

OTIMIZAÇÃO EM ESTADO ESTACIONÁRIO DE UM PROCESSO NÃO-LINEAR:  
O CASO DE UMA COLUNA DE DESTILAÇÃO

Francisco José Gomes

CETEC  
C.P. 2306  
Belo Horizonte - MG

Akebo Yamakami

FEE - DT - UNICAMP  
C.P. 6101  
Campinas - SP

Resumo

Colunas de destilação são equipamentos de alto consumo energético. Em épocas de energia abundante e barata a tendência usual era de se operar com máximo refluxo garantindo, desta forma, que os produtos obtidos estariam sem pre conforme as especificações exigidas pelo mercado. Quando, porém, o custo energético torna-se significativo é necessário determinar um ponto ótimo de operação que, efetuando um compromisso entre o retorno obtido e os custos/perdas existentes no processo maximize seu lucro. O presente trabalho, utilizando técnicas de programação não linear, apresenta a implementação de um algoritmo que, minimizando as perdas/custos do processo, possibilita a obtenção de um ponto ótimo de operação.

Steady State Optimization of a Non-Linear Process: A Distillation Column Case.

Abstract

Distillation columns are equipments of high energy consumption. The basic operating philosophy, when the energy was cheap, was to maximize reflux for fulfilling the market specifications applicable to final products, but the energy shortage has changed drastically this procedure. The necessity now is the determination of an optimum operating point where the process profit can be maximized. This maximization generally relies on the trade-off between return value and utility costs. This paper deals with the implementation of a non-linear programming algorithm that, minimizing the utilities cost, establishes the optimum operating point.

Keywords : Non-linear Programming ; Distillation Column ; Minimization ; Optimization ; Steady State ; Mathematical Programming.

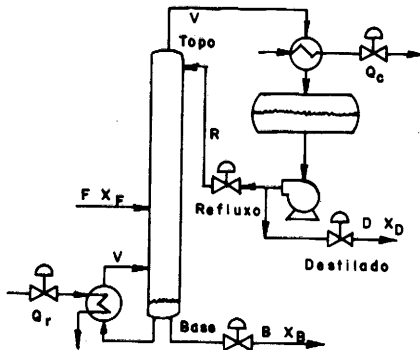
1. INTRODUÇÃO

A função primordial de uma coluna de destilação é separar dois ou mais compostos entre si até um nível de pureza ditado pelas especificações de mercado. Estas especificações podem incidir sobre o produto retirado do topo da coluna, na base ou sobre ambos. A pureza final dos compostos obtidos, vista sob o enfoque da engenharia de controle, é função basicamente dos dois balanços aplicáveis à coluna: balanço de massa e balanço energético (Nisenfeld e Seeman, 1981). Sua manipulação, através das variáveis independentes existentes no processo permite não só alterar a composição dos produtos obtidos mas também possibilita a busca de um estado de operação que, analisado sob determinado critério possa ser considerado ótimo. Um estado ótimo é aquele que, em última análise, permite maximizar os lucros obtidos no processo e pode ser expresso, p. ex., sob a forma de minimização de uma função que forneça as perdas/

custo existentes ou maximização de uma função que expresse o retorno monetário obtido pelo processo.

Para maior facilidade no entendimento dos termos e análises efetuadas ao longo deste trabalho apresentamos uma explicação extremamente sucinta da operação de uma coluna de destilação binária convencional (fig. 1). Mediante o fornecimento de determinada quantidade de energia -  $Q_r$  - à base da coluna são gerados vapores, os quais passando através de diversos estágio de contato alcançam o topo de coluna, onde são condensados, total ou parcialmente. Parte do material condensado, no qual consta uma fração  $x_D$  do componente mais leve, é retirado como destilado - D - e parte retorna ao interior da coluna na forma de refluxo líquido - R -. A alimentação F, contendo uma fração  $x_F$  do componente mais volátil é inserida no estágio

de alimentação, situado geralmente em um ponto médio da coluna. Parte do material é retirado através da vazão na base - B -, na qual consta uma fração  $x_B$  do componente mais volátil.



