo, estágio de operação, consistiu em uma análise de flexibilidade para verificar se o projeto obtido no estágio anterior foi capaz de operar na região de incerteza especificada e identificar cenários críticos para a operação validando o projeto. Ambos estágios foram realizados através de simulações computacionais. Este procedimento foi resolvido iterativamente até que se obtenha um projeto flexível. Um estudo de caso teórico foi utilizado para validar e consolidar a metodologia proposta. Os resultados obtidos indicam que a variabilidade na vazão e na composição da carga conduzem a cenários operacionais críticos que devem ser considerados no projeto ótimo com o intuito de garantir a operação em toda a região de incerteza considerada.

Palavras chave: otimização de colunas de destilação; otimização de projetos sujeitos a incertezas; flexibilidade; variabilidade; operabilidade.

ABSTRACT

One of the main challenge in the industry is to reduce costs and environmental impacts through an efficient management of resources. To that end, optimization techniques have been extensively adressed. In conventional design methods for process synthesis, it is assumed that a fixed operating condition for which the total annual cost inherent to the investment and operating cost is minimized. However, during operation, the operating conditions are subject to uncertainties, such as variability in flow rates, compositions and temperatures that could lead to a higher energy consumption. In this work we investigated the impact of the uncertainty in the synthesis of distillation columns in order to develop a systematic methodology for operationally efficient design, i.e. able to achieve feasible operation even if subject to uncertainty in process variables. The methodology proposed is based on a two stage strategy. The first stage is the design stage and it is performed through a multi-period optimization problem, in which each period corresponds to an operating scenario. This optimatizon problem aims to minimize both, the operating and investment costs simultaneously. The second stage, the operating stage, consists of a flexibility analysis in order to verify if the design obtained in the preceding stage can operate within the specified uncertainty region and identify critical scenarios that should be added to the previous set of periods and the multi-period optimization is reformulated. This procedure is iteratively solved until a flexible design is obtained. In this work, both stages were carried out through computer simulations. A theoretical case study was used in order to validate and consolidate the proposed methodology. The results pointed out that the flow rate and composition variability lead to critical scenarios for the operation that must be taken into account in the design in order to ensure a feasible operation whitin the uncertainty range.

Keywords: distillation columns optimization; optimization projects subject to uncertainties; flexibility; variability; operability.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Representação esquemática do equipamento para destilação.....	12
Figura 2 – Esquema de uma coluna de destilação.....	26
Figura 3 – Gráfico para obtenção da razão de refluxo ótima.....	29
Figura 4 – Projeto de coluna de destilação sujeito à incerteza.....	31
Figura 5 – Algoritmo em dois estágios para a síntese de processos flexíveis.....	32
Figura 6 – Gráfico de R ótima para o projeto nominal.....	37
Figura 7 – Gráfico de N ótimo para o projeto nominal.....	37
Figura 8 – Gráfico de R ótima para os projetos nominal e crítico considerando incerteza na vazão.....	39
Figura 9 – Gráfico de N ótimo para o projeto multiperíodo considerando incerteza na vazão.....	40
Figura 10 – Gráfico de N ótimo para os projetos nominal e críticos considerando incerteza na composição.....	43
Figura 11 – Gráfico de N ótimo para o projeto multiperíodo considerando incerteza na composição.....	45
Figura 12 – Gráfico de N ótimo para os projetos nominal e críticos considerando incerteza na vazão e na composição.....	47
Figura 13 – Gráfico de N ótimo para o projeto multiperíodo considerando incerteza na vazão e na composição.....	48

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Custos de equipamentos instalados.	30
Tabela 2 – Síntese dos resultados para a validação da metodologia.	35
Tabela 3 – Comparativo entre os resultados da autora e da referência.	35
Tabela 4 – Síntese dos resultados obtidos para o projeto nominal.....	36
Tabela 5 – Síntese dos resultados obtidos para o projeto crítico considerando incerteza na vazão.	38
Tabela 6 – Síntese dos resultados obtidos para o projeto multiperíodo considerando incerteza na vazão.	40
Tabela 7 – Síntese dos resultados obtidos para o projeto crítico considerando incerteza na composição – Caso 2.	42
Tabela 8 – Síntese dos resultados obtidos para o projeto crítico considerando incerteza na composição – Caso 3.	42
Tabela 9 – Síntese dos resultados obtidos para o projeto multiperíodo considerando incerteza na composição.....	44
Tabela 10 – Síntese dos resultados obtidos para o projeto crítico considerando incerteza na vazão e na composição – Caso 1.....	46
Tabela 11 – Síntese dos resultados obtidos para o projeto crítico considerando incerteza na vazão e na composição – Caso 2.....	47
Tabela 12 – Síntese dos resultados obtidos para o projeto multiperíodo considerando incerteza na vazão e na composição.	48

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO	8
2 OBJETIVOS	10
2.1 Objetivo geral	10
2.2 Objetivos específicos	10
3 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA E REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	11
3.1 Destilação	11
3.1.1 Equilíbrio Líquido-Vapor	13
3.1.2 Modelos termodinâmicos	16
3.2 Projeto de colunas de destilação	17
3.2.1 Métodos para cálculo de colunas.....	17
3.3 Precificação	18
3.4 Simulação de processos	20
3.4.1 Simulador <i>ChemSep</i>	21
3.4.2 Simulação de colunas de destilação.....	22
3.5 Otimização de processos.....	22
3.5.1 Otimização de colunas de destilação.....	23
3.5.2 Otimização de projetos sujeitos à incerteza.....	24
4 METODOLOGIA.....	26
4.1 Projeto de coluna de destilação	26
4.2 Otimização de projetos de colunas através de simulação	28
4.3 Precificação	30
4.4 Projeto sujeito à incerteza.....	31
5 RESULTADOS E DISCUSSÃO.....	33
5.1 Validação da metodologia.....	33
5.2 Projeto nominal	36
5.3 Projetos sujeitos a incertezas	37
5.3.1 Incerteza na vazão.....	37
5.3.2 Incerteza na composição	41
5.3.3 Incerteza na vazão e na composição.....	45
6 CONCLUSÕES	50
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	52

1 INTRODUÇÃO

A separação de misturas químicas em seus constituintes tem sido praticada, como uma arte, por milênios (SEADER; HENLEY, 2006). A maior parte dos processos industriais da atualidade necessitam de operações de separação, seja na etapa final do processo, a fim de obter as exigências do produto a ser comercializado, ou durante as etapas de processamento, para atingir as especificações de alimentação dos equipamentos subsequentes. O método de separação mais amplamente utilizado industrialmente é a destilação (KISTER, 1992).

A destilação é uma operação unitária de separação baseada na diferença dos pontos de ebulição dos componentes individuais de uma mistura. As primeiras aplicações utilizando vaporização bruta e equipamentos de condensação se destinaram a concentração do teor alcoólico de bebidas. A primeira destilação contínua em coluna vertical foi desenvolvida por Cellier-Blumenthal na França em 1813. O primeiro livro sobre fundamentos da destilação foi *La Rectificacion de l'alcohol* escrito por Ernest Sorel em 1893 (KISTER, 1992).

Durante o século XX, a aplicação da destilação se expandiu de uma ferramenta para concentrar o teor alcoólico das bebidas para uma técnica de separação privilegiada na indústria química. Essa expansão foi impulsionada pela descoberta da eficácia em separar o óleo bruto em vários produtos por destilação. Desde então, a aplicação dessa operação disseminou-se por grande parte dos processos químicos (KISTER, 1992). Atualmente, a destilação fracionada multiestágios é o método industrial mais utilizado para a separação de misturas líquidas de componentes químicos.

Tendo em vista a relevância da destilação no cenário industrial, atenta-se para o fato desta ser uma das operações unitárias que mais demandam energia, sendo responsável pela geração de grandes impactos econômicos e ambientais em um processo. Aliado a isso, a crescente procura por novas fontes renováveis de energia e o aumento dos custos da mesma, associados a questões políticas e de sustentabilidade econômica, ambiental e social, têm motivado estudos sobre a otimização da eficiência energética de processos. A otimização conduz a projetos com menores custos e que, preferencialmente, gerem menos impactos ambientais.

Nesse âmbito, a otimização de projetos contribui como uma ferramenta importante para minimizar o custo total de um processo, que inclui o custo de investimento (equipamentos e instalações) e o custo operacional (consumo energético

da operação). No caso de um projeto existente, onde os equipamentos encontram-se instalados, busca-se reduzir o consumo de energia através da modificação das condições operacionais.

Um dos fatores que pode levar um projeto de colunas de destilação a consumir mais energia do que o necessário para realizar a operação, conforme a especificação do produto, é a presença de distúrbios durante a operação que, convencionalmente, não são previstos no projeto de um processo. Esses distúrbios acabam por promover variabilidades nas variáveis de processo (e.g. vazão, composição, temperatura). A presença de distúrbios pode acarretar em um aumento do consumo energético na operação, além de, eventualmente, impedir que algumas restrições operacionais como o grau de pureza ou de recuperação dos produtos sejam alcançadas, se um projeto eficiente de controle não for implementado.

Projetos que consideram variabilidades nas variáveis de processo, que são intrínsecas a todos os processos durante a operação, ou seja, projetos sujeitos a incertezas, são tipicamente chamados de projetos flexíveis. Estes têm por objetivo garantir a operabilidade dos processos considerando incertezas previamente especificadas pelo projetista, tornando os projetos mais próximos à realidade e mais eficientes do ponto de vista econômico e energético. Neste contexto, pretende-se com este trabalho investigar a influência da variabilidade na vazão e na composição da carga de alimentação da coluna de destilação sobre o projeto ótimo e a otimização das condições operacionais da coluna.

2 OBJETIVOS

2.1 Objetivo geral

Este trabalho tem como objetivo desenvolver um projeto de colunas de destilação operacionalmente eficiente, ou seja, ótimo do ponto de vista econômico e capaz de garantir a factibilidade da operação ainda que sujeito a incertezas.

2.2 Objetivos específicos

- Construir e validar o estudo de caso através do uso de simulação computacional;
- Obter o projeto ótimo a partir de simulações para uma condição nominal fixa utilizando estimativas dos custos de investimento e operacional;
- Caracterizar as principais incertezas associadas ao projeto de colunas e avaliar o impacto dessas no projeto ótimo através de simulações;
- Definir uma metodologia para o projeto ótimo de colunas considerando múltiplos cenários de operação.

3 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA E REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Separadores são equipamentos desenvolvidos para separar componentes oriundos de uma mistura pré-concebida, explorando a diferença das suas propriedades físico-químicas. Propriedades essas como, por exemplo, ponto de ebulição, solubilidade, densidade, tamanho, fase, capacidade de absorção, propriedades magnéticas e eletrostáticas entre outras. Esses equipamentos desempenham a função de ajustar a composição de algumas correntes entre a saída de um equipamento e a entrada de outro em unidades de processos, a fim de obter a especificação requerida dos produtos ou remover impurezas e compostos indesejáveis ao processo subsequente (PERLINGEIRO, 2005).

Encontra-se disponível uma infinidade de tipos de separadores no âmbito industrial, os quais utilizam uma ou mais das diversas propriedades físico-químicas dos compostos presentes nas misturas para conceber a separação. Pode-se citar alguns dos separadores mais requisitados industrialmente, como os separadores magnéticos, colunas cromatográficas, extratores, filtros, evaporadores e colunas de destilação. Dentre todos, destaca-se o último, que será o objeto de estudo deste trabalho e receberá uma abordagem detalhada nas sessões que seguem.

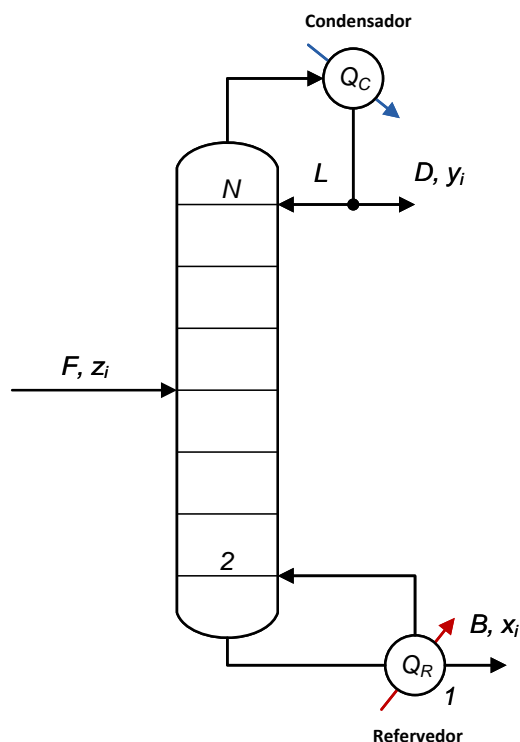
3.1 Destilação

A destilação é uma das operações unitárias mais empregadas na indústria química e petroquímica (SEADER; HENLEY, 2006). Ainda que os primeiros relatos de sua utilização sejam do ano de 1820, hoje continua sendo o principal método de separação em unidades de transformação (KISTER, 1992). Colunas de destilação são responsáveis por grande parte do consumo energético de um processo, uma vez que utilizam como agente de separação a energia, envolvendo elevados custos operacionais, podendo inclusive limitar a produção.

A separação por destilação é baseada na diferença dos pontos de ebulição dos componentes individuais da mistura. O objetivo da destilação é separar uma mistura de dois ou mais componentes em um produto de topo (destilado) rico no componente mais leve e um produto de fundo (resíduo) rico no componente mais pesado. Tradicionalmente, a mistura a ser separada (alimentação) encontra-se no estado líquido ou numa mistura líquido-vapor, o produto de fundo encontra-se no estado líquido e o produto de topo no estado líquido, vapor ou ambos (MCCABE; SMITH; HARRIOTT, 1993).

Uma representação esquemática do equipamento básico necessário à destilação é apresentada na Figura 1, onde, além da coluna propriamente dita com uma alimentação e duas correntes de produto, ainda são requeridos um condensador (no topo) e um refeedor (no fundo).

Figura 1 – Representação esquemática do equipamento para destilação.



Fonte: própria autora, 2016.

