

**MÁRA LÚCIA FERNANDES CARNEIRO**

**SÍNTESE AUTOMATIZADA DE  
COLUNAS DE DESTILAÇÃO: UMA  
ABORDAGEM ALTERNATIVA AO  
PROCESSO DE PROJETO**

Dissertação apresentada como requisito parcial à  
obtenção do grau de mestre.

Curso de Mestrado em Informática

Instituto de Informática

Pontifícia Universidade Católica do Rio Grande do  
Sul.

Orientador: Prof. Dr. Ney L. Vilar Calazans

PORTO ALEGRE

1996/SETEMBRO

## DADOS INTERNACIONAIS DE CATALOGAÇÃO NA PUBLICAÇÃO (CIP)

C289s	Carneiro, Mára Lúcia Fernandes Síntese Automatizada de Colunas de Destilação: uma abordagem alternativa ao processo de projeto/ Mára Lúcia Fernandes Carneiro. - Porto Alegre, 1996 106f.  Diss.(Mestrado) - Inst. de Informática, PUCRS 1. Engenharia Química - Informática 2. Informática - Síntese Automatizada. 3. Processos Químicos - Otimização 4. Simulação e Modelagem em Computadores I.Título.  CDD 660.2028542 004.11-.16 660.281  CDU 66:681.3 681.3:66.09 66.095
-------	---

### **Bibliotecária Responsável**

Ginamara Lima Jacques Pinto

CRB 10/1204

## **AGRADECIMENTOS**

Ao Prof. Dr. Ney Calazans, que demonstrou no nosso dia-a-dia o significado da palavra orientador. Obrigada pelo apoio nas horas em que os problemas pareciam ser maiores que as minhas forças para superá-los. Obrigada pelo incentivo constante. Obrigada pela confiança.

À Pontifícia Universidade Católica do Rio Grande do Sul, na pessoa do Prof. Dr. Monsenhor Urbano Zilles, Pró-Reitor de Pesquisa e Pós-Graduação, pelo apoio financeiro, e do Prof. Eng. Dulcemar Coelho Lautert, Diretor da Escola Politécnica, pelo estímulo dado aos professores em seu aprimoramento pessoal.

Ao Prof. Doutorando Claudio Frankenberg, meu colega no Departamento de Engenharia Química. Foi contigo que comecei a descobrir o mundo da pesquisa. Obrigada meu amigo.

Aos auxiliares de pesquisa, Paulo César Ramos, Roger Godolphin da Rosa, Lucas Aragão e Marco Antonio Ghidini, pela dedicação e amizade.

Aos amigos que encontrei no Instituto de Informática e que me mostraram uma nova visão do mundo. Vocês me ajudaram a crescer. Obrigada.

Aos meus pais, Fernando e Eneida, que me ensinaram que, com esforço e dedicação, tudo podemos conseguir. Estou tentando colocar isto em prática. Amo vocês.

As minhas manas e “manos” Márcia e Fábio, Marlise e João e ao meu amado Rafael. Obrigada pela força e compreensão.

A Suzana e Simone, obrigada pelo apoio constante.

# SUMÁRIO

<b>AGRADECIMENTOS</b> .....	<b>iii</b>
<b>SUMÁRIO</b> .....	<b>iv</b>
<b>LISTA DE FIGURAS</b> .....	<b>vii</b>
<b>LISTA DE TABELAS</b> .....	<b>ix</b>
<b>RESUMO</b> .....	<b>x</b>
<b>ABSTRACT</b> .....	<b>xii</b>
<b>1. INTRODUÇÃO</b> .....	<b>12</b>
<b>1.1 Processo de projeto baseado em simulação</b> .....	<b>13</b>
<b>1.2 Processo de projeto baseado em síntese</b> .....	<b>17</b>
<b>1.3 Comparação entre simulação e síntese</b> .....	<b>20</b>
1.3.1 Síntese e Simulação em Projeto de Colunas de Destilação .....	22
<b>1.4 Objetivos e escopo do trabalho</b> .....	<b>23</b>
<b>1.5 Organização da dissertação</b> .....	<b>23</b>
<b>2. CONCEITOS E DEFINIÇÕES</b> .....	<b>25</b>
<b>2.1 Definição de problema de otimização</b> .....	<b>25</b>
<b>2.2 Propriedades das funções</b> .....	<b>28</b>
<b>2.3 Projeto de Processos Químicos</b> .....	<b>30</b>
<b>2.4 Processos Químicos de Separação: Destilação</b> .....	<b>31</b>
<b>3. MÉTODOS DE OTIMIZAÇÃO</b> .....	<b>36</b>
<b>3.1 Introdução</b> .....	<b>36</b>
<b>3.2 Procedimento para a solução de problemas de otimização</b> .....	<b>37</b>
<b>3.3 Uma visão sobre métodos de otimização</b> .....	<b>39</b>
3.3.1 Métodos determinísticos.....	40
3.3.2 Métodos Probabilísticos .....	46
<b>3.4 Taxonomia de métodos de otimização</b> .....	<b>53</b>
<b>4. OTIMIZAÇÃO DO PROJETO DE COLUNAS DE DESTILAÇÃO</b> .....	<b>59</b>

<b>4.1 Modelos de projeto para colunas de destilação .....</b>	<b>59</b>
<b>4.2 Critérios de otimização para colunas de destilação.....</b>	<b>61</b>
<b>4.3 Modelos de projeto para colunas de destilação de pratos.....</b>	<b>62</b>
<b>4.4 Formulação das funções objetivo aplicáveis ao projeto de colunas .....</b>	<b>65</b>
4.4.1 Estimando custos .....	65
4.4.2 Atualizando as correlações de custo .....	66
<b>4.5 Estimando custos para colunas de destilação .....</b>	<b>67</b>
4.5.1 Coluna.....	67
4.5.2 Equipamentos auxiliares.....	68
4.5.3 Custo total instalado de uma coluna de destilação .....	70
<b>4.6 Análise da função custo.....</b>	<b>71</b>
<b>5. PROJETO AUTOMATIZADO DE COLUNAS DE DESTILAÇÃO .....</b>	<b>73</b>
<b>5.1 Introdução .....</b>	<b>73</b>
<b>5.2 Métodos de otimização aplicáveis ao problema de projeto de colunas de destilação .....</b>	<b>74</b>
5.2.1 O método de Evolução Estocástica .....	75
<b>5.3 Adaptação do Algoritmo de Evolução Estocástica para otimização do projeto de colunas de destilação .....</b>	<b>78</b>
<b>6. UM PROTÓTIPO DE SINTETIZADOR DE COLUNAS DE DESTILAÇÃO.....</b>	<b>82</b>
<b>6.1 Descrição do protótipo SINCO.....</b>	<b>82</b>
6.1.1 Visão do usuário .....	83
6.1.2 Visão do implementador.....	89
<b>6.2 Estudos de Caso .....</b>	<b>90</b>
6.2.1 Processo de execução do SINCO .....	91
6.2.2 Comparação entre os modelos de projeto do SINCO e HYSIM .....	93
<b>6.3 Experimentos para calibração da ferramenta SINCO .....</b>	<b>96</b>
6.3.1 Avaliação da influência das variáveis de projeto selecionadas sobre a função objetivo .....	96
6.3.2 Parametrização do otimizador .....	99
<b>7. CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS.....</b>	<b>101</b>

**8. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS .....104**

## LISTA DE FIGURAS

Figura 1.1 - Fluxograma de emprego de ferramentas de projeto baseadas em simulação .....	16
Figura 1.2 - Fluxograma de emprego de ferramentas de projeto baseadas em síntese automatizada .....	19
Figura 2.1 - Exemplo de uma função unimodal .....	29
Figura 2.2 - Exemplo de uma função multimodal .....	29
Figura 2.3 - Esquema de uma coluna de pratos .....	33
Figura 2.4 - Esquema de uma coluna recheada .....	34
Figura 3.1 - Etapas da solução de problemas de otimização .....	38
Figura 3.2 - Taxonomia proposta por HILLIER e LIEBERMAN (1988) .....	54
Figura 3.3 - Taxonomia proposta por EDGAR e HIMMELBLAU (1989) .....	55
Figura 3.4 - Taxonomia proposta por GILL et alii (1993) .....	55
Figura 3.5 - Taxonomia proposta por TANOMARU (1995) .....	56
Figura 3.6 - Taxonomia proposta por SHANG e WAH (1996) .....	56
Figura 3.7 - Proposta de nova taxonomia para os métodos de otimização.....	58
Figura 4.1 - Representação esquemática de uma coluna de destilação .....	60
Figura 4.2 - Algoritmo de aplicação das equações do método de Lewis-Sorel para dimensionamento de colunas de destilação .....	65
Figura 4.3 - Representação da função custo aplicada à colunas de destilação.....	72
Figura 4.4 - Projeção da função custo para colunas de destilação .....	72
Figura 5.1 - Algoritmo de Evolução Estocástica.....	75
Figura 5.2 - Algoritmo de função PERTURB <sub>SE</sub> .....	76
Figura 5.3 - Algoritmo de pseudo-função UPDATE original .....	77
Figura 5.4 - Algoritmo de Evolução Estocástica adaptado .....	79
Figura 5.5 - Algoritmo de pseudo-função PERTURBA <sub>SINCO</sub> .....	79
Figura 5.6 - Algoritmo proposto para a função MOVIMENTO <sub>SINCO</sub> .....	80
Figura 5.7 - Algoritmo proposto para a função ATUALIZA <sub>SINCO</sub> .....	81
Figura 6.1 - Protótipo SINCO.....	83

Figura 6.2 - Diagrama de fluxo de dados do protótipo SINCO.....	85
Figura 6.3 - Caixa de diálogo de apresentação do SINCO.....	86
Figura 6.4 - Caixa de diálogo para entrada de dados da alimentação .....	87
Figura 6.5 - Caixa de diálogo para entrada de dados dos produtos .....	87
Figura 6.6 - Apresentação dos resultados da coluna gerada.....	88
Figura 6.7 - Resultados do processo de otimização.....	88
Figura 6.8 - Principais hierarquias de classes do protótipo SINCO .....	90
Figura 6.9 - Evolução do custo de soluções intermediárias geradas pelo SINCO .....	92
Figura 6.10 - Influência da razão de refluxo sobre o custo .....	94
Figura 6.11 - Influência da condição térmica da alimentação sobre o custo.....	95
Figura 6.12 - Influência da distância entre pratos e razão de refluxo sobre o custo.....	96
Figura 6.13 - Influência da razão de refluxo e condição térmica sobre o custo .....	97

## LISTA DE TABELAS

Tabela 6.1 - Dados das colunas otimizadas.....	92
Tabela 6.2 - Resultados da comparação de experimento com o SINCO e HYSIM para o sistema pentano-heptano.....	93
Tabela 6.3 - Resultados da comparação de experimento com o SINCO e HYSIM para o sistema pentano-heptano.....	94
Tabela 6.4 - Resultados da comparação de experimento com o SINCO e HYSIM para o sistema água-ácido acético .....	94
Tabela 6.5 - Resultados da comparação de experimento com o SINCO e HYSIM para o sistema etanol-água.....	95

## RESUMO

Este trabalho propõe um método computacionalmente eficaz para conduzir o processo de projeto e resolver o problema de projeto de colunas de destilação. O problema, neste caso, consiste em determinar uma coluna capaz de satisfazer os requisitos de operação estabelecidos pelo projetista. A abordagem proposta para a condução do processo de projeto sugere o emprego de técnicas de síntese automatizada, largamente utilizadas em projeto auxiliado por computador em algumas áreas de engenharia. Esta abordagem é apresentada aqui como uma alternativa ao emprego de ferramentas de simulação, tradicionalmente utilizadas na área de Engenharia Química. O processo de projeto, conduzido sob o enfoque de simulação, envolve a descrição do modelo selecionado para descrever o sistema em estudo, através da especificação de um conjunto de entradas que permitam testá-lo, e a atividade de análise das saídas obtidas. Já o processo conduzido sob o enfoque de síntese envolve, a partir de uma especificação do comportamento esperado, a agregação de informações até a obtenção de uma descrição detalhada que permita sua construção física. O conceito de otimização está presente nas duas abordagens analisadas. Na simulação, o projetista necessita analisar as saídas, através de um algum critério, para que possa optar pela solução mais adequada ao seu problema. Já na síntese, a descrição final é obtida através da análise de diversas alternativas e da seleção daquela considerada a melhor para solucionar o problema. Para auxiliar na caracterização do problema em estudo, o trabalho apresenta uma definição formal do problema de otimização. A implementação de um procedimento de projeto sob o enfoque de síntese automatizada propiciou a comparação entre as duas abordagens. O protótipo implementado, denominado SINCO (SINtetizador de COLunas), inclui, como modelo de projeto, o proposto por Lewis-Sorel e adota, como método de otimização, o método probabilístico denominado Evolução Estocástica. Os estudos de caso desenvolvidos com o SINCO permitiram avaliar a influência das diversas variáveis de projeto sobre a função objetivo selecionada e a parametrização da ferramenta. A comparação dos resultados obtidos com o SINCO e os fornecidos pelo simulador comercial HYSIM propiciaram a validação do modelo de projeto.

## ABSTRACT

This work proposes a new, computationally efficient method to drive the distillation column design process and to solve the associated design problem. This problem consists in determining a distillation column capable of satisfying the operation requirements established by the designer. The proposed approach to conduct the design process suggests the employment of automated synthesis techniques. Such techniques are in wide use in some engineering fields such as electrical and mechanical engineering, but have been barely explored in chemical engineering. The approach we use is an alternative to the design of distillation columns based on simulation tools, the approach of choice in chemical engineering, and many times the only one available to designers in the field. The design process conducted under the simulation tools approach is threefold, comprising the elaboration of an abstract description of the equipment, the description of a set of input stimuli that allow to test the model of the equipment and the analysis of the output response of the simulator submitted to the equipment description and the input stimuli set. All of these steps rely upon the technical expertise of the designer to be adequately solved. On the other hand, the automated synthesis approach assumes that the final equipment description is obtained as a selection, by the designer, of one of several alternative designs automatically generated. To help characterizing the central optimization problem involved in the design of distillation columns, we present a formal definition of optimization problems. The computer implementation of automated synthesis design allowed the comparison of our approach with that of commercial simulators. The prototype implementation, called SINCO (Synthesizer of Distillation Columns) includes, as a design model, the one proposed by Lewis-Sorel, and adopts as optimization method, stochastic evolution, a probabilistic approach. The case studies treated with SINCO allowed us to evaluate the influence of several design variables upon the selected objective function, as well as the possibility of parameterizing the synthesis tool. Comparing the results obtained with the SINCO tool and those obtained with the HYSIM commercial simulator provided us with means to validate the design model.

# 1. INTRODUÇÃO

O projeto auxiliado por computador (Computer Aided Design - CAD) é hoje uma realidade na indústria química. O desenvolvimento de equipamentos de uso geral e a maior disponibilidade de programas especializados permitem a análise de diversas alternativas de projeto, devido à maior velocidade nos cálculos associados à obtenção de uma solução, e propiciam uma diminuição dos erros humanos associados às soluções via cálculos manuais.

O surgimento de uma legislação ambiental específica e o aumento nos custos de energia, conseqüência, entre outras causas, da crise do petróleo da década de 70, determinaram a necessidade de promover alterações nos procedimentos de projeto e operação de plantas industriais com o objetivo de atender às restrições ambientais e reduzir custos.

As técnicas de otimização podem ser consideradas como ferramentas de grande auxílio na busca de novas alternativas destes procedimentos de projeto e operação. Isto deve-se ao fato de que os problemas de projeto têm muitas e, seguidas vezes, infinitas soluções e a otimização consiste em selecionar a melhor ou uma das melhores dentre este conjunto de soluções, através de critérios preestabelecidos.

Em algumas áreas de engenharia o processo de projeto é estudado há bastante tempo e, como resultado, foram propostos diversos modelos para representá-lo. Exemplos são a Engenharia Mecânica e Engenharia Elétrica, em particular na área de projeto de sistemas digitais. Esta última será utilizada em nosso trabalho como referência para descrição do processo de projeto em Engenharia Química.

O processo de projeto de um sistema digital pode ser definido, conforme CALAZANS (1995), “como a transformação de uma descrição inicial, freqüentemente denominada *especificação*, em uma descrição final, também chamada de *projeto final* ou *projeto detalhado*”. A diferença fundamental entre as descrições inicial e final está no fato da última conter todas as informações necessárias à construção do sistema de forma mecânica ou automática, ao contrário da primeira. No caso de sistemas complexos, a passagem de uma descrição a outra não ocorre de

maneira direta. A atividade de projeto, nestes casos, é desenvolvida de forma que a cada passo são agregadas novas informações à descrição inicial até ser obtida a descrição final desejada, gerando um conjunto de descrições intermediárias.

Esta forma de descrever o processo de projeto, embora tenha sido elaborada no contexto da área de Engenharia Elétrica, é também válida para outras áreas da engenharia. Na Engenharia Química, o projeto de uma planta industrial, constituída por um conjunto de equipamentos, envolve a transformação de uma *descrição inicial* que inclui, entre outros dados, a especificação da matéria-prima disponível e do produto desejado, em uma *descrição final* do sistema em estudo, denominado de *projeto básico*. O projeto básico envolve a especificação dos equipamentos envolvidos, a sua distribuição na planta (seqüência de operações) e suas dimensões fundamentais (altura, diâmetro, volume, etc.). O termo *projeto final* ou *detalhado*, em Engenharia Química, pressupõe a participação de outros profissionais, como o engenheiro mecânico para especificação estrutural e mecânica dos equipamentos e seus acessórios internos, do engenheiro civil para determinação das fundações para instalação dos equipamentos, do engenheiro eletrônico para instrumentação, etc., atividades que estão fora do escopo de nosso trabalho.

No caso do problema de otimização do processo de projeto em Engenharia Química, a literatura indica uma abordagem essencialmente apoiada na *simulação*, enquanto da engenharia de processos podemos trazer a idéia de *síntese automatizada* como uma forma concomitante de conduzir o processo de projeto. Antes de estabelecer a proposta de trabalho, discutiremos algumas características destas duas abordagens do processo de projeto e discutiremos sua aplicabilidade na área de Engenharia Química.

### **1.1 Processo de projeto baseado em simulação**

Segundo LAW e KELTON (1991), a *simulação* consiste em utilizar um computador para avaliar numericamente uma *descrição* e a reunião dos dados assim obtidos são utilizados para estimar as verdadeiras características da descrição sob estudo. Já SILVA e MUNTZ (1992) definem descrição como uma visão simplificada do sistema em estudo, projetada de forma a capturar o máximo do comportamento

real do sistema, suficiente para fornecer prognósticos precisos dentro de uma tolerância aceitável. Estes mesmos autores afirmam que simulação é a forma mais popular de se descrever sistemas reais e que virtualmente podemos simular qualquer sistema desde que seja realizado esforço suficiente para representar os detalhes do mesmo. SILVA e MUNTZ consideram a simulação como a implementação de uma descrição detalhada, enquanto LAW e KELTON consideram a simulação como uma forma de validar uma descrição. THOME (apud DIMIAN (1994)) define *simulação* como “um processo de projeto de uma descrição operacional de um sistema e a condução de experimentos com esta descrição com o propósito de adquirir conhecimento sobre seu comportamento ou avaliar estratégias alternativas para seu desenvolvimento ou operação. Esta descrição deve ter a capacidade de reproduzir aspectos selecionados do comportamento do sistema descrito com um certo grau de precisão”. Esta última definição acrescenta, às definições anteriores, a possibilidade da simulação ser utilizada como fonte de informações sobre o sistema em estudo. Outra possibilidade sugerida é o uso da simulação como ferramenta facilitadora do processo de tomada de decisão presente no processo de projeto, por permitir a análise de várias alternativas de projeto ou operação do sistema.

Na área de Engenharia Química, o termo *simulação*, conforme PERRY e CHILTON (1973), refere-se à criação de um modelo abstrato para representar um processo químico. Esta descrição pode ser resultado de uma análise rigorosa de uma operação unitária (como a destilação) ou de um conjunto de equações empíricas.

Em nossa visão, o processo de projeto conduzido sob o enfoque de simulação envolve, além da elaboração de um modelo abstrato para representar o sistema em estudo, uma descrição do modelo selecionado, ou seja, a especificação de um conjunto de entradas que permita testar o modelo e a atividade de análise das saídas obtidas a partir das entradas fornecidas. No caso de projeto de colunas de destilação, o modelo do sistema poderia representar o comportamento de uma coluna de pratos, enquanto uma descrição indicaria que a coluna separa uma mistura binária constituída por hexano e heptano para produzir um destilado contendo 99 mois% de hexano, por exemplo.

Concordamos com a definição proposta por THOME (apud DIMIAN (1994)) quanto ao simulador ser utilizado na análise de diversas alternativas de projeto. Na realidade, embutido neste conceito está o conceito de otimização, pois o projetista, ao fazer esta análise, deverá estabelecer algum tipo de critério para selecionar a solução mais adequada ao seu problema.

O processo de projeto, conduzido com o auxílio de ferramentas de projeto desenvolvidas sob o enfoque de simulação, permite a otimização de equipamentos através da alteração *manual e sucessiva* dos valores das variáveis de projeto. A seguir, a análise dos resultados obtidos na simulação da coluna com os valores alterados são utilizados como fonte para novas iterações. O processo de projeto via simulação consiste, portanto, em exercitar uma descrição gerada a partir de um modelo abstrato do sistema em estudo até o projetista obter informações suficientes para considerar o projeto válido, ou, na maioria das vezes, analisar as conseqüências da alteração de algumas variáveis de projeto sobre a operação de um equipamento já existente.

Simuladores e ferramentas de captura de descrições possuem papel passivo, sendo empregados pelo projetista para reduzir o tempo de projeto (CALAZANS, 1995). Os programas HYSIM e HEXTRAN (da Hyprotech, 1994) e Pro-II (da Simulation Sciences, 1991) são exemplos de simuladores de processo amplamente utilizados na indústria química e que podem ser enquadrados nesta categoria.

O estilo de projeto estabelecido por ferramentas de simulação é fortemente centrado no talento criativo do ser humano. O fluxograma apresentado na Figura 1.1 foi proposto por CALAZANS(1995) para descrever o processo de projeto de sistemas digitais. No entanto, o mesmo também pode ser usado para representar o modelo adotado pelas ferramentas de simulação disponíveis na área de Engenharia Química.

Na simulação, o projetista deve não somente compreender os modelos abstratos subjacentes ao projeto, mas também deve ser capaz de descrever um sistema que atenda aos requisitos de projeto (tipicamente, estes últimos correspondem a uma

descrição mais abstrata) e de sugerir entradas relevantes para exercitar a descrição.

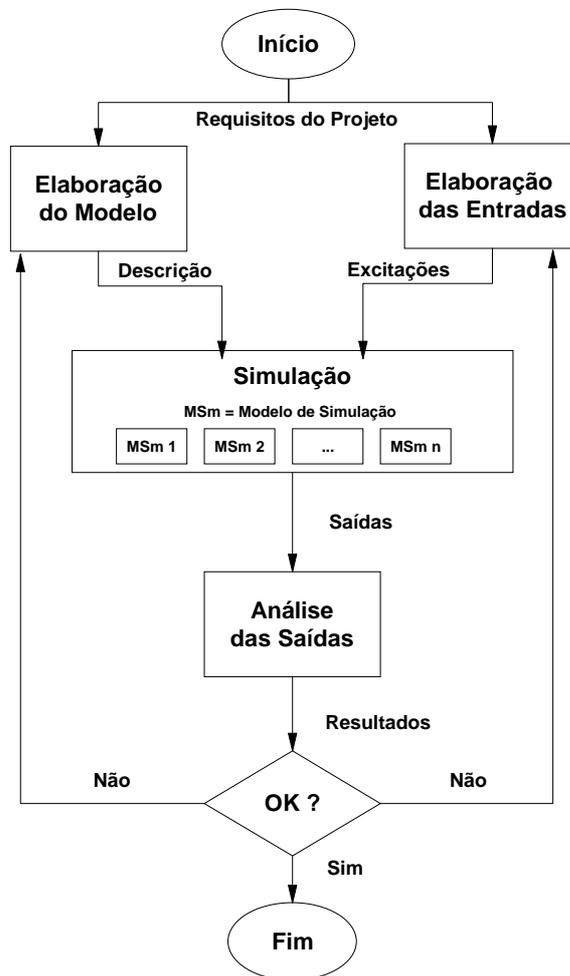


Figura 0.1 - Fluxograma de emprego de ferramentas de projeto baseadas em simulação

No caso do simulador de processos químicos HYSIM (1994), por exemplo, o processo de projeto tem início quando o projetista seleciona um modelo termodinâmico que descreve o comportamento físico-químico dos componentes químicos que serão introduzidos no equipamento a ser simulado. Diversos são os modelos termodinâmicos disponíveis para estimativa de propriedades físico-químicas dos componentes a serem separados e a seleção do modelo mais adequado depende diretamente do conhecimento do projetista sobre a aplicabilidade destes modelos. Após esta seleção, o simulador solicita a identificação destes componentes químicos e, somente após estas informações, o projetista pode selecionar o equipamento a ser

projetado, ou seja, o modelo de simulação que o descreve. A indicação de um equipamento específico deve ser complementada com uma descrição estrutural (dimensões básicas, condições de temperatura e pressão de operação, etc.).

Uma vez que o projetista humano tenha elaborado uma descrição estrutural e/ou comportamental, ele deve criar um conjunto de entradas para exercitar a descrição, as chamadas *excitações*. Feito isto, descrição e excitações são entregues ao simulador. Com base em um dos modelos de simulação internos escolhidos pelo usuário, o simulador computa as saídas para cada excitação e as fornece para o usuário. Cabe então a este analisá-las e decidir se os resultados satisfazem os requisitos de projeto. Caso negativo, ele deve saber identificar a origem dos problemas para poder elaborar novas excitações. As fontes de erro possíveis são múltiplas: falhas na descrição, falhas na geração das entradas, falhas da tecnologia em atender aos requisitos ou requisitos exigentes demais, entre outras.

A utilização de simuladores comerciais como ferramenta de apoio ao processo de projeto em Engenharia Química apresenta uma série de dificuldades, sendo a principal a necessidade de grande conhecimento do equipamento sob análise por parte do projetista. Isto se deve ao fato de que o projetista deve fornecer, como entradas ao simulador, uma série de dados nem sempre disponíveis (ou conhecidos com precisão) no início do processo de projeto.

## **1.2 Processo de projeto baseado em síntese**

Uma segunda abordagem para o processo de projeto é aquela conduzida sob o enfoque de *síntese automatizada*.

Na Engenharia Química, o processo de projeto, segundo RUDD et alii (1973), requer do projetista as habilidades de síntese e análise. Segundo o NOVO DICIONÁRIO AURÉLIO (1986), a síntese é a “reunião de elementos concretos ou abstratos em um todo” e análise é “o exame de cada parte de um todo, tendo em vista conhecer sua natureza, suas proporções, suas funções, suas relações, etc.”. A síntese trata da criação de abstrações de sistemas que devem possuir determinadas propriedades, envolvendo a agregação de informações sobre o objeto em estudo até a obtenção de uma descrição detalhada que permita sua construção física. Este conceito

vêm ao encontro daquele proposto por CALAZANS(1995). Já a análise envolve o entendimento das características dos sistemas e como eles trabalham.

