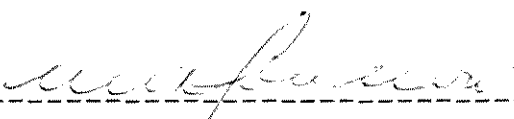


Esta versão corresponde à redação final da tese de mestrado, defendida pelo Eng. PEDRO PEDROSA NETO, e aprovada pela comissão julgadora em 10/06/94.

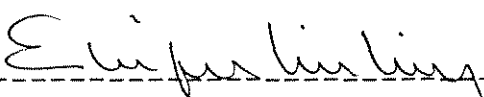


Prof. Dr. MILTON MORI

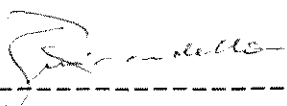
Tese defendida e aprovada, em 10 de junho de 1994, pela banca
examinadora constituída pelos Professores Doutores:



Prof. Dr. MILTON MORI - Orientador



Prof. Dr. ENRIQUE LUIS LIMA



Prof. Dr. REGINALDO GUIRARDELLO

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA
DEPARTAMENTO DE PROCESSOS QUÍMICOS

SIMULAÇÃO E OTIMIZAÇÃO DA SEÇÃO DE FRACIONAMENTO E RECUPERAÇÃO
DE PRODUTOS DA UNIDADE DE CRAQUEAMENTO CATALÍTICO FLUIDO

Autor : Pedro Pedrosa Neto

Tese submetida à comissão de Pós-Graduação da Faculdade de Engenharia Química como parte dos requisitos necessários para a obtenção do título de Mestre em Engenharia Química.

Campinas - SP
Junho de 1994

BC
UNICAMP
P343s
BC/24.464
4.33/95
D <input checked="" type="checkbox"/>
R\$ 11,00
10/05/95

CM-00070084-1

FICHA CATALOGRAFICA ELABORADA PELA
BIBLIOTECA CENTRAL - UNICAMP

P343s	<p>Pedrosa Neto, Pedro</p> <p>Simulacao e otimizacao da secao de fracionamento e recuperacao de produtos da unidade de craqueamento catalitico fluido / Pedro Pedrosa Neto. - - Campinas, SP : [s.n.], 1994</p> <p>Orientador : Milton Mori.</p> <p>Dissertacao (mestrado) - Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de Engenharia Quimica.</p> <p>1. Simulacao e modelagem. 2. Otimizacao. 3. Craqueamento catalitico. I. Mori, Milton. II. Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de Engenharia Quimica.</p> <p style="text-align: right;">20. CDD -603.3 -003 -665.533</p>
-------	--

Indices para catalogo sistematico:

1. Simulacao e modelagem 603.3
2. Otimizacao 003
3. Craqueamento catalitico 665.533

DEDICATÓRIA

Dedico esta tese a Leia Regina, minha namorada, pelo grande incentivo, a minha mãe pelo apoio que sempre me proporcionou durante toda a minha vida acadêmica e a garotinha Bárbara, minha sobrinha, pela alegria de uma criança. O carinho e a alegria dessas pessoas me ajudaram muito a transpor os obstáculos da realização desta tese.

AGRADECIMENTOS

Várias pessoas contribuíram para a realização desta tese.

Agradecimentos especiais à Petrobrás por conceder-me o tempo para assistir as aulas e disponibilizar recursos necessários para a execução do curso de mestrado.

Aos colegas de trabalho Walter Karasawa, Adalberto S. Barbalho, Luis C. Boizan e Renato Spandri, por defenderem este tipo de trabalho, pelos incentivos e apoio.

À bibliotecária Shirlei pela organização e montagem da bibliografia da tese.

Ao Eng. Pedro Martins Alves - Diretor da Soteica do Brasil Ltda, representante exclusivo e suporte técnico Brasil da Hyprotech Ltd Canadá; pelos esclarecimentos de dúvidas e "dicas" relativas ao uso do simulador de processos Hysim.

Ao professor Dr. Milton Mori por conceder orientação de tese a um aluno de indústria, disponibilizando tempo fora do expediente normal de trabalho, para orientação e esclarecimentos de dúvidas.

Aos amigos Carlos R. Porfírio, Marcelo Sgarbosa e Marcelo Bacci pelas sugestões, incentivos e acima de tudo pelo companheirismo.