Nas colunas de destilação convencionais, a corrente de vapor, ascendente na coluna, é formada no refeedor, onde o calor fornecido evapora uma corrente líquida. A corrente líquida, descendente na coluna, resulta da condensação da corrente de vapor que chega ao condensador, onde é removido parte do calor fornecido no refeedor. As correntes de vapor e líquido são colocadas em contato através de pratos ou enchimentos (FLORINDO, 2012). Por meio de vários estágios de contato em contracorrente dispostos em cascata de duas seções com refluxo e refeedor é possível alcançar uma separação nítida entre os dois componentes da alimentação, a menos que um azeótropo seja formado (SEADER; HENLEY, 2006).

3.1.1 Equilíbrio Líquido-Vapor

O mecanismo que norteia as operações de destilação é o equilíbrio líquido-vapor (VLE, *vapor-liquid equilibrium*), formado através do contato das fases líquida e de vapor, cuja composição será diferente. A facilidade da separação dos componentes de uma mistura através de destilação depende essencialmente da diferença na sua pressão de vapor, ou volatilidade relativa, sendo a diferença de composição das fases líquida e de vapor a força motriz da operação (KISTER, 1992). O parâmetro K_i , chamado de razão ou constante de equilíbrio, constitui a medida da tendência do componente i em vaporizar e está representado pela Equação 1.

$$K_i \equiv \frac{y_i}{x_i} \quad (1)$$

Onde y_i é a fração molar do componente i na fase de vapor e x_i é a fração molar do componente i na fase líquida, K_i é a constante de equilíbrio do componente i , dependente inversamente da pressão total P e diretamente da pressão de saturação ou de vapor, p_i^{sat} , a qual, por sua vez, depende fortemente da temperatura do sistema.

Se os dois componentes formam misturas ideais, pode-se adotar o modelo simplificado expresso pela Lei de *Raoult*, considerando que uma mistura com duas fases (líquida e vapor) só está em equilíbrio se a temperatura de ambas as fases forem iguais a temperatura do sistema e a pressão total de cada uma das fases (vapor e líquida) seja igual a pressão total do sistema, pode-se escrever que (LISTIK; FRANCHI, 2014):

$$Py_i = p_i^{sat}x_i \leftrightarrow K_i = \frac{p_i^{sat}}{P} \quad (2)$$

Se $K_i < 1$ o componente i encontra-se concentrado na fase líquida, $K_i = 1$ indica que o componente i encontra-se igualmente distribuído por ambas as fases e $K_i > 1$ indica que o componente i encontra-se concentrado na fase de vapor (FLORINDO, 2012).

A volatilidade relativa, α_{ij} , entre os componentes i e j é definida pela Equação 3 (KISTER, 1992; SEADER; HENLEY, 2006).

$$\alpha_{ij} = \frac{K_i}{K_j} \quad (3)$$

A volatilidade relativa pode ser expressa em termos das composições do equilíbrio líquido-vapor. Para sistemas binários de destilação, onde os componentes leve e pesado são representados, respectivamente, pelos índices 1 e 2, têm-se a Equação 4 (SEADER; HENLEY, 2006).

$$\alpha_{1,2} = \frac{K_1}{K_2} = \frac{y_1/x_1}{y_2/x_2} = \frac{y_1(1-x_1)}{x_1(1-y_1)} \quad (4)$$

O valor da volatilidade relativa quantifica a facilidade ou dificuldade de vaporização de um componente em detrimento ao outro. Quanto maior o seu valor, maior será a tendência de um componente se vaporizar frente ao outro e a mistura é facilmente separada através da destilação. No entanto, valores de volatilidade relativa próximos da unidade atentam para a dificuldade ou impossibilidade de separação por destilação (KISTER, 1992).

Para sistemas não ideais, as fugacidades do componente i no vapor e no líquido desempenham o mesmo papel que a pressão parcial do componente na forma de vapor e a pressão de vapor do componente no líquido. A fugacidade pode ser considerada como uma pressão termodinâmica. No equilíbrio, a fugacidade do componente i na fase vapor é igual a fugacidade do componente i na fase líquida (Equação 5):

$$f_i^V = f_i^L \quad (5)$$

A fugacidade do componente i na fase vapor, f_i^V , pode ser considerada como uma pressão parcial corrigida dada pela Equação 6. Do mesmo modo, a fugacidade do componente i na fase líquida, f_i^L , pode ser considerada como uma pressão de vapor corrigida dada pela Equação 7.

$$f_i^V = \hat{\phi}_i^V (Py_i) \quad (6)$$

$$f_i^L = \phi_i^{sat} \gamma_i \psi_i (x_i p_i^{sat}) \quad (7)$$

O coeficiente de fugacidade do componente i na fase vapor, $\hat{\phi}_i^V$, é responsável pelo efeito de não idealidade na fugacidade do vapor. Geralmente é estimado a partir de uma equação de estado e baseia-se na temperatura do sistema, na pressão e composição do vapor. O coeficiente de fugacidade do componente puro, ϕ_i^{sat} , é estimado na pressão e temperatura do sistema. O fator de *Poyinting*, ψ_i , é responsável pelo efeito da pressão na fugacidade do líquido, uma vez que o coeficiente de fugacidade na fase líquida, $\hat{\phi}_i^L$, é avaliado à pressão de vapor do componente puro, ψ_i é usado para representar a diferença entre a pressão de vapor do componente puro e a pressão da mistura. Esse efeito é pequeno e pode ser desprezado a baixas pressões, mas é importante considerá-lo em caso de pressões altas. O coeficiente de atividade no líquido, γ_i , corrige a fugacidade do líquido para o efeito da não linearidade e depende da temperatura e da composição da fase líquida. Para misturas de componentes semelhantes, que tendem a formar soluções ideais, esse valor é próximo da unidade (KISTER, 1992). O coeficiente de atividade pode ser estimado a partir de um modelo termodinâmico para fase líquida.

Combinando as equações acima, obtêm-se a Equação 8 que estima o valor de K_i para misturas de comportamento não ideal.

$$K_i = \frac{y_i}{x_i} = \frac{\hat{\phi}_i^L}{\hat{\phi}_i^V} \gamma_i \psi_i \frac{p_i^{sat}}{P} \quad (8)$$

Para um dado equilíbrio líquido-vapor, os componentes leves, detentores de menores pontos de ebulição (maiores valores de K), se concentrarão na fase vapor, enquanto que os componentes pesados (maiores pontos de ebulição e menores valores de K), na fase líquida. Dessa maneira, é possível separar as frações ricas em componentes mais leves das ricas em componentes mais pesados em um único estágio de equilíbrio, através da diferença de volatilidade entre os componentes presentes na mistura, por meio do aquecimento da mesma a pressão constante ou redução da pressão a temperatura constante. A esse processo dá-se o nome de *flash* (MCCABE; SMITH; HARRIOTT, 1993).

Ainda que a partir de separações do tipo *flash* seja possível separar uma mistura em frações mais leves e mais pesadas, nem sempre por meio desses processos consegue-se atingir a especificação de pureza desejada. Para tal, usa-se as correntes líquidas e de vapor oriundas de um primeiro estágio de equilíbrio como alimentação para um segundo estágio e assim sucessivamente, chegando à configuração de uma coluna de destilação propriamente dita (MCCABE; SMITH; HARRIOTT, 1993). A coluna de destilação pode ser entendida como um espaço em que correntes de vapor e líquido são postas em contato íntimo de modo a promover a transferência de massa entre elas. Este contato é propiciado através dos inúmeros estágios de equilíbrio, que configuram os pratos que constituem a coluna (LISTIK; FRANCHI, 2014).

3.1.2 Modelos termodinâmicos

A termodinâmica tem um papel fundamental nas operações de separação no que diz respeito à energia requerida e a predição da composição das fases em equilíbrio. Tendo em vista essa importância, é indispensável a escolha de um modelo termodinâmico apropriado às características dos componentes da mistura e à suposta interação entre eles.

Não existem equações universais disponíveis para o cálculo das propriedades termodinâmicas de misturas não ideais. Para isso, são utilizados modelos conhecidos como equações de estado e modelos de fase líquida que se baseiam em equações constitutivas, pois dependem da natureza dos componentes da mistura. As equações de estado relacionam o volume molar, a temperatura e a pressão. Um grande número de equações de estado têm sido propostos, principalmente para a fase vapor. A mais simples delas é a lei dos gases ideais, que se aplica apenas a baixas pressões ou altas temperaturas, de modo que negligencia o volume ocupado pelas moléculas e as forças intermoleculares existentes. Todas as outras equações de estado propostas tentam corrigir essas duas deficiências (SEADER; HENLEY, 2006).

A equação de van der Waals foi a primeira abordagem bem sucedida para a formulação de uma equação de estado para um gás não ideal. No entanto, raramente é utilizada na engenharia pois sua gama de aplicação é muito estreita. As equações de estado mais amplamente utilizadas por engenheiros são as equações cúbicas como Redlich-Kwong (RK), Soave-Redlich-Kwong (SRK) e Peng-Robinson (PR).

3.2 Projeto de colunas de destilação

O *design* de uma coluna de destilação inclui algumas premissas como a especificação do grau de separação pretendido, a seleção das condições operacionais, o dimensionamento da coluna (diâmetro, número de pratos ou altura de enchimento), a especificação da razão de refluxo, a determinação do local da alimentação, entre outras.

Existem muitos métodos para projetos de colunas de destilação tradicionais conhecidos, podendo-se encontrar na literatura diferentes metodologias para diferentes âmbitos de aplicação.

3.2.1 Métodos para cálculo de colunas

3.2.1.1 Métodos *short-cut* (simplificados)

Pode-se dar início a um projeto de uma coluna obtendo-se uma estimativa para o número mínimo de pratos ideais para realizar a separação (correspondente à condição hipotética de refluxo total) e para a razão mínima de refluxo (correspondente à situação hipotética de infinitos estágios ideais), com estes, determina-se um par número de pratos ideais versus razão de refluxo que possibilite a separação com as especificações requeridas (LISTIK; FRANCHI, 2014). Para tal estimativa inicial, existem métodos simplificados denominados *short-cut*, que possibilitam seu cálculo através de equações baseadas em uma série de hipóteses que simplificam o equacionamento do problema, o qual consiste em balanços materiais e de energia prato a prato, além do equilíbrio líquido-vapor. São exemplos: o método de McCabe-Thiele para separações binárias e o método de FUG (Fenske, Underwood e Gilliland) para separações multicomponentes.

Casos como o mencionado, onde através dos dados das correntes de entrada e da recuperação desejada dos produtos chave é possível determinar o número de pratos e a razão de refluxo, são chamados de problemas de projeto. Já casos onde a coluna é existente e são conhecidos o número de estágios de equilíbrio e a razão de refluxo, são denominados problemas de simulação, onde o que se deseja é determinar as correntes de topo e fundo da coluna. Para isso, faz-se necessário o uso de metodologias mais rigorosas que utilizem equações com menor grau de simplificação.

3.2.1.2 Métodos rigorosos

Para problemas de simulação, existe uma grande variedade de métodos de solução ditos rigorosos, os quais, contrariamente aos métodos *short-cut*, resolvem o modelo matemático da coluna, de fato, solucionando as entradas e saídas de todos os estágios da mesma, valendo-se, para tanto, dos balanços de massa e energia em cada prato, assim como da relação de equilíbrio mais adequada para cada um deles (LISTIK; FRANCHI, 2014). Em linhas gerais, o objetivo destas metodologias é a determinação tanto das vazões de líquido e vapor em cada estágio como também da temperatura e composição das fases, utilizando minimamente de simplificações nas equações. Usualmente a pressão de operação é definida previamente.

Uma metodologia usual para colunas de destilação é o equacionamento prato a prato onde assume-se que o equilíbrio de fases é atingido, que não ocorrem reações químicas e despreza-se o arraste de gota de líquido no vapor e de bolhas de vapor no líquido através da escolha apropriada do diâmetro da coluna. A base dos métodos rigorosos reside na solução de um conjunto de equações que inclui balanços materiais, equilíbrio de fases, consistência das frações molares e balanços de energia, conhecido como equações de MESH (*Material balance, Equilibrium, Summation, and Heat (energy balance equations)*) (SEADER; HENLEY, 2006). A resolução deste conjunto de equações alcançou significativa maturidade e hoje existem diversos métodos robustos disponíveis e implementados em simuladores comerciais.

A prática atual baseia-se principalmente nos métodos do Ponto de Bolha, Soma das Vazões, Newton-Raphson e *Inside-out*. Os dois últimos métodos são os mais largamente utilizados, pois permitem uma flexibilidade considerável na escolha das variáveis especificadas e geralmente são capazes de resolver a maioria dos problemas (SEADER; HENLEY, 2006). Os métodos estão baseados em uma estratégia de decomposição, onde algumas variáveis são fixas em um *loop* interno e atualizadas externamente. Por exemplo, se fixarmos a temperatura e vazões em cada estágio, o equilíbrio de fases e os balanços molares são resolvidos através de um sistema linear. O somatório das frações molares e o balanço de energia são utilizados para atualizar a temperatura e as vazões até eventual convergência.

3.3 Precificação

A performance econômica prevista para um processo em fase de projeto e a real de um processo em operação podem ser medidas através de critérios expressos

por funções de lucro e custo. Esses critérios são utilizados tanto em problemas de dimensionamento como de simulação (PERLINGEIRO, 2005).

Assim como as operações de destilação são as mais versáteis para separação dos componentes de uma mistura, também são as que mais demandam energia para tal, sendo consideradas as maiores consumidoras de energia nos processos industriais (DRLJO et al., 2012). O consumo energético da coluna de destilação é dependente das variáveis de operação e a otimização destas pode minimizar o custo operacional relativo às cargas térmicas nos refeedores e condensadores, vazões de fluidos refrigerantes e de aquecimento, ao bombeamento, entre outros.

Pode-se estimar os custos de um processo de maneira detalhada ou aproximada, dependendo da etapa do projeto em que será praticada. Uma estimativa detalhada é conduzida por especialistas com base em desenhos e especificações sobre o processo a fim de formalizar propostas para a compra dos equipamentos. Já uma estimativa aproximada é baseada nas dimensões dos equipamentos mais importantes e nas estimativas de consumo de matérias-primas, insumos e utilidades. Muitos itens de estimativa mais incerta são correlacionados, através de fatores empíricos, com outros que podem ser estimados com maior precisão em função da experiência acumulada no projeto de processos. Em razão disso, a sua precisão é inferior, mas a sua execução é muito mais rápida. Esse tipo de estimativa é adotada para discriminar diferentes alternativas nos estágios preliminares do projeto, etapa em que a precisão não é relevante (PERLINGEIRO, 2005).