A atividade de síntese é comumente empregada no projeto de circuitos digitais. Conforme DE MICHELI (1994), as técnicas de síntese de projeto agilizam o ciclo de projeto e reduzem o esforço humano, enquanto que as técnicas de otimização aumentam a qualidade do projeto. Assim como GAJSKI e KUHN (1983), o autor considera que a síntese pode ser vista como uma série de transformações realizadas sobre o conjunto de especificações iniciais até a obtenção do produto desejado, através de alterações sobre a representação funcional, estrutural e geométrica.

Os conceitos de *correção* e *otimização* do sistema a projetar são conceitos fundamentais a serem considerados durante o processo de projeto. Segundo CALAZANS (1995), uma descrição é *correta* se ela atende a todos os requisitos da descrição inicial e pode ser construída. Uma descrição final é *ótima* se ele a é correta e possui custo mais baixo e melhor desempenho que qualquer outra solução correta.

DAVIO et alii (1983) afirmam que o propósito da síntese é obter uma descrição que, quando implementada, resulte em um produto de baixo custo. Estes autores associam o processo de síntese à otimização, salientando que, para determinar o produto de menor custo, devem ser definidos previamente os critérios adequados. MEDLAND (1986) considera que existem dois tipos de programas que podem ser desenvolvidos para apoiar o processo de projeto: técnicas de otimização e de simulação. No caso da otimização, ou projeto automatizado como denomina o autor, são empregados algoritmos de otimização de tal maneira que uma solução adequada é obtida a partir de um dado conjunto de parâmetros. No capítulo 2 apresentaremos uma definição precisa de otimização, adequada para o escopo do presente trabalho.

O processo de projeto deve ser conduzido pela busca da ou de uma das soluções ótimas. Contudo, na maior parte dos casos, a solução ótima não é conhecida (ou facilmente determinável) e deve ser estabelecido algum compromisso entre custo e desempenho a ser obtido.

O estilo de projeto estabelecido pelas ferramentas de síntese é centrado não apenas no talento criativo do ser humano, mas também no fato de parte deste talento

poder ser capturado por ferramentas computacionais e usado para guiar o processo de projeto. Este estilo é ilustrado na Figura 1.2. Aqui, o projetista é liberado da tarefa de geração da descrição inicial, bem como da geração das excitações. A ferramenta central possui embutido um conjunto de *modelos de síntese* e é capaz de gerar uma descrição correta por construção, bem como uma avaliação do desempenho desta descrição, a partir dos requisitos de projeto fornecidos como entrada. O laço de realimentação é fechado pelo projetista, que julga os resultados da síntese e aceita a descrição, ou a rejeita e escolhe um novo modelo de síntese para ser usado.

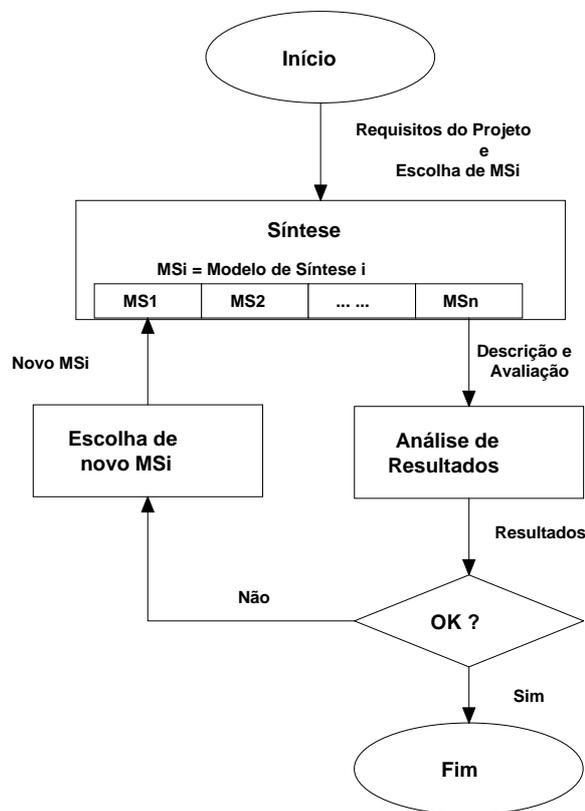


Figura 0.2 - Fluxograma de emprego de ferramentas de projeto baseadas em síntese automatizada

Os modelos de síntese podem ser apenas ligeiramente diferentes entre si, provendo uma exploração do espaço de soluções corretas sob a forma de um quase contínuo (CALAZANS, 1995).

As ferramentas de simulação podem ainda ser empregadas aqui visando fornecer mais detalhes sobre a implementação. Um exemplo seria um conjunto de relacionamentos entre vetores de entrada e vetores de saída, para prover uma caracterização parcial do sistema sintetizado, visando o teste do sistema após sua construção. Note-se ainda na Figura 1.2 a presença implícita no seio do sintetizador de procedimentos de síntese e de otimização. Frequentemente, o sintetizador gera uma descrição a partir dos requisitos, e refina esta descrição através de técnicas de otimização. Tipicamente, apenas a descrição resultante deste último processo é fornecida ao projetista.

A necessidade de manipular quantidades crescentes de informação durante o projeto exige a constante elaboração de novas ferramentas. Estas deveriam transcender as atividades de facilitar a captura e de exercitar descrições, passando a ser capazes de gerar novas descrições de forma automatizada e corretas por construção, baseado nos mesmos requisitos manipulados pelos projetistas.

### **1.3 Comparação entre simulação e síntese**

A diferença mais visível entre simulação e síntese é o fato das descrições simuláveis serem propensas a erros, enquanto que as descrições geradas por ferramentas de síntese são corretas por construção. Claramente esta afirmação deriva do pressuposto básico de que a ferramenta de síntese possa ser provada correta, o que é muito difícil. Partindo deste pressuposto, ainda que eventualmente incorretas, essa diferença faz com que o emprego de síntese automatizada forneça uma segurança maior com relação à correção do projeto final, uma característica essencial para minimizar os custos do sistema final. Por outro lado, uma outra consequência do emprego de síntese automatizada reside na rapidez de obtenção de uma solução sem erros, ao contrário das ferramentas baseadas em simulação, onde a obtenção de uma descrição correta está associada a um processo iterativo de edição de descrições e simulação destas.

Uma outra vantagem associada à utilização de uma ferramenta de síntese é a rapidez na obtenção de soluções corretas, propiciando uma melhor exploração do espaço de soluções na busca da solução ótima. Logo, ferramentas de síntese

automatizada são mais propensas a aproximar soluções ótimas de projeto, em comparação com ferramentas baseadas em simulação.

Ferramentas de síntese possuem modelos subjacentes que podem ser bastante complexos, o mesmo ocorrendo com ferramentas de simulação. No entanto, o projetista não precisa dominar todos os conceitos associados a estes modelos para explorar os recursos da ferramenta, visto que seu papel é parametrizar a ferramenta para que esta gere descrições corretas. Ele apenas precisa dominar a influência desta parametrização no desempenho dos modelos de síntese. Os modelos de simulação, por outro lado, precisam ser dominados mais profundamente pelo projetista, pois de sua compreensão depende a qualidade da descrição inicial, bem como a capacidade do projetista de analisar as saídas.

Na Engenharia, a transição da abordagem de simulação para a de síntese ocorre de maneira gradual. A própria tradição de uso das ferramentas de simulação faz com que os projetistas mantenham seus procedimentos de projeto. Em especial na Engenharia Elétrica, a proximidade com a Ciência da Computação e o avanço da tecnologia têm acelerado este processo.

As ferramentas de simulação possuem também um conjunto de vantagens com relação a ferramentas de síntese (CALAZANS, 1995). Enquanto as ferramentas baseadas em simulação não pressupõem um estilo de projeto específico, uma vez que cabe ao projetista gerar a descrição simulável, as ferramentas de síntese partem do princípio que as descrições geradas se encaixam em um dos modelos de síntese embutidos. Logo, a flexibilidade para explorar o espaço de soluções é mais baixa que nas ferramentas de simulação. Uma boa ferramenta de síntese deve permitir muitas parametrizações para reduzir sua falta de flexibilidade, enquanto que uma ferramenta de simulação deve apenas ater-se a um modelo de simulação, por mais complexo que este seja. Logo, a implementação de ferramentas de síntese é mais difícil que a implementação de simuladores. Para reforçar ainda mais este último ponto, ferramentas de síntese devem capturar os aspectos mais criativos do processo de projeto (a geração de descrições finais a partir de descrições iniciais), enquanto que os simuladores se limitam a exercitar descrições geradas externamente.

### 1.3.1 Síntese e Simulação em Projeto de Colunas de Destilação

Os trabalhos desenvolvidos na área de destilação são essencialmente voltados à simulação na busca das melhores condições de operação do equipamento ou na melhor seqüência de colunas necessárias à separação. Como exemplo, podemos analisar o trabalho de MACIEL e CARVALHO (1994), onde o projeto ótimo de seqüências de destilação é realizado através do um simulador comercial. No entanto, os autores precisaram recorrer a métodos simplificados, como o de Fenske-Underwood-Gilliland (WANKAT, 1988), para obter os parâmetros básicos solicitados como entrada pelo simulador. Já no trabalho de PEDROSA NETO e MORI (1994), foi desenvolvido um módulo de otimização baseado no método Simplex Modificado (Método de Box) e uma interface com o simulador. Este módulo de otimização permitiu a obtenção do valor das variáveis operacionais que maximizam a função objetivo, no caso em questão representada pela rentabilidade diária da unidade de destilação em estudo. No entanto o objetivo do estudo era otimizar as *condições de operação* de uma coluna já existente, permitindo que os parâmetros iniciais, requisitados pelo simulador, fossem obtidos experimentalmente. Em ambos os casos, a descrição inicial exigida pelo simulador foi obtida de maneira indireta (por cálculos manuais (métodos simplificados) ou obtidos na operação do equipamento) como forma de superar a necessidade de conhecimento dos modelos internos do simulador.

Na Engenharia Química, inúmeros são os estudos de *síntese de processo* (RUDD et alii, 1973; GROSSMANN, 1989; BRITT et alii, 1989, entre outros), envolvendo a seleção da seqüência otimizada de operações unitárias (equipamentos) que produzam um produto especificado a partir da disponibilidade de matéria-prima. A síntese de processo envolve um certo grau de abstração, onde os equipamentos são projetados por métodos simplificados, já que o objetivo fundamental é verificar a viabilidade da seqüência escolhida. Somente após encontrada esta seqüência considerada ótima é que o projetista passará a etapa de projeto dos equipamentos individuais. Nosso estudo aborda a síntese de projeto de um destes equipamentos, onde o nível de abstração é menor do que o presente na síntese de processo, já que nesta etapa utilizam-se modelos de projeto mais detalhados e precisos.

#### **1.4 Objetivos e escopo do trabalho**

No presente trabalho, investigamos a proposta de que o processo de projeto baseado em síntese automatizada pode ser considerado como uma alternativa ao processo desenvolvido via simulação, quando aplicado em Engenharia Química. Para verificar a viabilidade de nossa proposta, implementamos o protótipo de uma ferramenta de síntese como forma de validar nossas idéias, através de estudos de casos.

O método apresentado neste trabalho procura superar as dificuldades presentes no processo de projeto essencialmente apoiado na simulação. O sintetizador proposto solicita como entrada uma descrição inicial baseada somente em um conjunto de requisitos, normalmente disponíveis ao projetista, e a seleção do modelo de síntese a ser adotado. A partir destes dados, o sintetizador produz como saída uma descrição detalhada, constituída por conjunto de variáveis de projeto que podem ser utilizadas como descrição inicial para o simulador para posterior refinamento da solução. Desta forma, o uso da ferramenta de síntese torna-se mais simples sob o ponto de vista do usuário que o uso de ferramentas de simulação.

No ensino de Engenharia Química, são estudados os modelos de projeto tradicionais e o processo de projeto segue a abordagem de síntese, pois, na maior parte dos casos analisados, o aluno (atuando como projetista) dimensiona um equipamento a partir da especificação de um conjunto restrito de entradas (variáveis de projeto) e de uma descrição comportamental do sistema. No entanto, a análise de diversas alternativas de projeto na busca do projeto ótimo é dificultada pela falta de ferramentas informatizadas que auxiliem e agilizem este processo. A implementação do método proposto neste trabalho gerou um protótipo de uma ferramenta de síntese que poderá ser utilizada no ensino de projeto de colunas de destilação, permitindo que as descrições geradas pelo sintetizador sejam analisadas e comparadas com razoável rapidez.

#### **1.5 Organização da dissertação**

Para apresentar e justificar nossa proposta, o trabalho está organizado de acordo com a seguinte estrutura. O capítulo 2 apresenta uma definição precisa para o

problema de otimização. Esta definição surgiu da necessidade de caracterizarmos, de maneira clara e suficientemente geral, o problema de otimização de forma a abarcar problemas das mais diversas áreas, já que a literatura consultada não apresentava uma definição adequada. Neste capítulo também são apresentados os conceitos fundamentais para o entendimento da abordagem proposta, considerando a multidisciplinaridade dos temas abordados.

O capítulo 3 apresenta as características fundamentais dos problemas de otimização, propondo uma seqüência de etapas a serem seguidas para sua solução. Nesta seção também discute-se brevemente os principais métodos de otimização e sua classificação, apresentando a proposta de uma nova taxonomia. No capítulo 4 analisamos os modelos de projeto de colunas de destilação e a função custo adotada. No capítulo 5, apresentamos o método de otimização probabilístico selecionado para implementar o protótipo e discutimos como foi realizado o mapeamento para o nosso problema específico.

No capítulo 6, abordamos os aspectos de projeto e implementação do protótipo de uma ferramenta de síntese denominada SINCO (SINtetizador de COLunas de destilação). Este protótipo propiciou o desenvolvimento de estudos de caso para avaliar o emprego de síntese como alternativa à simulação em Engenharia Química. Finalmente, no capítulo 7, é apresentado um conjunto de conclusões a respeito do enfoque de projeto automatizado de colunas de destilação, salientando a possibilidade de utilização desta abordagem no ensino de Destilação nos cursos de Engenharia Química, bem como sugestões para trabalhos futuros.

## 2. CONCEITOS E DEFINIÇÕES

Neste capítulo, apresentamos alguns conceitos básicos que auxiliarão na compreensão dos diversos tópicos abordados ao longo da dissertação. Embora tenhamos aqui objetivado propor definições genéricas, sempre que necessário para simplificar as discussões posteriores, algumas delas foram particularizadas para o escopo de problemas de processo de projeto.

### 2.1 Definição de problema de otimização

Um *problema de otimização* é caracterizado por um conjunto totalmente ordenado de *variáveis*,  $V$ , e por um conjunto de *restrições*,  $R$ .

A *dimensão*,  $d$ , do problema de otimização é a cardinalidade do conjunto  $V$ .

Para um dado conjunto  $V$ , o *espaço de soluções* é  $\mathfrak{R}^d$ , onde  $\mathfrak{R}$  é o conjunto dos números reais.

Denominamos *solução candidata* a uma  $d$ -tupla de valores na forma

$$(v_1, v_2, \dots, v_d) \in \mathfrak{R}^d$$

onde cada  $v_i$  designa o *valor* de uma variável.

Uma *restrição* é uma função de chaveamento do tipo

$$r_j : \mathfrak{R}^d \rightarrow \{ 0, 1 \}, \text{ com } r_j \in R$$

Note-se que uma restrição pode aplicar-se a todas as  $d$  variáveis, ou a um subconjunto destas ou mesmo a apenas uma variável das  $d$ -tuplas. A formulação proposta permite, assim, modelar a interação entre valores de diferentes variáveis mediante o uso de um conjunto reduzido de funções  $r_j$ .

A cada solução candidata, existe um *custo* associado. Definimos *função custo*, ou *função objetivo*, como  $c : \mathfrak{R}^d \rightarrow \mathfrak{R}$ .

Um *problema de otimização de dimensão  $d$  submetido a  $n$  restrições* pode então ser definido como:

Encontrar *uma*  $d$ -tupla  $t \in \mathcal{R}^d$  tal que

1.  $r_j(t) = 1$  para todo  $1 \leq j \leq n$  onde  $n = |\mathbf{R}|$ ;
2. o custo  $c(t)$  é um mínimo, sobre todos os valores  $t$  que obedecem a (1).

Informalmente, dado um conjunto de restrições, resolver um problema de otimização consiste em encontrar um conjunto de valores que satisfaz todas as restrições e possui custo mínimo.

Se existe pelo menos uma tupla  $t$  tal que a condição 1 é satisfeita, diz-se que o problema tem solução. Cada tupla  $t$  que obedece à condição 1 corresponde a uma *solução correta* ou simplesmente uma *solução* do problema de otimização.

Uma tupla  $t$  que obedece às condições 1 e 2 será denominada *solução ótima*.

Convém observar que a determinação das  $n$  restrições  $r_j$  pode ser em si um problema de difícil solução. Em muitos casos, dado um conjunto de restrições, a solução encontrada satisfaz apenas um subconjunto de  $R$ . Como forma de simplificar a solução, assume-se aqui que este subconjunto é o conjunto de restrições de interesse.

Podemos exemplificar com o caso do problema de otimização do projeto de uma coluna de destilação. Uma  $n$ -tupla que representa uma solução candidata para este problema é constituída pelas seguintes variáveis:

$v_1$  = número de pratos reais

$v_2$  = altura da coluna

$v_3$  = diâmetro da coluna

$v_4$  = razão de refluxo de operação

$v_5$  = distância entre pratos

$v_6$  = condição térmica da alimentação

$v_7$  = pressão de operação

$v_8$  = temperatura de operação

A dimensão do conjunto de variáveis,  $V$ , neste caso é igual a 8 (oito). Sobre estas variáveis é estabelecido um conjunto de restrições para que a solução possa ser admitida como correta e, portanto, seja a ela associado o valor 1, através da aplicação da função de restrição.

Por exemplo, o número de pratos de uma coluna deve ser um número inteiro, assim como a coluna, para ser considerada como coluna de pratos, deve possuir pelo menos um prato. Poderíamos até mesmo especificar que, no caso especial do número de pratos ser nulo, a coluna seria do tipo recheada. Da mesma forma, a altura corresponderá, no mínimo, ao número de pratos mais um (ou seja, o número de espaços entre pratos e entre o prato superior e o topo da coluna) multiplicado pela distância entre pratos. Logo, a altura nunca poderá ser menor que a distância entre pratos.

Existem também regras empíricas quanto aos valores do diâmetro, que determinam a viabilidade de operação de uma coluna de pratos ou a recomendação de substituição por uma coluna recheada. Já o valor da razão de refluxo de operação corresponde a um valor que deve ser superior à razão de refluxo mínima da coluna descrita. Um valor de razão de refluxo menor que a razão mínima implicaria em um número infinito de pratos para a realização da separação desejada.

A distância entre pratos é limitada a um conjunto de seis valores usualmente empregados na indústria e considerados no projeto, enquanto as condições de temperatura e pressão são estabelecidas em função das propriedades físico-químicas dos componentes a separar. Como uma restrição, podemos considerar que a coluna opera à pressão atmosférica e a temperatura estará limitada pelas temperaturas de ebulição dos componentes puros. Para outras pressões, sabemos que seu valor não pode ser negativo. Tanto temperatura quanto pressão possuem limites superiores baseados em restrições do material de construção ou limites de aplicabilidade dos modelos termodinâmicos. A variável que representa a condição térmica da alimentação (cujo valor indica o estado físico da corrente de alimentação), por sua vez, pode assumir qualquer valor real.

As restrições  $r_j$  são funções que refletem estas regras. Uma restrição sobre esta tupla poderia ser exemplificada na forma:

$$(v_1 > 0, v_2 > 0 \text{ e } v_2 > v_5, v_3 > 0, v_4 > R_{\min},$$

$$v_5 = 6 \text{ ou } v_5 = 12 \text{ ou } v_5 = 18 \text{ ou } v_5 = 24 \text{ ou } v_5 = 36;$$

$$v_6 \in \mathfrak{R}, \text{ Teb}_A < v_7 < \text{TeB}_B, v_8 = 1 \text{ atm})$$

Neste exemplo, a função de restrição é aplicada sobre elementos da tupla e estabelece interação entre algumas variáveis, por exemplo  $v_2$  e  $v_5$ .

## 2.2 Propriedades das funções

As funções objetivo ou funções custo possuem características que devem ser levadas em conta quando da escolha do método de otimização.

Estas funções podem ser unimodais ou multimodais. Uma função  $f(x)$  é denominada *unimodal* se, na faixa de valores especificados para  $x$ , possui um único extremo (mínimo ou máximo), enquanto uma função *multimodal* possui dois ou mais extremos (locais).

Se a derivada da função  $f(x)$ , denotada por  $f'(x)$ , for igual a zero em um ponto de extremo, este ponto é denominado *ponto estacionário* (e pode ser um máximo ou mínimo). No caso das funções multimodais, podem existir múltiplos pontos estacionários. Neste caso, deve-se diferenciar entre o *extremo global*, o maior de todos (ou menor) entre um conjunto de pontos extremos, enquanto qualquer outro ponto extremo é denominado *extremo local* (EDGAR e HIMMELBLAU, 1988).

Muitas técnicas numéricas utilizadas nos métodos de otimização baseiam-se na hipótese de que a função a ser tratada é unimodal. No entanto, a propriedade de unimodalidade é difícil de ser estabelecida analiticamente. Para funções de uma ou duas variáveis, a função pode ser plotada, evidenciando se a função é unimodal ou não. A Figura 2.1 exemplifica este procedimento através da representação a função  $y = x^2$ . No intervalo de  $0 \leq x \leq 50$ , esta função apresenta um único extremo (ponto de mínimo) e, portanto, representa o comportamento de uma função unimodal. Já a Figura 2.2 apresenta a representação da função  $y = \text{sen}(x)$ , exemplo de uma função

multimodal, pois apresenta vários pontos de mínimo na faixa de valores de  $x$  considerada.

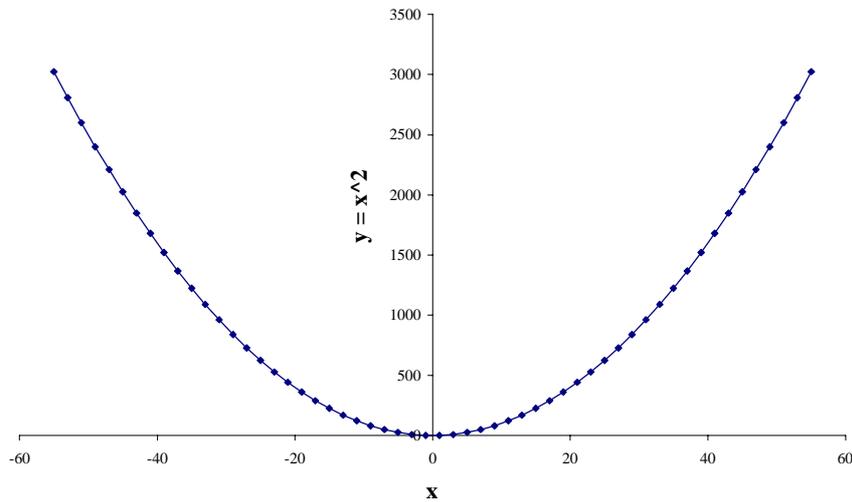


Figura 0.1 - Exemplo de uma função unimodal

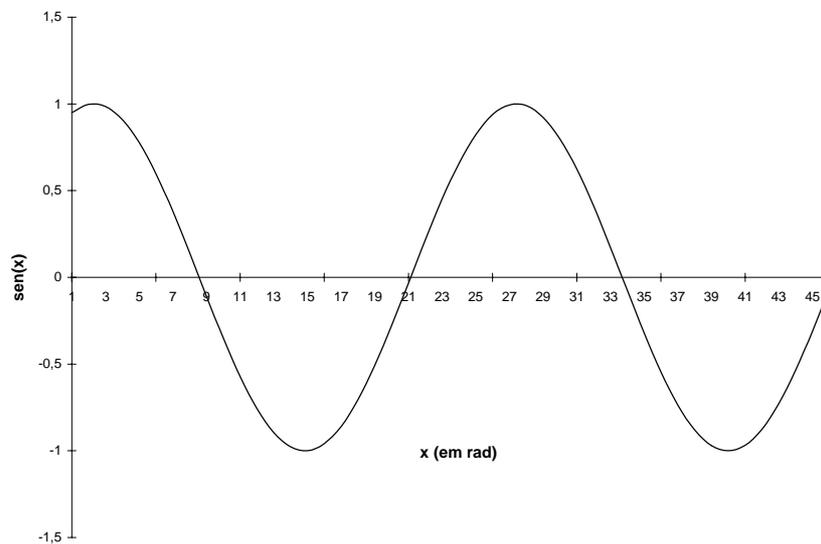


Figura 0.2- Exemplo de uma função multimodal

As funções objetivo podem também ser caracterizadas como funções côncavas ou convexas. A determinação da concavidade ou convexidade de uma função auxilia na verificação de que uma solução ótima local é ou não uma solução ótima global. Quando se sabe que uma função tem as características de concavidade (ou

convexidade), a determinação da solução ótima pode ser acelerada, através de algoritmos apropriados (EDGAR e HIMMELBLAU, 1988).

Uma função é denominada *côncava* sobre uma região  $R$  se a relação, apresentada pela equação (2.1), for válida. Para dois valores diferentes de  $x$ ,  $x_a$  e  $x_b$  que recaem na região  $R$

$$f[\theta x_a + (1 - \theta) x_b] \geq \theta f(x_a) + (1 - \theta) f(x_b) \quad (2.1)$$

onde  $\theta$  é um escalar que assume um valor entre 0 e 1. A função é *estritamente côncava* se o sinal de “maior ou igual ( $\geq$ )” for substituído pelo sinal de “maior ( $>$ )”. Uma função é denominada *convexa* quando o sinal de igual ou maior for substituído por um sinal de menor ( $<$ ).

A função apresentada na Figura 2.1 é exemplo de uma função estritamente convexa, pois se unirmos com uma linha reta quaisquer pares de valores  $f(x_a)$  e  $f(x_b)$ , os valores de  $f(x)$  sobre esta linha, para todos os pares  $x_a$  e  $x_b$ , sempre ficarão acima dos valores da função correspondentes aos pontos considerados.

### 2.3 Projeto de Processos Químicos

A *Engenharia Química* é definida por FOUST et al (1982), como a "aplicação dos princípios das ciências físicas, juntamente com os princípios da economia e das relações humanas, aos campos que são diretamente pertinentes aos processos e aos equipamentos de processos nos quais se tratam substâncias visando provocar modificações de estado, de energia ou de composição". Esta definição é bastante vaga, devido à amplitude do campo abarcado. Deve-se observar, no entanto, que se realçarm, de forma considerável, os processos e os equipamentos de processo, permitindo afirmar que o trabalho de muitos engenheiros químicos poderia ser denominado, com maior propriedade, de engenharia de processo.