- V = vazão total de vapor no topo da coluna, t/dia.
- R = vazão de refluxo, t/dia.
- F = vazão da alimentação, t/dia.
- D = vazão do destilado, t/dia.
- B = vazão na base, t/dia.
- $Q_c$  = energia retirada no condensador, Mcal/dia.
- $Q_r$  = energia fornecida no reator, Mcal/dia.
- $x_D$  = fração em peso do componente leve no destilado.
- $x_B$  = fração em peso do componente leve na base.
- $x_F$  = fração em peso do componente leve na alimentação.

Fig. 1 - Coluna de destilação típica.

O presente trabalho mostra como é possível, através da correta manipulação das variáveis independentes do processo, alcançar um estado de operação que maximize seus ganhos. Para isto, procurou-se, inicialmente, estabelecer a função objetivo apropriada, de finir então as condições que possibilitam a aplicação de uma política de otimização e, finalmente a implementação de um algoritmo apropriado à solução do problema.

## 2. ESCOLHA DA FUNÇÃO OBJETIVO

A primeira providência para implementação de uma política de otimização é determinar a função objetivo aplicável à situação em questão. Uma função objetivo expressa um determinado critério que se busca otimizar, seja no sentido de maximização ou minimização e que se encontra sujeito, geralmente, à determinadas restrições operacionais: de projeto, operacionais e mercado. Entre os diversos critérios que podem balizar o estabelecimento de uma função objetivo existem dois bastante utilizados: a minimização dos custos e/ou perdas e a maximização dos ganhos (Shinsky, 1984; Martin, Latour e Richard, 1981).

Para o caso específico do processo em questão as duas situações acima citadas podem ser representadas pelas seguintes funções objetivo:

### 2.1 - Minimização dos custos e/ou perdas

Uma função objetivo que minimize as perdas/custo decorrentes da operação de uma coluna adiabática pode ser expressa por

$$F_0 = (D/F) \sum_i x_p(i) \Delta v_p(i) + (B/F) \sum_j x_B(j) \Delta v_\ell(j) + (H_D/F) (c_1 + c_2) (R+D) \quad (1)$$

onde:

- $F_0$  = função que expressa os custos/perdas do processo por unidade de alimentação, \$/t.
- $x_p(i)$  = fração do componente pesado i com valor econômico presente no topo.
- $\Delta v_p(i)$  = custo diferencial do i-ésimo componente pesado entre base e topo, \$/t.
- $x_B(j)$  = fração do componente leve j com valor econômico presente na base.
- $\Delta v_\ell(j)$  = custo diferencial do j-ésimo componente leve entre topo e base, \$/t.
- $H_D$  = calor latente do destilado, Mcal/t.
- $c_1$  = custo do aquecimento, \$/Mcal.
- $c_2$  = custo da refrigeração, \$/Mcal.

A função objetivo expressa as perdas existentes na base e no topo mais o custo energético necessário à geração dos produtos finais associados ao estado operacional em questão. É bom lembrar que os balanços de massa e energia de uma coluna são sempre expressos na forma D/F e V/F, sendo portanto de grande conveniência a expressão da função objetivo por unidade de alimentação. Além disto, a expressão da função objetivo por unidade de alimentação a torna independente de alterações nesta variável, que podem advir de mudanças ditadas por questões de mercado ou necessidades operacionais impostas pelo restante da planta onde a coluna se localiza.

### 2.2 - Maximização dos ganhos

Uma função objetivo para esta situação pode ser representada por

$$F_0 = \sum_i P(i)v(i) - \sum_j F(j)v_f(j) - \sum_n Q(n)c(n) \quad (2)$$

onde:

- $F_0$  = função que expressa o ganho total do processo, \$/dia.
- $P(i)$  = i-ésimo produto com valor econômico fornecido pelo processo, t/dia.
- $v(i)$  = valor econômico associado ao i-ésimo produto gerado pelo processo, \$/t.
- $F(j)$  = j-ésimo componente alimentado ao processo, t/dia.
- $v_f(j)$  = custo associado ao j-ésimo componente da alimentação, \$/t.
- $Q(n)$  = n-ésimo fluxo energético entregue ou retirado do processo, Mcal/dia.
- $c(n)$  = Custo associado ao n-ésimo fluxo

energético, \$ Mcal.

Esta função fornece a diferença entre os ganhos advindos da operação da coluna e os custos necessários à sua obtenção. É necessário então definir qual a função que melhor se ajusta às características do processo.