O custo total do projeto inclui, além do custo de operação, também o custo de investimento que se refere à aquisição dos equipamentos propriamente ditos, como o casco da coluna e seus adereços internos (pratos, recheios, etc.), refeedores e condensadores e o custo da instalação dos mesmos. Para predizer com precisão o custo operacional leva-se em consideração o custo das utilidades como água de resfriamento e vapor de aquecimento, dos eventuais combustíveis utilizados e até mesmo correlações para a atual inflação (PIOTROWIEZ; SECCHI, 2005).

O custo total é geralmente utilizado como critério de seleção entre diferentes alternativas de projetos. Sendo assim, ressalta-se a importância da análise econômica para os projetos de colunas, existem diversos métodos utilizados para tal precificação.

Em colunas de destilação, a relação razão de refluxo versus número de pratos estabelece um compromisso entre o custo de operação e o de investimento no projeto de colunas, tendo em vista que quanto menor o número de pratos da coluna (menor

custo de investimento na compra do equipamento), maior será o refluxo necessário para atingir a especificação do produto (maior custo operacional pelas cargas térmicas do refeedor e condensador). Da mesma maneira que um aumento da razão de refluxo, em função do aumento das vazões internas, requer um maior diâmetro da coluna a fim de evitar inundações. Em síntese, uma mesma separação pode ser obtida para os graus de liberdade número de estágios e razão de refluxo.

3.4 Simulação de processos

Os modelos de processos consistem em um conjunto de equações que descrevem o comportamento do processo e relacionam as suas variáveis. Usualmente, esses modelos são complexos e não admitem solução analítica, necessitando ser solucionados numericamente. Nesse âmbito, o simulador resolve o modelo com o intuito de prever o comportamento do processo.

A preocupação com o uso consciente de energia, associada a questões políticas e de sustentabilidade econômica, social e ambiental têm servido de motor para a investigação e desenvolvimento de processos mais eficientes energeticamente, que conduzam a menores custos de investimento e operação, com menores impactos ambientais e maior segurança. Neste âmbito a simulação de processos constitui uma ferramenta tecnológica essencial, cujo desenvolvimento se baseia na modelagem de processos e através da qual é possível o *design* e o desenvolvimento de processos, dimensionamento e determinação da operabilidade dos equipamentos que o integram para a generalidade das indústrias (FLORINDO, 2012).

O avanço da simulação de processos auxiliada por computadores durante as últimas décadas tem sido muito expressivo. Até o final da década de 1970, era raro que um graduado em engenharia tivesse qualquer experiência na utilização de um simulador de processos. A maioria dos balanços materiais e energéticos ainda eram feitas à mão por equipes de engenheiros. A simulação rigorosa de equipamentos de separação multiestágios, por exemplo, era geralmente inédita, o projeto de tal equipamento foi conseguido através de uma combinação de análises simplificadas, métodos *short-cuts* e anos de experiência. Atualmente, no entanto, estar familiarizado com ferramentas de simulação computacional vem sendo um diferencial positivo para engenheiros no mercado de trabalho (TURTON et al., 2012).

Os graus de liberdade em um modelo correspondem ao número de variáveis que podem ser especificadas de forma independente e é definido como na Equação

9, onde N_L é o número de graus de liberdade, N_V é o número total de variáveis envolvidas no problema e N_E é o número de equações independentes (incluindo especificações).

$$N_L = N_V - N_E \quad (9)$$

A análise de consistência do problema pode ser feita com base nos graus de liberdade. Se $N_L = 0$ o problema é exatamente determinado, então o número de equações independentes é igual ao número de variáveis de processo e o conjunto de equações, sendo esta uma condição necessária mas não suficiente para que o sistema simulado tenha solução. Se $N_L > 0$ o problema é indeterminado, existem mais variáveis de processo no problema do que equações independentes, pelo menos uma variável pode ser otimizada. Se $N_L < 0$ o problema é sobredeterminado, existem menos variáveis de processo no problema do que equações independentes e, conseqüentemente, o conjunto de equações não tem solução (EDGAR; HIMMELBLAU; LASDON, 2001).

De certa forma, o conhecimento necessário para simular um processo químico com sucesso dependerá do simulador utilizado. Atualmente, existem vários simuladores de processos no mercado, alguns já muito consolidados e utilizados industrialmente como, por exemplo, CHEMCAD, Aspen Plus, HYSYS, PRO/II, outros mais recentes, ainda em aprimoramento e mais utilizados academicamente, como o *ChemSep*. Este último será utilizado para realizar as simulações do presente trabalho e é abordado na seção seguinte.

3.4.1 Simulador *ChemSep*

ChemSep é um simulador de colunas para operações de destilação, absorção e extração. Em uma interface fácil e intuitiva, é capaz de simular colunas com até 40 componentes e 300 andares de equilíbrio utilizando um banco de dados que cobre mais de 400 produtos químicos. O simulador foi desenvolvido para solução de diversas colunas industriais de difícil convergência e se comporta de forma robusta, sem exigir que o usuário faça qualquer tentativa inicial (KOOIJMAN; TAYLOR, 2006).

O simulador *ChemSep* detém muitas propriedades físicas e termodinâmicas para predizer os coeficientes de atividade, pressões de vapor, equações de estado, entre outras, das misturas a serem separadas na coluna. Essas propriedades

determinam as frações molares no equilíbrio de fases, bem como os termos do balanço de energia. Tipicamente, eles têm uma profunda influência sobre a simulação. Selecionar os modelos certos exigirá uma visão a partir do usuário, sabendo que não há modelos que cobrem todos os sistemas e operações. Além disso, o simulador oferece uma ampla variedade de maneiras de analisar os resultados da simulação, como McCabe-Thiele e diagramas operacionais (KOOIJMAN; TAYLOR, 2006).

3.4.2 Simulação de colunas de destilação

Usualmente, torres de separação líquido-vapor, multiestágios, multicomponentes, sejam de pratos ou de enchimento, são projetadas através do uso de simuladores. Os cálculos são normalmente baseados em estágios de equilíbrio, mas modelos de transferência de massa mais realísticos também podem ser adotados. Os cálculos de estágios de equilíbrio aplicam balanços molares de componentes, balanços de energia e o critério de equilíbrio de fase líquido-vapor prato a prato, e utiliza um número razoável de correlações termodinâmicas baseadas em equações de estado ou em coeficientes de atividade de fase líquida para estimar os valores do parâmetro K_i e as entalpias. O conjunto de equações resultante é não linear e é resolvido de forma iterativa através dos métodos citados na seção 3.2.1.2, principalmente *inside-out* ou Newton-Raphson, para determinação de perfis de vazão de vapor e líquido e respectiva composição e de perfis de temperatura, a partir de um conjunto de pressuposições iniciais (FLORINDO, 2012).

3.5 Otimização de processos

Engenheiros trabalham no dimensionamento inicial dos equipamentos e se esforçam para melhorar o funcionamento destes. Uma vez instalados, a preocupação dos profissionais se volta à busca por um aumento na produção, maior lucro, menor custo, redução do consumo de energia, entre outras, na operação destes equipamentos. Problemas como estes podem ser solucionados com o auxílio de técnicas de otimização.

A resolução de problemas de dimensionamento, comumente, admite mais de uma solução, tendo em vista que as metas de projeto são insuficientes, dando margem a graus de liberdade. Neste caso, torna-se imprescindível buscar a melhor dentre as soluções viáveis, a solução ótima, através da otimização deste projeto.

Um processo pode ser representado por algumas equações ou talvez apenas por dados experimentais. Se o critério de desempenho for o custo mínimo, o objetivo da otimização é encontrar os valores das variáveis no processo que produzam o melhor valor do critério de desempenho, ou seja, o menor custo. Os problemas típicos em projetos de processos de engenharia ou operação da planta têm infinitas soluções. A otimização está preocupada com a seleção do melhor entre todo o conjunto de métodos quantitativos eficientes (EDGAR; HIMMELBLAU; LASDON, 2001).

3.5.1 Otimização de colunas de destilação

Uma grande gama de métodos de otimização são disponíveis para aplicação no projeto de colunas de destilação. Edgar, Himmelblau e Lasdon (2001) classificam os problemas de otimização para a destilação em estado estacionário, em ordem crescente de complexidade, como:

1. Determinação das condições operacionais ideais para uma coluna já existente alcançar um desempenho específico a um custo mínimo (ou consumo energético mínimo);
2. Determinação das condições operacionais e o número (mínimo) de estágios de equilíbrio (pratos) requeridos para a separação;
3. Determinação do número de estágios de equilíbrio e a localização ótima da alimentação e da(s) retirada(s) lateral(ais).

O trabalho pioneiro nesta área foi de Sargent e Gaminibandara (1976). Neste trabalho o número de pratos é fixo e o objetivo é identificar a localização ótima da alimentação bem como as condições operacionais ótimas. Viswanathan e Grossmann (1990) propuseram estratégias de otimização para a localização ótima do prato de alimentação e para o número de pratos em colunas de destilação. Pouco tempo depois, Viswanathan e Grossmann (1993) sugeriram uma formulação alternativa para o mesmo problema, através de um modelo matemático para a otimização do número de pratos fixando a localização do prato de alimentação. Mais tarde, Yeomans e Grossmann (1999) e Yeomans e Grossmann (2000) apresentaram modelos de otimização para a síntese de sequências de colunas de destilação termicamente acopladas. Em seu trabalho, Barttfeld, Aguirre e Grossmann (2003) examinaram modelos alternativos para a otimização econômica de colunas de destilação multicomponente. As diferentes representações envolvem várias formas de

representar as escolhas para o número de pratos e a localização do prato de alimentação. Além disso, são consideradas alternativas para modelar a troca térmica, quando o número de pratos da coluna deve ser determinado. Ainda no mesmo ano, Caballero, Reyes-Labarta e Grossmann (2003) apresentaram um procedimento de otimização para o projeto de uma sequência de colunas de destilação termicamente acopladas para separar uma mistura não azeotrópica levando em consideração o custo total anual do processo.

Trabalhos mais recentes como o de Kamath, Grossmann e Biegler (2010), propõe modelos agregados para sistemas de destilação complexos em fluxogramas de grande escala. Esses métodos, baseados nas equações de Kremser, são sistematicamente analisados e melhoram algumas das aproximações anteriormente propostas, exibindo previsões precisas com menor esforço computacionais quando comparado aos modelos rigorosos. O projeto ideal de sistemas de destilação complexos para separação de misturas multicomponentes zeotrópicas é estudado por ZOU et al. (2012) através de uma modelagem matemática de superestrutura, utilizando modelos físicos rigorosos para cada fase de transferência de calor e massa para garantir a confiabilidade prática e a otimização dos modelos obtidos. Três exemplos de separações multicomponentes foram empregados para provar a eficácia da abordagem proposta.

3.5.2 Otimização de projetos sujeitos à incerteza

Nos métodos convencionais de síntese e projeto de processos é assumida uma condição operacional fixa, para a qual o custo total anual inerente ao investimento e o custo operacional são minimizados e um projeto de um sistema de controle e operação se torna necessário para manter o processo operando nas condições operacionais ótimas definidas no projeto. No entanto, durante a operação as condições operacionais estão sujeitas a incertezas, como distúrbios que causam variabilidades nas vazões, composições e temperaturas das correntes de processo, levando a distintos cenários de operação.

Devido a estes distúrbios e ineficiências do projeto de controle, o consumo de energia médio durante a operação pode ser maior que o mínimo necessário para um determinado desempenho. Em um cenário desfavorável, especificações operacionais como o grau de pureza ou de recuperação dos produtos, podem nem mesmo ser atendidas. Portanto, se torna evidente que as incertezas, intrínsecas aos processos,

precisam ser consideradas ainda na etapa de projeto para que este seja operacionalmente eficiente não apenas em sua concepção, mas durante toda a sua operação.

Nesse contexto, a flexibilidade consiste na capacidade do processo de encontrar operação factível para um dado intervalo de incerteza (HALEMANE; GROSSMANN, 1983). O problema de síntese sujeito à incerteza consiste em minimizar o valor esperado da função custo para os parâmetros incertos variando dentro de uma região pré-especificada no projeto. Este problema tem natureza estocástica, uma vez que não se tem certeza a respeito dos valores exatos dos parâmetros do processo, podendo ser aproximado por uma formulação determinística, onde um conjunto finito de pontos é utilizado para representar essa incerteza. É então formulado um problema multiperíodo/multicenário, onde cada período/cenário consiste em uma condição operacional.

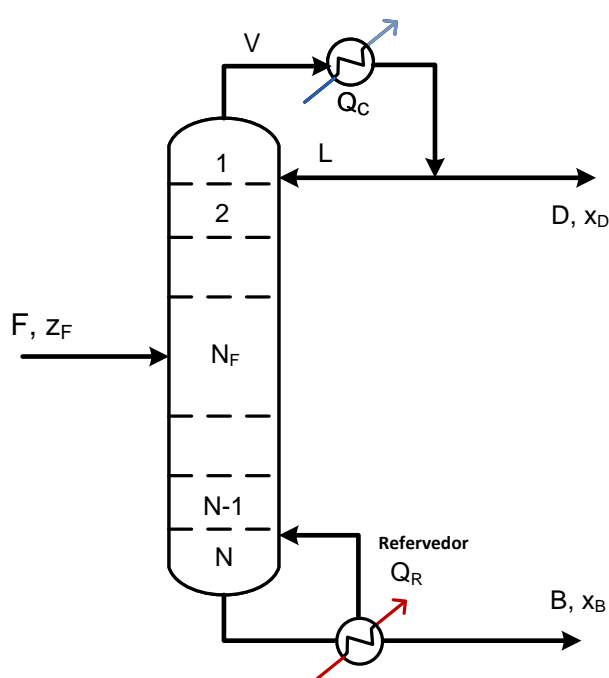
Como já mencionado, Halemane e Grossmann (1983), com o intuito de manter rigorosamente a viabilidade operacional de processos (para uma gama de parâmetros limitada pelo projetista) propuseram um algoritmo iterativo multiperíodo para resolução de projetos sujeitos à incertezas. Este processo se mostrou eficiente para os exemplos demonstrados no trabalho para trocadores de calor e reatores. Décadas mais tarde, Escobar (2011) utilizou a mesma superestrutura para minimizar simultaneamente o custo operacional e o custo de investimento de projetos de redes de trocadores de calor flexíveis e controláveis, através de um projeto baseado numa estratégia em dois estágios. Steimel e Engell (2015) utilizaram da mesma estratégia em dois estágios, desta vez a abordagem foi implementada na ferramenta computacional FSOpt (*Flow sheet Superstructure Optimization*), aplicando a dois estudos de caso, a hidroformação de dodec-1-eno e a separação de uma mistura azeotrópica de água e ácido fórmico por destilação. Uma revisão dos principais trabalhos publicados na área de flexibilidade foi produzida por Grossmann, Calfa e Garcia-Herreros (2014), fornecendo uma perspectiva histórica e uma visão geral de trabalhos pioneiros desenvolvidos na área da resiliência (flexibilidade) para processos químicos, bem como apresentando novos autores interessados nessa esfera de estudo.