O *processo* pode ser definido aqui como qualquer conjunto de etapas que envolvem modificações de composição química, ou que envolvem alterações físicas no material que está sendo *preparado*, *separado* ou *purificado*. O trabalho de muitos engenheiros químicos envolve a escolha das etapas apropriadas, na ordem adequada,

para formular um processo capaz de concretizar uma operação de produção, separação ou purificação. Em virtude de cada etapa que constitui um processo estar sujeita a variações, o engenheiro de processo deve também especificar as condições exatas de realização efetiva de cada etapa. O conjunto destas tarefas (escolha adequada das etapas e dimensionamento dos equipamentos envolvidos) é denominado *projeto de processo*.

#### 2.4 Processos Químicos de Separação: Destilação

Uma *corrente* é uma mistura de compostos químicos que, por exigência do processo químico da qual faz parte, deseja-se separar em seus componentes individuais. Quando a corrente é constituída por apenas dois componentes, a mistura é denominada *mistura binária*, enquanto as misturas com mais do que dois componentes são denominadas *misturas multicomponentes*. As separações de substâncias constituem uma fase importante de quase todos os processos de Engenharia Química e são necessárias porque as espécies químicas de uma corrente, em geral, são conduzidas a múltiplos destinos com concentrações especificadas.

Um *estágio real* é uma etapa do processo de separação, caracterizada pelo fato de nela ocorrer a mistura de duas ou mais correntes de tal forma que se permita a ocorrência da transferência de massa entre elas, fazendo com que as correntes que saem do estágio possuam composição diferente das correntes de entrada.

Um *estágio ideal*, também denominado de *estágio de equilíbrio* ou *estágio teórico*, é uma etapa do processo onde duas ou mais correntes são colocadas em contato; ocorre transferência de massa entre as fases até que o *equilíbrio seja alcançado* e as novas fases formadas são separadas. Mesmo que as condições de equilíbrio sejam raramente alcançadas em um equipamento real, o estágio de equilíbrio é um modelo físico útil para a análise das operações em estágios.

Embora o modelo físico do estágio seja conveniente para os cálculos, o número de estágios de equilíbrio calculado deve ser relacionado ao número de estágios reais necessários à separação. Exprime-se esta relação pela *eficiência de estágio*, definida como a razão entre a modificação de composição num estágio real e a modificação de composição em um estágio de equilíbrio (FOUST et al, 1982).

Alguns equipamentos industriais podem ser constituídos por um único estágio, mas, em geral, empregam-se equipamentos com vários estágios, com escoamento em contracorrente entre as duas fases. A *operação em estágios múltiplos* (ou *multiestágios*) possibilita maiores variações na composição das duas fases do que as variações que se pode obter em um só estágio.

O equipamento para separações multiestágios freqüentemente consiste de *pratos* horizontais para promover o contato entre as fases, arranjados em uma *coluna* vertical. A diferença de composição obtida após o contato entre as fases, seja em um ou vários estágios, é denominada *grau de separação*. O grau de separação depende do *número de pratos* e da *eficiência* dos estágios. A área da seção transversal da coluna determina a capacidade dos pratos em permitir a passagem das correntes que devem entrar em contato (HENLEY e SEADER, 1981, WANKAT, 1988).

As *colunas* de fracionamento podem ser de *pratos* ou *recheadas*, mas em ambos os casos devem possuir um *refervedor* na base e um *condensador* no topo. A função do refervedor é produzir o vapor que sobe pela coluna. O líquido retirado do refervedor é o *produto de fundo*. O condensado vai para um acumulador (tambor de refluxo) do qual parte retorna para o topo da coluna como refluxo e o restante é retirado como produto destilado. O *refluxo* origina a corrente líquida que desce de prato em prato pela coluna (GOMIDE, 1988; HOLLAND, 1963; HOLLAND, 1975). A Figura 2.3 apresenta o esquema de uma coluna de pratos, onde cada prato é considerado como um estágio, enquanto a Figura 2.4 apresenta o esquema de uma coluna recheada.

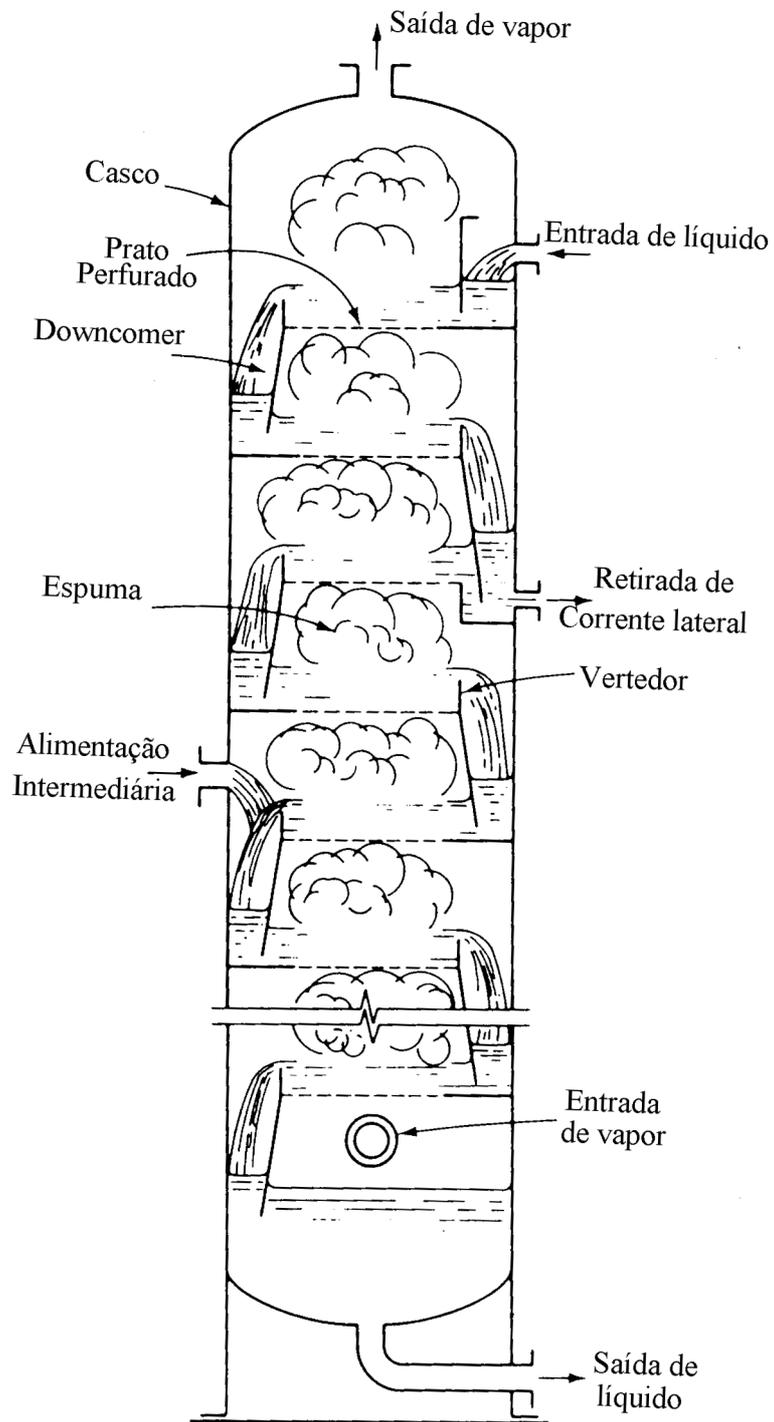


Figura 0.3 - Esquema de uma coluna de pratos

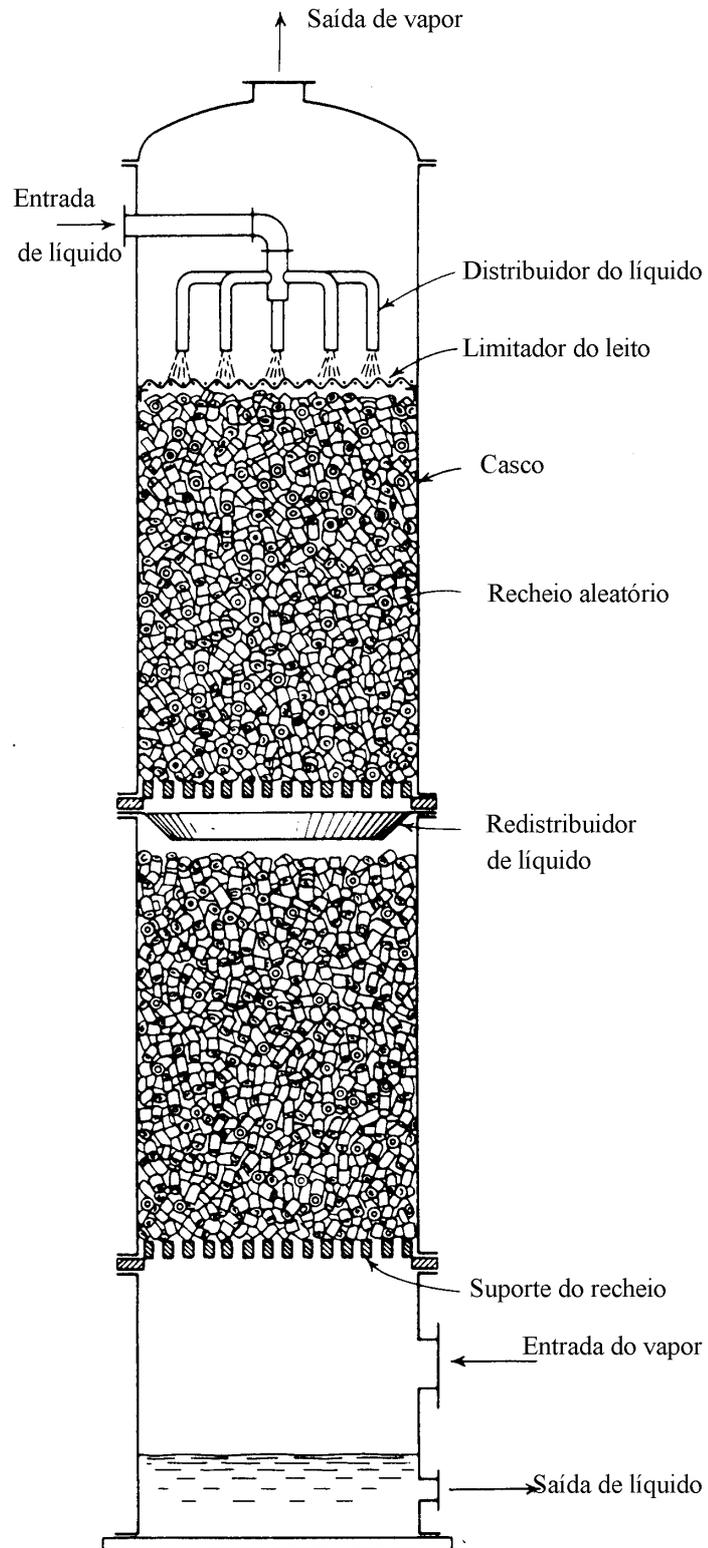


Figura 0.4 - Esquema de uma coluna recheada

A destilação fracionada ou retificação é uma operação multiestágios em contracorrente. Na destilação fracionada opera-se com vaporizações e condensações sucessivas em uma coluna de fracionamento. A separação dos componentes da mistura está baseada nas diferenças de temperaturas de ebulição dos componentes puros. Na destilação, uma fase vapor entra em contato com uma fase líquida e ocorre transferência de massa do líquido para o vapor e deste para aquele. O líquido e o vapor contêm, em geral, os mesmos componentes, mas em quantidades relativas diferentes. O efeito final é o aumento da concentração do componente mais volátil no vapor e do componente menos volátil no líquido (BOLES e FAIR, 1970; CHANG, 1980; ECONOMOPOULOS, 1978a, 1978b; HOLLAND, 1963; JAFAREY et alii, 1979; KING, 1980; LUYBEN e WENZEL 1988, WANKAT, 1988, SINOTT, 1993).

## 3. MÉTODOS DE OTIMIZAÇÃO

### 3.1 Introdução

A otimização em projeto baseia-se fundamentalmente na formulação de um padrão de medida - a função custo - que represente o desempenho ou o valor de uma decisão e, iterativamente, na busca de melhoria deste desempenho através da seleção entre um conjunto de alternativas possíveis (FOGEL, 1994).

Os métodos clássicos de otimização geram uma seqüência pré-determinada de possíveis soluções, baseados nas variações provocadas na função custo e selecionam a solução ótima (valor máximo ou mínimo da função custo). Em muitos casos, dependendo das características desta função, estes métodos podem gerar seqüências de soluções que convergem assintoticamente para soluções ótimas locais.

Os métodos denominados *probabilísticos* ou *estocásticos* propõem a determinação da solução ótima através da pesquisa em um espaço de estados possíveis, baseando-se na idéia de busca probabilística, onde cada decisão é função somente das decisões anteriores e a aceitação de um novo estado é determinada a partir de uma função de probabilidade.

Como discutido anteriormente, os problemas típicos de projeto ou operação de processos químicos geralmente possuem inúmeras soluções e a otimização apresenta-se como uma ferramenta efetiva na seleção da solução mais adequada, através da aplicação de métodos quantitativos eficientes.

Conforme EDGAR e HIMMELBLAU (1988), não existe método ou algoritmo de otimização que possa ser aplicado a todos os problemas. A escolha do método de otimização para qualquer caso particular dependerá fundamentalmente das características da função objetivo e se ela é conhecida explicitamente, da natureza das restrições e do número de variáveis independentes e dependentes.

Para nos auxiliar na escolha de um método de otimização adequado ao nosso estudo, vamos analisar o procedimento proposto por EDGAR e HIMMELBLAU (1988) para a *solução* de problemas de otimização, na seção 3.2. A seção 3.3

apresenta as características dos principais métodos de otimização descritos na literatura, enquanto a seção 3.4 apresenta uma proposta de taxonomia para os métodos estudados.

### **3.2 Procedimento para a solução de problemas de otimização**

Uma proposta de seqüência de etapas para análise e solução de problemas de otimização é mostrada no fluxograma apresentado na Figura 3.1, baseado na seqüência de etapas para a análise e solução de problemas de otimização, proposta por EDGAR e HIMMELBLAU(1988).

A primeira etapa envolve a análise do problema de maneira a definir as variáveis de processo e as características específicas de interesse, isto é, determinação de todas as variáveis envolvidas. A etapa seguinte (modelagem dos critérios de otimização) propõe a determinação de um critério para a otimização e especificação da função objetivo em termos das variáveis identificadas na primeira etapa, proporcionando um modelo de desempenho, algumas vezes denominado modelo econômico.

A modelagem do problema envolve o desenvolvimento, através de expressões matemáticas, de uma representação para o equipamento ou processo. Tal modelo deve relacionar as variáveis de entrada (dados do problema) e saída (valores gerados). Devem também ser incluídas aqui as restrições, através do uso dos princípios físicos bem conhecidos (balanços de massa e energia), relações empíricas, conceitos implícitos e restrições externas.

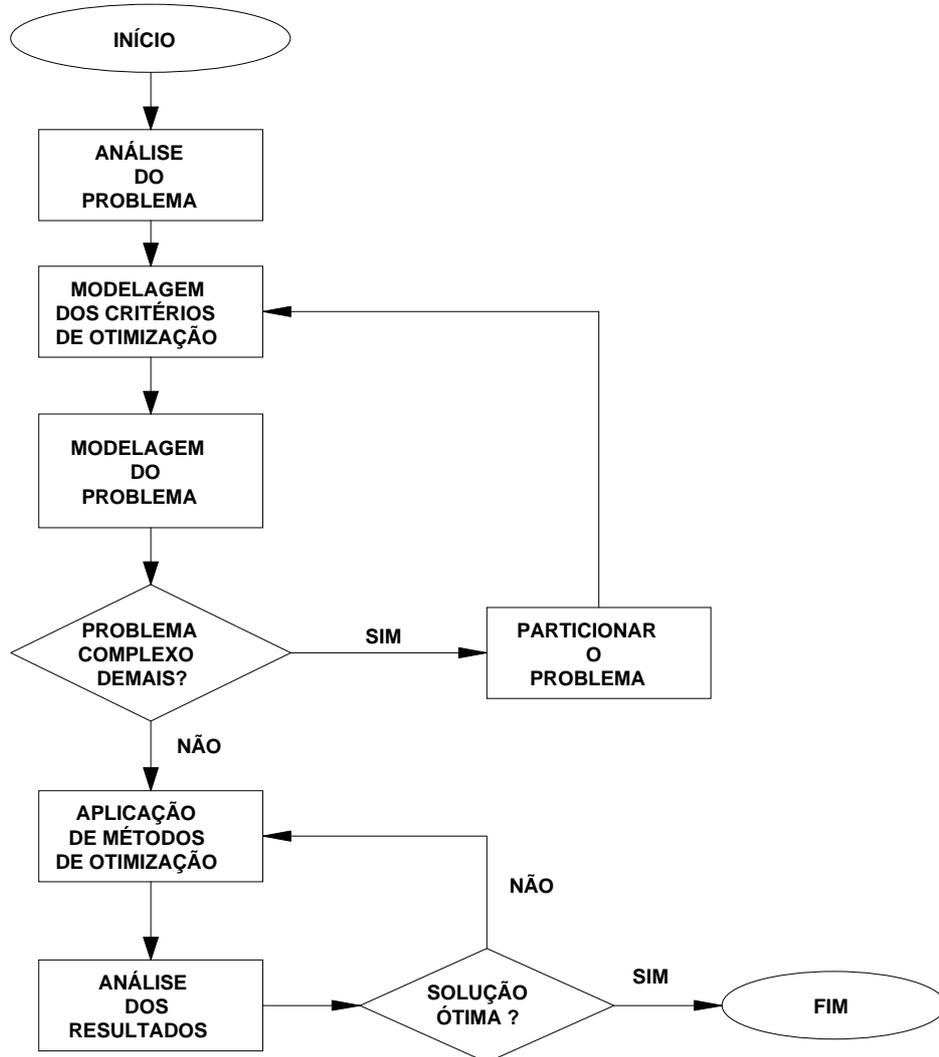


Figura 0.1- Etapas da solução de problemas de otimização

Se a formulação do problema é muito ampla para o escopo, há a necessidade de particioná-lo, dividi-lo em partes manejáveis e/ou simplificar a função objetivo e o modelo. Esta etapa sugere que a descrição matemática do problema seja simplificada tanto quanto possível sem perda das características essenciais do problema. No caso de particionamento do problema, o algoritmo de solução proposto por EDGAR e HIMMELBLAU(1988) não indica alternativas para a reunião das soluções dos subproblemas para a obtenção da solução do problema original.

Finalmente, a fase de resolução e análise da solução envolve a aplicação de um método de otimização adequado à representação formal estabelecida para o

problema, análise dos resultados e exame da sensibilidade do resultado a alterações nos coeficientes, no problema e nas hipóteses.

Virtualmente, todo método de otimização envolve iteração e a efetividade de uma dada técnica depende, em geral, de uma boa estimativa inicial dos valores das variáveis para alcançar a solução ótima. A etapa de análise envolve a avaliação da solução candidata para determinar se ela já é ótima. Em alguns problemas, podemos verificar se as condições suficientes para uma solução ótima foram satisfeitas. Muito freqüentemente existe uma solução ótima, embora não possamos demonstrar que as condições suficientes para obtê-la tenham sido satisfeitas. Tudo o que podemos mostrar, neste último caso, por cálculos numéricos repetitivos, é que o valor da função objetivo, para uma suposta solução ótima, é superior (ou inferior) a todas as alternativas conhecidas.

O algoritmo apresentado contempla as etapas fundamentais para a solução de um problema de otimização. Sugere que, através da análise do problema, identifiquemos as variáveis de projeto, permitindo a caracterização do espaço de soluções do problema de otimização. A etapa de modelagem dos critérios de otimização envolve a caracterização da função custo ( $c$ ). A etapa de modelagem do problema estabelece as demais condições: a determinação do modelo matemático do processo ou equipamento (e respectiva descrição) e inclusão das restrições sobre as variáveis de projeto. A aplicação de um método de otimização, adequado ao problema em estudo, propicia a determinação da solução candidata que possui custo mínimo, de acordo com a nossa definição do problema de otimização, apresentada no capítulo 2.

### **3.3 Uma visão sobre métodos de otimização**

De um modo geral, podemos classificar os métodos de otimização em determinísticos e probabilísticos. Os métodos ditos determinísticos são aqueles que, em sua formulação, levam em consideração os processos físicos que relacionam as entradas e saídas. A estrutura dos métodos probabilísticos não apresenta relação com o fenômeno físico em si, obtendo os valores das variáveis de saída a partir da ocorrência em tempos anteriores da própria variável ou de outra que possa com ela estar relacionada.

### 3.3.1 Métodos determinísticos

LAW e KELTON (1991) definem um modelo determinístico como aquele que não contém nenhum componente probabilístico. Nestes modelos, a saída é *determinada* uma vez que o conjunto de entradas e relações do modelo tenham sido especificadas. Esta definição pode ser estendida para os métodos de otimização também denominados determinísticos. A característica fundamental destes métodos é que sua aplicação independe dos valores das funções envolvidas (GILL et alii, 1993).

A aplicação de métodos determinísticos sobre o conjunto de variáveis do problema determina *uma* solução cujo custo é mínimo. No entanto, não há garantias de que a solução encontrada corresponda a um mínimo global da função. Nas seções 3.3.1.1 a 3.3.1.4 descrevemos as características básicas de alguns métodos que podem ser classificados como determinísticos.

#### 3.3.1.1 Funções de uma variável sem restrição

O problema de otimização de funções sem restrição pode ser descrito, através da adequação da definição apresentada no capítulo 2. Neste caso, o conjunto de variáveis do problema de otimização ( $V$ ) é constituído por *uma* variável de projeto, pertencente ao conjunto dos números reais, expresso na forma

$$V = \{ v \mid v \in \mathfrak{R} \}$$

e confunde-se com o conjunto de variáveis ( $V$ ), já que não existem restrições à variável pesquisada. Assim, a solução do problema de otimização sempre atenderá a condição 1 da definição do problema de otimização (capítulo 2), correspondendo a uma *solução correta*.

Os métodos que recaem nesta categoria foram denominados por TANOMARU (1995) de métodos enumerativos de otimização. Eles examinam cada ponto do espaço de estados em busca do valor mínimo para a função custo (função objetivo), adotando procedimentos específicos para determinar a *direção de busca*, ou seja, qual o próximo valor a ser examinado.

Muitas vezes, no caso de problemas mais complexos, pode ser conveniente estabelecer critérios de forma que o método não alcance a melhor solução, mas que quase sempre encontre uma solução muito boa, baseando-se na idéia de *busca heurística*. O propósito de um *função heurística* é guiar o processo de busca na direção mais promissora, sugerindo que caminho seguir primeiro, quando houver mais de um disponível (RICH e KNIGHT, 1994).

Os métodos que envolvem a busca heurística podem ser descritos independentemente de qualquer domínio de problemas, mas, quando aplicados a um tipo de problema em particular, tornam-se altamente dependentes do modo como eles exploram o conhecimento de cada domínio da aplicação. Quando forem utilizados como métodos complementares em algoritmos de otimização mais complexos, tornam-se também dependentes da forma como exploram o conhecimento de cada domínio da aplicação (RICH e KNIGHT, 1994).

Alguns dos métodos que recaem nesta categoria são os Procedimentos de Busca e Limite (“*scanning and bracketing procedures*”), Método de Newton, Método de Aproximação por diferenças finitas (Método quasi-Newton), Método da Secante, Método de limitação da região de busca, Métodos de Aproximação Polinomial e os Métodos de Busca Heurística, como Busca em profundidade, Busca em amplitude, Gerar-e-testar, Subida de encosta e a Busca pela melhor escolha, entre outros. (BOAS, 1963; EDGAR e HIMMELBLAU, 1988; HIMMELBLAU, 1963; RICH e KNIGHT, 1994). Estes métodos diferenciam-se basicamente pelos procedimentos recomendados para determinação do melhor caminho a seguir na busca da solução.

### **3.3.1.2 Funções multivariáveis sem restrição**

O problema de otimização de funções multivariáveis envolve a determinação da solução candidata, que minimiza a função custo,  $c$ . Como no caso anterior, não existem restrições aos valores das variáveis pertencentes ao espaço de soluções.

A direção de busca é determinada a partir de um ponto inicial e a função custo é minimizada naquela direção. A busca é interrompida segundo algum critério e, então, uma nova direção é determinada, até ser detectada a limitação de uma região de

mínimo. Neste ponto a busca pode ser concluída e utilizado um método mais sofisticado, para que seja alcançado um grau de precisão maior.

Os métodos adotados para otimização de funções multivariáveis sem restrição são denominados por EDGAR e HIMMELBLAU(1988) de métodos de programação não linear. Os métodos, que recaem nesta categoria, basicamente diferem entre si na forma como são geradas as direções de busca.

Os métodos de otimização multivariáveis denominados *diretos* são métodos que não requerem o uso de derivadas para determinar a direção de busca da solução. Alguns destes métodos são a Busca randômica, Busca baseada em quadrante ("grid search") e Busca invariante. EDGAR e HIMMELBLAU (1988) indicam, além dos citados acima, os métodos Simplex (SPENDLEY et alii (1962) apud EDGAR e HIMMELBLAU (1988)), a busca com direções conjugadas e o método de Powell (POWELL(1970) apud EDGAR e HIMMELBLAU (1988)).

Já os métodos *indiretos* utilizam-se de derivadas para determinar a direção de busca para otimização. Recaem nesta categoria o método do gradiente, gradiente conjugado, método de Newton, método da secante, entre outros (EDGAR e HIMMEMBLAU, 1989).

### **3.3.1.3 Funções multivariáveis com restrições**

A programação linear (PL) é um dos métodos mais amplamente usados e um dos mais efetivos. O termo programação linear foi proposto por George Dantzig, em 1947, com o objetivo de nomear o procedimento de otimização de problemas em que tanto a função objetivo quanto as restrições são lineares (HIMMEMBLAU e EDGAR, 1988).

Segundo HILLIER e LIEBERMAN (1980), a programação linear trata de problemas de alocação otimizada de recursos limitados entre atividades que competem. O termo "programação", segundo estes autores, é sinônimo de "planejamento". Assim, a PL envolve o planejamento de atividades para obter um

resultado ótimo, isto é, o melhor resultado que atinge o objetivo especificado entre todas as possíveis alternativas.

Um programa linear está em uma forma padrão se é:

- um problema de maximização (ou minimização);
- contém restrições de igualdade e
- todas as variáveis pertencem ao conjunto dos números naturais.

Logo, a definição do problema envolve uma limitação ao conjunto de valores possíveis das variáveis pertencentes ao conjunto  $V$  de variáveis de projeto. Além disso, as restrições impostas sobre estas variáveis restringem-se a relações de igualdade.

Em muitos problemas práticos, as variáveis de decisão somente têm sentido se assumirem valores inteiros, restrição esta de difícil solução matemática. Entretanto, alguns progressos têm sido feitos (HILLIER e LIEBERMAN, 1980) no desenvolvimento de procedimentos de solução para o caso dos problemas de *programação linear*, sujeitos a esta *restrição adicional* de que as variáveis devem assumir valores inteiros.