A forma mais genérica assumida pela função de maximização faz com que a mesma seja mais indicada para otimização de sub-unidade abrangendo equipamentos diversos (uma ou mais colunas, reatores, compressores, etc.) operando interligados, visto utilizar os fluxos totais (energia e massa) do processo. A função de minimização, por sua vez, se revela mais adequada à otimização de uma unidade isolada pois é expressa explicitamente em função das variáveis de uma coluna, bem como dos balanços aplicáveis. Além disto, uma análise da opção de controle mais apropriada (regulação ou otimização) conforme mostrado a seguir, fica facilitada pelo uso da função de minimização. Utilizaremos, portanto, neste trabalho, como função objetivo a equação (1).

O estabelecimento da função objetivo possibilita, através da análise de seus termos, definir as condições que decidirão sobre a política de controle mais adequada à cada caso: regulação ou otimização (Latour, 1978). Uma coluna de destilação é um processo complexo e uma análise de caráter geral pode se revelar bastante problemática. Contudo, em primeira aproximação, o problema pode ser visualizado pela análise dos valores diferenciais constantes da função objetivo:

Valor dos Produtos	Mínimo de FO
Caso número 1:	
$\sum_i v_p(i) < 0$	$\max D, \max \sum_i x_p(i)$
$\sum_j v_l(j) > 0$	$\min B, \min \sum_j x_B(j)$
. Caso número 2:	
$\sum_j v_l(j) < 0$	$\max B, \max \sum_j x_B(j)$
$\sum_i v_p(i) > 0$	$\min D, \min \sum_i x_p(i)$
. Caso número 3:	
$\sum_i v_p(i) > 0$	???
$\sum_j v_l(j) > 0$	

No primeiro caso a fração pesada total é mais valiosa no topo que na base e a melhor política a adotar é uma malha regulatória que maximize o conteúdo de impurezas pesadas no destilado, respeitando as especificações aplicáveis ao produto. No segundo caso a situação se inverte e a fração leve total é mais valiosa na base que no topo, sendo então recomendável uma política regulatória que a maximize na base, até o nível permitido pelas especificações. Situações como estas descritas recomendam, geralmente,

uma maximização do fator de recuperação da coluna, mas uma decisão definitiva sobre a melhor opção deverá levar em conta suas reais condições operacionais (especificações aplicáveis aos produtos gerados e penalidades pela sua violação, p. ex.). Exemplos destes casos podem ser encontrados, entre outras, nas referências (5) (Latour, 1978), (6) (Martin, G.D., et al, 1981) e (8) (Shinsky, 1984). É evidente, nestes dois casos analisados, que os valores de R, Q<sub>r</sub> e Q<sub>c</sub> deverão ser os mínimos necessários para efetuar a separação dos compostos conforme as especificações à que devem satisfazer. O caso número 3 se revela o mais interessante pois a fração leve é mais valiosa no topo e a fração pesada mais valiosa na base, respeitadas as tolerâncias existentes para os produtos. Neste caso os termos diferenciais correspondentes são positivos e nada se pode afirmar, a priori, sob o ponto de mínimo da função. É necessário a adoção de uma política de otimização para determinação do ponto ótimo de operação. Há de se ressaltar, contudo, que para uma coluna multicomponente a avaliação correta dos diversos valores diferenciais pode ser problemática, ainda mais se considerarmos que os produtos por ela gerados normalmente vão alimentar outros processos. Uma política de otimização, portanto, pode ser mais eficientemente utilizado em colunas separando misturas constituídas de dois ou três compostos que apresentem interesse econômico.

### 3. EQUACIONAMENTO DO PROBLEMA

A otimização de um processo real, ao buscar um ponto que minimize ou maximize a função objetivo escolhida, envolve necessariamente a satisfação das restrições que incidem sobre o mesmo e que são, geralmente, de três tipos: operacionais, de projeto e de mercado. O primeiro conjunto é geralmente de igualdades enquanto os dois últimos envolvem desigualdades. Estes três conjuntos são apresentados a seguir.