4 METODOLOGIA

4.1 Projeto de coluna de destilação

O projeto de uma coluna de destilação é geralmente baseado em especificações como o grau de separação ou pureza do produto, dada uma alimentação fornecida à unidade, a uma composição, temperatura e vazão conhecidas. O projetista deve determinar o tamanho da coluna e a taxa/razão de refluxo necessária para atender essas especificações.

Figura 2 – Esquema de uma coluna de destilação.



Fonte: própria autora, 2016.

A Figura 2 ilustra uma coluna de destilação e as variáveis comumente utilizadas para representar as suas correntes, onde F é a vazão de alimentação, D é o produto destilado, B é o produto de fundo, V é a vazão de vapor e L é a parcela de destilado que retorna à coluna como refluxo. O balanço material global para uma coluna de destilação em estado estacionário é tal como na Equação 10. O balanço material para o componente i , Equação 11, é acompanhado da fração deste componente, x_i , em cada corrente.

$$F = D + B \quad (10)$$

$$F \cdot x_{i,F} = D \cdot x_{i,D} + B \cdot x_{i,B} \quad (11)$$

A vazão de vapor no topo da coluna, V , é a soma da corrente que retorna à coluna no topo com a corrente que sai da coluna como destilado, Equação 12. A razão entre essas duas correntes é definida como razão de refluxo, R , Equação 13. Dessa forma, a vazão de vapor pode ser expressa em função de D e R , conforme Equação 14.

$$V = L + D \quad (12)$$

$$L = R \cdot D \quad (13)$$

$$V = D \cdot (1 + R) \quad (14)$$

A vazão volumétrica de vapor, V_v , também está relacionada com a velocidade de escoamento do vapor, v , e com a área transversal da coluna, A , Equação 15. O diâmetro da coluna cilíndrica, Di , é expresso pela Equação 16.

$$V_v = v \cdot A \quad (15)$$

$$Di = \left(\frac{4 \cdot A}{\pi} \right)^{1/2} \quad (16)$$

Para atingir as especificações exigidas em uma operação de destilação, os equipamentos de troca de calor necessitam de uma área de troca térmica, A_T , que suporte as vazões da coluna, essas áreas podem ser calculadas pela Equação 17, onde Q é a carga térmica no condensador ou no refeedor, U é o coeficiente global de transferência de calor do equipamento e ΔT é a diferença de temperatura média entre os fluidos em contato.

$$A_T = \frac{Q}{U \cdot \Delta T} \quad (17)$$

Um projeto de coluna envolve, primordialmente, a determinação das condições operacionais, do número de pratos/estágios de equilíbrio, da localização do prato de alimentação, da razão de refluxo e do consumo energético, a fim de se obter uma dada especificação de qualidade do produto.

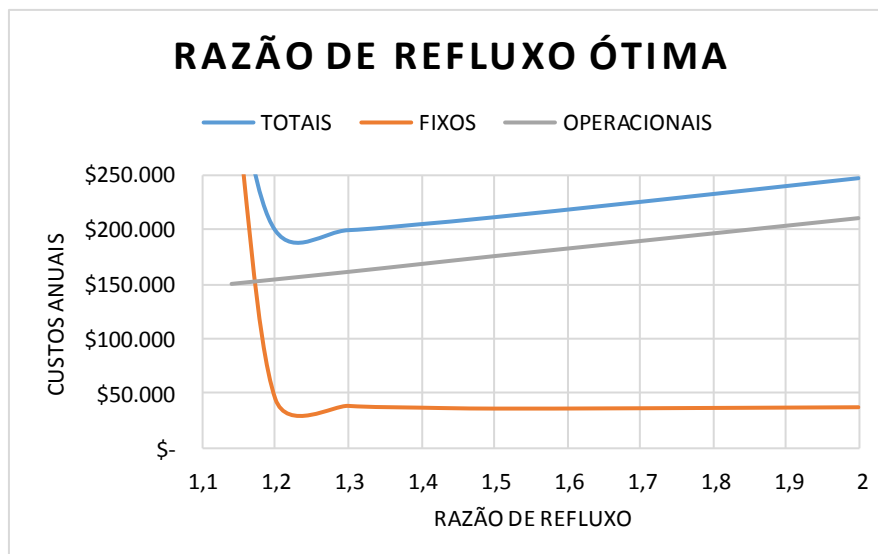
Para uma dada especificação, existe uma quantidade mínima de estágios de equilíbrio necessária para que a separação seja alcançada, o que ocorre em refluxo total. Por outro lado, existe um valor de refluxo mínimo necessário para que exista força motriz para a separação e que esta seja alcançada em um equipamento finito. Para valores de razão de refluxo entre o mínimo e o total, quando a razão de refluxo é aumentada, o número de estágios de equilíbrio teóricos necessários para uma dada separação diminui. Esse aumento, portanto, pode resultar em menores custos fixos (de investimento) para a coluna de destilação e maiores custos operacionais para o suprimento energético no refeedor e no condensador. Claramente existe um compromisso entre os custos de investimento e operacionais no projeto de uma coluna de destilação.

4.2 Otimização de projetos de colunas através de simulação

No geral, em problemas de otimização de colunas de destilação, busca-se uma razão de refluxo ótima. A qual refere-se ao ponto onde a soma dos custos de investimento e operacionais é mínima. Utilizando regras heurísticas, costuma-se considerar que a razão de refluxo ideal é entre 1,1 e 1,3 vezes a razão de refluxo mínima (PETERS; TIMMERHAUS, 1991).

A metodologia seguida para a obtenção da razão de refluxo ótima foi a proposta por Peters e Timmerhaus (1991). A qual consiste em considerar algumas situações distintas de configuração de colunas, variando o número de pratos, o que atribui a cada situação um valor diferente de razão de refluxo, determinando os custos totais decorrentes através de funções de custo. Os valores obtidos são traçados em um gráfico, como o exemplificado pela Figura 3, de Custos (fixos, operacionais e totais) versus Razão de refluxo, onde o ponto de mínimo da curva de custos totais corresponderá ao valor de refluxo ótimo.

Figura 3 – Gráfico para obtenção da razão de refluxo ótima.



Fonte: adaptado de Peters e Timmerhaus, 1991.

A metodologia proposta foi implementada com o auxílio do simulador *ChemSep*. Neste ambiente foi realizada a construção das simulações nos diferentes cenários do projeto e a validação da metodologia. No simulador é possível fazer a seleção do modelo termodinâmico que melhor se adapta ao projeto entre um banco com diferentes tipos de modelos.

Em suma, os problemas de otimização em colunas de destilação do presente trabalho foram solucionados através de simulações onde, fixando algumas variáveis de projeto como pressão de operação, vazão e composição de alimentação, local e temperatura da alimentação e pureza (de topo e fundo), restringiu-se o problema à um grau de liberdade, referente ao número de estágios ou à razão de refluxo. Na medida em que foi atribuído um valor a um destes parâmetros (número de estágios, por conveniência), encontrou-se o valor do outro. Tendo em vista que ambos se relacionam intimamente e estão inseridos nas funções de custo, pôde-se, através da resolução destas funções para vários cenários, obter uma metodologia de otimização para o problema buscando o custo mínimo. Depois da avaliação dos custos de cada cenário, a decisão se deu pelo cenário que, obtendo o menor custo, apresentou viabilidade técnica e se enquadrou nas necessidades e exigências do projeto.

Inicialmente, a otimização foi realizada em um projeto de coluna para uma condição operacional fixa. Depois da validação do método para essa condição, ou seja, da certeza de que os modelos do simulador estavam adequados às

necessidades do projeto, foram testados projetos nos quais o efeito da variabilidade das variáveis vazão e composição na carga era considerado, ou seja, projetos sujeitos a incertezas.

4.3 Precificação

A predição dos custos de investimento foi realizada em função do diâmetro da coluna, que estava relacionado com a vazão máxima permitida do vapor no topo da coluna para que não haja inundação. Somou-se a isso o custo com tubulações, isolamento e instrumentação, equivalente a 60% do custo do equipamento instalado. Encargos fixos anuais somam 15% do custo total do equipamento instalado, tubulação, instrumentação e isolamento (PETERS; TIMMERHAUS, 1991). A Tabela 1 traz os custos para os equipamentos instalados, incluindo custos de entrega e montagem.

Tabela 1 – Custos de equipamentos instalados.

Coluna de pratos		Condensador		Refervedor	
Diâmetro, m	Custo, \$/prato	Área de transferência térmica, m ²	Custo, \$	Área de transferência térmica, m ²	Custo, \$
1,50	2640,00	75	21100,00	90	37200,00
1,75	3170,00	95	24600,00	130	45700,00
2,00	3910,00	110	27000,00	165	52700,00
2,25	4730,00	130	29800,00	200	59100,00
2,50	5680,00	150	32250,00	240	65200,00

Fonte: adaptado de Peters e Timmerhaus, 1991.

Já os custos operacionais dependem de correlações que consideram os custos correntes com utilidades como água de resfriamento, vapor de aquecimento e combustíveis, a taxa de transferência de calor no condensador e no refervedor, a capacidade calorífica e a temperatura do fluido e o calor de condensação. Segundo Peters e Timmerhaus (1991), o custo do valor de aquecimento é de 3,31 \$/10³Kg e o de água de arrefecimento de 0,0238 \$/10³Kg. Esses valores foram considerados válidos no presente trabalho.

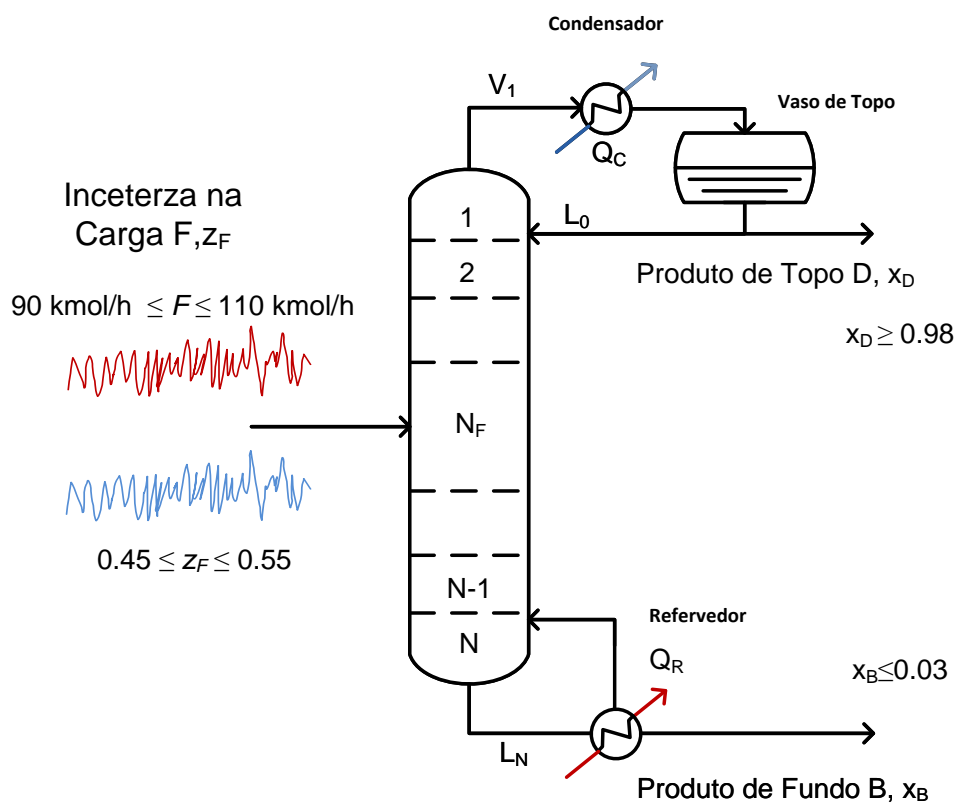
O equacionamento foi estruturado de forma que os custos fixos representam a soma dos custos com os equipamentos (coluna, condensador e refervedor) e os custos operacionais a soma dos gastos com utilidades. A soma de ambos é o custo

total anual da operação em cada coluna utilizado como critério indicador da otimização.

4.4 Projeto sujeito à incerteza

Para um melhor entendimento e visualização do tipo de problema abordado neste trabalho, considere o projeto ótimo de uma coluna de destilação exemplificado pela Figura 4. Deseja-se uma pureza de no mínimo 98% do componente chave leve no topo e no máximo 3% no fundo. Estas são as restrições operacionais que devem ser atendidas pelo projeto e durante a operação da coluna. No entanto, a carga da coluna apresenta uma incerteza na vazão, podendo variar entre 90 e 110 kmol/h, e na composição, na faixa entre 0,45 e 0,55. Cada conjuntura, consistindo de um valor de vazão e um valor de composição, corresponde a um possível cenário de operação. O objetivo da otimização do projeto sujeito à incerteza é minimizar o custo total garantindo a operabilidade do projeto em diferentes cenários.