Embora a hipótese básica da Programação Linear seja satisfeita em numerosos problemas práticos, algumas vezes é necessário reformulá-la para atender os casos onde as restrições são do tipo não-linear. A *programação quadrática* recai entre estes casos e refere-se ao problema de maximizar (ou minimizar) uma função objetivo quadrática sujeita a restrições lineares. Já o problema de *programação convexa* (HILLIER e LIEBERMAN, 1980) refere-se ao caso especial de programação não linear onde a função objetivo é uma função *côncava* e todas as restrições são funções *convexas*.

#### **3.3.1.4 Processos discretos**

Muitas plantas de processos e partes de equipamentos são representadas como processos multiestágios, mesmo se o conjunto sob análise não é constituído por

unidades separadas. A determinação das condições ótimas de operação ou projeto em tais processos é complicada, porque os próprios estágios são quantidades discretas e as condições a serem estabelecidas para cada estágio estão interrelacionadas. Os métodos discutidos a seguir abordam este tipo de problema.

#### **3.3.1.4.1 Divisão e conquista**

Historicamente, o termo "divisão e conquista" foi criado pelos generais napoleônicos (1800-1814) (TERADA, 1991), que aplicavam uma estratégia de dividir o exército inimigo em vários sub-exércitos separados, para poder vencer cada uma das partes mais facilmente. O método de desenvolvimento de algoritmos por divisão e conquista reflete esta estratégia.

A Divisão e Conquista, segundo TOSCANI e VELOSO (1990), é um método que consiste em, dado um problema, decompô-lo em subproblemas menores independentes, resolver estes problemas recursivamente e então combinar as soluções. É um método *recursivo descendente* ("top-down") e útil no caso de problemas que podem ser resolvidos por decomposição em problemas menores, mas *do mesmo tipo*.

#### **3.3.1.4.2 Programação dinâmica**

A essência do método de Programação Dinâmica recai na decomposição de um problema de otimização com múltiplas variáveis interconectadas em uma seqüência de subproblemas que podem ser solucionados em série.

Segundo TOSCANI e VELOSO (1990), a Programação Dinâmica " recebe uma seqüência de problemas de tamanho mínimo, soluciona esses problemas, guarda os resultados, combina subproblemas menores e seus resultados, para obter e resolver problemas maiores, até recompor e resolver o problema original. O problema neste método é decomposto uma única vez, de forma que os subproblemas menores são gerados antes dos subproblemas maiores (é um método *ascendente* ou "bottom-up")".

Os resultados parciais são armazenados em uma tabela para serem usados numa outra iteração. Uma vantagem do método está no fato de, uma vez resolvido um

subproblema, a solução será guardada para consulta e não mais calculada a cada aparecimento (CORMEN et alii, 1990; HILLIER e LIEBERMAN, 1980; WAGNER, 1985). Segundo WAGNER (1985), “a característica comum de todos os modelos de programação dinâmica é expressar o problema de decisão por meio de uma formulação recursiva”.

A Programação Dinâmica é aplicável, quando, ao contrário dos problemas tratáveis com Divisão e Conquista, existem subproblemas compartilhados no particionamento inicial em subproblemas.

O desenvolvimento de um algoritmo de programação dinâmica pode ser dividido em uma seqüência de quatro etapas (CORMEN et alii, 1990):

1. caracterizar a estrutura de uma solução ótima;
2. definir recursivamente o valor de uma solução ótima;
3. calcular o valor de uma solução ótima de maneira "ascendente";
4. construir uma solução ótima a partir da informação computada.

As etapas 1 a 3 formam a base da solução de um problema por programação dinâmica. A etapa 4 pode ser omitida somente se o valor de uma solução ótima é requerido. Quando se desenvolve a etapa 4, algumas vezes acrescenta-se informações adicionais durante o cálculo da etapa 3 para facilitar a construção de uma solução ótima.

#### **3.3.1.4.3 Métodos gulosos**

Para muitos problemas de otimização, o uso da programação dinâmica para determinar as melhores escolhas implica mais esforço do que seria necessário, indicando a possibilidade de outros algoritmos mais simples realizarem estas escolhas.

Um *algoritmo guloso* sempre faz a escolha que parece ser a melhor no momento, ou seja, em qualquer estágio individual, um algoritmo guloso seleciona a opção que corresponde a um "ótimo local", sob algum ponto de vista.

A diferença essencial entre este método e a programação dinâmica é que no método guloso apenas uma seqüência de decisões é gerada, enquanto que na programação dinâmica, várias seqüências de decisões podem ser geradas.

### 3.3.2 Métodos Probabilísticos

Os métodos determinísticos descritos anteriormente pressupõem que todos os dados necessários para descrição do modelo sejam conhecidos. Mas, na vida real, dificilmente se conhece todos estes valores com absoluta certeza e necessitamos avaliar situações em que alguns valores das variáveis, pertencentes ao espaço do problema, assumem valores aleatórios.

Duas são as abordagens a serem adotadas (WAGNER, 1985) para lidar com a falta de conhecimento dos valores de algumas variáveis que constituem uma solução candidata: testar a sensibilidade da solução em modelos determinísticos e construir modelos que contenham elementos probabilísticos. Em ambas, as variáveis desconhecidas são vistas como predições imperfeitas a serem caracterizadas por distribuições de probabilidades para os diferentes eventos possíveis. Frequentemente, os modelos resultantes são meras versões mais complicadas de modelos determinísticos e podem ser resolvidos pelos mesmos métodos numéricos (através da programação dinâmica, por exemplo). Em outras ocasiões, para obter as soluções, teremos de estabelecer heurísticas ou alguma forma arbitrária de escolha entre as soluções para determinar a solução ótima.

Em qualquer dos casos, segundo HILLIER e LIEBERMAN (1980), os modelos probabilísticos são inerentemente mais difíceis de usar que as versões determinísticas. Primeiro, porque há novas dificuldades conceituais, tais como a interpretação de probabilidades propriamente ditas e o significado da *otimalidade*. Segundo, porque há novas dificuldades técnicas relacionadas à matemática da otimização. Por exemplo, mesmo quando um modelo estocástico for uma generalização direta de uma versão determinística, a carga computacional aumenta, uma vez que se deve considerar cada evento possível, em vez de somente uma única

estimativa. Além disso, em modelos estocásticos, as funções objetivo são tipicamente não-lineares, tornando a tarefa de otimização mais complexa. E além disso são necessários mais dados para a especificação das distribuições de probabilidade.

No entanto, os métodos probabilísticos permitem uma melhor exploração do espaço de soluções, aumentando a possibilidade de determinação do extremoextremo global da função objetivo pesquisada.

### 3.3.2.1 Recozimento Simulado

METROPOLIS et alii (apud KIRKPATRICK et alii, 1983) propuseram, no início dos anos 50, um algoritmo simples que pode ser usado, por exemplo, para simular o comportamento de uma coleção de átomos em equilíbrio a uma dada temperatura. Em cada etapa deste algoritmo é realizado um pequeno deslocamento aleatório de um átomo e calculada a variação resultante da energia do sistema,  $\Delta E$ . Se  $\Delta E \leq 0$ , o deslocamento é aceito e a configuração com o átomo deslocado é usada como ponto de partida para o próximo passo. O caso de  $\Delta E > 0$  é tratado probabilisticamente: a probabilidade que a configuração seja aceita é

$$P(\text{de aceitar um aumento de energia } \Delta E) = \exp(-\Delta E / k_B T).$$

Nesta relação,  $T$  é a temperatura e  $k_B$  é um parâmetro que determina o *cronograma de têmpera*, isto é, como a probabilidade varia com a temperatura  $T$ .

Os números aleatórios uniformemente distribuídos no intervalo (0,1) constituem um meio conveniente para implementar a parte aleatória do algoritmo. Um destes números é selecionado e comparado com  $P(\Delta E)$ . Se ele é menor do que  $P(\Delta E)$ , a nova configuração é retida; caso contrário, a configuração original é usada no próximo passo. Repetindo estes passos básicos diversas vezes, podemos simular a movimentação térmica de átomos, em contato com um banho térmico à temperatura  $T$ . A escolha de  $P(\Delta E)$  tem como consequência a evolução do sistema de acordo com a distribuição de Boltzmann.

KIRKPATRICK et alii (1983) observaram que a determinação de qual arranjo de átomos tem a menor energia era semelhante a encontrar quais os valores das variáveis de um problema de otimização que minimizariam a função objetivo.

Para encontrar o valor mínimo da função objetivo, o processo inicia a uma alta temperatura e aplica o algoritmo até ser alcançado o *estado estacionário*, quando não ocorrem mais alterações no sistema. Quando o valor da função objetivo não decresce sistematicamente, mas somente varia aleatoriamente de uma iteração para a seguinte, inicia-se a lenta redução da temperatura e são realizadas mais algumas iterações. Eventualmente um novo estado de equilíbrio é alcançado com um valor menor que o anterior. O processo continua até que a temperatura seja reduzida a zero, proporcionando uma configuração final com um valor muito baixo da função objetivo, talvez até o valor ótimo. Este processo é denominado de *Recozimento Simulado ou Têmpera Simulada* ("*simulated annealing*") devido às semelhanças ao processo físico de têmpera que METROPOLIS et alii (apud KIRKPATRICK et alii, 1983) originalmente simularam.

O Recozimento Simulado é uma variação da *Subida de encosta*, método de busca que envolve uma função heurística, a qual fornece uma estimativa da proximidade de uma determinada solução em relação à solução ótima (RICH e KNIGHT, 1994). A partir do valor desta função, o método decide sobre como continuar a exploração do espaço de soluções. No caso do Recozimento Simulado, no início do processo, podem ser feitos alguns movimentos descendentes, ou seja, o método aceita possíveis soluções de maior custo (no caso do problema de minimização), na expectativa de escapar de um possível mínimo local. A idéia é explorar suficientemente todo o espaço do problema logo no início, para que a solução final seja relativamente independente do estado inicial. Como, em geral, o objetivo é minimizar a função objetivo, na realidade não temos uma subida de encosta, mas sim uma *descida de vale*.

Quatro ingredientes são necessários, segundo KIRKPATRICK et alii (1983), para implementação do algoritmo de Recozimento Simulado:

- uma descrição concisa de uma configuração do sistema;

- um gerador aleatório de "movimentos" ou rearranjos dos elementos em uma configuração;
- uma função objetivo quantitativa contendo os compromissos a serem assumidos e
- um cronograma de t mpera das temperaturas e intervalos de tempo para os quais o sistema evoluir .

### 3.3.2.2 Evolu o Estoc stica

A Evolu o Estoc stica   uma t cnica dedicada   otimiza o combinatorial proposta por SAAB e RAO (1991). O m todo   similar ao Recozimento Simulado, tendo como principal diferen a o fato da Evolu o Estoc stica aceitar inicialmente somente ganhos positivos fazendo com que a Subida de encosta (RICH e KNIGHT,1994) inicie somente quando for alcan ado um m nimo local. Segundo os autores, esta abordagem permite que a Evolu o Estoc stica apresente converg ncia mais r pida que o Recozimento Simulado, com resultados similares ou at  melhores.

O algoritmo caracteriza-se por *estrat gias de movimento* que determinam a gera o de novos valores para as vari veis na pr xima itera o. Segundo SAAB e RAO (1991), dada uma estrat gia de movimento, a solu o candidata  $s'$    uma solu o *vizinha* de uma solu o candidata  $s$  se  $s'$  pode ser gerada a partir de  $s$  por um n mero m ximo de movimentos, que podem ser simples ou compostos.

O *ganho* de um movimento   resultado da compara o entre o custo  $c$  da solu o candidata inicial  $s$  e o custo  $c'$  da nova solu o  $s'$ , ap s a ocorr ncia do movimento.

Cada movimento   aceito se o ganho for maior que um n mero aleat rio, gerado no intervalo  $(0, -p)$ , onde  $p$    o par metro que permite ganhos negativos de forma a realizar a subida de encosta. Um par metro  $r$  controla o n mero de itera es, correspondendo a uma estimativa do tempo necess rio para melhorar a solu o corrente. Cada vez que   encontrada uma solu o melhor, o contador   decrementado de  $R$  unidades, proporcionando mais etapas para o algoritmo de Evolu o Estoc stica.

A técnica de Evolução Estocástica, segundo seus autores (SAAB e RAO, 1991) pretende superar as dificuldades inerentes ao Recozimento Simulado, tais como a necessidade de um acerto cuidadoso dos parâmetros de controle e uso de excessivo tempo de computação, através de uma modelagem apropriada das soluções candidatas do problema; a noção de movimento associada aos elementos "móveis" (variáveis) das soluções candidatas; um valor inicial para o parâmetro de controle e um método para atualizá-lo e um valor para o parâmetro do critério de parada. Segundo os autores, esta técnica tem proporcionado bons resultados associados a uma execução rápida, quando comparados com os resultados obtidos através do Recozimento Simulado.

### 3.3.2.3 Computação evolucionária

Segundo FOGEL (1994), a evolução Darwiniana é um mecanismo efetivo de busca e otimização. A evolução dos seres vivos (biota) demonstra um comportamento otimizado a cada nível: a célula, o órgão, o indivíduo e a população. Este processo de evolução pode ser aplicado a problemas onde soluções heurísticas não fornecem resultados satisfatórios.

As teorias evolucionárias mais amplamente aceitas baseiam-se no paradigma neo-Darwiniano (FOGEL, 1994). Estas teorias atestam que a história da vida pode ser completamente descrita por processos físicos (reprodução, mutação, competição e seleção) que operam sobre ou entre populações e espécies. Os indivíduos e as espécies podem ser vistos como uma combinação de sua programação genética (genótipo) e a expressão de seu comportamento, determinado pelas condições ambientais (fenótipo), sobre os quais estes processos físicos agem. A evolução é vista como um processo de otimização, pois a seleção produz fenótipos tão próximos do ótimo quanto possível, a partir da especificação de um estado inicial e das restrições ambientais.

Segundo TANOMARU (1995), a Computação Evolucionária encara a teoria de evolução Darwiniana como um *processo adaptativo* de otimização, sugerindo um modelo em que populações *evoluem* (buscam um estado melhor) de modo a melhorar

o *desempenho geral* da população (medido através de uma função objetivo) com respeito a um dado problema.

Atualmente, a Computação Evolucionária envolve um crescente número de paradigmas e métodos, dos quais os mais importantes são os Algoritmos Genéticos, a Programação Evolucionária e as Estratégias Evolucionárias, entre outros (TANOMARU, 1995).

### 3.3.2.3.1 Algoritmos Genéticos

Os Algoritmos Genéticos (AGs) constituem as técnicas mais estudadas e difundidas de Computação Evolucionária, pela sua flexibilidade, relativa simplicidade de implementação e eficácia em realizar busca global em ambientes adversos.

Vista de forma global, a evolução natural implementa mecanismos adaptativos de otimização que, embora estejam longe de serem uma forma de busca aleatória, com certeza envolvem aleatoriedade. É este tipo de busca *inteligente*, mas não determinística, que os algoritmos genéticos tentam imitar (TANOMARU, 1995).

Estes algoritmos pertencem à classe dos métodos probabilísticos de busca e otimização, embora não envolvam variáveis aleatórias. Apesar do uso do conceito de probabilidade, os algoritmos genéticos tentam dirigir a busca para regiões do espaço de soluções onde é “provável” a localização de pontos ótimos.

TANOMARU propõe a seguinte definição para os algoritmos genéticos:

*“Métodos computacionais de busca baseados nos mecanismos de evolução natural e na genética. Em AGs, uma população de possíveis soluções para o problema em questão evolui de acordo com operadores probabilísticos concebidos a partir de metáforas biológicas, de modo que há uma tendência que, na média, os indivíduos representem soluções cada vez melhores à medida que o processo evolutivo continua”.*

De um modo geral, os algoritmos genéticos diferenciam-se por operarem sobre uma população de pontos e não partir de um ponto isolado e em um espaço de soluções codificadas e não diretamente no espaço de busca. Estes algoritmos necessitam somente de informação sobre o valor da função objetivo para cada membro da população e usam transições probabilísticas e não regras determinísticas. Já o Recozimento Simulado e na Evolução Estocástica, métodos que também se utilizam de transições probabilísticas, operam sobre pontos isolados (soluções candidatas) e analisam diretamente o espaço de busca, calculando, a cada decisão, o valor da função objetivo para a solução sob análise.

Conforme TANOMARU (1995), os Sistemas Classificadores e a Programação Genética podem ser vistos como aplicações especiais de Algoritmos Genéticos.

O campo da Programação Genética aplica as idéias de algoritmos genéticos a estruturas muito mais complexas que seqüências binárias. Cada cromossomo representa uma árvore computacional de tamanho variável, em contraste com os cromossomos de tamanho fixo da grande maioria dos algoritmos genéticos. Assim, a Programação Genética realiza a geração automática de programas de computador para resolver um dado problema.

Os Sistemas Classificadores, por sua vez, são basicamente sistemas de produção (regras) adaptativos, em que regras do tipo “se-então” evoluem de acordo com um algoritmo genético. Cada regra é denominada um classificador e é representada por uma seqüência gerada a partir de um alfabeto (TANOMARU, 1995).

### **3.3.2.3.2 Programação Evolucionária**

Os métodos de Programação Evolucionária foram originalmente desenvolvidos por FOGEL (1994). Tipicamente, na Programação Evolucionária há uma população de  $N$  indivíduos que são copiados na totalidade numa população temporária e sofrem mutações variáveis. Um torneio estocástico é realizado para extrair a população seguinte desse grupo de  $2N$  indivíduos. Não há nenhuma restrição que implique em um tamanho de população constante e não há recombinação entre os indivíduos (TANOMARU, 1995).

### **3.3.2.3.3 Estratégias Evolucionárias**

As Estratégias Evolucionárias surgiram na Alemanha, com RECHENBERG e SCHWEFEL (apud TANOMARU,1995) na busca do desenvolvimento de um método eficiente de otimização de funções reais multimodais e não-diferenciáveis.

No esquema mais simples de Estratégia Evolucionária, um indivíduo-pai gera um só filho através de aplicação de mutações de distribuição Gaussiana, média zero e variância variável, de modo que pequenas mutações ocorram mais frequentemente que mutações mais radicais. Sempre que um filho “melhor” que o pai é gerado, o pai é substituído e o processo é reiniciado (TANOMARU, 1995).

## **3.4 Taxonomia de métodos de otimização**

Na Ciência da Computação, na Engenharia Elétrica e Química e na Matemática, encontramos propostas de diversos métodos, que poderiam ser classificados segundo variados critérios, tais como natureza matemática do problema (natureza matemática da função objetivo e restrições), procedimentos de busca da solução ótima, etc. HILLIER e LIEBERMAN (1980) propõem uma taxonomia para os métodos de otimização, classificando-os segundo duas grandes categorias: programação matemática e modelos probabilísticos (Figura 3.2).

Já EDGAR e HIMMELBLAU (1988) classificam as métodos de acordo com as características do problema: funções sem restrição, programação matemática e processos discretos (Figura 3.3), enquanto GILL et alii (1993) propõem uma classificação baseada na natureza da função objetivo (Figura 3.4).

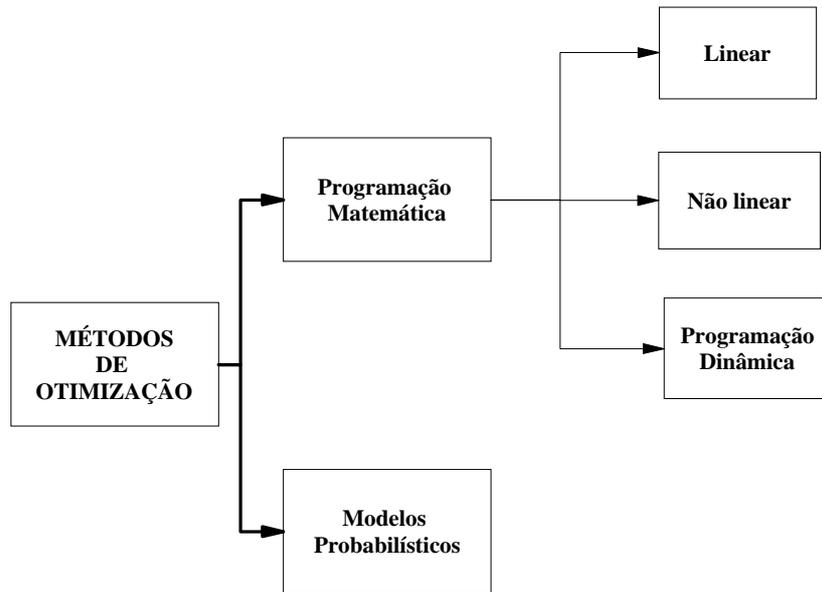


Figura 0.2 -Taxonomia proposta por HILLIER e LIEBERMAN (1980)

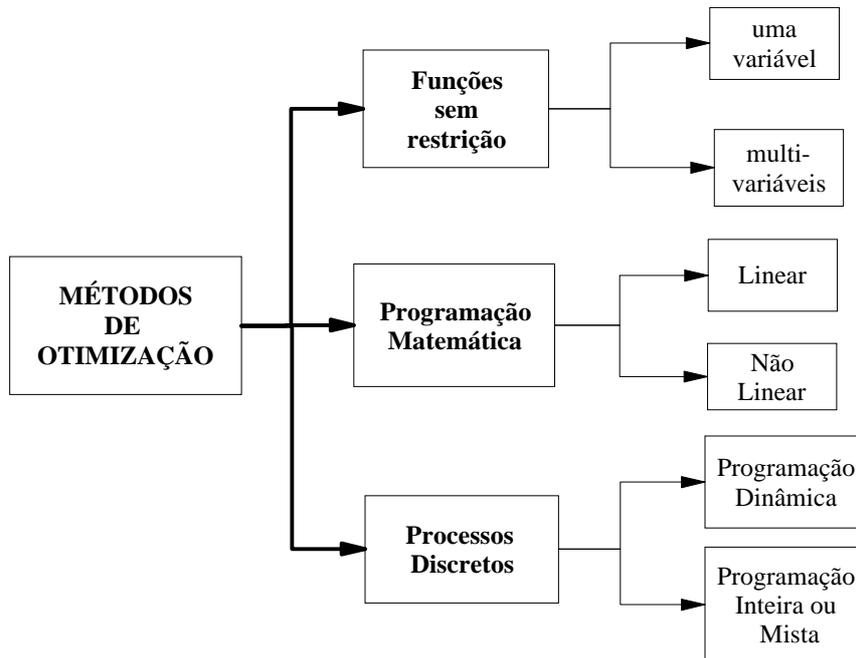


Figura 0.3 -Taxonomia proposta por EDGAR e HIMMELBLAU (1988)

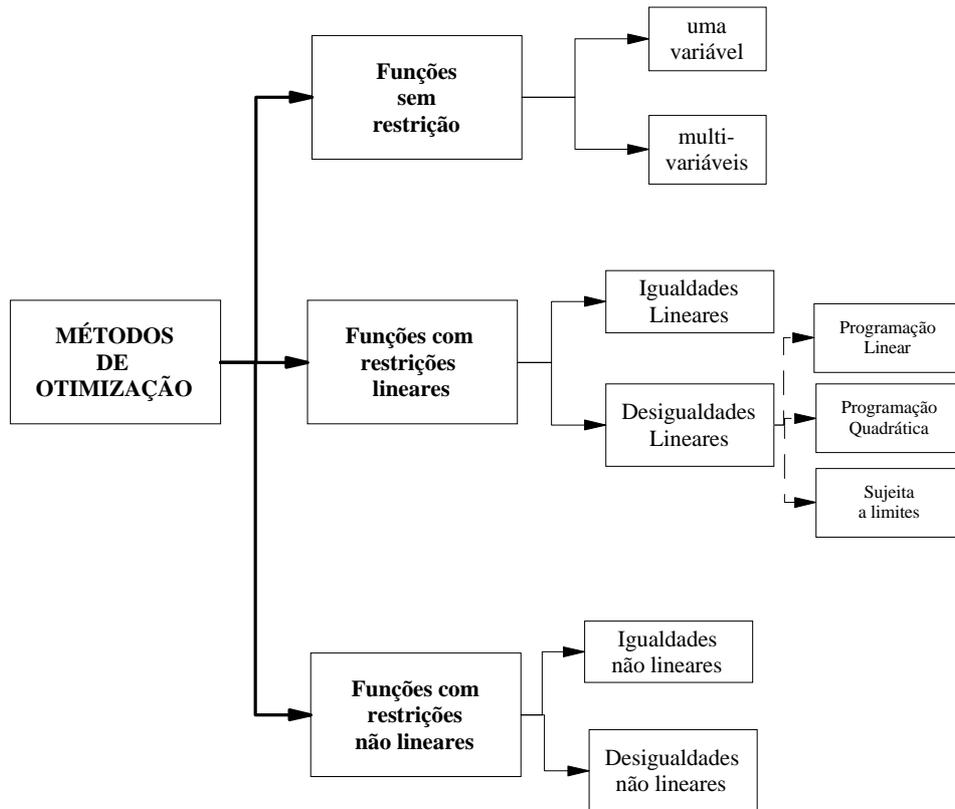


Figura 0.4 - Taxonomia proposta por GILL et alii (1993)

TANOMARU (1995) afirma que existem três correntes fundamentais de métodos gerais de otimização: métodos probabilísticos, numéricos e enumerativos, além de um grande número de métodos híbridos. A Figura 3.5 apresenta esquematicamente esta proposta de classificação.

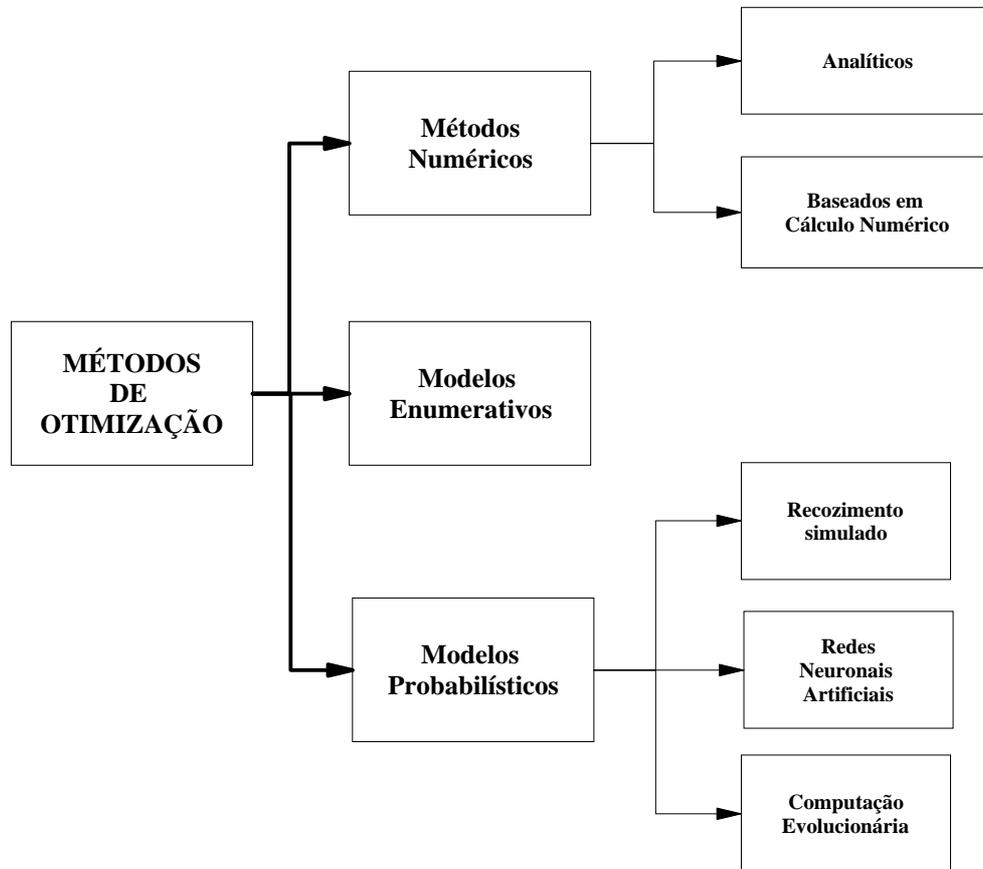


Figura 0.5 - Taxonomia proposta por TANOMARU (1995)

SHANG e WAH (1996) classificam os métodos de otimização em métodos de minimização local e de minimização global (Figura 3.6). Métodos de minimização local são aqueles que convergem para um mínimo local, e, segundo estes autores, encontram este mínimo local de maneira eficiente, sendo adequados a problemas unimodais. Os métodos de minimização global, ao contrário, empregam estratégias heurísticas para procurar o mínimo global e não interrompem o procedimento de busca ao encontrar um mínimo local. No entanto, esta classificação refere-se somente aos métodos de minimização de problemas não lineares e sem restrições, limitando o escopo da aplicação.