"Todas as coisas cooperam para o bem daqueles que amam a Deus" Rom. 8:28

RESUMO

O presente trabalho consistiu na simulação, previsão de desempenho e otimização da seção de fracionamento e recuperação dos produtos efluentes do reator da Unidade de Craqueamento Catalítico Fluido, UFCC-I, da Refinaria de Paulínia (PEPLAN).

A unidade foi simulada usando o HYSIM (Hyprotech Simulator), simulador de processos comercial de grande aplicabilidade na indústria do petróleo.

Executou-se a simulação até que esta apresentasse resultados coerentes com os obtidos na prática, tanto em termos de condições operacionais, como rendimentos de produtos obtidos na unidade e qualidade de produtos obtidos através de análises de laboratório.

Foi avaliado o desempenho da unidade nas diferentes condições operacionais, quanto a eficiência da recuperação de produtos nobres e distribuição dos componentes de maior interesse nas várias correntes. Esta análise foi feita para cada variável de interesse, individualmente.

Desenvolveu-se um programa de computador, um otimizador do tipo Simplex Modificado (Método de Box), que faz interface com o simulador de processos, permitindo encontrar valores das variáveis operacionais de otimização, que maximiza a função objetivo. Foi feita também uma análise de sensibilidade da função objetivo perante diferentes condições de preços de derivados de petróleo.

A função objetivo retrata a rentabilidade diária da unidade, considerando: custos da matéria-prima, valorização dos produtos e custos de energia e utilidades envolvidas no processo.

LISTA DE FIGURAS

Fig. II.1	- Diagrama de blocos da DCCCF da REPLAN	4
Fig. II.2	- Seção de fracionamento e recuperação de produtos da Unidade de Craqueamento Catalítico Fluido	9
Fig. III.1	- Esquema da composição da carga da fracionadora	12
Fig. IV.1	- GAP entre duas frações adjacentes	15
Fig. IV.2	- Correção da curva de destilação	16
Fig. VI.1	- Esquema de interface Simulador-Otimizador	45
Fig. VII.1	- Efeito razão refluxo da fracionadora principal	49
Fig. VII.2	- Efeito temp. fundo da fracionadora principal	50
Fig. VII.3a	- Efeito da pressão de descarga do compressor na separação C_2^-/C_3^+ e recuperação de C_2^- e C_3^+	52
Fig. VII.3b	- Efeito da pressão de descarga do compressor na recuperação e perda de H_2S	53
Fig. VII.4a	- Efeito da temperatura de fundo da retificadora na separação C_2^-/C_3^+ e recuperação de C_2^- e C_3^+	54
Fig. VII.4b	- Efeito da temperatura de fundo da retificadora na recuperação e perda de H_2S	55
Fig. VII.5a	- Efeito do reciclo de nafta estabilizada na separação C_2^-/C_3^+ e recuperação de C_2^- e C_3^+	56
Fig. VII.5b	- Efeito do reciclo de nafta estabilizada na recuperação e perda de H_2S	57
Fig. VII.6a	- Efeito do reciclo de óleo leve abs. secundária na separação C_2^-/C_3^+ e recuperação de C_2^- e C_3^+	58
Fig. VII.6b	- Efeito do reciclo de óleo leve abs. secundária na recuperação e perda de H_2S	59
Fig. VII.7	- Efeito da razão de refluxo da debutanizadora na separação C_4^-/C_5^+ e recuperação de C_4^- e C_5^+	61
Fig. VII.8	- Efeito da temp. de fundo da debutanizadora na separação C_4^-/C_5^+ e recuperação de C_4^- e C_5^+	62
Fig. A.1	- Diagrama de blocos do método de BOX	73

LISTA DE TABELAS

Tab. V.1	- Critérios de convexidade da função objetivo	22
Tab. VI.1	- Faixas aceitáveis das variáveis de otimização	44
Tab. VII.1	- Eficiências de pratos da fracionadora principal	46
Tab. VII.2	- Eficiências de pratos da absorvedora primária	47
Tab. VII.3	- Eficiências de pratos da retificadora	47
Tab. VII.4	- Eficiências de pratos da absorvedora secundária	47
Tab. VII.5	- Eficiências de pratos da debutanizadora	48
Tab. VII.6	- Preços de derivados considerados (US\$/t)	63
Tab. VII.7	- Resultados da otimização (US\$/d)	64
Tab. VII.8	- Resultados da otimização (valores ótimos das variáveis de otimização)	64
Tab. A.1	- Coordenadas do simplex inicial	69
Tab. B.1	- Vazões e rendimentos de produtos	91
Tab. B.2	- Cromatografias dos produtos gasosos	92
Tab. B.3	- Destilações dos produtos líquidos	93