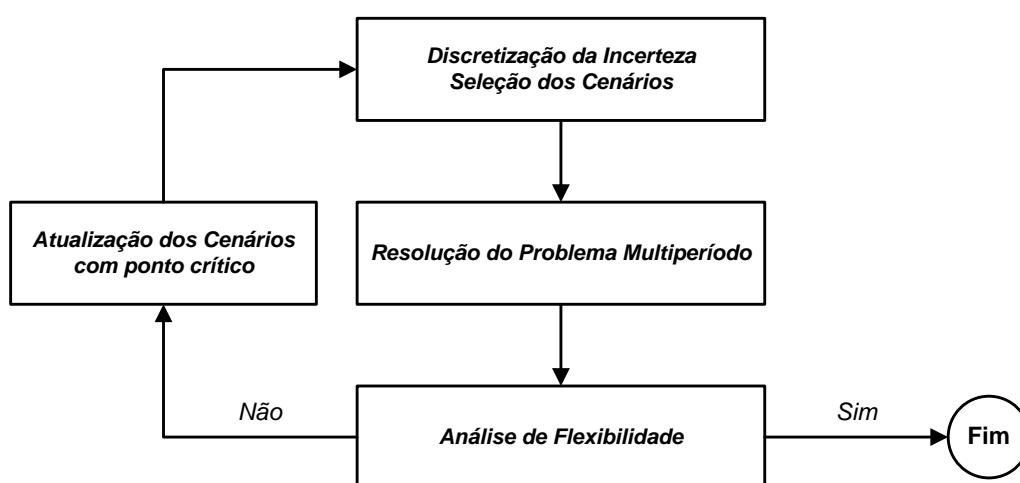
Figura 4 – Projeto de coluna de destilação sujeito à incerteza.



Fonte: própria autora, 2016.

A metodologia para solução do problema multiperíodo criado em torno dos projetos sujeitos a incertezas será baseada no trabalho de Halemane e Grossmann (1983). Os autores propuseram uma estratégia de decomposição em dois estágios para o projeto de processos flexíveis, baseados na hipótese de que algumas decisões podem ser postergadas na etapa de projeto, ou seja, algumas variáveis podem ser ajustadas durante a operação. Uma visão esquemática da estratégia proposta é ilustrada na Figura 5.

Figura 5 – Algoritmo em dois estágios para a síntese de processos flexíveis.



Fonte: ESCOBAR, 2011.

O primeiro estágio precede a operação (estágio de projeto) onde as variáveis de projeto são escolhidas (dimensão dos equipamentos e topologia do processo) através da resolução do problema multiperíodo. Em um segundo estágio (estágio de operação) as variáveis de controle, que consistem nos graus de liberdade, são ajustadas durante a operação de acordo com a realização dos parâmetros incertos. O cálculo do Índice de Flexibilidade (GROSSMANN; FLOUDAS, 1987) permite avaliar se o projeto obtido através da solução do problema multiperíodo é capaz de operar em toda região de incerteza, ou seja, se o projeto obtido é flexível. Em caso afirmativo, o procedimento termina. Caso contrário, a análise de flexibilidade retorna o ponto de máxima violação das restrições, sendo esse um ponto crítico para operação. O ponto crítico é então adicionado ao conjunto inicial de pontos, e o problema da síntese é reformulado. Este é um procedimento iterativo, onde a cada nova iteração um novo ponto crítico é adicionado ao conjunto prévio de pontos. Conforme mencionado por

Biegler, Grossmann e Westerberg (1997) este algoritmo geralmente converge em poucas iterações.

Em geral, a extensão do projeto ótimo em uma dada condição para a representação multiperíodo é bastante direta. As variáveis de projeto (dimensão dos equipamentos, configuração do processo) são independentes dos cenários. Ao passo que as variáveis que definem as condições operacionais (vazões, temperaturas, composições) podem assumir diferentes realizações em cenários distintos.

A análise dos efeitos da incerteza nos diferentes cenários foi realizada no ambiente do simulador e foi desenvolvida uma estratégia a fim de identificar cenários críticos para o projeto da coluna. Uma vez realizado o projeto ótimo para o cenário nominal, os cenários críticos foram identificados como aqueles nos quais a coluna não conseguiria atender as especificações de pureza. Nestes cenários, a área de troca térmica não foi suficiente e/ou o diâmetro da coluna não foi grande o bastante para que não houvesse inundação. Na metodologia adaptada no presente trabalho, todos os cenários críticos foram identificados em uma única etapa através de uma análise de viabilidade com o auxílio do simulador *ChemSep*. O projeto ótimo passou a considerar múltiplos cenários de operação, o nominal mais os cenários críticos identificados, garantindo assim que o projeto final obtido fosse capaz de operar em toda região de incerteza considerada e que fosse ótimo em relação aos custos totais, apresentando um bom compromisso entre os custos de investimento e operacionais.

5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

5.1 Validação da metodologia

O estudo de caso utilizado para a validação da metodologia no simulador *ChemSep* foi a destilação em coluna de pratos de uma mistura binária de 45 % Benzeno e 55 % Tolueno (base molar), com vazão de 318 kmol/h, operando continuamente com pressão de 1 atm e alimentação na temperatura de ebulição, 94 °C. A especificação é de 92 % de Benzeno no destilado e 95 % de Tolueno no produto de fundo (base molar).

Algumas considerações foram realizadas:

- Massa molar do Benzeno é igual a 78 kg/kmol e do Tolueno igual a 92 kg/kmol;
- Massa específica do vapor é constante e igual a 2,70 kg/m³;
- Velocidade de vapor máxima permissível no topo da coluna é 0,76 m/s, para que não haja inundação;

- A pressão de operação da coluna foi mantida fixa em 1 atm;
- A proporção entre o número de estágios na seção de retificação e de esgotamento foi mantida fixa;
- O modelo termodinâmico considerado foi o de gás ideal e solução ideal (Lei de Raoult) e a equação de Antoine para predição da pressão de saturação;
- O custo calculado foi em base anual, considerando que a unidade opera 8500 horas por ano.

Foram realizadas simulações para seis situações distintas, variando o número de pratos da coluna, fechando assim os graus de liberdade para cada simulação. Através da simulação, foram obtidas informações da razão de refluxo e das cargas térmicas do condensador e do refeedor para cada situação, ou seja, para as seis colunas simuladas. Utilizando os valores encontrados para a razão de refluxo foi possível calcular o diâmetro de cada coluna, através das equações descritas na metodologia (Equações 15 e 16). A partir do diâmetro da coluna e do número de estágios pôde-se calcular o custo fixo, associado ao custo de investimento na coluna.

Com os valores de carga térmica obtidos para cada coluna, calculou-se as áreas de troca térmica do condensador e do refeedor a partir da Equação 17, considerando que o coeficiente global de transferência de calor no condensador é igual a $568 \text{ J/m}^2 \cdot \text{s} \cdot \text{K}$ e no refeedor $454 \text{ J/m}^2 \cdot \text{s} \cdot \text{K}$ e que as temperaturas do produto destilado, produto de fundo, água de arrefecimento e vapor de aquecimento são, respectivamente, 81.7°C , 108°C , $32,2^\circ\text{C}$ e 144.8°C . A partir das áreas de troca térmica foram calculados os custos fixos associados ao investimento no condensador e no refeedor.

Com os valores de carga térmica também foram calculados os custos operacionais atribuídos aos despêndios com água de arrefecimento e vapor de aquecimento, considerando a capacidade calorífica da água igual a $4200 \text{ J/kg} \cdot \text{K}$ e o calor de condensação do vapor igual a $2,13 \times 10^6 \text{ J/Kg}$.

Obtidos esses resultados, agrupou-se os custos de investimento com equipamentos (coluna, condensador e refeedor) denominando custos fixos, e a soma dos custos com utilidades, custos operacionais. Somados, custos fixos e operacionais, constituem a coluna dos custos totais da Tabela 2, que apresenta uma síntese dos resultados obtidos nas simulações para cada número de pratos arbitrado.

Tabela 2 – Síntese dos resultados para a validação da metodologia.

N	R	Di, m	Área de troca térmica, m ²		Custos, \$		
			Condensador	Refrervedor	Fixos	Operacionais	Totais
29	1,25	2,10	101,47	169,37	48572,47	135896,45	184468,92
21	1,30	2,13	103,53	172,87	40999,01	138706,43	179705,44
18	1,35	2,15	106,05	177,13	38516,12	142118,19	180634,31
16	1,44	2,19	109,96	183,71	37353,12	147401,88	184755,00
14	1,61	2,27	117,69	196,80	36874,53	157901,55	194776,08
13	1,87	2,37	129,23	216,27	38132,84	173521,52	211654,36

Fonte: própria autora, 2016.

O resultado obtido foi então comparado ao encontrado por Peters e Timmerhaus (1991), autores de referência, R*, a fim de validar o uso do simulador para a metodologia e para o estudo de caso. Para isso, foi calculado o erro percentual na razão de refluxo entre os dois resultados, Tabela 3. Considerou-se o resultado satisfatório, tendo em vista que o erro percentual foi inferior a 10% para todos os casos. Portanto, o simulador *ChemSep* mostrou-se uma boa ferramenta para simulação da operação de destilação testada. Possibilitando dar continuidade ao trabalho para a análise de incerteza.

Tabela 3 – Comparativo entre os resultados da autora e da referência.

N	R*	R	Erro, %
29	1,20	1,25	4,52
21	1,30	1,30	0,02
18	1,40	1,35	3,34
16	1,50	1,44	3,82
14	1,70	1,61	5,02
13	2,00	1,87	6,47

Fonte: própria autora, 2016.

Ainda que o erro percentual entre os resultados tenha sido pequeno, este pode ser atribuído ao fato de que o autor de referência não expõe algumas informações importantes na metodologia, como o modelo utilizado para o cálculo das propriedades termodinâmicas e o prato aonde é realizada a alimentação, por exemplo, além de erros de arredondamento inerentes à exibição dos resultados com a precisão de apenas duas casas decimais.

5.2 Projeto nominal

Para iniciar a metodologia de otimização de colunas de destilação, utilizou-se o mesmo estudo de caso da validação, destilação binária da mistura de benzeno e tolueno, nas mesmas condições operacionais e especificações. No entanto, para maior precisão nos resultados, foram realizadas simulações para oito situações diferentes de números de pratos, e não seis como na etapa de validação, mas ainda dentro da faixa de 13 a 29 pratos para a coluna. A Tabela 4 apresenta os resultados das simulações para o projeto nominal.

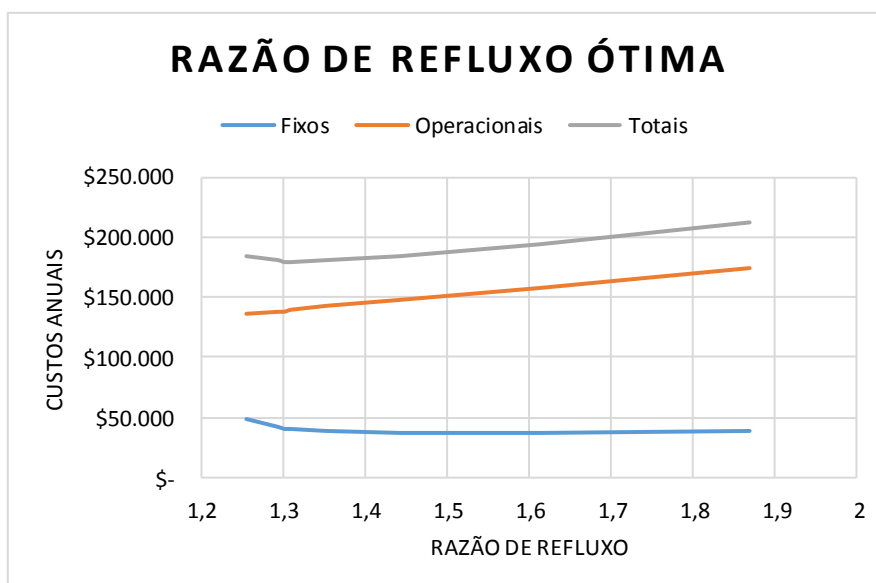
Tabela 4 – Síntese dos resultados obtidos para o projeto nominal.

N	R	Di, m	Área de troca térmica, m ²		Custos, \$		
			Condensador	Refervedor	Fixos	Operacionais	Totais
29	1,25	2,10	101,47	169,37	48572,47	135896,45	184468,92
22	1,30	2,12	103,28	172,47	41966,26	138383,86	180350,11
21	1,30	2,13	103,53	172,87	40999,01	138706,43	179705,44
20	1,31	2,13	103,96	173,57	40076,15	139269,60	179345,75
18	1,35	2,15	106,05	177,13	38516,12	142118,19	180634,31
16	1,44	2,19	109,96	183,71	37353,12	147401,88	184755,00
14	1,61	2,27	117,69	196,80	36874,53	157901,55	194776,08
13	1,87	2,37	129,23	216,27	38132,84	173521,52	211654,36

Fonte: própria autora, 2016.

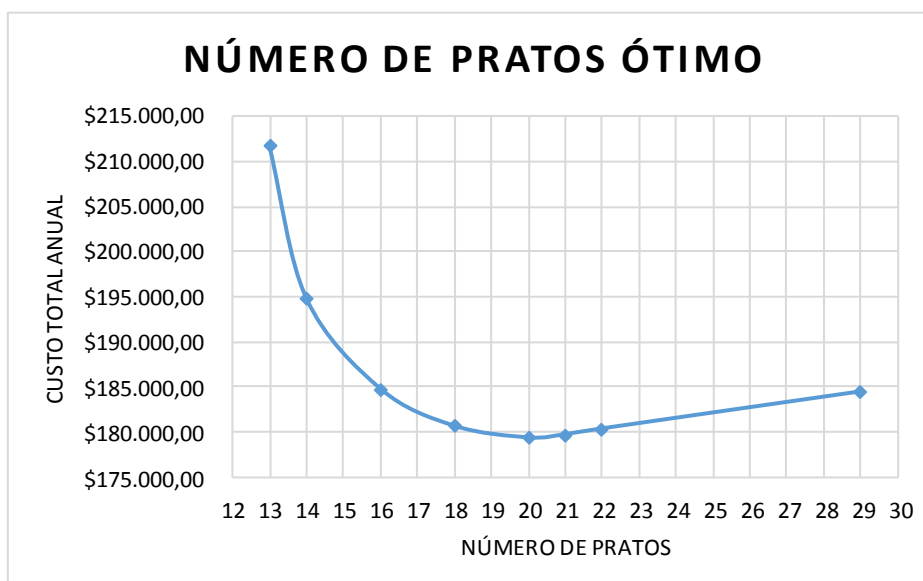
O resultado graficado, Figura 6, evidencia que a razão de refluxo ótima para o projeto nominal, ou seja, o ponto de mínimo na curva de custos anuais totais, foi em torno de 1,3. É conveniente também graficar o número de pratos versus o custo total anual, Figura 7, o que possibilita a visualização da configuração da coluna que representa a melhor opção de projeto, neste caso, uma coluna com 20 pratos.