Figura 0.6 - Taxonomia proposta por SHANG e WAH (1996)

As classificações apresentadas não são abrangentes o suficiente para abarcar os métodos levantados na literatura consultada. Além disso, uma outra forma de classificação pode proporcionar uma melhor compreensão da distribuição dos métodos, facilitando o estabelecimento de relações entre eles. Assim, propõe-se uma nova taxonomia para os métodos de otimização, apresentada na Figura 3.7, classificando-os em métodos Determinísticos e métodos Probabilísticos.

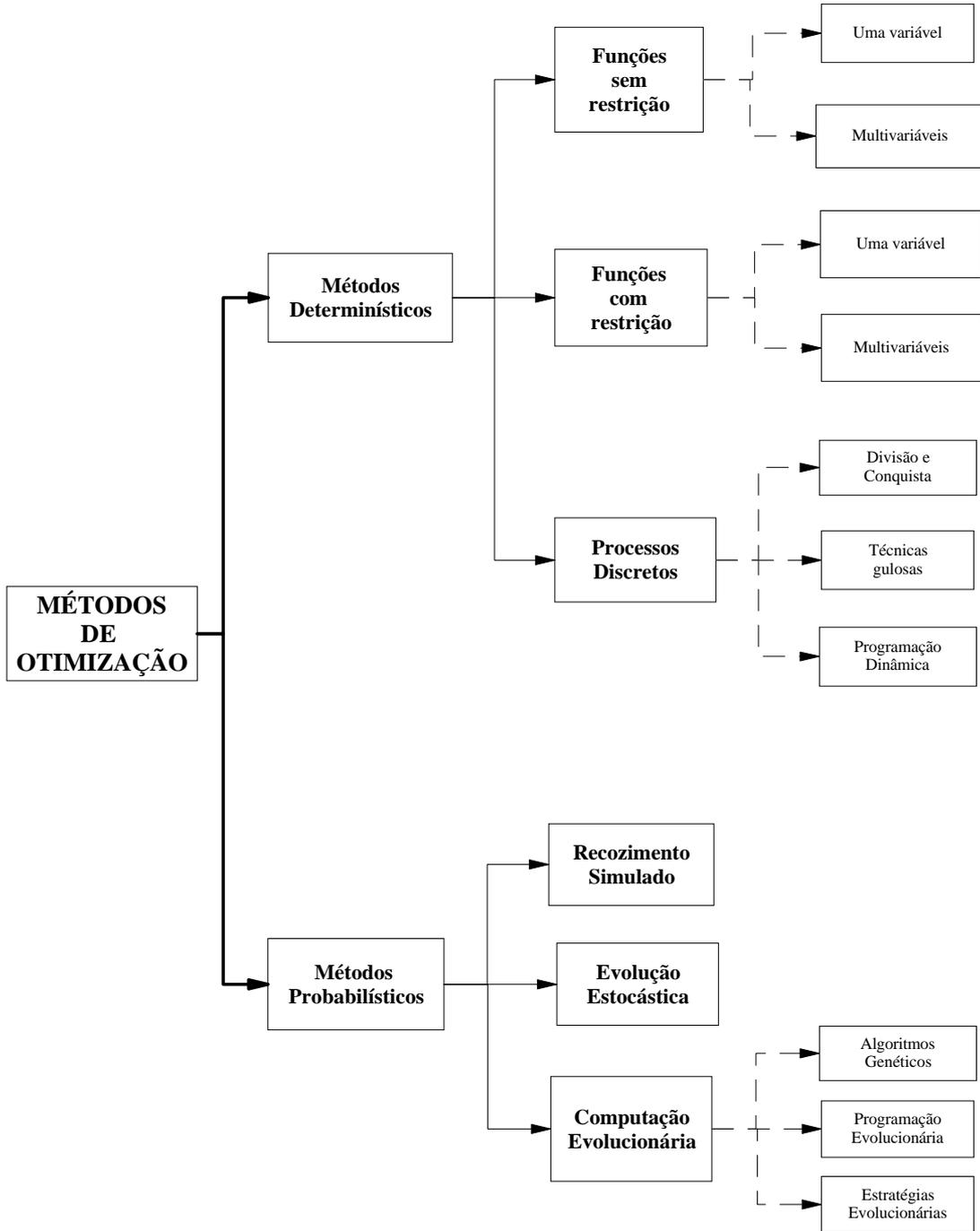


Figura 0.7 - Proposta de nova taxonomia para os métodos de otimização

## 4. OTIMIZAÇÃO DO PROJETO DE COLUNAS DE DESTILAÇÃO

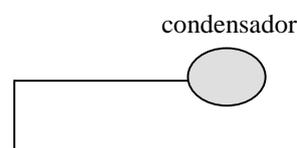
Os processos de separação são uma fase importante na maioria dos processos industriais. As separações são necessárias porque as espécies químicas de uma corrente devem ser enviadas para múltiplos destinos com concentrações específicas.

Para alcançar a separação desejada, devemos determinar o melhor tipo e sequência de separadores a ser usada, avaliar as diferenças de propriedades físico-químicas, determinar o número de fases em cada separador e estabelecer as condições de operação para todo o processo. A otimização é necessária tanto na fase de projeto do equipamento quanto na determinação das condições ótimas de operação. No nosso caso, abordaremos a otimização na fase de projeto.

Para que possamos simular e otimizar uma coluna de destilação, necessitamos elaborar um modelo que descreva o problema de projeto de tal equipamento. Neste capítulo apresentamos um modelo de projeto de colunas de destilação, aplicado à separação de sistemas constituídos por dois componentes (sistemas binários). A partir deste modelo, propomos a formulação de uma função objetivo aplicável ao caso em estudo.

### 4.1 Modelos de projeto para colunas de destilação

Uma coluna de destilação típica e os equipamentos auxiliares básicos (condensador e refeedor) pode ser esquematizada conforme mostrado na Figura 4.1. A corrente  $F$  designa a taxa de alimentação da coluna, enquanto as correntes  $D$  e  $W$  designam os produtos destilado e resíduo, obtidos como resultado da operação. A introdução da alimentação, em geral, ocorre em um prato intermediário, dividindo a coluna em duas seções, denominadas Seção Superior ou de Enriquecimento e Seção Inferior ou de Esgotamento.



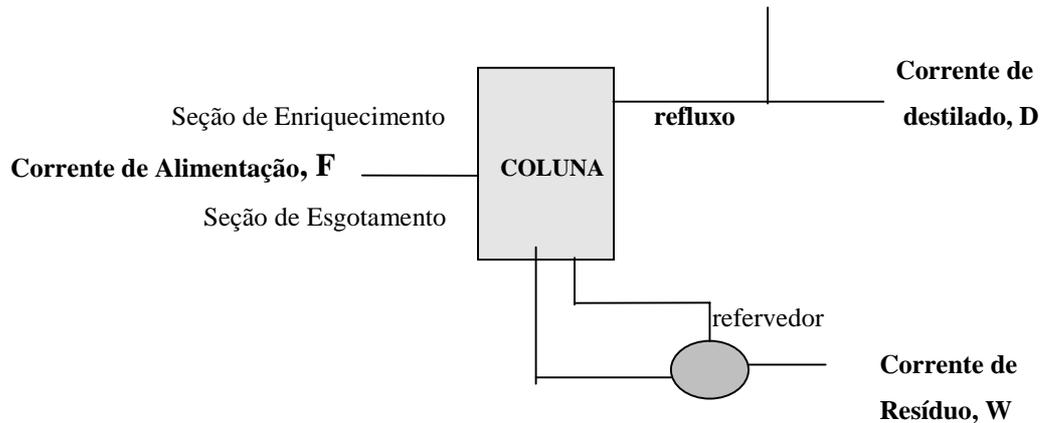


Figura 0.1 - Representação esquemática de uma coluna de destilação

A razão entre a quantidade de líquido retornada como *refluxo* e a quantidade retirada como *destilado* é denominada *razão de refluxo*,  $R$ . A razão de refluxo é inversamente proporcional ao número de pratos necessários à separação. Assim, a operação com uma razão de refluxo mínima implicaria em um número infinito de pratos, enquanto a operação com refluxo total (mas sem retirada de produtos) corresponderia ao número mínimo de pratos. Além disso, uma alteração no valor da razão de refluxo determina alterações nas taxas de calor trocadas no condensador e refervedor, implicando em maior ou menor consumo de água de refrigeração (no condensador) e vapor de aquecimento (no refervedor).

As colunas de destilação são modeladas em função do tipo de contato promovido entre as fases líquido e vapor: contato contínuo ou contato descontínuo.

No contato contínuo, as fases líquido e vapor escoam em contracorrente ao longo da coluna e permanecem em contato durante toda sua extensão. Este é o caso das colunas recheadas, cujo recheio é selecionado de forma a promover maior área e tempo de contato entre as fases. Já no contato descontínuo, o modelo de projeto baseia-se no conceito de estágio (definido no capítulo 2), onde as fases líquido e vapor entram em contato, transferem massa entre si e são separadas. Este é o caso das colunas de pratos, que podem ser perfurados, valvulados ou com borbulhadores (HENLEY e SEADER, 1981).

Os modelos de projeto para colunas de contato contínuo baseiam-se na diferença da taxa de transferência de massa dos constituintes da mistura, enquanto que no contato descontínuo fundamentam-se na diferença de composição das fases em equilíbrio (FOUST et al., 1982).

Os modelos de projeto denominados *rigorosos* envolvem as equações de balanço material e entálpico, além das relações de equilíbrio. Já os modelos *simplificados* estabelecem algumas hipóteses simplificadoras para reduzir o número de equações envolvidas e fornecer resultados menos precisos, mas mais rapidamente obtidos (FOUST, 1982; HENLEY e SEADER, 1987, GOMIDE, 1988).

#### **4.2 Critérios de otimização para colunas de destilação**

Várias são as propostas de algoritmos encontrados na literatura para a otimização de projeto de colunas de destilação (LOGSDON et alii, 1990; SALCEDO et alii, 1990; SKOVBORG e MICHELSEN, 1992; SRYGLEY e HOLLAND, 1965; WALLER e GUSTAFSSON, 1978). Como critério de otimalidade, os diversos autores consultados indicam essencialmente critérios econômicos para constituir a função objetivo.

WALLER e GUSTAFSSON (1978) afirmam que a exigência de máxima separação por prato não poderia ser usada como critério de otimalidade pois implicaria numa razão de refluxo infinita. Estes autores indicam, como função a otimizar, o critério de minimização da soma dos custos devido a perda do componente mais volátil no fundo, custos com a perda do componente mais pesado na corrente de topo e custos da geração de vapor no refeedor.

MOURA (1981) afirma que, traçando uma curva de custo anual total (soma do custo das utilidades (água, vapor de aquecimento, etc.) e investimento) contra a razão de refluxo, se pode constatar que ela passa por um mínimo para razão de refluxo de *1,1 a 1,25 vezes o refluxo mínimo*, a partir da análise de 70 destilações de hidrocarbonetos. No caso de refluxos acima deste "ótimo", KING (1980) recomenda o projeto considerando uma razão de refluxo *20 a 30 % superior ao mínimo*, já que o custo total é de apenas 2 a 6 % acima do custo ótimo. Estas recomendações baseiam-

se em experiências prévias dos autores, mas não podem servir como regra para a determinação da razão de refluxo mais adequada a uma determinada separação.

DOUGLAS (1988) propõe a minimização do custo anual, expresso em função do custo de capital (custo da coluna, refeedor e condensador, número de pratos) e custo das utilidades (geração de vapor de aquecimento), enquanto LOGSDON et alii (1990) baseiam-se no critério proposto por DOUGLAS, relacionando o custo anual com a quantidade de destilado produzido e custo da alimentação.

Pelo exposto, podemos inferir que não existe um consenso entre os autores consultados, quanto à função objetivo mais adequada para otimizar o projeto de colunas de destilação. Além disso, alguns autores mencionam a existência de um conjunto de heurísticas de projeto, derivadas de dados empíricos, indicando que a complexidade do problema não permite o estabelecimento de uma única estratégia de solução.

Dentre as sugestões encontradas, optamos por considerar a função objetivo proposta por DOUGLAS (1988) pois esta leva em conta não só o custo da coluna (casco mais pratos), mas também envolve o consumo de energia, através das estimativas das taxas de água de refrigeração e vapor de aquecimento. Este consumo de energia é diretamente afetado pela alteração dos requisitos de projeto, por exemplo, condição térmica da alimentação (introduzida na coluna na forma de vapor ao invés de líquido), e intimamente ligado às condições de temperatura e pressão de operação da coluna.

### **4.3 Modelos de projeto para colunas de destilação de pratos**

O projeto completo de uma coluna de pratos envolve diversas etapas, que poderemos caracterizar como:

- cálculo das taxas de produto fornecidas pela coluna,
- cálculo do número de pratos e
- determinação da altura e diâmetro da coluna.

Dentre estas etapas, a determinação do número de pratos é normalmente a etapa crítica, pois é afetada diretamente pela especificação dos requisitos de projeto.

De um modo geral, as destilações na prática industrial envolvem misturas multicomponentes, porém a compreensão dos princípios da destilação de misturas binárias é particularmente importante do ponto de vista didático, pois constitui a base para as operações mais complexas. Além disso, permite o estabelecimento de hipóteses simplificadoras que não afetam o projeto, mas facilitam a identificação da influência das variáveis envolvidas (requisitos de projeto) sobre o processo.

O algoritmo esquematizado na Figura 4.2 permite o dimensionamento de colunas de destilação de pratos para separação de sistemas binários e baseia-se no método de Lewis-Sorel (HENLEY e SEADER,1981).

### **DIMENSIONAMENTO DE UMA COLUNA DE DESTILAÇÃO**

#### 1. ENTRADA DE DADOS

Para o sistema a ser separado, devemos especificar :

- quais os componentes a separar
- taxa (F) e composição ( $x_F$ ) da corrente de alimentação
- composições das correntes produto: destilado ( $x_D$ ) e resíduo ( $x_W$ )
- condição térmica da alimentação, q
- temperatura e pressão de operação

A especificação das condições de operação da coluna determinam a volatilidade relativa (alfa) do sistema.

#### 2. CÁLCULO DAS CORRENTES PRODUTO - Estabelecimento do balanço material

As correntes de produto são calculadas a partir dos dados especificados

$$D = F * (x_F - x_W)/(x_D - x_W) \qquad W = F - D$$

#### 3. ESTIMATIVA DA RAZÃO DE REFLUXO MÍNIMA

A coluna opera, em geral, com uma razão de refluxo R, igual a razão L (líquido proveniente do condensador, que retorna à coluna) e D (taxa de destilado) superior ao valor mínimo. Por isso, o algoritmo determina primeiro o valor da razão mínima, como função da condição térmica da alimentação, volatilidade relativa e composições de F e D.

#### 4. CÁLCULO DAS TAXAS INTERNAS DE LÍQUIDO E VAPOR

As taxas internas designam as taxas de líquido e vapor que escoam no interior da coluna:

$$\begin{aligned} L_n &= R * D && // \text{ taxa de líquido na seção superior} \\ V_n &= (R + 1) * D && // \text{ taxa de vapor na seção superior} \\ L_m &= L_n + q * F && // \text{ taxa de líquido na seção inferior} \\ V_m &= V_n - (1 - q) * F && // \text{ taxa de vapor na seção inferior} \end{aligned}$$

### 5. INTERSEÇÃO DAS LINHAS DE OPERAÇÃO

A determinação da interseção das linhas de operação, através da coordenada  $x_{int}$ , indica o prato de introdução da alimentação, ou seja, a passagem da seção superior para a inferior.

$$x_{int} = \frac{x_F(R + 1) - x_D(q - 1)}{(R + q)}$$

### 6. DETERMINAÇÃO DO NÚMERO DE PRATOS TEÓRICOS DA COLUNA

O cálculo do número de pratos (ou estágios) teóricos (ou ideais) é realizado a partir da variação das composições do líquido ( $x$ ) e vapor ( $y$ ) que escoam através da coluna. As composições do líquido e vapor que se cruzam na seção superior são representadas pelas variáveis  $x_n$  e  $y_{n+1}$ , respectivamente. Na seção inferior, as composições do líquido e vapor são denominadas de  $x_m$  e  $y_{m+1}$ .

Iniciando no prato de topo, o procedimento segue até a identificação do prato de introdução da alimentação, determinado pela comparação do valor de  $x$  com  $x_{int}$ , calculado no passo anterior.

$$\text{Enquanto } x_n \geq x_{int} \quad y_{n+1} = \frac{R}{R + 1} * x_n + \frac{x_D}{R + 1}$$

$$x_n = \frac{y_{n+1}}{y_{n+1} + (1 - y_{n+1}) \alpha}$$

$$\text{NumPratosSuperior} = \text{NumPratosSuperior} + 1$$

Quando  $x_n$  torna-se menor que  $x_{int}$ , indica que estamos na seção inferior e devemos utilizar a equação da linha de operação correspondente, considerando  $x_m = x_n$ . O procedimento é repetido até ser alcançada a composição do resíduo,  $x_w$ .

$$\text{Enquanto } x_m >= x_w \quad y_{m+1} = \frac{L_m}{V_m} * x_m - \frac{W \cdot x_w}{V_m}$$

$$x_m = \frac{y_{m+1}}{y_{m+1} + (1 - y_{m+1}) \alpha}$$

$$\text{NumPratosInferior} = \text{NumPratosInferior} + 1$$

$$\text{NumPratosTotal} = \text{NumPratosSuperior} + \text{NumPratosInferior}.$$

### 7. ALTURA DA COLUNA

$$\text{Altura} = (\text{NumPratosTotal} + 1) * \text{DistanciaEntrePratos}$$

### 8. DETERMINAÇÃO DO DIÂMETRO DO TOPO DA COLUNA (método de Fair)

O diâmetro é estimado em função da velocidade do vapor que causaria inundação da coluna. Algumas regras práticas são sugeridas pelo método de FAIR (apud

WANKAT, 1988) para determinação da velocidade de operação e correspondente diâmetro, fornecendo a equação

$$\text{Diametro} = \sqrt[4]{4 * \text{TaxaMassicaVapor} / (3.1416 * 0,90 * \text{DensVapor} * 0,75 * \text{VelocInund} * 3600)};$$

Figura 0.2 - Algoritmo de aplicação das equações do método de Lewis-Sorel para dimensionamento de colunas de destilação

#### 4.4 Formulação das funções objetivo aplicáveis ao projeto de colunas

A formulação de funções objetivo é uma das etapas cruciais na aplicação da otimização a um problema prático. Devemos ser capazes de traduzir uma afirmação verbal ou conceito do objetivo desejado em termos matemáticos. Nas indústrias de processos químicos, a função objetivo é expressa em unidades monetárias porque a meta do empreendimento é minimizar custos ou maximizar lucros sujeitos a uma grande variedade de restrições.

##### 4.4.1 Estimando custos

A maioria dos métodos modernos de estimativas de custos usam correlações de custo baseadas em dados históricos ou projetados. Tais correlações são usualmente expressas em termos das variáveis de operação ou de projeto, as quais, por sua vez, podem corresponder às variáveis independentes que podem ser otimizadas.

As correlações para estimativa de custos geralmente são utilizadas nas estimativas denominadas preliminares (projeto básico), envolvendo uma precisão que recai na faixa de -15 a +30%. Já as estimativas definitivas, que envolvem o desenvolvimento de desenhos e especificações completas (projeto detalhado), recaem numa faixa de precisão entre -5 a +15 % (EDGAR e HIMMELBLAU, 1988).

Os custos de operação são normalmente simples de estimar e envolvem os custos de matéria-prima, mão-de-obra, supervisão, manutenção, estoques, utilidades (vapor, gás, eletricidade, combustível), taxas e seguro. Conhecidos os fluxos de matéria-prima e utilidades, simplesmente multiplicamos o fluxo pelo seu custo

unitário. Quanto aos custos de capital (instalação e localização, instrumentação, isolamento, taxas, etc.) existem inúmeras formas de estimativas, desde cálculos rápidos de limitada precisão até cálculos detalhados, mas mais precisos.

Para projetos básicos, necessitamos de uma abordagem que propicie avaliações simples e rápidas. Por isso, normalmente, utilizam-se correlações, obtidas através do estabelecimento de relações entre o preço médio de mercado e o tamanho dos equipamentos disponíveis.

#### **4.4.1.1 Correlações de GUTHRIE**

GUTHRIE (1969) publicou um conjunto de correlações de custo que incluíam informações tanto sobre custos de aquisição quanto instalação dos principais equipamentos utilizados nas indústrias químicas. Estas correlações foram inicialmente propostas com o objetivo de apoiar a avaliação econômica durante a fase de projeto básico de plantas de processos químicos. O método foi desenvolvido baseado em dados de quarenta e dois projetos de plantas de processo.

#### **4.4.1.2 Correlações ASPEN**

Outro conjunto de correlações foi desenvolvido pelo Projeto ASPEN (EVANS et alii, 1979), usando dados da empresa PDQ\$ Inc. Estas correlações são parte de um programa de projeto auxiliado por computador e, portanto, as correlações estão todas em forma numérica, ao invés de gráficos como na maioria das outras fontes.

### **4.4.2 Atualizando as correlações de custo**

As correlações de Guthrie proporcionam muito mais informações que a maioria das correlações de custo disponíveis na literatura, embora sejam tão simples de usar quanto as demais (DOUGLAS, 1988). No entanto, estas correlações foram desenvolvidas em 1968. Evidentemente, o custo aumenta com o passar do tempo e

devemos estar aptos a atualizar as correlações de custo. Vários métodos podem ser usados com este propósito, mas, de modo geral, envolvem a multiplicação do custo básico em um certo ano pela razão entre o índice de custo de algum outro ano e o índice de custo do ano base. Um dos índices mais populares deste tipo é publicado por Marshall e Swift (M&S) e atualizado mensalmente pela revista Chemical Engineering .

#### 4.5 Estimando custos para colunas de destilação

A estimativa dos custos de capital para o equipamento de destilação é, assim como a estimativa de custo de outros equipamentos, baseada na determinação do custo básico dos componentes principais, o qual será multiplicado por um fator para obter um custo que cubra a compra e a instalação (ROSE, 1985).

Os itens principais no equipamento de destilação são: a coluna, trocadores de calor, vasos e bombas. Apresentamos a seguir as correlações propostas por GUTHRIE (1969) e adaptadas por DOUGLAS (1988), no sistema de unidades técnico americano conforme proposto originalmente.

##### 4.5.1 Coluna

Uma vez calculada a altura e diâmetro da torre, podemos usar as correlações para estimar o custo da torre, isto é, o custo do casco, considerado como um vaso de pressão, mais o custo dos pratos. Como uma aproximação, DOUGLAS (1988) sugere que os custos dos pratos sejam considerados como sendo 20% do custo do casco (admitindo que o material seja aço carbono). O autor ainda sugere um fator de 1/3 para transformar o custo do equipamento instalado em um valor anual. Assim, temos:

$$C_{\text{COLUNA}} = \frac{1}{3} \left( \frac{\text{M\&S}}{280} \right) (120 \times D_T \times H^{0.8}) (2.18 + F_C) \quad (4-1)$$

onde

M&S é o índice de Marshall e Swift para correção da inflação

$D_T$  é o diâmetro da coluna (e dos pratos), em ft

H é a altura da coluna, em ft.

$F_c$  é um fator de correção que leva em conta o material da coluna e a pressão de operação.

#### 4.5.2 Equipamentos auxiliares

Para colunas de destilação, devemos também projetar e estimar o custo do condensador e refeedor, além de especificar as exigências da água de resfriamento e vapor de aquecimento.

##### 4.5.2.1 Condensador e água de refrigeração

A situação mais comum é considerar um condensador total. Assim, a carga térmica do condensador é o calor requerido para condensar completamente o vapor de topo da coluna. Considerando que a água de resfriamento entra a 90 °F e sai a 120 °F, o balanço térmico fornece:

$$Q_C = \Delta H_{V_n} \times V_n = U_C \times A_{COND} \times \frac{120 - 90}{\ln[(T_{eb} - 90)/(T_{eb} - 120)]} \quad (4-2)$$

$$Q_C = m_{\text{agua}} C_p (120 - 90)$$

A estimativa da área de troca térmica ( $A_{COND}$ ), conforme DOUGLAS (1988), necessita das informações sobre o calor latente de vaporização do vapor de topo e fundo, bem como suas respectivas taxas molares.

$$A_{COND} = \left( \frac{\Delta H_{V_n}}{30 \times 100} \right) \times \log \left( \frac{(T_{eb} - 90)}{(T_{eb} - 120)} \right) \times V_n \quad (4-3)$$

onde considera-se

- $C_p$  é o calor específico da água, em Btu/lbm.°F
- $A_{COND}$  é a área de troca térmica do condensador, em ft<sup>2</sup> ;

- $U_C$  é o coeficiente global de transferência de calor (considerado aqui igual a 100 Btu/(h.ft<sup>2</sup>.°F)
- $V_n$  é a taxa molar de vapor que é alimentado ao condensador, lbmol/h
- $\Delta H_{Vn}$  é o calor latente molar de vaporização, em Btu/lbmol
- $T_{eb}$  é a temperatura de ebulição do vapor de topo, em °F.

e a taxa requerida de água de resfriamento é

$$m_{\text{agua}} = \left( \frac{\Delta H_{Vn}}{30} \right) \times V_n \quad (4-4)$$

DOUGLAS (1988) ainda estabelece como simplificações:

- custo da água: US\$ 0,01 por 1000 galões
- trocador de calor com área de 1000 ft<sup>2</sup> e custo de US\$ 8900;
- trocador de cabeça flutuante, aço carbono, operando a uma pressão menor que 150 psig
- fator de instalação de 3,29.