#### 3.1 - Restrições Operacionais

São aquelas que expressam o interrelacionamento entre as diversas variáveis existentes no processo. No caso de uma coluna de destilação ela é expressa por um balanço de massa, um balanço energético e relações de soma e equilíbrio (Holand, 1963). Os símbolos utilizados estão definidos no final do artigo. Estas relações são expressas matematicamente por:

$$y_{j,i} = K_{j,i} x_{j,i} \quad (1 \leq i \leq c) \quad (0 \leq j \leq N+1)$$

$$\sum_{i=1}^c x_{j,i} = 1, \quad \sum_{i=1}^c y_{j,i} = 1 \quad (0 \leq j \leq N+1)$$

$$V_{j+1} y_{j+1,i} = L_j x_{j,i} + DX_{D,i} \quad (1 \leq i \leq c) \quad (0 \leq j \leq f-2)$$

$$V_f y_{f,i} + V_F y_{F,i} = L_{f-1} x_{f-1,i} + DX_{D,i} \quad (1 \leq i \leq c)$$

$$V_{j+1} y_{j+1,i} = L_j x_{j,i} - Bx_{B,i} \quad (1 \leq i \leq c)$$

$$FX_i = DX_{D,i} + Bx_{B,i} \quad (1 \leq i \leq c)$$

$$V_{j+1} H_{j+1} = L_j h_j + DH_D + Q_c \quad (0 \leq j \leq f-2)$$

$$V_f H_f + V_F H_F = L_{f-1} h_{f-1} + DH_D + Q_c$$

$$V_{j+1} H_{j+1} = L_j h_j - Bh_B + Q_r \quad (f \leq j \leq N)$$

$$FH = Bh_B + DH_D + Q_c - Q_r$$

Estas relações expressam a condição de equilíbrio estacionário do processo e formam um conjunto de restrições ativas. É importante ressaltar que o coeficiente de distribuição entre fases,  $K_{j,i}$ , é uma função não linear, o que significa a existência de não linearidades nas restrições (ver Apêndice).

### 3.2 - Restrições de projeto

São aquelas que definem os valores máximos e mínimos permitidos para os fluxos de massa e energia existentes no processo. São sempre restrições de desigualdades restritas que limitam, superior e inferiormente, os valores das variáveis  $Q_r$ ,  $Q_c$ ,  $R$ ,  $D$ ,  $B$  e  $F$ .

Existem neste conjunto duas variáveis que podem ser ignoradas como restrições de desigualdade:  $B$  e  $F$ . A vazão na base,  $B$ , está sempre determinada através do balanço de massa total da coluna e portanto está implícita nas restrições de igualdade do problema. A vazão da alimentação,  $F$ , geralmente procede de outro processo e pode ser suposta uma variável fora do alcance do operador.

### 3.3 - Restrições de mercado

São as restrições impostas pelo mercado aos produtos finais obtidos pela coluna, ou seja, os teores máximos e mínimos de impurezas permitidos para os produtos obtidos. São também restrições de desigualdades restritas que se expressam por

$$x_{B \min,i} \leq x_{B,i} \leq x_{B \max,i}$$

$$x_{p \min,i} \leq x_{D,i} \leq x_{p \max,i}$$

Definida a função objetivo bem como as restrições às quais ela se sujeita o problema, em sua formulação final, pode ser descrita pela seguinte expressão (problema P1):

Minimizar

$$F_0 = (D/F) \sum_i x_p(i) \Delta v_p(i) + (B/F) \sum_j x_b(j) \Delta v_b(j) + (H_D/F) (c_1 + c_2) (R+D)$$

$$\text{s.a.} \quad \begin{aligned} g_1(z) &= 0 \\ g_2(z) &\leq 0 \end{aligned}$$

$$g_3(z) \leq 0$$

onde

$g_1(z) = 0$  representa o conjunto de restrições operacionais

$g_2(z) \leq 0$  representa o conjunto de restrições de projeto

$g_3(z) \leq 0$  representa o conjunto de restrições de mercado

## 4. TÉCNICA DE SOLUÇÃO

O problema acima representa algumas especificidades que devem ser analisadas para a definição da estratégia correta de solução do mesmo:

- embora altamente estruturado, o problema é de dimensão razoável, com elevado número de variáveis em suas restrições
- existe um problema adicional de não linearidades nas restrições através do coeficiente de separação entre fases, fato este que funciona como um elemento de aumento de complexidade para sua solução
- a maior parte das variáveis só aparece de forma implícita na função objetivo, o que inviabiliza o cálculo de seu gradiente