Figura 6 – Gráfico de R ótima para o projeto nominal.



Fonte: própria autora, 2016.

Figura 7 – Gráfico de N ótimo para o projeto nominal.



Fonte: própria autora, 2016.

5.3 Projetos sujeitos a incertezas

5.3.1 Incerteza na vazão

5.3.1.1 Projeto crítico

A avaliação da incerteza na vazão de alimentação da coluna foi realizada considerando uma variação de 10 % acima e abaixo da vazão nominal ($F_{nom} = 318$ kmol/h). Foram realizadas simulações para os extremos dessa faixa, $0,9 * F_{nom}$ e

$1,1 * F_{nom}$, visto que a vazão de alimentação é proporcional à vazão de vapor no topo (condição crítica para o diâmetro da coluna), e o cenário crítico foi facilmente identificado no extremo superior da faixa, para a vazão 10 % maior que a vazão nominal. Um resumo dos resultados das simulações nessa condição é apresentado na Tabela 5.

Tabela 5 – Síntese dos resultados obtidos para o projeto crítico considerando incerteza na vazão.

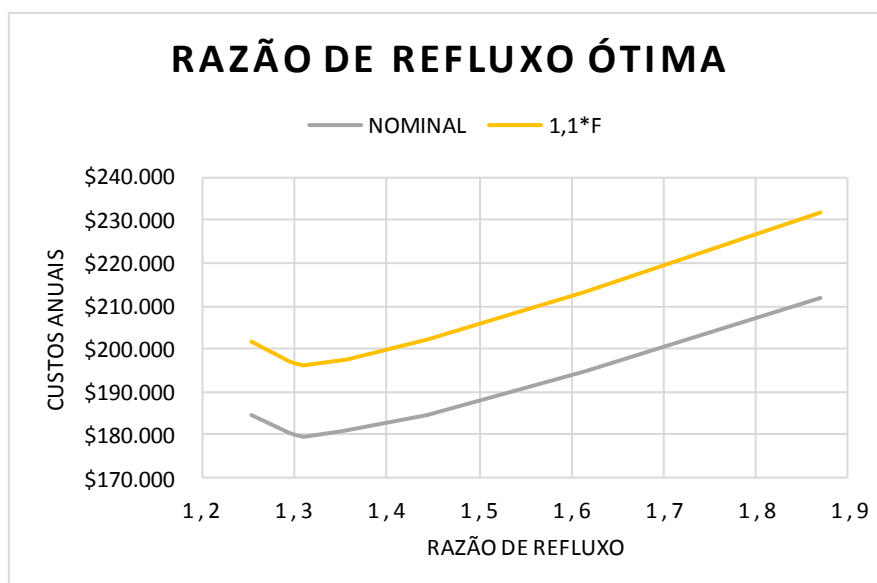
N	R	Di, m	Área de troca térmica, m ²		Custos, \$		
			Condensador	Refrervedor	Fixos	Operacionais	Totais
29	1,25	2,21	111,62	186,30	52041,58	149482,82	201524,40
22	1,30	2,23	113,65	189,72	44898,01	152225,66	197123,68
21	1,30	2,23	113,90	190,16	43851,57	152576,77	196428,34
20	1,31	2,23	114,36	190,93	42852,63	153197,57	196050,20
18	1,35	2,26	116,66	194,84	41175,83	156330,13	197505,95
16	1,44	2,30	120,96	202,08	39860,35	162143,13	202003,48
14	1,61	2,38	129,48	216,48	39425,99	173691,93	213117,92
13	1,87	2,49	142,15	237,89	40681,08	190870,77	231551,85

Fonte: própria autora, 2016.

Uma variação na vazão não promove mudança no número de pratos e na razão de refluxo para purezas especificadas. A vazão de alimentação (F) apenas influencia nas vazões de topo (D) e de fundo (B) da coluna e, conseqüentemente, nas quantidades de benzeno e tolueno que saem dela, mas não na pureza. As cargas térmicas no condensador e no refrervedor também são diferentes, uma vez que a vazão que troca calor nesses equipamentos é alterada.

Para o projeto no ponto crítico $F = 1,1 * F_{nom}$, a coluna necessita de um diâmetro maior para evitar inundações, as cargas térmicas nos trocadores aumentam, portanto as áreas de troca térmica também, provocando um aumento tanto nos custos fixos quanto nos operacionais. No entanto, como é possível visualizar no gráfico da Figura 8, a razão de refluxo ótima continua sendo em cerca de 1,3, ou seja, o projeto segue tendo como melhor opção uma coluna com 20 pratos, porém, operando, logicamente, com custos maiores em função da nova condição.

Figura 8 – Gráfico de R ótima para os projetos nominal e crítico considerando incerteza na vazão.



Fonte: própria autora, 2016.

O Quadro 1 apresenta um comparativo entre as configurações básicas das colunas consideradas ótimas para a operação no cenário nominal e no cenário que considera incerteza na vazão. Nota-se que, como mencionado, ambas devem ser construídas com 20 estágios de equilíbrio, no entanto a coluna que opera com incerteza na vazão e, conseqüentemente, que suporta uma vazão de alimentação maior, necessita de um diâmetro de coluna maior.

Quadro 1 – Comparativo entre as colunas para cada cenário.

Cenário	N	R	Diâmetro, m
Nominal	20	1,31	2,13
10% da vazão nominal	20	1,31	2,23

Fonte: própria autora, 2016.

5.3.1.2 Projeto multiperíodo

Obtidos os projetos ótimos para os dois cenários separadamente, foi preciso encontrar um projeto que fosse capaz de operar nas duas condições ao menor custo. Para isso, foi feita uma combinação entre os projetos, onde o número de pratos permaneceu igual a ambos os projetos, assim como as razões de refluxo, já que essas independem da vazão quando para uma mesma composição da carga e especificação da coluna. Os diâmetros e as cargas térmicas foram selecionados iguais aos do

projeto que obteve os maiores valores para essas variáveis (cenário crítico). Os custos de investimento foram calculados para os novos valores e os operacionais foram definidos como a média aritmética entre os valores anteriormente obtidos nos dois projetos. A Tabela 6 mostra um resumo dos resultados das simulações para esse novo cenário.

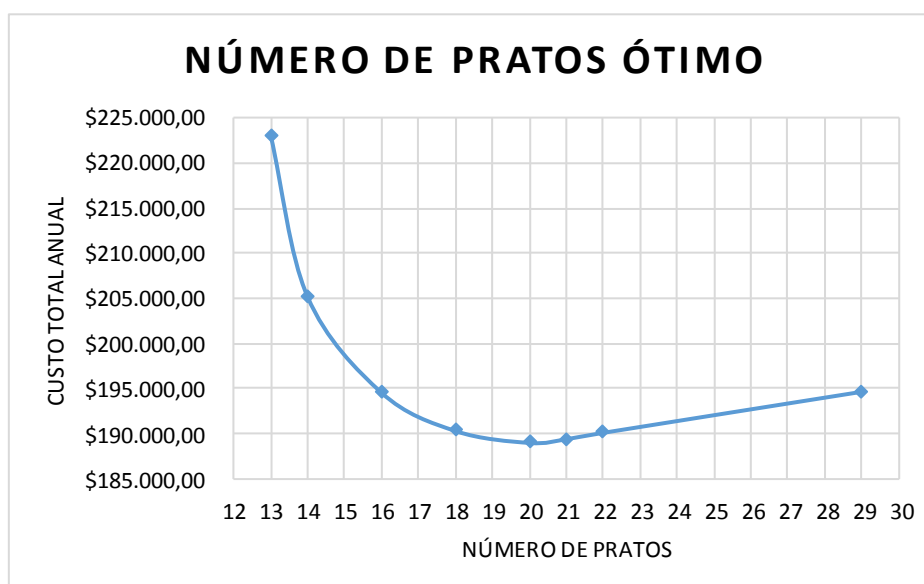
Tabela 6 – Síntese dos resultados obtidos para o projeto multiperíodo considerando incerteza na vazão.

N	R	Di, m	Área de troca térmica, m ²		Custos, \$		
			Condensador	Refervedor	Fixos	Operacionais	Totais
29	1,25	2,21	111,62	186,30	52041,58	142689,64	194731,22
22	1,30	2,23	113,65	189,72	44898,01	145304,76	190202,77
21	1,30	2,23	113,90	190,16	43851,57	145641,60	189493,17
20	1,31	2,23	114,36	190,93	42852,63	146233,59	189086,21
18	1,35	2,26	116,66	194,84	41175,83	149224,16	190399,99
16	1,44	2,30	120,96	202,08	39860,35	154772,51	194632,86
14	1,61	2,38	129,48	216,48	39425,99	165796,74	205222,73
13	1,87	2,49	142,15	237,89	40911,96	182196,14	223108,11

Fonte: própria autora, 2016.

O resultado foi graficado, Figura 9, evidenciando que, para o projeto multiperíodo considerando vazão variável na faixa de 10 %, a coluna que proporciona o menor custo ao projeto é construída com 20 pratos. Esta coluna é capaz de operar em toda a região de incerteza garantindo o menor custo possível ao projeto.

Figura 9 – Gráfico de N ótimo para o projeto multiperíodo considerando incerteza na vazão.



Fonte: própria autora, 2016.

O Quadro 2 apresenta uma síntese da configuração da coluna considerada ótima para cada condição. Nota-se que a coluna que opera no cenário multiperíodo deverá ter o mesmo número de pratos e diâmetro da que opera na condição extrema de incerteza, uma vez que é nessa condição onde é exigido um diâmetro maior a fim de que não haja problemas com inundação, já que a vazão que circula na coluna é maior. O custo vinculado ao projeto multiperíodo fica na faixa entre o custo dos demais projetos, visto que considera a possibilidade de operar em condições mais severas de vazão eventualmente, mas sua condição de operação padrão, ou seja, na maior parte do tempo, segue sendo a nominal.

Quadro 2 – Comparativo entre o custo dos cenários.

Cenário	N	R	Diâmetro, m	Custo total, \$
Nominal	20	1,31	2,13	179345,75
10% da vazão nominal	20	1,31	2,23	196050,20
Multiperíodo	20	1,31	2,23	189086,21

Fonte: própria autora, 2016.

5.3.2 Incerteza na composição

5.3.2.1 Projeto crítico

Para avaliar a incerteza na composição foram realizados testes a fim de aumentar e diminuir a composição de benzeno em 5 e 10 % frente à composição nominal ($Z_B = 0,45$). Foram realizadas as simulações para as oito colunas de diferentes números de pratos para cada caso descrito:

- Caso 1: Composição de benzeno +5 % ($Z_B * 1,05$);
- Caso 2: Composição de benzeno +10 % ($Z_B * 1,1$);
- Caso 3: Composição de benzeno -5 % ($Z_B * 0,95$);
- Caso 4: Composição de benzeno -10 % ($Z_B * 0,90$).

Uma alteração na composição da alimentação da coluna promove uma mudança na razão de refluxo que, por sua vez, varia a vazão de vapor no topo. Uma vez que a vazão de vapor no topo é o que determina o diâmetro necessário à coluna para que não haja inundação, essa variável estabelece um cenário crítico desse projeto. Portanto, com o acréscimo em 10 % na composição de benzeno, embora a razão de refluxo diminua, a vazão de destilado aumenta. Essa conjuntura proporciona

um aumento da vazão de vapor da coluna, requerendo um diâmetro maior de coluna para garantir a operabilidade, indicando o Caso 2 como um cenário crítico de operação. A Tabela 7 apresenta um resumo dos principais resultados obtidos nas simulações para os diferentes números de pratos nesse cenário.

Tabela 7 – Síntese dos resultados obtidos para o projeto crítico considerando incerteza na composição – Caso 2.

N	R	V	Di, m	Área de troca térmica, m ²		Custos, \$		
				Condensador	Refervedor	Fixos	Operacionais	Totais
29	1,25	0,10	2,22	112,83	153,17	50852,36	123234,34	174086,71
22	1,29	0,10	2,24	114,53	156,07	43611,39	125558,37	169169,75
21	1,29	0,10	2,24	114,78	156,50	42997,56	125909,47	168907,03
20	1,30	0,10	2,24	115,24	157,28	42602,45	126535,03	169137,49
18	1,35	0,11	2,26	117,55	161,19	39870,19	129667,59	169537,78
16	1,43	0,11	2,30	121,60	167,99	38583,81	135124,73	173708,54
14	1,59	0,12	2,38	129,58	181,50	38029,00	145961,24	183990,24
13	1,84	0,13	2,49	142,00	202,49	39367,99	162803,24	202171,23

Fonte: própria autora, 2016.

Entretanto, ao diminuir a composição de benzeno na carga de alimentação, consequentemente aumentando a composição de tolueno, acaba-se proporcionando um aumento da vazão no fundo da coluna que passa pelo refervedor, exigindo uma área de troca térmica maior nesse equipamento para atingir as especificações. A maior área do refervedor foi requerida pelo Caso 3, que também foi identificado como um cenário crítico para a operação. A Tabela 8 resumo os valores encontrados nas simulações para esse cenário.

Tabela 8 – Síntese dos resultados obtidos para o projeto crítico considerando incerteza na composição – Caso 3.