A consideração destas hipóteses leva à expressão do custo :

$$C_{\text{Condensador}} = \left( \frac{M\&S}{280} \right) \times 328 \times \left( \frac{\Delta H_{Vn}}{3000} \times \ln \frac{T_{eb} - 90}{T_{eb} - 120} \right)^{0,65} \times V_n^{0,65} \quad (4-5)$$

$$C_{\text{agua}} = \left( \frac{M\&S}{280} \right) (328 \times A_{\text{COND}}^{0,65}) \quad (4-6)$$

onde

$C_{\text{condensador}}$  é o custo do condensador

$C_{\text{água}}$  é o custo do consumo de água de refrigeração.

#### 4.5.2.2 Refervedor e suprimento de vapor de aquecimento

O balanço térmico no refervedor é apresentado na equação (4-7), considerando que o vapor d'água é fornecido em quantidade suficiente para produzir  $V_m$  móis/h de vapor na base da torre.

$$Q_{ref} = \Delta H_{Vm} \times V_m = U_{ref} \times A_{referv} \times \Delta T_{medio} = m_{vapor} \times \Delta H_{vaporizacao} \quad (4-7)$$

onde  $(U_{ref} \times \Delta T_{medio})$  é estimado em 11.250 Btu/(h.ft<sup>2</sup>) e a área, calculada por

$$A_{referv} = \left( \frac{\Delta H_{Vm} \times V_m}{11.250} \right) \quad (4-8)$$

onde

$A_{referv}$  é a área de troca térmica no refervedor, em ft<sup>2</sup> ;

-  $V_m$  é a taxa molar de vapor que é alimentado ao condensador, lbmol/h

-  $\Delta H_{Vm}$  é o calor latente molar de vaporização, em Btu/lbmol

-  $U_{ref}$  é o coeficiente global de transferência de calor do refervedor

-  $m_{vapor}$  é a taxa requerida de vapor de aquecimento, em lbm/h

-  $\Delta H_{vaporizacao}$  é o calor latente de vaporização do vapor de aquecimento, em Btu/lbm

A taxa de vapor requerida é 
$$m_{vapor} = \frac{\Delta H_{Vm}}{\Delta H_{vaporizacao}} \times V_m \quad (4-9)$$

#### 4.5.3 Custo total instalado de uma coluna de destilação

O custo total de uma coluna é portanto a soma de todos os custos básicos multiplicados pelo fator que converte o custo básico em custo total instalado. Para este tipo de equipamento, este fator é igual a 4,0 (PERRY e CHILTON, 1973). O custo final tem de ser corrigido pela inflação desde 1968 usando um fator de inflação  $f_I$ .

$$\text{Custo total} = \sum (\text{custos dos componentes}) \times f_i \times 4,0 \quad (10)$$

Considerando o fator de correção da inflação de M&S de maio de 1996 (1046,3), a expressão do custo total (coluna + trocador) torna-se

$$\text{Custo total} = (C_{\text{COLUNA}} + C_{\text{CONDENSADOR}} + C_{\text{REFERVEDOR}}) * (1046,3/280) * 4,0$$

$$\text{ou } \text{Custo total} = (C_{\text{COLUNA}} + C_{\text{CONDENSADOR}} + C_{\text{REFERVEDOR}}) * 14,9471$$

$$(11)$$

#### 4.6 Análise da função custo

A função custo apresentada na seção 4.4 foi representada como função das variáveis de projeto (Figuras 4.3 e 4.4), evidenciando sua característica multimodal.

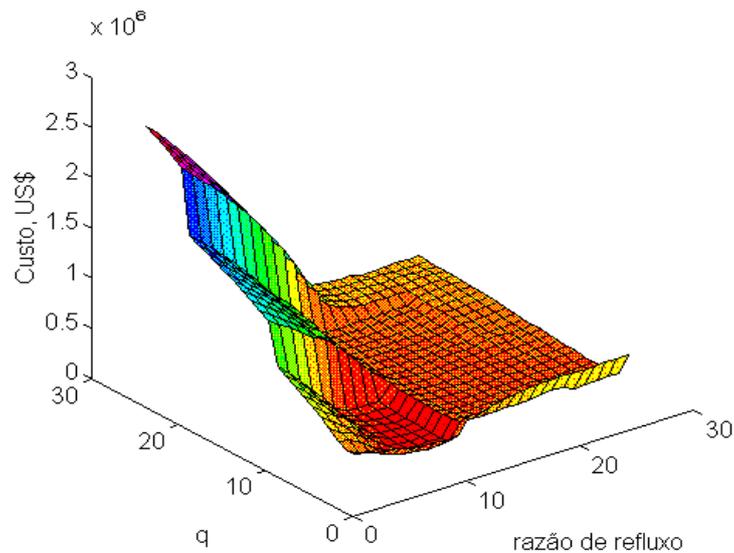


Figura 0.3 - Representação da função custo aplicada às colunas de destilação

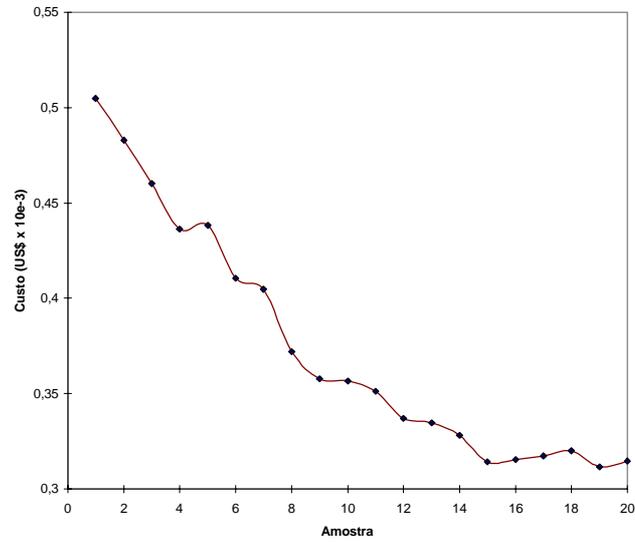


Figura 0.4 - Projeção da função custo para colunas de destilação

# 5. PROJETO AUTOMATIZADO DE COLUNAS DE DESTILAÇÃO

## 5.1 Introdução

Vários são os métodos de otimização disponíveis e aplicáveis ao projeto de colunas de destilação e a seleção do método mais adequado deve passar pela análise cuidadosa do tipo de problema a ser resolvido (operação ou projeto) e o modelo selecionado para descrever a coluna de destilação.

EDGAR e HIMMELBLAU (1988) classificam os problemas de otimização de colunas de destilação segundo as seguintes categorias:

- Determinação das condições ótimas de operação para uma coluna já existente alcançar um desempenho específico com custo mínimo (consumo mínimo de energia): problema que pode ser resolvido por um método de *programação não linear*;

- Determinação das condições de operação e o número (mínimo) de estágios (pratos da coluna) requeridos para a separação: problema de *programação não linear mista*. Neste tipo de problema, os custos incluem tanto os custos de capital quanto os de operação; os custos de capital aumentam com o número de estágios e as razões de refluxo internas, enquanto os custos de operação decrescem até um certo ponto. Suas características, no entanto, permitem solução através de técnicas de *busca randômica*, *programação quadrática* ou através do uso de técnicas baseadas em *modelos probabilísticos*.

- Determinação do número de estágios e a localização ótima da alimentação e retirada(s) lateral (ais): Neste caso, nos deparamos com problemas que exigem, para sua solução, não somente reunir um conjunto de equações que descreva o problema (modelo), mas também o auxílio da experiência prática. A literatura fornece algumas heurísticas, originárias da experiência industrial.

O problema de projeto de colunas de destilação proposto em nosso estudo envolve a determinação do número de estágios e a localização ótima da introdução da

alimentação para uma coluna separando uma mistura binária. Por suas características, podemos classificá-lo como pertencente a terceira categoria proposta por EDGAR E HIMMELBLAU (1988), já que envolve um conjunto de equações não lineares e um conjunto de restrições estabelecidas a partir de heurísticas, indicando que o método de otimização adequado deve levar em conta estas restrições.

Neste capítulo apresentamos uma breve descrição do método de otimização selecionado para a implementação do protótipo SINCO e o mapeamento do algoritmo original para o problema de otimização do projeto de colunas de destilação de pratos.

## **5.2 Métodos de otimização aplicáveis ao problema de projeto de colunas de destilação**

Conforme discutido anteriormente, os métodos de otimização podem ser classificados em determinísticos e probabilísticos. Tradicionalmente, a otimização do projeto de colunas de destilação tem sido realizada com o auxílio de métodos determinísticos, como por exemplo programação linear, programação não linear mista, etc. No entanto, o número de equações envolvidas, a não linearidade destas equações, o número de variáveis de projeto a serem especificadas e o conjunto de restrições indicam que este problema é complexo e, possivelmente, melhor tratado por um método probabilístico.

Para implementar o protótipo de uma ferramenta de síntese, optamos pelo método probabilístico proposto por SAAB e RAO (1991), denominado *Evolução Estocástica*, descrito no capítulo 3. Este método foi escolhido por ter sido recentemente proposto como uma evolução de um método probabilístico de sucesso, o Recozimento Simulado (KIRKPATRICK et alii, 1983) e pelo nosso conhecimento sobre sua utilização.

### 5.2.1 O método de Evolução Estocástica

Como introduzido no capítulo 3, o método de Evolução Estocástica, foi proposto para superar algumas dificuldades encontradas na implementação do método de Recozimento Simulado (KIRKPATRICK et alii, 1983).

No *modelo de estados* proposto por SAAB e RAO (1991), um *estado* é definido como uma função  $S: M \rightarrow L$ , onde  $M$  é um conjunto finito de *elementos móveis* e  $L$ , um conjunto finito de *posições*. O método baseia-se na idéia de que a movimentação adequada de cada elemento  $m \in M$  de sua localização corrente  $S(m)$  proporciona um custo menor para o estado  $S$ . Em linhas gerais, o algoritmo de Evolução Estocástica (EE) pode ser descrito pelo algoritmo apresentado na Figura 5.1.

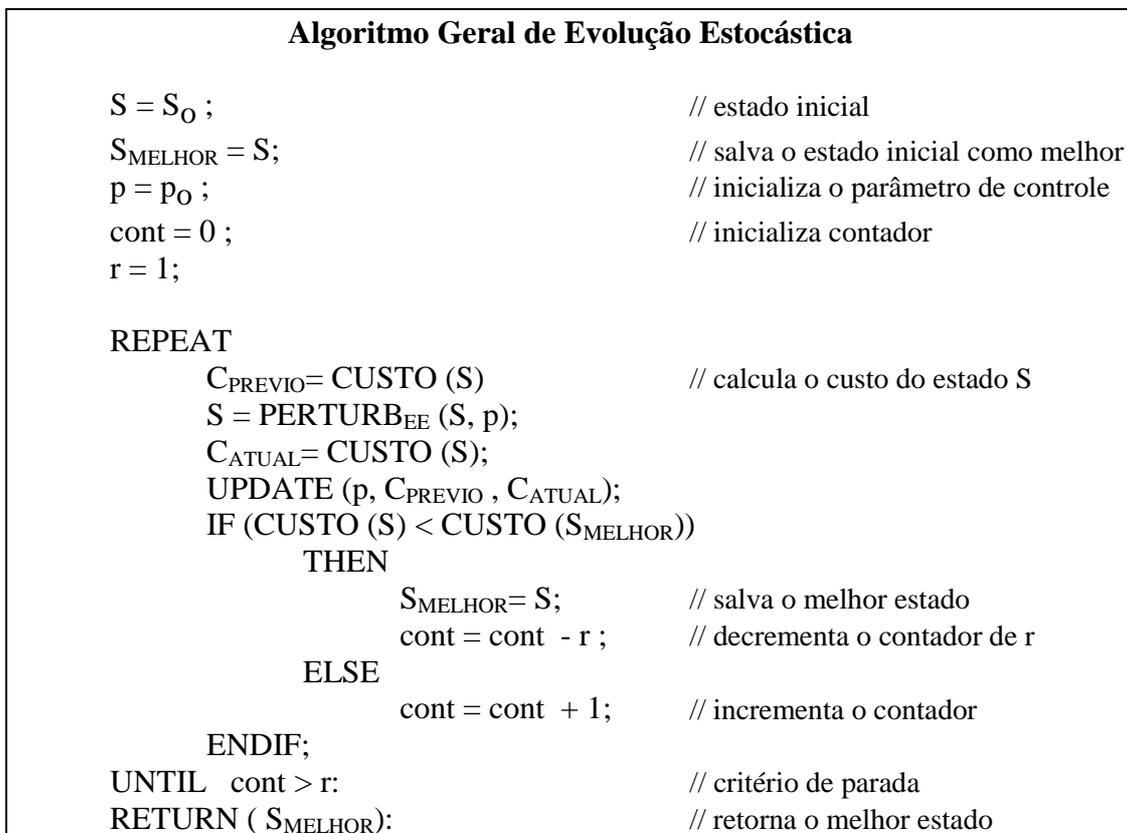


Figura 0.1 - Algoritmo de Evolução Estocástica  
Fonte: SAAB e RAO(1991)

A entrada do algoritmo EE é um estado inicial  $S_o$ , um valor inicial para o *parâmetro de controle*  $p$  e um parâmetro  $r$  usado como *critério de parada*. O algoritmo EE retém o estado de menor custo entre aqueles produzidos pela função  $PERTURB_{EE}$  (cujo algoritmo é apresentado na Figura 5.2). Cada vez que um estado é encontrado e possui um custo menor que o melhor estado ( $S_{MELHOR}$ ), o algoritmo decrementa o contador *cont*, mas o "recompensa", aumentando o número de iterações.

<b>função <math>PERTURB_{EE}</math> (<math>S,p</math>)</b>	
FOR EACH ( $m \in M$ ) DO	
$S' = MOVE(S,m);$	//provoca o movimento associado a m
$GANHO(M) = CUSTO(S) - CUSTO(S');$	// calcula o ganho do movimento
IF ( $GANHO(M) > RANDINT(-p, 0)$ )	
THEN $S = S';$	// movimento aceito
ENDIF;	
ENDFOR;	
$S = MAKE\_STATE(S);$	// garante que S é um estado
RETURN ( $S$ );	// retorna um estado vizinho

Figura 0.2 - Algoritmo da função  $PERTURB_{EE}$

Fonte: SAAB e RAO(1991)

Durante cada chamada da função  $PERTURB_{EE}$ , os elementos do conjunto  $M$  de elementos móveis são explorados segundo alguma ordem preestabelecida (SAAB e RAO, 1991). Quando o elemento  $m \in M$  é explorado, associa a  $m$  um movimento *simples* de  $S$  que gera uma nova função  $S': M \rightarrow L$  tal que  $S'(m) \neq S(m)$ . É importante notar que um movimento a partir de  $S$  associado a  $m$  gera uma função *única*  $S'$ .

O  $GANHO(m)$  é definido como uma redução do custo depois de ocorrer um movimento. A função  $PERTURB_{EE}$  decide *estocasticamente* se *aceita* ou não o movimento associado ao elemento  $m$  pesquisado, com a ajuda de um parâmetro de controle não negativo  $p$ . O valor de  $GANHO(m)$  é comparado com um inteiro  $i$  *randomicamente gerado* no intervalo  $[-p, 0]$ . Se  $GANHO(m) > i$ , então o movimento para  $S'$  é aceito; em caso contrário, é rejeitado. Note que sempre  $i \leq 0$ ; portanto, movimentos com ganhos positivos sempre serão aceitos.

O parâmetro  $r$  age como o número esperado de iterações que o algoritmo EE necessita até que  $C_{ATUAL} < CUSTO(S_{MELHOR})$ , isto é, até que ocorra um aumento do custo. Se tal aumento ocorrer em  $\rho < r$  iterações, então às  $r - \rho$  iterações são somadas as  $r$  iterações seguintes. O algoritmo então irá analisar o próximo elemento de  $M$ . Se, depois de pesquisar todos os elementos de  $M$ , a função final  $S$  gerada não satisfizer as restrições do problema, a função  $MAKE\_STATE(S)$  é chamada para reverter algum número dentre os últimos movimentos aceitos de forma a satisfazer as restrições.

A figura 5.3 apresenta a pseudo-função UPDATE, responsável pela atualização do valor do parâmetro de controle  $p$ . No algoritmo implementado por SAAB e RAO (1991),  $p$  é um conjunto de valores não-negativos próximos de zero. Tal escolha para  $p$  significa que somente movimentos com ganhos negativos pequenos serão realizados. Os autores salientam que movimentos, com ganhos negativos muito grandes, tendem a dificultar o processo de otimização e somente aumentar o tempo de processamento do algoritmo. Assim, o valor de  $p$  somente é aumentado quando necessário, isto é, quando detectamos um possível mínimo local, permitindo que o algoritmo escape de um “vale”.

<p><b>Procedimento UPDATE( <math>p</math>, <math>C_{PREVIO}</math>, <math>C_{ATUAL}</math> );</b></p> <p>IF ( <math>C_{PREVIO} = C_{ATUAL}</math> )</p> <p>    THEN <math>p = f(p)</math>;           // altera o valor do parâmetro de controle</p> <p>ELSE         <math>p = p_0</math>;           // retorna ao valor de <math>p</math> inicial</p> <p>ENDIF;</p>
---

Figura 0.3 - Algoritmo da pseudo-função UPDATE original

Fonte: SAAB e RAO(1991)

Depois de cada passo da função  $PERTURB_{EE}$ , a função custo  $C_{ATUAL}$  do novo estado é comparada com a função custo  $C_{PREVIO}$  do estado anterior. Se ambos forem iguais, então  $p$  é aumentado para um novo valor  $f(p) \geq p$ . Em caso contrário,  $p$  volta a assumir seu valor inicial.

Um problema potencial associado ao algoritmo de Evolução Estocástica é a falta de grandes saltos (“hill climbing steps”). A solução pode circular ao redor de um mínimo local se o “vale” for muito profundo. Não existe um mecanismo para evitar a possibilidade de retorno ao mesmo mínimo local, depois de algumas etapas. Para evitar este problema (CALAZANS et alii, 1992) propõem a utilização de uma função que gera um estado aleatório se a melhor solução não é alcançada depois de  $r$  tentativas (ou etapas). O valor de  $r$  é escolhido como o número esperado de iterações para alcançar a melhor solução.

### 5.3 Adaptação do Algoritmo de Evolução Estocástica para otimização do projeto de colunas de destilação

No caso do projeto da coluna de destilação, o estado inicial é uma  $n$ -tupla de variáveis que identificam uma solução candidata do problema de otimização. No caso em estudo, as variáveis que constituem as  $n$ -tuplas são: a razão de refluxo (através da especificação do multiplicador da razão mínima), a condição térmica da alimentação, a temperatura e pressão de operação e a distância entre pratos. A identificação da influência destas variáveis sobre a função objetivo (função custo) é discutida a seguir, no capítulo 6.

A Figura 5.4 apresenta nossa proposta para a adaptação do algoritmo EE para a otimização de colunas de destilação. Os movimentos propostos no algoritmo  $PERTURBA_{SINCO}$  (adaptação do algoritmo  $PERTURB_{EE}$ ) serão movimentos compostos, prevendo a alteração simultânea das variáveis do conjunto  $V$ .

As pseudo-funções  $PERTURBA_{SINCO}$  e  $MOVIMENTO_{SINCO}$ , adaptadas ao projeto de colunas de destilação, são apresentadas nas Figuras 5.5 e 5.6. A adaptação da pseudo-função original propõe a alteração estocástica da condição térmica da alimentação e multiplicador da razão de refluxo e a avaliação exaustiva das seis possibilidades de valores para a distância entre pratos, consideradas na determinação do diâmetro da coluna. Dentre estes valores, o de menor custo é o considerado como o novo estado da coluna.

#### Otimizador Estocástico

$S = S_0 ;$

// recebe estado inicial

```

SMELHOR = S; // armazena S como estado melhor
ParametroControle = 500; // inicializa o parâmetro de controle
Contador = 0; // inicializa contador
LimiteContador = 15; // inicializa o critério de parada

REPEAT
    CustoPrevio = CustoAtual;
    S = PERTURBASINCO (ParametroControle);
    CustoAtual = Custo(S) ;
    ParâmetroControle = ATUALIZASINCO (ParâmetroControle,
                                        CustoPrévio, CustoAtual);
IF ( CustoAtual < CustoMelhor)
    THEN SMELHOR = S;
        Contador = Contador - LimiteContador;
    ELSE Contador = Contador + 1;
ENDIF;
UNTIL ( Contador > LimiteContador);
RETURN( SMELHOR)

```

Figura 0.4 - Algoritmo de Evolução Estocástica adaptado

### Custo (S)

```

CalculaCustoCasco(Altura (S), Diametro(S))
    a = (0.778 - 0.000082 * Altura(S)) * log(3.281 * Diametro(S));
    b = 0.9199 * sqrt(Altura(S)* 0.3028) - 1.433;
    f = a + b;
    nCustoCasco = exp(1.33 * f - 0.541);

CalculaCustoPrato (NumPratoReal(S), Diametro(S))
    CustoPrato= NumPratoReal(S) * ( 0.030 + 0.038 * Diametro(S)2);

CalculaCustoTrocadores (CalorLatVapVn, CalorLatVapVm, Vn, Vm)
    CustoTrocadores = CustoCondensador + CustoRefervedor ;

CustoTotal = (CustoCasco + CustoPrato + CustoTrocadores )
RETURN Custo (S)

```

Figura 5.5 - Algoritmo para cálculo da função custo

### PERTURBA<sub>SINCO</sub> (p)

```

SANTERIOR = SATUAL;
SNOVO = MOVIMENTOSINCO ( );
GANHO = CustoMelhor - CustoNovo;

```

```

aleatório = random (- p);
IF (Ganho > aleatório)
    THEN return (SNOVO);
return (SANTERIOR);

```

Figura 0.6 - Algoritmo da pseudo-função PERTURBA<sub>SINCO</sub>

O GANHO (Figura 5.6) é considerado como a redução do custo, que pode ocorrer depois de um movimento, e é calculado pela diferença entre o custo do melhor estado e o custo do novo estado gerado pela função PERTURBA<sub>SINCO</sub>. No nosso caso, este custo é definido como o custo total anual da coluna, envolvendo os custos da coluna (função da altura e diâmetro) e custos de energia (calor trocado no condensador e refervedor), determinados após a geração de uma solução para o conjunto de requisitos especificados.

O valor de GANHO é comparado com um inteiro aleatoriamente gerado no intervalo limitado pelo valores (-ParâmetroControle) e zero. Se GANHO é maior do que o número aleatório gerado, então o movimento para o novo estado é aceito; caso contrário, o sistema retorna ao estado anterior, rejeitando o movimento. Como o número aleatório gerado é sempre menor ou igual a zero, os movimentos com ganhos positivos sempre serão aceitos e o algoritmo passará então a analisar o próximo movimento.

```

MOVIMENTOSINCO ( )
    ALTERACondiçãoTérmica( );
    ALTERA Multiplicador( );
    ALTERADistânciaEntrePratos ( );
    return (S) ;

```

Figura 0.7 - Algoritmo proposto para a função MOVIMENTO<sub>SINCO</sub>

Depois de cada passo da função PERTURBA<sub>SINCO</sub>, a função custo C<sub>ATUAL</sub> do novo estado é comparada com a função custo C<sub>PRÉVIO</sub> do estado anterior. Se ambos forem iguais, então ParâmetroControle é aumentado para um novo valor maior que o anterior. No nosso caso, este valor é determinado através de um número aleatório gerado no intervalo [500,1000]. Em caso contrário, ParâmetroControle volta a

assumir seu valor inicial. O valor inicial do parâmetro de controle foi estabelecido como igual a 500 porque a função Custo fornece valores da ordem de  $10^3$ .

O parâmetro LimiteContador age como o número esperado de iterações que o algoritmo EE necessita até que  $C_{ATUAL}$  seja menor que o  $C_{MELHOR}$ , isto é, até que ocorra uma diminuição do custo. Se esta diminuição ocorrer em número de iterações menor que o limite estabelecido (aqui denominado LimiteContador), então as iterações já realizadas são somadas às iterações seguintes. A qualidade do estado final obtido aumenta com o tempo de execução do algoritmo EE, portanto a escolha adequada do número limite de iterações é muito importante. SAAB e RAO(1991) afirmam que um valor para o limite de iterações entre 10 e 20 fornece bons resultados.

O procedimento  $ATUALIZA_{SINCO}$  (Figura 5.8) é o principal responsável pela atualização do valor do parâmetro de controle (adaptação da função UPDATE (SAAB e RAO,1991)). Devemos observar que movimentos com ganhos negativos muito grandes tendem a dificultar o processo de otimização e somente aumentar o tempo de processamento do algoritmo. Assim, o valor do parâmetro de controle é aumentado somente quando é identificada a possibilidade do algoritmo estar no entorno de um mínimo local.

<p><b><math>ATUALIZA_{SINCO}</math> ( p, CustoPrevio, CustoAtual)</b></p> <p>IF ( CustoPrevio = CustoAtual)</p> <p>    THEN</p> <p>        p = aleatório (500, 1000);</p> <p>    ELSE p = 500 ;</p> <p>RETURN (p);</p>
--

Figura 0.8 - Algoritmo proposto para a função  $ATUALIZA_{SINCO}$

A adaptação do algoritmo de Evolução Estocástica ao projeto de colunas de destilação, apresentada através das Figuras 5.4 a 5.8, foi implementada no protótipo SINCO. No capítulo 6 apresentamos algumas considerações sobre esta implementação e o comportamento do sistema sob análise durante a realização de estudos de casos.

## **6. UM PROTÓTIPO DE SINTETIZADOR DE COLUNAS DE DESTILAÇÃO**

A abordagem de síntese automatizada é uma alternativa para a condução do processo de projeto de colunas de destilação. A ferramenta computacional construída no escopo do presente trabalho é capaz de gerar automaticamente uma solução para o problema de projeto e avaliar o desempenho desta. Isto é feito a partir da especificação de requisitos pelo usuário. A ferramenta é responsável pelo cômputo de um conjunto de restrições que definem o problema de otimização, junto com o conjunto de variáveis intrínsecas ao(s) modelo(s) de síntese embutido(s) na ferramenta.

Com vistas a validar parcialmente algumas das idéias propostas, implementamos um protótipo de um sintetizador de colunas de destilação, denominado SINCO (SINtetizador de COLunas). Este capítulo descreve a implementação do SINCO e apresenta os resultados obtidos a partir de alguns estudos de casos.

### **6.1 Descrição do protótipo SINCO**

O aplicativo denominado SINCO - SINtetizador de COLunas de destilação é um sistema computacional projetado mediante o uso do paradigma de orientação a objetos (WIRFS-BROCK et alii, 1990) e implementado na linguagem C++ (STROUSTRUP, 1991) em ambiente Windows (BORLAND, 1992).

A Figura 6.1 apresenta um esquema da concepção do protótipo SINCO. Para validar a Abordagem de Síntese Automatizada, optamos pelo estudo do processo de projeto de colunas de destilação. Este estudo exigiu o estabelecimento de Modelos de Projeto para a coluna e seleção de um Método de Otimização adequado ao problema. A abordagem de Orientação a Objetos auxiliou na implementação de um sistema informatizado com uma interface amigável, já que um de seus objetivos é o uso no ensino de Engenharia Química. O emprego do SINCO proporciona novas

possibilidades de pesquisa no desenvolvimento de ambientes de projeto em Engenharia Química.