Estes fatores enumerados não recomendam as técnicas usuais de solução nas quais se utilize como direção de caminhada o gradiente da função objetivo, quer diretamente ou projetado nas restrições. Um método alternativo, contudo, pode ser implementado se atendermos para o fato de que o conjunto de restrições operacionais deve permanecer sempre ativo, garantindo a condição de equilíbrio estacionário do processo e que, além disto, as variáveis deste conjunto guardam entre si relações específicas bem definidas. Pode-se, portanto, reescrever o problema P1 na forma:

$$\text{Min} \quad (D/F) \sum_i x_p(i) \Delta v_p(i) + (B/F) \sum_j x_b(j) \Delta v_b(j) + (H_D/F) (c_1 + c_2) (R+D)$$

$$\text{s.a.} \quad \begin{aligned} g_2(z) &\leq 0 \\ g_3(z) &\leq 0 \end{aligned}$$

uma vez que se garanta sempre que as restrições de igualdade estarão ativas para todos os pontos do problema. Pode-se, desta maneira desmembrar o problema original P1 em dois sub-problemas consistindo de

- minimização da função objetivo sujeita às restrições de desigualdade impostas por condições de projeto e de mercado
- satisfação do conjunto de restrições ativas representadas por condições operacionais do processo, para todos os pontos que satisfaçam às restrições de desigualdades.

A estrutura básica do algoritmo implementado segue as seguintes etapas: as variáveis sujeitas às restrições de desigualdades são divididas em dois sub-conjuntos:  $z_1$ ,  $\forall i \in M$ ,

onde  $M$  é o conjunto dos índices das variáveis independentes e  $z_j$ ,  $\forall j \in A$ , onde  $A$  é o conjunto de índices das variáveis dependentes do processo. Para a  $k$ -ésima iteração, as variáveis  $z_i$  são atualizadas segundo um algoritmo específico (item 4.1) e, a seguir, para cada ponto factível, as variáveis dependentes  $z_j$  são calculadas mediante satisfação das restrições de igualdade (item 4.2). Como a geometria da coluna, o tipo de condensador e a alimentação são especificados, existem no problema  $(N+2)(2c+3) + 3$  variáveis para um total de  $(N+2)(2c+3)$  equações, onde  $N$  é o número de estágios e  $c$  o número de compostos, o que fornece três graus de liberdade ao sistema. Foram escolhidas portanto como variáveis independentes o refluxo  $R$ , a vazão do destilado  $D$  e a pressão da coluna  $P$ .

#### 4.1 - Atualização das variáveis sujeita às restrições de desigualdades

Sua atualização é feita segundo as etapas do método de Hooke & Jeeves (Bazarra e Shetty, 1979) para otimização irrestrita, adaptado às especificidades do presente problema. Seja  $z_i^k$  o valor da variável  $z_i$  na  $k$ -ésima iteração:

- 1) definido o critério de parada e um ponto inicial  $z^k$ , determina-se um conjunto de direções de caminhada  $d_i$ ,  $\forall i \in M$  tal que  $C \cdot I$ , onde  $C$  é a matriz cujas linhas são os vetores direção e  $I$  é a identidade. Seja  $w_i = z_i^k$ ,  $\forall i \in M$ .
- 2) encontrar um tamanho de passo ótimo  $U_i^*$  que resolve o sub-problema
 
$$\min F_0(w_i^k + U_i d_i \lambda_i), \quad \forall i \in M$$
 s.a  $U^* \in R$ ,  $w_i \in S$ 
 onde  $S$  é o conjunto factível e  $\lambda_i$  é dado por (Westerberg e Debrosse, 1979):
 
$$\lambda_i = r_i / \|r_i\|_2$$
 onde  $r_i$  é o multiplicador de Lagrange associado à  $i$ -ésima restrição do vetor de controle no ponto considerado (Gill e Murray, 1979).
- 3) faça  $z^{k+1} = \underline{w}$ . Avalie a função objetivo. Caso o critério de parada seja satisfeito, o problema convergiu. Caso contrário prossiga.
- 4) definir um novo vetor de direções  $\underline{d}$ , tais que  $\underline{d} = z^{k+1} - z^k$ . Encontre um  $U^*$  que resolve
 
$$\min F_0(z^{k+1} + U^* \underline{d})$$
 s.a  $U^* \in R$ ,  $z^{k+1} \in S$ 
 Faça  $\underline{w} = z^{k+1} + U^* \underline{d}$  e retorne ao passo 2.