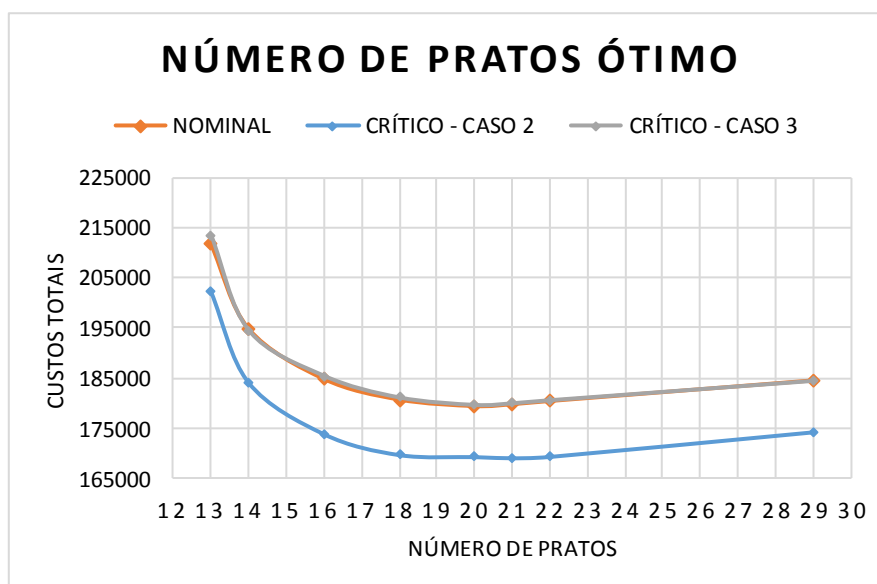
N	R	V	Di, m	Área de troca térmica, m ²		Custos, \$		
				Condensador	Refervedor	Fixos	Operacionais	Totais
29	1,32	0,09	2,07	98,60	170,25	47819,82	136549,47	184369,28
22	1,37	0,09	2,09	100,48	173,44	41398,02	139104,58	180502,60
21	1,37	0,09	2,10	100,73	173,84	40455,06	139431,91	179886,98
20	1,38	0,09	2,10	101,15	174,57	39559,43	140014,11	179573,53
18	1,43	0,09	2,12	103,35	178,26	38089,57	142973,77	181063,34
16	1,53	0,10	2,16	107,36	185,04	36984,89	148411,33	185396,22
14	1,72	0,10	2,24	115,35	198,54	35273,45	159243,08	194516,53
13	2,00	0,11	2,36	127,38	218,91	37969,16	175584,29	213553,45

Fonte: própria autora, 2016.

Os resultados foram graficados, Figura 10, ilustrando o número de estágios de equilíbrio das colunas que proporcionaram o menor custo para ambos os projetos críticos que consideram incerteza na composição, comparados ao resultado obtido para o projeto que considera apenas a composição nominal.

Nota-se que o cenário nominal e o crítico – Caso 3 obtiveram comportamento bem semelhante com relação ao custo anual para cada número de pratos da coluna e um custo em média mais elevado se comparados ao cenário crítico – Caso 2, essa diferença no custo pode ser atribuída ao investimento com o refeedor, dado que o equipamento é maior para os primeiros, mas, principalmente, aos dispêndios operacionais com vapor de aquecimento, consequência da vazão maior de produto a ser aquecido decorrente da composição mais baixa de benzeno na carga da alimentação.

Figura 10 – Gráfico de N ótimo para os projetos nominal e críticos considerando incerteza na composição.



Fonte: própria autora, 2016.

5.3.2.2 Projeto multiperíodo

Uma combinação entre os cenários nominal e críticos foi feita a fim de obter um projeto que fosse capaz de operar em todas as condições especificadas. Para tal, fez-se a seleção das variáveis através dos seus valores limites, ou seja, os maiores valores obtidos entre os cenários para cada uma delas, a fim de garantir que a coluna fosse capaz de operar em toda a região especificada de incerteza.

Uma vez que a vazão de vapor máxima ocorreu no cenário crítico – Caso 2, o diâmetro selecionado para o projeto multiperíodo foi o obtido para essa condição. Ainda neste cenário foram encontrados os maiores valores para as áreas de troca térmica no condensador, já que nessa condição a vazão de destilado era maior justificando esse comportamento. A maior área de troca térmica no refeedor foi aquela encontrada no cenário crítico – Caso 3, em função de que nessa condição a vazão de destilado é menor do que a encontrada nos demais cenários, conseqüentemente, a vazão de produto de fundo é maior, exigindo que a área do refeedor seja maior para garantir a troca térmica.

Para a condição de projeto multiperíodo as razões de refluxo não podem ser previstas, uma vez que cada novo cenário de vazão/composição resultará em um novo valor de razão de refluxo para cada configuração de coluna (número de pratos/diâmetro).

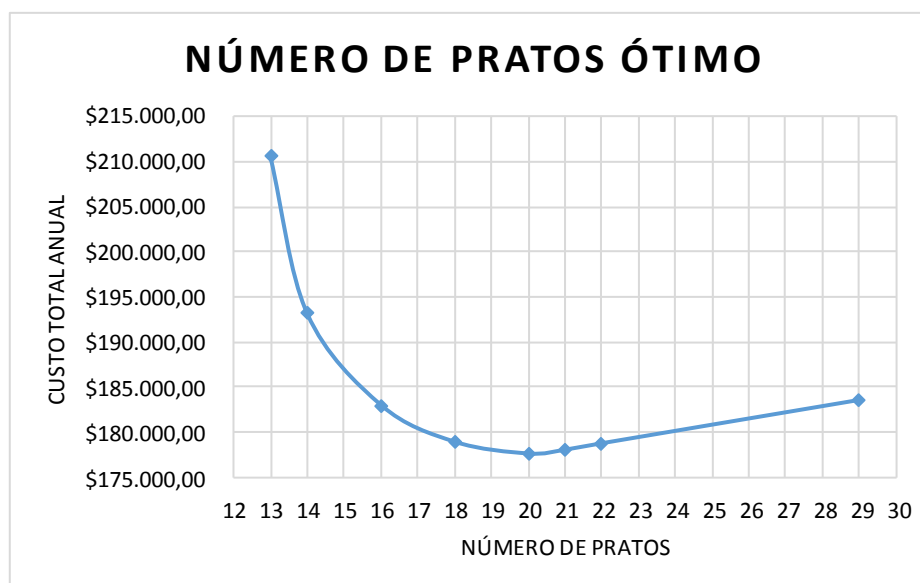
Os custos foram calculados de maneira análoga à anterior. Os resultados obtidos para essa nova condição estão dispostos na Tabela 9 e graficados na Figura 11, evidenciando que a coluna ótima para a condição multiperíodo contém 20 pratos e diâmetro de 2,24 metros. Um comparativo entre as configurações e os custos provenientes das colunas ótimas para cada condição é apresentado no Quadro 3.

Tabela 9 – Síntese dos resultados obtidos para o projeto multiperíodo considerando incerteza na composição.

N	Di, m	Área de troca térmica, m ²		Custos, \$		
		Condensador	Refeedor	Fixos	Operacionais	Totais
29	2,22	112,83	170,25	51650,73	131893,42	183544,15
22	2,24	114,53	173,44	44366,49	134348,94	178715,43
21	2,24	114,78	173,84	43311,26	134682,60	177993,87
20	2,24	115,24	174,57	42303,79	135272,91	177576,70
18	2,26	117,55	178,26	40635,04	138253,18	178888,22
16	2,30	121,60	185,04	39331,92	143645,98	182977,90
14	2,38	129,58	198,54	38776,84	154368,62	193145,46
13	2,49	142,00	218,91	39968,85	170636,35	210605,20

Fonte: própria autora, 2016.

Figura 11 – Gráfico de N ótimo para o projeto multiperíodo considerando incerteza na composição.



Fonte: própria autora, 2016.

Quadro 3 – Comparativo entre o custo dos cenários.

Cenário	N	R	Diâmetro, m	Custo total, \$
Nominal	20	1,31	2,13	179345,75
Crítico - Caso 2	21	1,29	2,24	168907,03
Crítico - Caso 3	20	1,38	2,10	179573,53
Multiperíodo	20	-	2,24	177576,70

Fonte: própria autora, 2016.

5.3.3 Incerteza na vazão e na composição

Feitas as avaliações da incerteza na vazão e na composição individualmente sobre os projetos, vê-se necessário avalia-las simultaneamente, uma vez que os processos reais sofrem distúrbios nas diferentes variáveis durante uma mesma operação, estando sujeitos a condições de incerteza.

5.3.3.1 Projeto crítico

A condição nominal permaneceu igual à considerada anteriormente e, para a identificação do cenário crítico, uma variação de 10 % a mais e a menos na vazão de alimentação e na composição de benzeno na alimentação foi proposta através de quatro casos, foram eles:

- Caso 1: Vazão +10 % ($F_{nom} * 1,1$) e Composição 10 % ($Z_B * 1,1$);
- Caso 2: Vazão +10 % ($F_{nom} * 1,1$) e Composição -10 % ($Z_B * 0,90$);
- Caso 3: Vazão -10 % ($F_{nom} * 0,90$) e Composição 10 % ($Z_B * 1,1$);
- Caso 4: Vazão -10 % ($F_{nom} * 0,90$) e Composição -10 % ($Z_B * 0,90$).

Cada caso acima enumerado representou um cenário diferente e para cada cenário foram realizadas as simulações para os diferentes números de pratos (N) avaliando as variáveis razão de refluxo, vazão de vapor no topo, diâmetro e cargas térmicas no trocadores de calor para cada valor de N. Os cenários críticos foram identificados como aqueles que promoveram o maior valor nas variáveis, ou seja, a condição limite de operação, que necessita de maior diâmetro de coluna e maiores áreas de troca térmica.

O Caso 1 foi identificado como crítico, uma vez que uma maior vazão exige um diâmetro maior de coluna e o aumento da composição de benzeno na alimentação requer uma área de troca térmica maior no condensador. No entanto, o Caso 2 também foi considerado crítico já que representava a condição de menor composição de benzeno na faixa de incerteza, configurando uma coluna com menor vazão de destilado e, conseqüentemente, maior área de troca térmica no refeedor. As Tabelas 10 e 11 apresentam os resultados relevantes para os cenários críticos identificados, Casos 1 e 2, respectivamente.

Tabela 10 – Síntese dos resultados obtidos para o projeto crítico considerando incerteza na vazão e na composição – Caso 1.

N	R	V	Di, m	Área de troca térmica, m ²		Custos, \$		
				Condensador	Refeedor	Fixos	Operacionais	Totais
29	1,25	0,11	2,33	124,12	168,49	54701,44	135559,74	190261,18
22	1,29	0,11	2,34	126,00	171,67	46822,12	138114,85	184936,97
21	1,29	0,11	2,35	126,28	172,15	45682,64	138499,81	184182,46
20	1,30	0,11	2,35	126,78	173,01	44599,28	139187,76	183787,04
18	1,35	0,12	2,38	129,33	177,31	42803,78	142638,13	185441,91
16	1,43	0,12	2,42	133,74	184,79	41353,18	148633,54	189986,72
14	1,59	0,13	2,49	142,54	199,65	40689,71	160557,78	201247,50
13	1,84	0,14	2,61	156,20	222,74	41966,69	179083,98	221050,67

Fonte: própria autora, 2016.

Os resultados obtidos nas simulações para os dois cenários críticos estão no gráfico da Figura 12, onde pode-se comparar o número de pratos ótimo para cada novo cenário ao número de pratos ótimo para o projeto nominal, bem como os

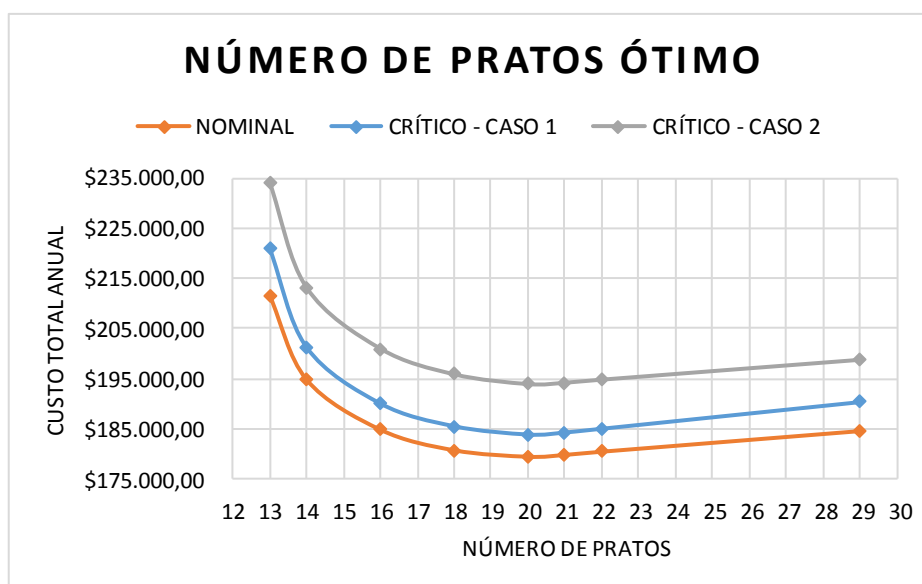
diferentes custos referentes a cada um desses projetos. Nota-se que o custo total dos projetos críticos é superior ao do projeto nominal, dado que estes operam em condições extremas de vazão e composição e englobam tanto as especificações nominais quanto às definidas na faixa de incerteza.

Tabela 11 – Síntese dos resultados obtidos para o projeto crítico considerando incerteza na vazão e na composição – Caso 2.

N	R	V	Di, m	Área de troca térmica, m ²		Custos, \$		
				Condensador	Refervedor	Fixos	Operacionais	Totais
29	1,42	0,09	2,16	106,51	184,66	50615,92	148098,12	198714,05
22	1,47	0,10	2,18	108,61	188,22	43794,85	150951,47	194746,32
21	1,48	0,10	2,18	108,89	188,69	42795,04	151331,67	194126,71
20	1,49	0,10	2,18	109,39	189,54	41851,50	152014,86	193866,36
18	1,55	0,10	2,21	111,94	193,88	40324,55	155493,77	195818,31
16	1,65	0,11	2,25	116,59	201,69	39182,99	161764,20	200947,19
14	1,86	0,11	2,34	125,82	217,29	38902,16	174275,39	213177,55
13	2,19	0,13	2,47	140,16	241,51	40547,17	193706,36	234253,52

Fonte: própria autora, 2016.

Figura 12 – Gráfico de N ótimo para os projetos nominal e críticos considerando incerteza na vazão e na composição.



Fonte: própria autora, 2016.