RELAÇÃO DE VARIÁVEIS

a	-	Tamanho da aresta do simplex
C_c	-	Custo da carga (US\$/t)
C_{ec}	-	Custo da energia dos condensadores (US\$/d)
C_{ee}	-	Custo da energia elétrica (US\$/d)
C_{er}	-	Custo da energia dos refervedores (US\$/d)
C_{eu}	-	Custo da energia e utilidades (US\$/d)
C_v	-	Custo de vapor (US\$/t)
C_2	-	Hidrocarbonetos com dois átomos de carbono
C_2^-	-	Hidrocarbonetos com dois ou menos átomos de carbono
C_3	-	Hidrocarbonetos com três átomos de carbono
C_3^+	-	Hidrocarbonetos com três ou mais átomos de carbono
C_4	-	Hidrocarbonetos com quatro átomos de carbono
C_4^-	-	Hidrocarbonetos com quatro ou menos átomos de carbono
C_5	-	Hidrocarbonetos com cinco átomos de carbono
C_5^+	-	Hidrocarbonetos com cinco ou mais átomos de carbono
C_c	-	Coefficiente de contração
C_e	-	Coefficiente de expansão
C_m	-	Centro de massa ou centróide
C_r	-	Coefficiente de reflexão
d	-	Direção do vetor gradiente
E_c	-	Energia dos condensadores (Kcal/d)
E_{cal}	-	Eficiência da caldeira (%)
E_e	-	Energia elétrica (Kcal/d)
E_r	-	Energia dos refervedores (Kcal/d)
E_t	-	Energia dos trocadores (Kcal/d)
E_c	-	Precisão requerida
f	-	Função matemática
FCCU	-	Fluid Catalytic Cracking Unit
FO	-	Função Objetivo (US\$/d)
FP	-	Fator de perda (% mássica)
FR	-	Fator de recuperação (% mássica)
FS	-	Fator de separação (% molar)

F	-	Valor da função objetivo no vértice contraído
f	-	Fator de escala
F _e	-	Valor da função objetivo no vértice expandido
F _i	-	Valor da função objetivo no vértice i do simplex
F _m	-	Valor médio da função objetivo no simplex
F _{máx}	-	Valor máximo da função objetivo no simplex
F _{mín}	-	Valor mínimo da função objetivo no simplex
F _r	-	Valor da função objetivo no vértice refletido
g	-	Funções de restrições de igualdade
GA	-	Gás Ácido
GAP	-	Medida da qualidade do fracionamento (°C)
GC	-	Gás Combustível
GLN	-	Nafta Craqueada ou Gasolina
GLP	-	Gás Liquefeito de Petróleo
h	-	incremento
h	-	Funções de restrições de desigualdade
H	-	Matriz hessiana
HCO	-	Heavy Cycle Oil ou óleo pesado de reciclo
Har	-	Entalpia da água de resfriamento (Kcal/Kg)
Hva	-	Entalpia do vapor de alta pressão (Kcal/Kg)
Hvb	-	Entalpia do vapor de baixa pressão (Kcal/Kg)
Hvm	-	Entalpia do vapor de média pressão (Kcal/Kg)
l	-	Tamanho do incremento do vetor gradiente
LCO	-	Light Cycle Oil
n	-	Número de variáveis de otimização
OCL	-	Óleo Clarificado
OCPE	-	Óleo Combustível Padrão Equivalente
p	-	Coordenadas do simplex
Par	-	Preço da água de resfriamento (US\$/t água circulada)
PCI	-	Poder Calorífico Inferior (Kcal/Kg)
PEV	-	Ponto de Ebulição Verdadeiro (°C)
Pocpe	-	Preço do óleo combustível padrão equivalente (US\$/t)
Pva	-	Preço do vapor de alta pressão (US\$/t)
Pvb	-	Preço do vapor de baixa pressão (US\$/t)
Pvm	-	Preço do vapor de média pressão (US\$/t)
PVR	-	Pressão de Vapor Reid (Kgf/cm ²)