A determinação de  $U^*$  foi efetuada utilizando-se a seqüência de Fibonacci e o algoritmo específico (item 4.2) para atualização das variáveis dependentes. Para garan-

tir que  $z_i^k \in S$ , utilizou-se a técnica de penalização das variáveis associadas às restrições violadas.

#### 4.2 - Satisfação das restrições de igualdades

A técnica de solução utilizada consistiu em um processo iterativo no qual a temperatura (variável implícita) é utilizada como variável independente (método Thiele-Geddes), assegurando-se a convergência através do método  $\theta$  (Holand, 1963);

- 1) Inicializar o algoritmo com os perfis de temperatura e vazões  $T_j$ ,  $L_j$  e  $V_j$ ,  $j = 0, \dots, N+1$  (obtidos a partir das condições operacionais da coluna, e/ou um balanço de massa suscinto) e para os valores das variáveis independentes atualizados.
- 2) Calcular as vazões parciais para cada componente  $i$ , expressos por  $v_{j,i} = V_j y_{j,i}$  e  $l_{j,i} = L_j x_{j,i}$ . Calcule  $x_{j,i}$ .
- 3) Utilizando as vazões parciais, encontre  $\theta > 0$  que satisfaz  $g(\theta) = 0$ , onde  $g(\theta)$  expressa o balanço de massa no topo da coluna. Atualize, usando  $\theta$  como fator de ponderação, as frações molares  $x_{j,i}$ ,  $i=1, \dots, c$  e  $j=0, N+1$ .
- 4) Use  $x_{j,i}$  para cálculo de base de separação

$K_{j,b}$  dada por

$$K_{j,b} = 1 / \prod_{i=1}^c \alpha_{j,i} \cdot x_{j,i} \quad \text{onde } \alpha_{j,i} \text{ é a vo}$$

latilidade relativa do componente  $i$  no estágio  $j$  calculada para  $T_j$  na iteração  $k$ . Utilizando  $K_{j,b}$  calcule o novo gradiente de temperatura  $T_j$  e, mediante os balanços energéticos e de massa, as novas vazões  $V_j$  e  $L_j$ . Se não convergiu, volte ao passo 2.

Quando o algoritmo converge obtêm-se as variáveis dependentes do problema  $P_1$  que satisfazem as restrições de igualdade para os valores atualizados das variáveis independentes.

#### 5. RESULTADOS OBTIDOS

O algoritmo foi utilizado para o estudo de uma coluna de destilação binária, alimentada com uma mistura de .80 molar de  $\text{SiHCl}_3$  e 0.2 molar de  $\text{SiCl}_4$ , a vazão de 10000 moles/hora, 27 estágios, com as especificações de 2,5% e 3% máximo de impurezas para o topo e para a base. Os valores monetários utilizados foram de 60. \$/Mcal para o custo combinado de aquecimento e refrigeração, 100. \$/Mol para a fração leve e 80. \$/Mol (máximos) para a pesada (Cetec, 1985), caindo proporcionalmente ao conteúdo de impurezas. A coluna foi colocada em operação num ponto de baixa taxa de refluxo e aplicou-se o algoritmo ao problema:

Estado	R/D	D/F	$x_D$	$(1-x_B)$	$F_0$ (\$/mol)
Inicial	1.025	.8000	99.35	97.34	.8720
Final	1.210	.8007	99.73	99.19	.7054

O novo estado obtido aumentou a taxa de refluxo, a taxa de recuperação, com o consumo energético variando de 100.73 para 109.96 Mcal/h no refulvedor e de 100.20 para 109.36 Mcal/h no condensador. O novo estado, embora com maior consumo energético, propiciou melhor distribuição das impurezas entre o topo e a base, com um decréscimo na função objetivo de .1666\$/mol, que significa um ganho adicional diário da ordem de 40.000\$, equiva- lente a 667 Mcal.