As seções 6.1.1 e 6.1.2 apresentam a descrição do sistema sob o ponto-de-vista do usuário e do implementador.

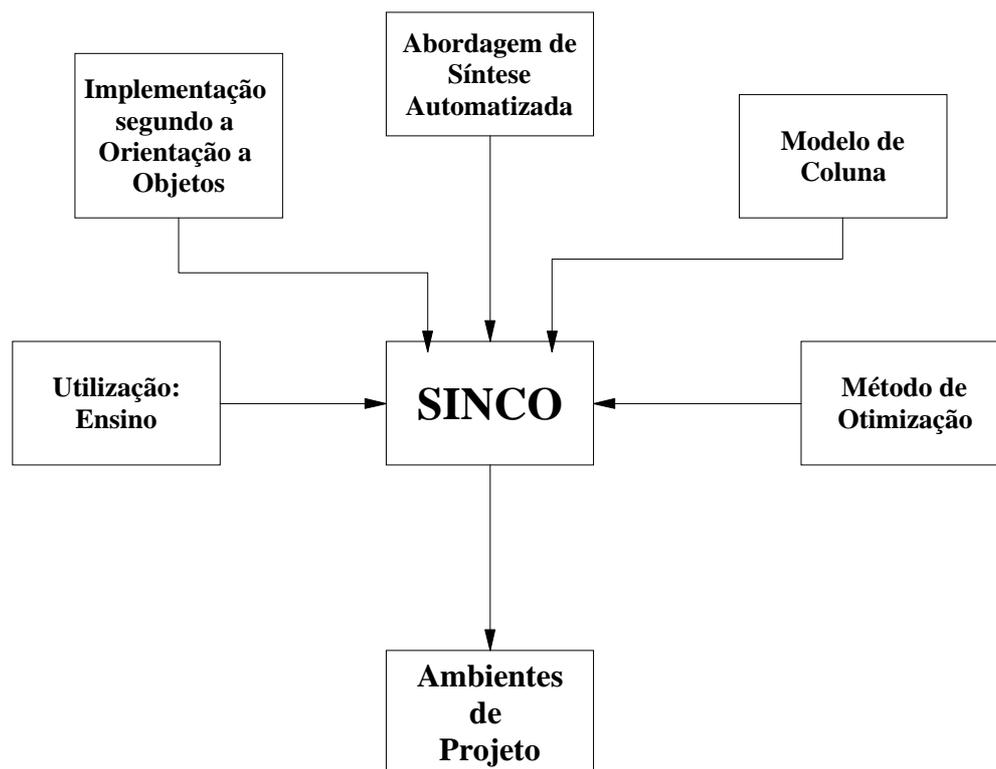


Figura 0.1- Protótipo SINCO

### 6.1.1 Visão do usuário

A Figura 6.2 apresenta a representação do sistema computacional SINCO, através de um Diagrama de Fluxo de Dados (DFD), seguindo a representação proposta por GANE e SARSON (1983).

No DFD apresentado, a entidade Projetista representa o usuário que interage com o sistema. Inicialmente, o Projetista fornece ao sistema um conjunto de especificações de entrada: *características da(s) corrente(s) a ser(em) tratada(s)*

(especificação dos componentes a serem tratados; taxa, composição e condição térmica da corrente de alimentação); *propriedades* físico-químicas dos componentes a serem tratados e *requisitos* (tipo de coluna, razão de refluxo, temperatura e pressão de operação) e as especificações de saída esperadas: *características das correntes produtos* (composições ou taxas ou percentual de recuperação de um componente).

O processo *Trata Propriedades* identifica, a partir da especificação dos componentes, se suas propriedades estão armazenadas no depósito de dados denominado *Propriedades*. Se estas propriedades estão armazenadas, elas podem ser apresentadas ao usuário para confirmação ou atualização. Em caso contrário, o usuário poderá cadastrar as informações sobre o novo componente. Este depósito de dados elimina a necessidade do usuário consultar tabelas e manuais durante a atividade de projeto.

O processo *Trata Requisitos* recebe as informações sobre a descrição da coluna a ser projetada e armazena estas informações no depósito de dados denominado *Coluna*. Este processo analisa as informações fornecidas pelo projetista e, caso algum valor não tenha sido especificado, solicita ao depósito de dados *Requisitos* o valor “por omissão” do requisito não especificado.

O conteúdo dos depósitos de dados ou arquivos lógicos (*Propriedades*, *Coluna* e *Requisitos*) foi definido através da análise dos conteúdos dos fluxos de dados que entram e saem dos respectivos arquivos.

A partir dos dados da coluna, das propriedades dos componentes e dos requisitos, o processo *Gera Coluna* gera (calcula) uma coluna e informa o resultado ao Projetista. O protótipo implementado utiliza o algoritmo apresentado no capítulo 4 (Figura 4.2) para calcular as dimensões da coluna (número de pratos, altura e diâmetro).

A coluna gerada corresponde a uma *solução* do problema de projeto e o sistema pode, por opção do Projetista, buscar uma *solução ótima* para o problema. A cada momento, o usuário tem a possibilidade de obter relatórios dos resultados intermediários e assim avaliar as conseqüências de suas alterações, pois os dados da coluna gerada são apresentados ao projetista.

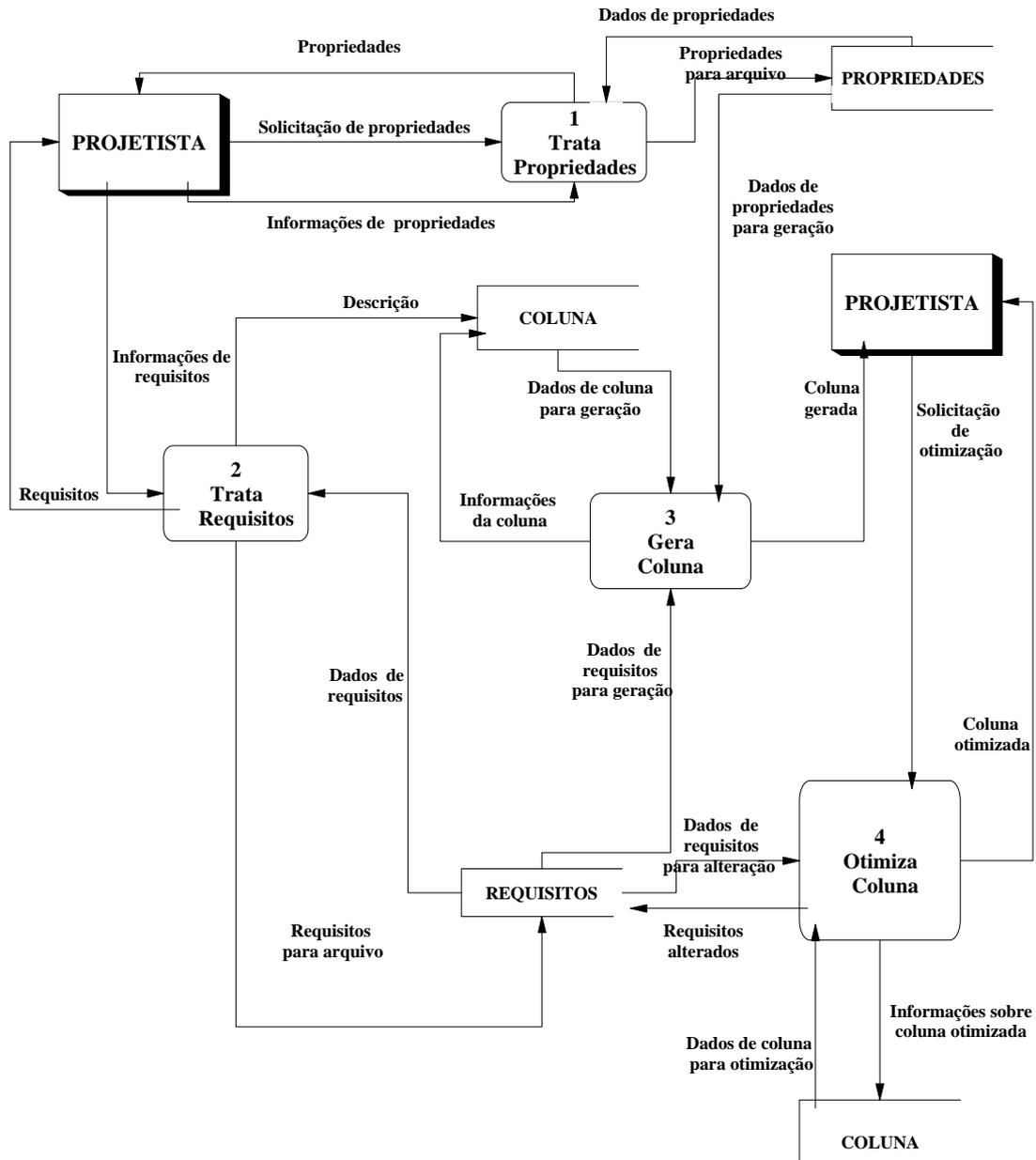


Figura 0.2 - Diagrama de fluxo de dados do protótipo SINCO

Por solicitação do Projetista, o processo *Otimiza Coluna* altera os valores dos requisitos seguindo o algoritmo do método de otimização escolhido até que o processo *Gera Coluna* forneça uma coluna com custo mínimo.

A seguir apresentamos a interface desenvolvida para o diálogo do sistema com o usuário. A Figura 6.3 é a tela de abertura, onde o usuário pode selecionar o tipo de

sistema (binário ou multicomponente) a ser separado por destilação, já que o processo de projeto é diferenciado para cada um dos casos.

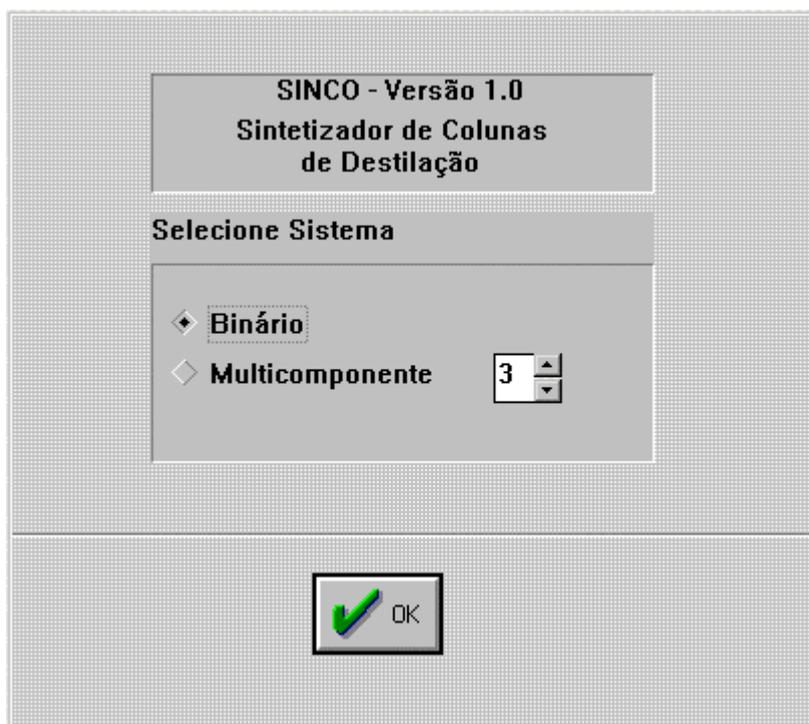


Figura 0.3 - Caixa de diálogo de apresentação do SINCO

As Figuras 6.4 e 6.5 apresentam as telas para entrada de dados da alimentação e especificação dos produtos no caso da destilação de um sistema constituído por dois componentes.

**Dados da Alimentação**

Componente 1: hexano      Componente 2: heptano

Taxa de Alimentação: 1000.00 lbmol/h      Condição Térmica: 1.00

Fração Molar em:

Alimentação: 0.50000      Alimentação: 0.50000

Fechar   Imprimir   Requisitos   Limpar   **Calcular**   Próximo >>

Figura 0.4 - Caixa de diálogo para entrada de dados da alimentação

**Dados dos Produtos**

Componente 1: hexano      Componente 2: heptano

Fração Molar em:

Destilado: 0.99900      Destilado: 0.00100

Produto: 0.00100      Produto: 0.99900

Taxa Molar de:

Destilado: 500.00000      Produto: 500.00000

Fechar   Imprimir   Requisitos   Limpar   **Calcular**   Coluna

Figura 0.5 - Caixa de diálogo para entrada de dados dos produtos

Quando o usuário solicita que a coluna seja gerada, é apresentada uma mensagem indicando que o processo de cálculo foi concluído. A Figura 6.6 mostra um exemplo típico de relatório. A partir do menu principal, o usuário pode ainda solicitar a impressão deste relatório ou a otimização dos parâmetros da coluna.

Dados da Coluna Gerada		
Distância Entre Pratos	24	in
Condição Térmica	1.000	
Volatilidade Relativa	2.455	
Multiplicador	1.200	
Razão de Refluxo	1.643	
Número de Pratos Reais	49	
Altura	100.000	ft
Diâmetro	7.809	ft
Custo da Coluna	1957.337	US\$ 1.000.00
Temperatura de Operação	182.624	o.F
Pressão de Operação	14.700	psia

Figura 0.6 - Apresentação dos resultados da coluna gerada

A Figura 6.7 apresenta os resultados da otimização, prevendo a possibilidade de representação gráfica do processo de cálculo da coluna de destilação de um sistema binário.

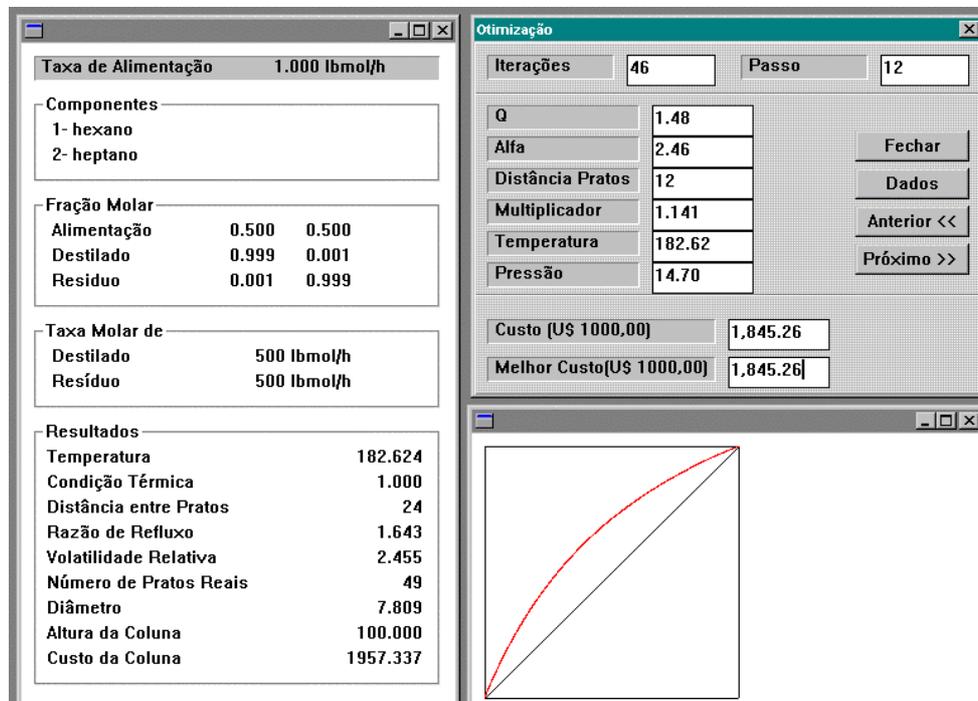


Figura 0.7 - Resultados do processo de otimização

### 6.1.2 Visão do implementador

Para projetar o protótipo, foi utilizada a abordagem de WIRFS-BROCK et alii (1990), para o desenvolvimento de um sistema orientado a objetos, enquanto a escolha de C++ como linguagem de programação foi motivada por ser esta uma das linguagens com algum suporte para o paradigma de orientação a objetos.

O protótipo SINCO foi implementado como uma ferramenta de síntese. Comparando a descrição do protótipo através da DFD (Figura 6.2) e o fluxograma de emprego de ferramentas de projeto baseadas em síntese automatizada, apresentado no capítulo 1, Figura 1.2, podemos estabelecer algumas relações. O SINCO recebe como entradas o conjunto de requisitos do sistema e uma descrição da coluna. Os processos *Gera Coluna* e *Otimiza Coluna* realizam a atividade de síntese, que engloba a geração de uma descrição mais completa da coluna e a avaliação do desempenho desta descrição, segundo algum critério preestabelecido. Este critério, no caso em estudo, corresponde ao custo anual da coluna, conforme detalhado no capítulo 4.

Aqui também o laço de realimentação do sistema é fechado pelo projetista que, ao ser informado dos resultados do processo de síntese, aceita a descrição ou a rejeita e escolhe um novo modelo de síntese para ser usado. Em nível macroscópico, pretendemos implementar modelos de síntese para o projeto de outros tipos de colunas como as recheadas, tanto para sistemas binários quanto multicomponentes.

A programação em ambiente Windows permitiu o desenvolvimento de interfaces amigáveis para o usuário, facilitando o fornecimento dos dados (descrição, propriedades e requisitos) e propiciando relatórios de mais fácil compreensão e interpretação.

O projeto do sistema segundo a abordagem de WIRFS-BROCK et alii (1990) permitiu a identificação das hierarquias de classes apresentadas na Figura 6.8.

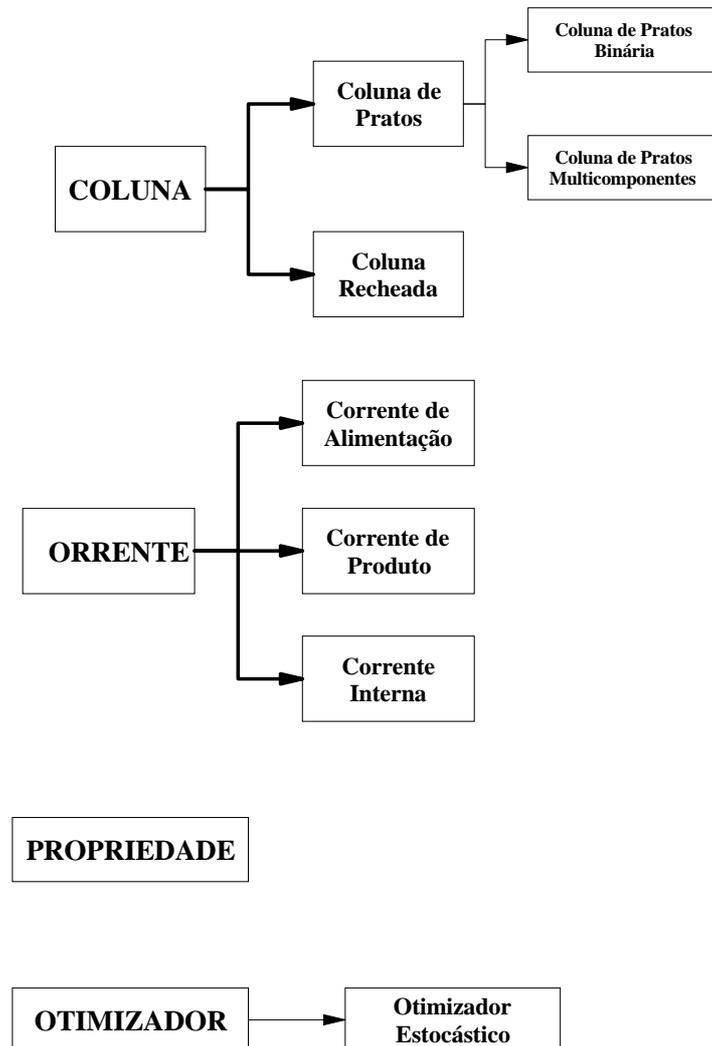


Figura 0.8 - Principais hierarquias de classes do protótipo SINCO

## 6.2 Estudos de Caso

Esta seção tem por objetivo apresentar os resultados obtidos a partir de estudos de caso, selecionado entre aqueles realizados. Tais estudos foram conduzidos de forma a permitir uma comparação entre os resultados obtidos a partir do modelo de projeto adotado (projeto de colunas de pratos para sistemas binários) e os fornecidos através de um modelo rigoroso como o utilizado pelo simulador comercial HYSIM, com o propósito de validar, dentro do possível, os resultados obtidos no SINCO.

Os sistemas em estudo foram: hexano-heptano, pentano-heptano, pentano-hexano, água-ácido acético e etanol-água. Como entrada são fornecidas ao SINCO as seguintes especificações:

- número de componentes a separar: neste caso é igual a 2, indicando que o sistema é binário;
- nome dos componentes
- taxa de alimentação (de 1000 lbmois/h, no exemplo) e
- composição da alimentação (mistura equimolar).

Estes dados são fornecidos através de caixas de diálogo como as mostradas nas Figuras 6.3 e 6.4. Ao confirmar estes dados, o projetista deve ainda especificar as composições esperadas para as correntes de produto (destilado e resíduo), através de caixa de diálogo como a da Figura 6.5. A especificação dos requisitos (valores adotados pela ferramenta por “omissão”) é a seguinte:

- condição térmica da alimentação (q): líquido saturado;
- razão de refluxo (R): 20% superior à razão de refluxo mínima;
- distância entre pratos (dp): 24 in;
- pressão de operação; 14,7 psia (pressão absoluta, expressa em lbf/in<sup>2</sup>);
- temperatura de operação: temperatura média entre as temperaturas de ebulição dos componentes envolvidos (em °F).

As seções 6.2.1 e 6.2.2 apresentam o processo de execução da etapa de otimização do SINCO e os resultados produzidos por uma simulação com o HYSIM, permitindo a comparação com os resultados do protótipo SINCO.

### **6.2.1 Processo de execução do SINCO**

A Figura 6.9 apresenta a evolução do custo de soluções intermediárias geradas ao longo de um experimento. A partir da especificação dos requisitos da coluna, o

SINCO determinou a coluna ótima que atende à especificação inicial. As soluções apresentadas são obtidas na etapa de otimização probabilística.

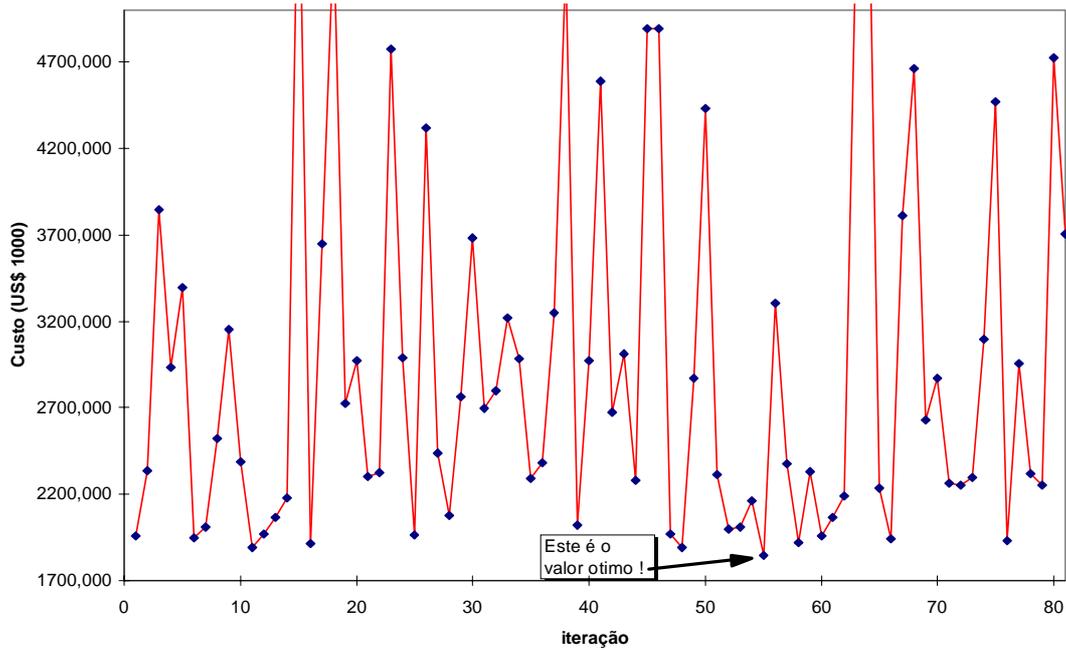


Figura 0.9 - Evolução do custo de soluções intermediárias geradas pelo SINCO

A Tabela 6.1 mostra a especificação da coluna otimizada determinada pelo SINCO. Conforme estabelecido na definição do problema de otimização, o SINCO encontra uma coluna de custo mínimo dentre as soluções candidatas pesquisadas.

Tabela 0.1 - Dados das colunas otimizadas

Sistemas					
Variáveis	hexano/ heptano	pentano/ heptano	pentano/ hexano	água/ácido acético	etanol/água
Condição térmica da	1.48	0.23	3.19	1.9	1.74

alimentação					
Distância entre Pratos	12	24	24	12	24
Multiplicador da razão de refluxo	1.141	1.062	1.819	2.19	1.674
Razão de refluxo	1.3224	0.9735	1.05	4.056	0.8651
Número de pratos reais	54	20	20	36	24
Altura (em ft)	55	42	42	37	50
Diâmetro (em ft)	9.54	21.23	21.42	15.743	11.228
Custo Total (US\$ 1.000)	1845.256	1655.19	2389.99	2771.57	1694.18

### 6.2.2 Comparação entre os modelos de projeto do SINCO e HYSIM

A partir da especificação dos requisitos, o SINCO gera uma solução candidata ao problema. O sistema permite que solução seja apresentada ao projetista, de forma que este verifique as dimensões da coluna gerada (número de pratos teóricos, número de pratos reais, altura e diâmetro) e o respectivo custo.

AS Tabelas 6.2 a 6.5 apresentam exemplos típicos dos resultados gerados pelo SINCO e HYSIM. Como discutido no capítulo 1, o simulador exige um maior número de especificações, tais como número de pratos e razão de refluxo. Assim, utilizando os resultados fornecidos pelo SINCO como entrada do simulador HYSIM, recalculamos a coluna com o objetivo de validar o modelo de simulação implementado no SINCO, cujos resultados são mostrados na última coluna das Tabela 6.2 a 6.5.