- P_i - Vértice contraído do simplex
- P_e - Vértice expandido do simplex
- P_i - Vértice i do simplex
- $P_{i_{\max}}$ - Vértice de valor máximo do simplex
- $P_{i_{\min}}$ - Vértice de valor mínimo do simplex
- P_r - Vértice refletido do simplex
- q - Coordenadas do simplex
- RCT - Refluxo circulante de topo
- RHCO - Retorno do óleo pesado de reciclo
- RR - Razão de refluxo
- Ver - Valorização da energia recuperada (US\$/d)
- Vp - Valorização dos produtos (US\$/d)
- \mathbf{x} - Variáveis independentes da função matemática
- X_{\max} - Limite superior da variável de otimização
- X_{\min} - Limite inferior da variável de otimização
- X_n - Valor normalizado da variável de otimização
- X_r - Valor real da variável de otimização
- \mathbf{y} - Variáveis dependentes da função matemática

LETRAS GREGAS E SÍMBOLOS MATEMÁTICOS

- ϵ - constante do método da seção áurea
- λ - Multiplicador de Lagrange
- δ - Parâmetro da função penalidade
- τ - Parâmetro de conversão da função desigualdade em igualdade
- ∇ - Gradiente

SUMÁRIO

DEDICATÓRIA	i
AGRADECIMENTOS	ii
RESUMO	iii
LISTA DE FIGURAS	iv
LISTA DE TABELAS	v
RELAÇÃO DE VARIÁVEIS	vi
SUMÁRIO	ix
I INTRODUÇÃO	1
II DESCRIÇÃO DA PLANTA	2
II.1 Sub-divisões da planta de craqueamento catalítico	2
II.2 Seção de fracionamento e recuperação de produtos	5
II.2.1 Fracionadora principal	5
II.2.2 Recuperação de gases	6
II.2.3 Debutanizadora	8
III SIMULAÇÃO DA PLANTA	10
III.1 Simuladores de processos	10
III.1.1 Simulador de processos Hysim	11
III.2 Metodologia de simulação	11
IV PREVISÃO DE DESEMPENHO	14
IV.1 Eficiência de separação GLN / LCO	14
IV.2 Eficiência de separação GC / GLP	17
IV.3 Eficiência de separação GLP / GLN	18

V	OTIMIZAÇÃO DE PROCESSOS	
	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	20
V.1	Elementos básicos de um problema de otimização	20
V.2	Características da função objetivo	21
V.3	Condições gerais para valores ótimos	22
V.4	Métodos de otimização	23
	V.4.1 Busca irrestrita univariável	23
	V.4.1.1 Método analítico	24
	V.4.1.2 Métodos numéricos	25
	V.4.1.2.1 Métodos diretos	26
	V.4.1.2.2 Métodos indiretos	26
	V.4.2 Busca restrita univariável	27
	V.4.2.1 Método analítico	27
	V.4.2.2 Métodos numéricos	27
	V.4.2.2.1 Métodos diretos	27
	V.4.2.2.2 Métodos indiretos	31
	V.4.3 Busca irrestrita multivariável	31
	V.4.3.1 Método analítico	31
	V.4.3.2 Métodos numéricos	32
	V.4.3.2.1 Métodos diretos	32
	V.4.3.2.2 Métodos indiretos	34
	V.4.4 Busca restrita multivariável	
	Programação Linear	37
	V.4.5 Busca restrita multivariável	
	programação não-linear	38
	V.4.5.1 Restrições de igualdade	38
	V.4.5.1.1 Método analítico	38
	V.4.5.1.2 Métodos numéricos	38
	V.4.5.2 Restrições de desigualdade	41
V.5	Análise de sensibilidade	42
VI	OTIMIZAÇÃO DA PLANTA INDUSTRIAL	43
VI.1	Função Objetivo	43
VI.2	Variáveis de decisão	43
VI.3	Restrições nas variáveis de otimização	44
VI.4	Mudança de escala das variáveis de otimização	44