Partiu-se então de um ponto de maior consumo energético com modificação na taxa de refluxo, aumentado conseqüentemente a pureza final dos produtos obtidos, com os demais valores inalterados:

Estado	R/D	D/F	$x_D$	$(1-x_B)$	$F_0$ (\$/mol)
Inicial	2.000	.8000	99.97	99.87	.8912
Final	1.206	.8008	99.72	99.21	.7051

O processo converge para o mesmo ótimo anterior, a menos das tolerâncias. Os ganhos obtidos são superiores aos obtidos no caso anterior e mostram-se que, para esta coluna, a componente devida ao custo energético não permite a política de refluxo máximo.

Estudou-se então a influência de perturbações no ponto ótimo, ilustrado através de modificações no custo energético e na fração de alimentação, alteradas para 80.\$/Mcal e .65, respectivamente:

Estado	R/D	D/F	$x_D$	$(1-x_B)$	$F_0$ (\$/mol)
Inicial	1.2105	.8007	99.73	99.19	.9243
Final	1.1703	.8011	99.67	99.67	.9201

O algoritmo responde eficientemente à pequenas variações, ainda que o novo ótimo seja bem próximo ao anterior.

Diversos casos adicionais foram estudados e a resposta do algoritmo satisfaz plenamente em todos. O fatos dos ganhos devidos a perturbações no retorno do ótimo não serem tão expressivos será analisado nas conclusões feitas a seguir.

## 6. CONCLUSÕES FINAIS

Através dos diversos casos estudados e dos resultados obtidos foi possível tirar diversas conclusões relativas não só quanto ao desempenho do algoritmo como também do comportamento da coluna analisada:

- 1) O algoritmo montado se revelou perfeitamente adequado às finalidades propostas. Sua resposta satisfaz plenamente, tanto para grandes como para pequenas perturbações no processo. No tocante à convergência, o método das coordenadas cíclicas apresenta um problema de avanço lento à medida que se aproxima do ótimo razão pela qual torna-se necessário efetuar uma política de compromisso entre tolerância, tamanho do passo e velocidade de convergência. Após devidamente ajustada, contudo para a coluna analisada, converge em 4 ou 5 iterações com tempo médio total da ordem de 7 minutos num PC-XT, consideran-

do-se os três graus de liberdade mencionados. Se uma ou duas destas variáveis estiverem fixas este tempo é reduzido de praticamente uma ordem de grandeza.

- 2) Como analisado anteriormente, (item 2) em determinadas situações é preferível regular que otimizar. E mesmo quando a política recomendada é a otimização, determinadas colunas apresentam respostas mais satisfatórias que outras, entre as quais se incluem aquelas com alta taxa de refluxo, baixa volatilidade relativa, fração leve de alimentação não próxima de .05 e alto custo diferencial dos produtos (Martín, D.G. et al., 1981). O algoritmo confirma que, quando estas condições não são preenchidas, os ganhos advindos da otimização nem sempre são tão significativos. Isto fica evidente no caso estudado onde a função objetivo possui curvas de nível bastante espedadas e os ganhos conseguidos devido a perturbações perto do ótimo não são tão expressivos.
- 3) O exemplo escolhido inicialmente se revela extremamente interessante, pois mostra que um ótimo pode se localizar numa região totalmente oposta ao que aparenta à primeira vista. O estado inicial de operação da coluna parecia, em análise preliminar, se situar nas imediações de um ótimo, pois o consumo energético foi reduzido ao mínimo, o destilado, composto mais nobre que represente 80% da produção, teve seu valor incrementado mediante aumento da pureza e manteve-se o produto da base dentro das especificações evitando-se o aparecimento de qualquer rejeito. Verifica-se, contudo, que este estado se caracteriza por elevado índice de perdas, a função objetivo tem um alto valor e o mesmo se situa bastante distante do ótimo em contrado.

## APÊNDICE: O fator de distribuição entre fases

As relações de equilíbrio termodinâmico entre as fases de um sistema podem ser convenientemente expressas, para o  $i$ -ésimo componente, por

$$y_i = K_i \cdot x_i \quad (1)$$

onde  $K_i$  é o coeficiente de distribuição entre fases,  $x_i$  e  $y_i$  são as frações molares líquidas em fase líquida e vapor, respectivamente. Sabe-se, empiricamente, que este coeficiente é uma função não linear da temperatura, pressão, composição e concentração do sistema. Valores tabelados de  $K$ , para sistemas de interesse comercial, podem ser facilmente obtidos em publicações especializadas.