5.3.3.2 Projeto multiperíodo

Para a elaboração do projeto multiperíodo, que considera variações na vazão e na composição de alimentação na faixa de 10 %, foi realizada uma combinação entre os cenários nominal e críticos, obtidos anteriormente. Do cenário crítico Caso 1

foram utilizados os valores de diâmetro e área de troca térmica do condensador, de modo que estes foram os maiores entre os três cenários. A área de troca térmica do refeedor foi retirada do cenário crítico Caso 2.

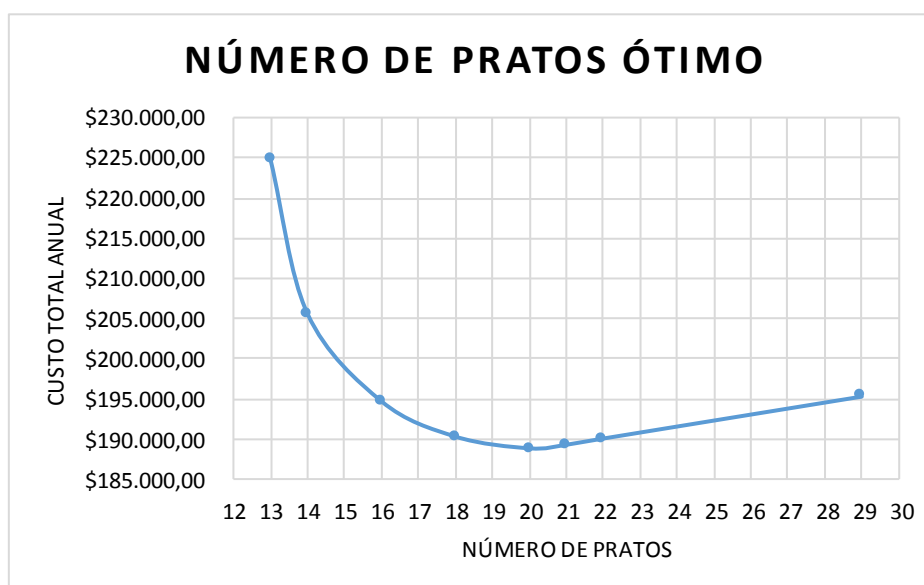
Os custos fixos foram calculados a partir do diâmetro da coluna e das áreas dos trocadores de calor e os custos operacionais foram obtidos por uma média entre os três projetos. A Tabela 12 apresenta os resultados condensados das simulações para o projeto multiperíodo e o gráfico da Figura 13 evidencia que o número de pratos que otimiza a operação é igual a 20, o qual refere-se a uma coluna com diâmetro de 2,35 metros.

Tabela 12 – Síntese dos resultados obtidos para o projeto multiperíodo considerando incerteza na vazão e na composição.

N	Di, m	Área de troca térmica, m ²		Custos, \$		
		Condensador	Refeedor	Fixos	Operacionais	Totais
29	2,33	124,12	184,66	55411,12	139851,44	195262,55
22	2,34	126,00	188,22	47548,12	142483,39	190031,51
21	2,35	126,28	188,69	46408,38	142845,97	189254,35
20	2,35	126,78	189,54	45324,75	143490,74	188815,49
18	2,38	129,33	193,88	43530,83	146750,03	190280,86
16	2,42	133,74	201,69	42082,90	152599,87	194682,77
14	2,49	142,54	217,29	41337,92	164244,91	205582,83
13	2,61	156,20	241,51	42653,61	182103,95	224757,56

Fonte: própria autora, 2016.

Figura 13 – Gráfico de N ótimo para o projeto multiperíodo considerando incerteza na vazão e na composição.



Fonte: própria autora, 2016.

O Quadro 4 apresenta um comparativo entre os custos para as diferentes configurações de colunas simuladas. Nota-se que, ainda que o número de pratos ótimo tenha se mantido em todos os cenários, o diâmetro para os cenários que consideram a incerteza são maiores, assim como as áreas dos trocadores, levando a um custo de investimento maior. O consumo de utilidades também aumenta para garantir as especificações da operação, refletindo no aumento dos custos operacionais. Portanto, o custo total anual da coluna que opera considerando incertezas é maior que o da coluna que considera apenas a condição nominal.

Quadro 4 – Comparativo entre o custo dos cenários considerando incerteza na vazão e na composição.

Cenário	N	R	Diâmetro, m	Custo total, \$
Nominal	20	1,31	2,13	179345,75
Crítico - Caso 1	20	1,30	2,35	183787,04
Crítico - Caso 2	20	1,49	2,18	193866,36
Multiperíodo	20	-	2,35	188815,49

Fonte: própria autora, 2016.

Portanto, conclui-se que, a partir dos resultados obtidos nas simulações para o estudo de caso de separação binária de benzeno e tolueno, a coluna ótima para a operação considerando variações na faixa de 10 % na vazão e na composição de alimentação da coluna é aquela que possui 20 estágios de equilíbrio, diâmetro de 2,35 metros, com áreas de troca térmica de aproximadamente 127 e 190 m² no condensador e refeedor, respectivamente. Essa coluna apresenta um custo anual estimado de \$ 188.815,49.

Importante ressaltar que os pratos para colunas de destilação são comercializados em diâmetros discretos, contudo, à título didático, o presente trabalho apresentou valores exatos (contínuos) para os diâmetros mínimos necessários para cada prato, calculando o custo dos mesmos através de uma interpolação entre os custos de referência para pratos comerciais, Tabela 1. O Quadro 5 apresenta uma estimativa de custo mais realista, utilizando pratos com diâmetros comerciais, para o projeto nominal e para a coluna considerada ótima para o cenário de incerteza na vazão e na composição simultaneamente. Esses valores podem ser comparados com

a estimativa apresentada anteriormente calculada a partir dos valores ideais dos diâmetros.

Quadro 5 – Comparativo entre o custo das colunas utilizando diâmetros ideais e comerciais.

Cenário	N	R	Diâmetro mínimo, m	Diâmetro comercial, m	Custo total anual, \$	
					Diâmetro ideal	Diâmetro comercial
Nominal	20	1,31	2,13	2,25	179345,75	181245,86
Multiperíodo	20	-	2,35	2,50	188815,49	191523,54

Fonte: própria autora, 2016.

6 CONCLUSÕES

No presente trabalho foi desenvolvido um projeto ótimo de colunas de destilação sujeito a incertezas na vazão e na composição da alimentação da coluna. Tal projeto foi considerado operacionalmente eficiente, uma vez que contemplou o menor custo total anual, que considera o custo de investimento dos equipamentos e o custo de operação dos mesmos, e foi capaz de garantir a operabilidade da coluna em toda a faixa predeterminada de incerteza.

A obtenção do projeto ótimo foi possível através da otimização das condições operacionais da coluna e da sua dimensão, de modo que a seleção da condição ótima foi realizada por aquela que atribuísse o menor custo ao projeto. O projeto foi realizado com o auxílio do simulador de processos *ChemSep*, onde foi feita a validação da metodologia adotada e as demais simulações necessárias. Utilizou-se como estudo de caso a destilação de uma mistura binária de benzeno e tolueno.

Inicialmente, obteve-se um projeto ótimo para uma condição nominal fixa, através das simulações e de estimativas para os custos de investimento e operacionais. A partir desse projeto, foi possível caracterizar as principais incertezas associadas à ele e investigar o impacto delas sobre o custo total do projeto de colunas de destilação.

Para a análise da incerteza sobre o projeto formulou-se um problema multicenário, onde cada cenário representava uma nova condição operacional. Para a solução deste problema, uma metodologia em dois estágios foi adotada, onde no primeiro estágio foram escolhidas as variáveis de projeto e no segundo foram feitos

ajustes nas variáveis operacionais a fim de que fosse possível garantir a operação na nova condição. Os cenários críticos de operação foram identificados e uma combinação entre eles e o projeto nominal foi feita a título de obter um novo projeto ótimo, desta vez capaz de operar em situações de incerteza.

É possível concluir que o projeto ótimo considerando incertezas conhecidas na vazão e na alimentação altera a configuração da coluna quando comparado com o projeto para uma única condição nominal. Visto que a configuração da coluna está diretamente ligada ao custo de investimento na mesma, tem-se um aumento do custo nessa nova condição. No entanto, garante-se o atingimento das especificações e a operabilidade do equipamento quando sujeito a essas variabilidades, evitando prejuízos decorrentes do não atendimento destes.

Salienta-se que a estimativa dos custos operacionais para as condições multiperíodo equivale a uma média entre os cenários individuais (nominal e críticos), como as condições de incerteza são eventuais, a tendência é que o custo operacional seja menor do que o estimado na maior parte do tempo de operação, aumentando ainda mais a viabilidade desse projeto.

Uma proposta para a continuidade deste trabalho é a sua extensão para outras misturas binárias, a fim de verificar se a previsão dos cenários críticos se mantém. Seria interessante considerar misturas de comportamento não ideal. Outra proposta é a expansão da metodologia para misturas multicomponentes e estudos de casos industriais onde, através dos dados históricos da planta, é possível estimar uma faixa real de incerteza. E, por fim, estender as incertezas para outras variáveis como temperatura e pressão da alimentação da coluna.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

BARTTFELD, M.; AGUIRRE, P. A.; GROSSMANN, I. E. Alternative representations and formulations for the economic optimization of multicomponent distillation columns. **Computers and Chemical Engineering**, v. 27, n. 3, p. 363–383, 2003.

BIEGLER, L. T.; GROSSMANN, I. E.; WESTERBERG, A. W. **Systematic methods of chemical process design**. [s.l.] Prentice Hall International Series in the Physical and Chemical Engineering Sciences, 1997.

CABALLERO, J. A.; REYES-LABARTA, J. A.; GROSSMANN, I. E. Synthesis of integrated distillation systems. **Computer Aided Chemical Engineering**, v. 14, n. C, p. 59–64, 2003.

DRLJO, A. et al. Predicting minimum energy conditions for a distillation column by design of experiments and process simulation. **Chemical Engineering Transactions**, v. 29, n. 3, p. 325–330, 2012.

EDGAR, T. F.; HIMMELBLAU, D. M.; LASDON, L. S. **Optimization of chemical processes**. 2. ed. [s.l.] McGraw-Hill, 2001.

ESCOBAR, M. A. **Síntese Simultânea de Redes de Trocadores de Calor com considerações Operacionais: Flexibilidade e Controlabilidade**. Porto Alegre, Brasil: Tese (Doutorado em Engenharia Química) - Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2011.

FLORINDO, S. M. DOS S. S. **Simulação de colunas de destilação de elevada eficiência energética**. Lisboa, Portugal: Dissertação (Mestrado em Engenharia Química e Biológica) - Instituto Superior de Engenharia de Lisboa, 2012.

GROSSMANN, I. E.; CALFA, B. A.; GARCIA-HERREROS, P. Evolution of concepts and models for quantifying resiliency and flexibility of chemical processes. **Computers and Chemical Engineering**, v. 70, p. 22–34, 2014.

GROSSMANN, I. E.; FLOUDAS, C. A. Active Constraint Strategy for Flexibility analysis in chemical processes. **Computers and Chemical Engineering**, v. 11, p. 675–693, 1987.

HALEMANE, K. P.; GROSSMANN, I. E. Optimal process design under uncertainty. **AIChE Journal**, v. 29, n. 3, p. 425–433, 1983.

KAMATH, R. S.; GROSSMANN, I. E.; BIEGLER, L. T. Aggregate models based on improved group methods for simulation and optimization of distillation systems. **Computers and Chemical Engineering**, v. 34, n. 8, p. 1312–1319, 2010.

KISTER, H. Z. **Distillation Design**. [s.l.] McGraw-Hill, 1992.

KOOIJMAN, H. A.; TAYLOR, R. **The ChemSep Book**. 2. ed. [s.l.: s.n.].

LISTIK, E.; FRANCHI, M. G. DA S. **Design, dimensionamento e análise econômica de um sistema de separação para mistura BTX oriunda da reforma catalítica da nafta**. São Paulo, Brasil: Relatório final (Bacharel em Engenharia Química) - Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, 2014.

MCCABE, W. L.; SMITH, J. C.; HARRIOTT, P. **Operations of Chemical Engineering**. 5. ed. [s.l.] McGraw-Hill, 1993.

PERLINGEIRO, C. A. G. **Engenharia de processos: análise, simulação, otimização e síntese de processos químicos**. São Paulo: Edgard Blücher Ltda., 2005.

PETERS, M. S.; TIMMERHAUS, K. D. **Plant Design and Economics for Chemical Engineers**. 4. ed. [s.l.] McGraw-Hill, 1991.

PIOTROWIEZ, L. E. B.; SECCHI, A. R. Estimativa de custos de equipamentos. **Oktober Fórum UFRGS**, 2005.

SARGENT, R. W. H.; GAMINIBANDARA, K. **Optimal Design of Plate Distillation Columns. Optimization in Action**. New York: Academic Press, 1976.

SEADER, J. D.; HENLEY, E. J. **Separation Process Principles**. 2. ed. [s.l.] John Wiley & Sons, 2006.

STEIMEL, J.; ENGELL, S. Conceptual design and optimization of chemical processes under uncertainty by two-stage programming. **Computers and Chemical Engineering**, v. 81, p. 200–217, 2015.

TURTON, R. et al. **Analysis, Synthesis, and Design of Chemical Processes**. 4. ed. [s.l.] Pearson Education, 2012.

VISWANATHAN, J.; GROSSMANN, I. E. A combined penalty function outer-approximation method MINLP optimization. **Computers Chem. Engng.**, v. 14, n. 7, p. 769–782, 1990.

VISWANATHAN, J.; GROSSMANN, I. E. An alternate MINLP model for finding the number of trays required for a specified separation objective. **Computers and Chemical Engineering**, v. 17, n. 9, p. 949–955, 1993.

YEOMANS, H.; GROSSMANN, I. E. Nonlinear disjunctive programming models for the synthesis of heat integrated distillation sequences. **Computers and Chemical Engineering**, v. 23, n. 9, p. 1135–1151, 1999.

YEOMANS, H.; GROSSMANN, I. E. Disjunctive programming models for the optimal design of distillation columns and separation sequences. **Industrial and Engineering Chemistry Research**, v. 39, n. 6, p. 1637–1648, 2000.

ZOU, X. et al. Optimal design of complex distillation system for multicomponent zeotropic separations. **Chemical Engineering Science**, v. 75, p. 133–143, 2012.