Tabela 6.2 - Resultados da comparação de experimento com o SINCO e HYSIM para o sistema pentano-heptano

Variáveis	Resultados SINCO	Resultados HYSIM
Pressão de operação (psia)	14,7	14,7
Taxa de destilado	500	499,96
Taxa de resíduo	500	500,04

% molar de pentano no destilado	99,0	97,60
% molar de pentano no resíduo	1,0	2,409
Razão de refluxo	0,9735	0,9735
Número de pratos reais	20	20
Altura (em ft)	42	36,0
Diâmetro (em ft)	21,23	21,23
Custo Total (US\$ 1.000)	1655,19	455,500

Tabela 6.3 - Resultados da comparação de experimento com o SINCO e HYSIM para o sistema pentano-hexano

<b>Variáveis</b>	<b>Resultados SINCO</b>	<b>Resultados HYSIM</b>
Pressão de operação (psia)	14,7	14,7
Taxa de destilado	500	500
Taxa de resíduo	500	500
% molar de pentano no destilado	99,0	90,03
% molar de pentano no resíduo	1,0	4,196
Razão de refluxo	1,05	1,05
Número de pratos reais	20	20
Altura (em ft)	42,0	36,0
Diâmetro (em ft)	21,42	21,42
Custo Total (US\$ 1.000)	2389,99	1195,00

Tabela 6.4 - Resultados da comparação de experimento com o SINCO e HYSIM para o sistema água-ácido acético

<b>Variáveis</b>	<b>Resultados SINCO</b>	<b>Resultados HYSIM</b>
Pressão de operação (psia)	14,7	14,7
Taxa de destilado	500	141,77
Taxa de resíduo	500	858,23
% molar de água no destilado	99,0	92,76

% molar de água no resíduo	1,0	42,93
Razão de refluxo	4,056	3,85451
Número de pratos reais	36	36
Altura (em ft)	37,0	64,0
Diâmetro (em ft)	15,743	15,743
Custo Total (US\$ 1.000)	2771,57	199,10

Tabela 6.5 - Resultados da comparação de experimento com o SINCO e HYSIM para o sistema etanol-água

<b>Variáveis</b>	<b>Resultados SINCO</b>	<b>Resultados HYSIM</b>
Pressão de operação (psia)	14,7	14,7
Taxa de destilado	500	499,83
Taxa de resíduo	500	500,17
% molar de água no destilado	80,0	70,0
% molar de água no resíduo	1,00	$8,76 \times 10^{-8}$
Razão de refluxo	5,562	5,5617
Número de pratos reais	16,0	16,0
Altura (em ft)	17,0	26,0
Diâmetro (em ft)	29,162	29,162
Custo Total (US\$ 1.000)	3072,38	873,10

Os sistemas exemplificados nas Tabelas 6.2 e 6.3 atendem às hipóteses de idealidade estabelecidas pelo SINCO. Os resultados fornecidos pelo HYSIM indicam que a separação ocorre com os produtos sendo fornecidos em uma composição muito semelhante à especificação estabelecida pelo SINCO.

Já os sistemas água-ácido acético (Tabela 6.4) e etanol-água (Tabela 6.5) são exemplos de sistemas não ideais. Como consequência, os resultados obtidos através do SINCO e posteriormente avaliados com o auxílio do HYSIM apresentam diferenças significativas. Estas diferenças são basicamente devidas às hipóteses simplificadoras do método de Lewis-Sorel (capítulo 4, Figura 4.2) utilizado como

modelo de projeto da coluna pelo SINCO, enquanto que o HYSIM adota um método rigoroso.

### **6.3 Experimentos para calibração da ferramenta SINCO**

Os testes realizados com o SINCO também tiveram por objetivo avaliar a influência das variáveis de projeto sobre a função objetivo e a parametrização da ferramenta, através da determinação das faixas recomendadas para as variáveis de controle envolvidas no algoritmo de otimização selecionado.

#### **6.3.1 Avaliação da influência das variáveis de projeto selecionadas sobre a função objetivo**

Os resultados de diversas iterações com o SINCO permitiram a análise da influência da seleção adequada das variáveis de projeto sobre o custo da coluna. A Figura 6.10 apresenta a influência da razão de refluxo (aqui representada por um fator multiplicador em relação a razão de refluxo mínima) sobre o custo da coluna.

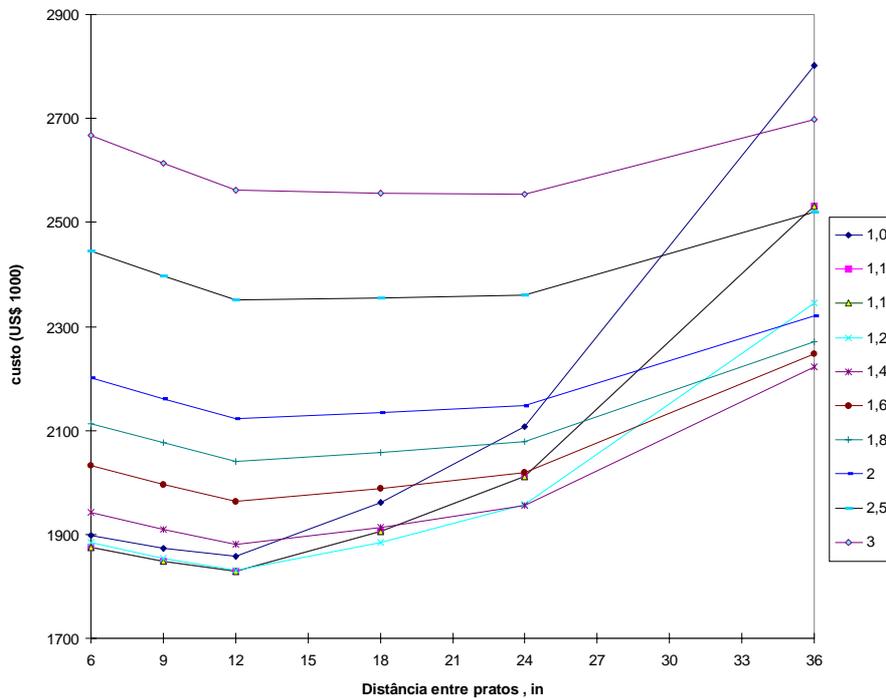


Figura 0.10 - Influência da razão de refluxo sobre o custo

Podemos observar que, apesar da literatura apontar a distância entre pratos de 24in como mais adequada (LUDWIG,1979) , obtivemos a minimização do custo para a distância entre pratos de 12 in. No entanto, cabe aqui salientar que a recomendação de 24 in (o que corresponde a, aproximadamente, 60 cm) é o tamanho usual que permite a instalação de aberturas de acesso ao interior da coluna para manutenção. Esta recomendação poderia ser utilizada, inclusive, como uma restrição ao projeto, função da altura e número de pratos da coluna.

A Figura 6.11 apresenta uma projeção da relação entre a condição térmica da alimentação e o custo da coluna, no plano com coordenadas razão de refluxo 20% superior à mínima e distância entre pratos igual a 24 in. Podemos observar que a região de custo mínimo corresponde ao estado de líquido saturado ( $q = 1$ ), pois as necessidades térmicas são menores, o que resulta em menor tamanho nos trocadores de calor e, conseqüentemente, menor custo. No entanto, os simuladores comerciais disponíveis para a comparação não permitem este tipo de especificação (normalmente

mais fácil de ser estabelecida), solicitando o fornecimento de informações como temperatura e pressão da alimentação, e exigindo estimativas iniciais para estas variáveis.

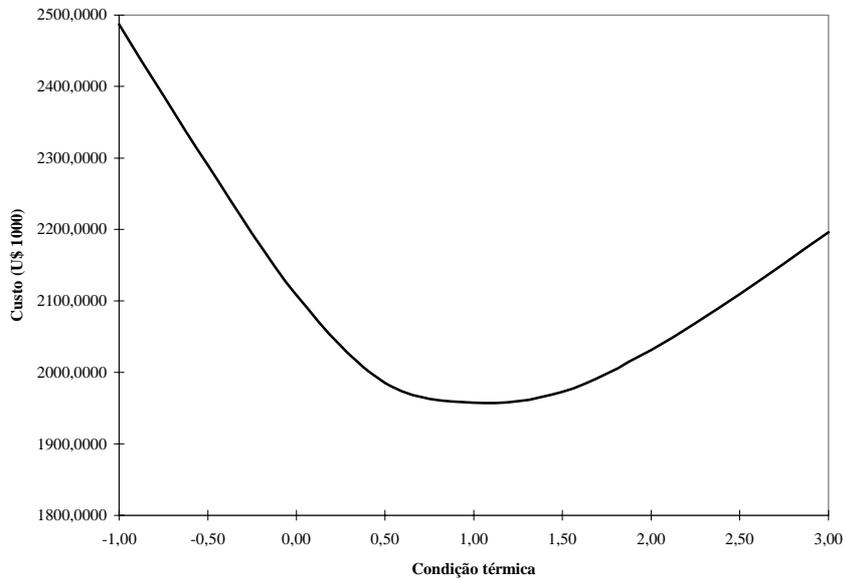


Figura 0.11 - Influência da condição térmica da alimentação sobre o custo (com  $R = 1,2 R_{min}$  e distância entre pratos de 24 in)

A Figura 6.12 apresenta a relação entre custo, distância entre pratos e razão de refluxo para uma corrente de alimentação no estado de líquido saturado. A região de mínimo custo indica valores de distância entre pratos de 12 in e razão de refluxo de 20 a 40% superior à razão mínima.



Figura 0.12 - Influência da distância entre pratos e razão de refluxo sobre o custo (alimentação como líquido saturado)

Na Figura 6.13, apresentamos a evolução da função custo ao longo de um teste com o SINCO, considerando a distância entre pratos igual a 24 in. Nesta figura, os valores calculados foram ordenados em função da condição térmica. A figura permite fazer uma análise preliminar da influência do multiplicador da razão de refluxo e da condição térmica sobre a função custo. Grandes valores para o multiplicador

implicam custos elevados. Além disso, os valores ótimos estão sempre próximos do multiplicador igual a 1,2, conforme discutido na literatura, e condição térmica igual a 1,0 (estado de líquido saturado).

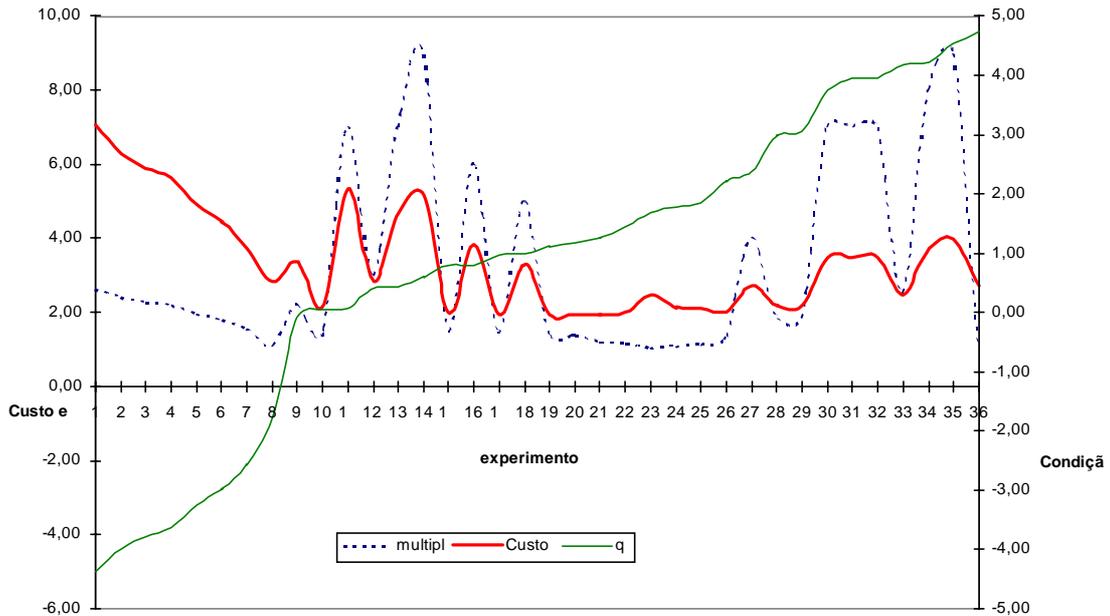


Figura 0.13 - Influência da razão de refluxo e condição térmica sobre o custo

### 6.3.2 Parametrização do otimizador

Os vários testes realizados com o SINCO permitiram estabelecer um subconjunto do conjunto de restrições sobre as variáveis de projeto e parametrizar o otimizador estocástico.

As restrições estabelecidas são:

- multiplicador da razão de refluxo mínima variando entre 1,01 e 3,00
- condição térmica da alimentação variando entre +5 e -5;
- distância entre pratos: assumindo um valor do conjunto {6,9,12,18,24,36}.

Através destes testes e seguindo recomendações da literatura (CALAZANS et alii, 1992) estabelecemos o limite do contador do número de iterações do otimizador como igual a 15. Além disso, conforme discutido no capítulo 5, o valor inicial do parâmetro de controle foi escolhido como igual a 500 e sua faixa de variação estabelecida como o intervalo [500, 1000], já que os custos estimados são da ordem de  $10^3$ .

## 7. CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS

Ao longo dos últimos anos, as indústrias químicas têm sofrido uma série de restrições quanto à disponibilidade de energia e controle ambiental. Estas restrições provocaram alterações nos procedimentos de projeto e operação, evidenciando processos de projeto otimizados. Tradicionalmente o processo de projeto auxiliado por computador tem sido desenvolvido sob o enfoque de simulação, onde a alteração manual e sucessiva dos valores das variáveis envolvidas é realizado até a obtenção do projeto ótimo.

Procuramos, através deste trabalho, propor uma nova maneira de conduzir o processo de projeto, de maneira que o projetista possua ferramentas de apoio às tarefas de estabelecimento da descrição estrutural do equipamento, bem como garantir a correção do projeto final. Na abordagem de síntese proposta aqui, o projetista fornece como entrada ao sistema somente o conjunto de requisitos a serem atendidos pelo projeto, deslocando o eixo de responsabilidade de projeto para mais próximo de uma ferramenta automatizada e reduzindo possíveis fontes de erro associadas às atividades do projetista. As ferramentas de otimização, presentes no seio do sintetizador, permitem ainda que uma solução aceitável para o problema de projeto seja eventualmente alcançada em menor espaço de tempo que através de um simulador.

Como os simuladores comerciais não possuem, em geral, uma interface projetada com o intuito de facilitar a utilização por um projetista iniciante, sugerimos a utilização do SINCO como gerador da descrição estrutural a ser utilizada como entrada para um simulador.

Os testes realizados com o protótipo SINCO indicaram que a abordagem proposta é promissora (RAMOS SILVA et al, 1995) e que seu potencial deve continuar sendo investigado. A utilização do protótipo também permitiu o estabelecimento de limites experimentais para os parâmetros considerados no algoritmo de Evolução Estocástica adaptado. A validação do modelo de síntese do

protótipo SINCO foi realizada através do simulador comercial HYSIM, amplamente utilizado na indústria química.

O projeto de pesquisa, ora em andamento, “Análise comparativa de desempenho de duas abordagens ao projeto de colunas de destilação: síntese versus simulação”, desenvolvido à nível de Iniciação Científica, tem por objetivos, entre outros, a realização de estudo comparativo entre o modelo selecionado para descrever o problema de projeto de colunas de destilação pelo programa Sintetizador de Colunas (SINCO) e o utilizado em um simulador comercial, através do estudo de caso de destilações típicas da indústria. Além disso, pretende avaliar e comparar o tempo necessário para o projeto de uma coluna de destilação via Sintetizador e via Simulador.

Inicialmente foram utilizados os resultados fornecidos pelo SINCO como entrada ao simulador e avaliados os resultados. Estes testes serviram de base para as análises comparativas, apresentadas no capítulo 6.

Na realização dos testes comparativos no escopo da pesquisa, encontramos algumas dificuldades, devidas basicamente às diferenças de modelagem entre o SINCO e o HYSIM. O simulador HYSIM não especifica qual o método de projeto utilizado, nem tão pouco explicita como é avaliado o custo da coluna. Os valores obtidos para o custo para uma mesma coluna no SINCO e HYSIM são diferentes, mas enquanto no primeiro incluímos, além do custo do casco e pratos (coluna em si), o custo de energia consumida nos trocadores (condensador e refeedor), no segundo somente o custo da coluna é considerado.

Como melhoramentos no SINCO, considerando sua possível utilização no ensino, sugerimos a inclusão de facilidades tais como: acesso às equações ou hipóteses simplificadoras utilizadas no modelo de projeto, informações sobre o cálculo da função objetivo e possibilidade do usuário alterar ou atualizar as correlações de custo originais, através da inclusão de dados experimentais, por exemplo. Estas alterações auxiliarão o uso do SINCO no ensino de Operações Unitárias, onde, tradicionalmente, estuda-se o projeto de equipamentos para atender

um conjunto de requisitos e disponibiliza-se ferramentas de projeto baseadas em simulação.

Ao longo da revisão bibliográfica foram identificadas outras abordagens para o desenvolvimento da etapa de otimização, como, por exemplo, a Computação Evolucionária. Estes estudos indicam que a adaptação de outros métodos de otimização, permitirá uma avaliação mais criteriosa sobre o método mais adequado para apoiar o processo de projeto em Engenharia Química via síntese automatizada.

Como sugestões para trabalhos futuros podemos ainda indicar a implementação de outros modelos de simulação, de forma a atender o projeto de outros tipos de colunas de destilação, como colunas recheadas e multicomponentes, e modelos de simulação para projetos de outras operações unitárias como absorção e extração.

## 8. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- BOAS, ARNOLD. *How search methods locate optimum in univariable problems*. Chemical Engineering February 4, 1963.
- BOLES, W. e FAIR, J. *Distillation*. Industrial and Engineering Chemistry. 62 (11):81-90, November, 1970.
- BORLAND C++ . *User's Guide*. California, Borland International Inc. , 1992.
- BRITT, H.; SMITH, J. e WARECK, S. *A Computer-Aided Process Synthesis and Analysis Environment*. **In:** Third International Conference on Foundations of Computer-Aided Process Design. Snowmas Village, Colorado, July 10-14, 1989. Anais CACHE. p.281-307.
- CALAZANS, N. *Métodos e Ferramentas para o Projeto de Sistemas Digitais*. **In:** Escola Regional de Informática. Caxias do Sul, 10-13 maio 1995. Anais Sociedade Brasileira de Computação. p.34-53.
- CALAZANS,N.; ZHANG,Q.; JACOBI, R.; YERNAUX, B. e TRULLEMANS, A. *Advanced Ordering and Manipulation Techniques for Binary Decision Diagrams*. **In:** Proceedings of the European Conference on Design Automation. Brussels, Belgium. March 16-19, 1992. IEEE Computer Society Press, p. 452-457.
- CHANG, H. *Computer aids short-cut distillation design*. Hydrocarbon Processing. August, 1980. p.79-82.
- CORMEN, T., LEISERSON,C. e RIVEST, R. *Introduction to Algorithms*. Cambridge, MIT Press, 1990.
- DAVIO, M.; DESCHAMPS, P. e THAYSE, A. *Digital systems with algorithm implementation*. Chichester, John Wiley, 1983.
- DE MICHELI, G. *Synthesis and optimization of digital circuits*. New York, McGraw-Hill, 1994. 579p.
- DIMIAN, A. *Use process simulation to improve plant operations*. Chemical Engineering Progress. 90(9):58-66. Set. 1994.
- DOUGLAS, J.M. *Conceptual design of chemical processes*. New York, McGraw-Hill, 1988.
- ECONOMOPOULOS, A. *A fast computer method for distillation calculations*. Chemical Engineering. 91-100. April 24, 1978a.
- ECONOMOPOULOS, A. *Computer design of sieve trays and tray column*. Chemical Engineering. 109-120. December 4, 1978b.
- EDGAR, T.F e HIMMELBLAU, D.M. *Optimization of chemical processes*. New York, McGraw-Hill, 1988.
- EVANS, L.B. et alii. *ASPEN: An Advanced System for Process Engineering*. Computers and Chemical Engineering . 3:319 (1979).
- FOGEL, D. *An Introduction to Simulated Evolutionary Optimization*. IEEE Transactions on Neural Networks. New York, 5 (1):3-14, Jan. 1994.
- FOUST, A.;WENZEL, L.;CLUMP,C.;MAUS,L. e ANDERSEN,L. *Princípios das Operações Unitárias*. Rio de Janeiro, Guanabara Dois, 1982.
- GAJSKI, D. e KUHN, R. *New VLSI Tools*. Computer. New York. 11-14(1983)

- GANE, C. e SARSON, T. *Análise Estruturada de Sistemas*. Rio de Janeiro, LTC, 1983.
- GILL, P, MURRAY,W. e WRIGHT, M. *Practical Optimization*. San Diego, Academic Press, 1993.
- GOMIDE, R. *Operações Unitárias*. São Paulo, Ed. do Autor, 1988. v.4.
- GROSSMANN, I. *MINLP Optimization Strategies and Algorithms for Process Synthesis*. **In:** Third International Conference on Foundations of Computer-Aided Process Desing. Snowmas Village, Colorado, july 10-14, 1989. Anais CACHE. p.105-132.
- GUTHRIE, K.M. *Data and techniques for preliminary...Capital Cost Estimating*.Chemical Engineering, New York, march 24, 1969.
- HENLEY,E. e SEADER, J.D. *Equilibrium-Stage Separation Operations In Chemical Engineering*. New York, John Wiley, 1981.
- HEXTRAN - User Manual. Simulation Sciences Inc. February 1993. version 6.0.
- HILLIER, F.S. e LIEBERMAN, G.J. *Introduction to Operations Research*. Oakland, California, Holden-Day, 1980.
- HIMMELBLAU, D.M. *Process optimization by search techniques*. IeEC Process Design and Development. 2 (4): 296-300, October 1963.
- HOLLAND, C.D. *Fundamentals and Modeling of Separation Processes*. New Jersey, Prentice-Hall, 1975.
- HOLLAND, C.D. *Multicomponent distillation*. New Jersey, Prentice-Hall, 1963.
- HYSIM - User's Guide. Hyprotech Centre, Alberta, Canada. march, 1994.
- JAFAREY, A.; DOUGLAS, J. e McAVOY, T.J. *Short-cut techniques for distillation column design and control. 1. column design*. Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev. 18(2):197-202, 1979.
- KING, C.J. *Separation Processes*. New York, McGraw-Hill, 1980.
- KIRKPATRICK, S.; GELATT, C.D. e VECCHI, M.P. *Optimization by simulated annealing*. Science. 220 (4598):671-680, 13 May 1983.
- LAW, A. e KELTON, D. *Simulation modeling and analysis*. New York, McGraw-Hill, 1991.
- LOGSDON, J.S.; DIWEKAR, U.M. e BIEGLER, L. *On the simultaneous optimal design and operation of batch distillation columns*. Trans IChemE. 68 , part A:434-444, September, 1990.
- LUDWIG, E.E. *Applied Process Design for Chemical and Petrochemical Plants*. v.2. Houston, Gulf Pub.Co., 1979.
- LUYBEN, W. e WENZEL,,L. *Chemical Process Analysis: Mass and Energy Balances*. New Jersey, Prentice-Hall,1988.
- MACIEL, M.R. e CARVALHO, C.A. *Projeto e otimização de seqüências de colunas de destilação utilizando um simulador comercial de processos químicos*. **In:** 10º Congresso Brasileiro de Engenharia Química. São Paulo, 13-16 set 1994. Anais Associação Brasileira de Engenharia Química. p.283-288.
- MEDLAND, A.J. *The computer based design process*. London, Kogan Page, 1986.
- MOURA, C.A.D. *Uso eficiente de programas de computador na simulação de colunas de destilação*. Boletim técnico PETROBRÁS. 24 (3):195-200, jul/set. 1981
- NOVO DICIONÁRIO AURÉLIO da Língua Portuguesa. Rio de Janeiro: Nova Fronteira, 1986. p. 113, 1592.

- PEDROSA NETO, P. e MORI, M. *Simulação e otimização de fracionamento e recuperação de produtos da unidade de craqueamento catalítico fluido da REPLAN*. In: 10º Congresso Brasileiro de Engenharia Química. São Paulo, 13-16 set 1994. Anais Associação Brasileira de Engenharia Química. p.864-869.
- PERRY, R. e CHILTON, C. *Chemical Engineer's Handbook*. Tokyo, McGraw-Hill, 1973.
- PRO/II . PC User Guide. Simulation Sciences Inc., 1991.
- RAMOS SILVA, P.C. ; CARNEIRO, M.L. e CALAZANS, N. *SINCO - Sintetizador de Colunas de Destilação*. In: XI CONGRESSO REGIONAL DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA E TECNOLÓGICA EM ENGENHARIA. Caxias do Sul, 30 a 31 outubro 1995. Anais Associação Brasileira de Ensino de Engenharia. p.99
- RAMOS SILVA, P.C. ; CARNEIRO, M.L. e CALAZANS, N. *SINCO - Sintetizador de Colunas de Destilação*. In: Salão de Iniciação Científica da UFRGS. Porto Alegre, 16 a 20 outubro 1995. Anais UFRGS. p.53.
- RICH, E. e KNIGHT, K. *Inteligência artificial*. São Paulo, Makron, 1994.
- ROSE, L.M. *Computer-Aided Chemical Engineering: Distillation Design in practice*. Amsterdam, Elsevier, 1985.
- RUDD, D. , POWERS, G. e SIIROLA, J. *Process Synthesis*. New Jersey, Prentice-Hall, 1973.
- SAAB, Y.G. e RAO, V.B. *Combinatorial Optimization by stochastic evolution*. IEEE Transactions on computer-aided design. vol. 10, nº 4, April 1991.
- SALCEDO, R.; GONÇALVES, M.J. e FEYO de AZEVEDO, S. *An improved random-search algorithm for non-linear optimization*. Computer Chem. Engng. 14 (10):1111-1126, 1990.
- SHANG, Y. e WAH, B. *Global Optimization for neural network training*. Computer. 29(3):45-54, March 1996.
- SILVA, E.S. e MUNTZ, R. *Métodos computacionais de solução de Cadeias de Markov: aplicações a sistemas de computação e comunicação*. Instituto de Informática da UFRGS. Porto Alegre, 1992.
- SINNOTT, R.K. *Coulson e Richardson's Chemical Engineering*. Oxford, Pergamon Press, 1993. vol.6
- SKOVBORG, P. e MICHELSEN, M.L. *A flexible algorithm for simulation and optimization of continuous distillation*. In: Proceedings of European Symposium on Computer Aided Process Engineering - ESCAPE-1 . Denmark, 24-28 May, 1992. p. S255-S262.
- SRYGLEY, J.M. e HOLLAND, C.D. *Optimum design of conventional and complex distillation columns*. AIChE Journal. 11 (4):695-701, July 1965.
- STROUSTRUP, B. *The C++ programming language*. Massachusetts, Addison-Wesley, 1991.
- TANOMARU, J. *Motivação, fundamentos e Aplicações de Algoritmos Genéticos*. In: II Congresso Brasileiro de Redes Neurais, Curitiba, 29/out a 01/nov 1995. Anais, p.373-403.
- TERADA, R. *Desenvolvimento de Algoritmo e Estrutura de Dados*. Rio de Janeiro, Makron, 1991.
- TOSCANI, L.V. e VELOSO, P.A. *A programação dinâmica: um caso particular da Divisão e Conquista*. Revista de Informática teórica e aplicada. 1(2), maio 1990.
- WAGNER, H. *Pesquisa Operacional* . Rio de Janeiro, Prentice-Hall, 1985.

- WALLER, K. e GUSTAFSSON, T. On optimal steady-state operation in distillation.  
Ind. Eng. Chem. Process Des.Dev. 17 (3):313-317, 1978.
- WANKAT, P. *Equilibrium staged separations*. New York, Elsevier, 1988.
- WIRFS-BROCK, R.; WILKERSON, B. e WIENER, L. *Designing Object Oriented Software*. New Jersey, Prentice Hall, 1990.