Se o sistema em estudo é considerado ideal pode-se supor que

$$K_i = \frac{P_i^0}{P} \quad (2)$$

onde  $P_i^0$  é a pressão de vapor para o  $i$ -ésimo componente puro e  $P$  a pressão do sistema. Desvios da situação de não-idealidade podem ser satisfatoriamente expressos por

$$K_i = \frac{\gamma_i P_i^o}{v_i P} \quad (3)$$

onde  $\gamma_i$  e  $v_i$  são os coeficientes de atividade e fugacidade.

No presente trabalho utilizou-se a fórmula (3) com o coeficiente de atividade  $\gamma_i$  sendo expressa pela equação de Van Laar, a pressão  $P_i^o$  pela equação de Antoine e  $v_i$  considerado unitário, dado a baixa pressão de operação da coluna (1 atm).

#### NOTAÇÃO UTILIZADA

B	= vazão total na base, moles/h
c	= número total de componentes do sistema
D	= vazão total no destilado, moles/h
F	= vazão total de alimentação, moles/h
$h_j$	= entalpia total avaliada à temperatura, pressão e composição do líquido deixando o estágio j, cal/mol
$H_j$	= entalpia total avaliada à temperatura, pressão e composição do vapor deixando o estágio j, cal/mol
H	= entalpia por mole de alimentação, independente do estado, cal/mol
$H_D$	= entalpia total do destilado, independente do estado, cal/mol
$K_{j,i}$	= coeficiente de distribuição entre fases, avaliada à temperatura e pressão do líquido deixando o estágio j
$L_j$	= vazão total do líquido deixando o estágio j, moles/h
N	= número total de estágios
P	= pressão, atm
$Q_C$	= energia retirada do condensador, cal/h
$Q_R$	= energia fornecida ao refeedor, cal/h
R	= vazão total do refluxo, moles/h
$V_j$	= vazão total de vapor deixando o estágio j, moles/h
$x_{j,i}$	= fração molar do componente i no líquido deixando o estágio j
$x_{B,i}$	= fração molar do componente i na base
$X_i$	= fração molar total do componente i na alimentação, independente do estado
$X_{D,i}$	= fração molar total do componente i no destilado, independente do estado
$y_{j,i}$	= fração molar total do componente i no vapor deixando o estágio j

#### ÍNDICES E SUBSCRITOS

i	= número do componente, $1 \leq i \leq c$
j	= número do estágio; j=0 para o acumulador; e j=f para o estágio de alimentação; j=N+1 para o refeedor
F	= variáveis associadas com uma alimentação parcialmente vaporizada

As demais variáveis utilizadas no texto são definidas localmente.

#### BIBLIOGRAFIA

- (1) Bazaraa, S.M. & Shetty, C.M. (1979) - Non linear programming: Theory and Algorithms John Wiley.
- (2) Cetec, "Projeto PQSP", (1985) - Relatório Técnico Final, BH.
- (3) Gill, P.E. & Murray, W. (1979) - "The Computation of Lagrange - Multiplier Estimates for Constrained Minimization", Mathematical Programming, 17, 32-60.
- (4) Holland, C.D. (1963) - Multicomponent Distillation, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, N.J.
- (5) Latour, P.R. (1978) - "Objectives and Strategies for Composition Control of Distillation Columns", Instrumentation Technology, July.
- (6) Martin, G.D., Latour, P.R., Richard, L. A., (1981) - "Closed Loop Optimization of Distillation Energy", CEP September.
- (7) Nisenfeld, Eli. A & Seeman, Richard, C. (1981) - Distillation Columns, ISA Monograph, Instrument Society of America.
- (8) Shinksey, F.G., (1984) - Distillation Control for Productivity and Energy Conservation, McGraw-Hill.
- (9) Westerberg, Arthur, W. & Debrosse, Charles, J. (1973) - "An Optimization Algorithm for Structured Design Systems", AIChE Journal, vol. 19, nº 2, 335.

Agradecimentos à CAPES pelo apoio financeiro.