VI.5	Interface simulador-otimizador	45
VII	APRESENTAÇÃO E DISCUSSÃO DOS RESULTADOS	46
VII.I	Eficiências de pratos	46
VII.2	Previsão de desempenho da unidade	48
VII.2.1	Fracionadora principal - (T-2201)	48
VII.2.2	Recuperação de gases - Área Fria	51
VII.2.3	Debutanizadora - (T-2206)	60
VII.3	Otimização da unidade	63
VIII	CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES	66
APÊNDICE A	MÉTODO DE BOX	69
A.1	Simplex inicial	69
A.2	Prosseguimento da pesquisa	70
A.3	Critério de precisão	71
A.4	Diagrama de blocos do método de box	73
A.5	Listagem dos programas computacionais	74
APÊNDICE B	RENDIMENTOS E QUALIDADE DE PRODUTOS	91
APÊNDICE C	MÉTODOLOGIA DE CÁLCULO DA FUNÇÃO OBJETIVO VARIÁVEIS DE OTIMIZAÇÃO E RESTRIÇÕES	94
C.1	Métodologia de cálculo da função objetivo	94
C.2	Variáveis de otimização	96
C.3	Restrições nas variáveis de otimização	98
BIBLIOGRAFIA	CONSULTADA	99
ABSTRACT	101

CAPÍTULO I - INTRODUÇÃO

Este trabalho apresenta um método convencional de simulação da seção de fracionamento e recuperação dos produtos de unidades de craqueamento catalítico fluido, usando um simulador de processos comercial, faz previsões de desempenho da unidade frente a diferentes condições operacionais e determina os valores ótimos das principais variáveis de processo que otimizam a função objetivo, rentabilidade diária da unidade.

O capítulo II descreve a planta de craqueamento catalítico fluido (UFCC-I) da refinaria de Paulínia (REPLAN), apresenta os produtos da unidade e detalha a seção de fracionamento e recuperação dos produtos efluentes do reator catalítico.

O capítulo III apresenta os principais simuladores de processos comerciais, descreve sucintamente o simulador HYSIM e faz uma abordagem acerca da metodologia de simulação da planta.

O capítulo IV trata dos parâmetros de avaliação do desempenho da unidade para diferentes condições operacionais.

O capítulo V apresenta os métodos de otimização de processos (revisão bibliográfica) e o apêndice A descreve o método de Box, com diagrama de blocos e listagem do programa computacional do método, tal qual foi implementado neste trabalho.

No capítulo VI discute-se a função objetivo, variáveis de otimização e restrições. Neste capítulo é apresentada também a lógica de interface entre o simulador e o otimizador.

O capítulo VII apresenta e discute os resultados da simulação, previsão de desempenho e otimização da unidade.

E finalmente, no capítulo VIII, são apresentadas as principais conclusões e recomendações.

CAPÍTULO II - DESCRIÇÃO DA PLANTA

A primeira Unidade de Craqueamento Catalítico Fluido (FCCU - Fluid Catalytic Cracking Unit), UFCC-I da REPLAN, tem como objetivo transformar uma matéria-prima de baixo valor agregado, normalmente gasóleos de destilação a vácuo e resíduos atmosféricos, em produtos nobres como a Gasolina (GLN) e o Gás Liquefeito de Petróleo (GLP), através de reações de craqueamento em presença de catalisador, produzindo ainda Gás Combustível (GC), Diesel de FCC (LCO - Light Cycle Oil ou Óleo Leve), Óleo Clarificado (OCL) usado como diluente de Óleo Combustível (OC) ou como matéria-prima na produção de negro-de-fumo (produção de pneus) e Coque que é queimado no próprio processo gerando energia; além de Enxofre e Dissulfeto Líquido recuperados nos tratamentos dos produtos.

Uma UFCC, além de adequar a produção de derivados à demanda do mercado, aumenta a lucratividade de uma refinaria de petróleo.

II.1 - Sub-divisões da planta de craqueamento catalítico

As unidades de craqueamento catalítico fluido são normalmente sub-divididas em três sub-unidades ou seções. A UFCCI-I da REPLAN não foge a esta regra, sendo portanto, dividida em:

- . Seção de conversão;
- . Seção de fracionamento e recuperação dos produtos e
- . Seção de tratamentos de produtos.

A seção de conversão é considerada o "coração" da unidade, pois é onde se processam as reações químicas de ruptura de ligações (cracking), na presença do catalisador, gerando compostos de menor peso molecular, com cadeias carbônicas de diferentes estruturas moleculares, resultado das reações de craqueamento catalítico, craqueamento térmico e reações secundárias.

A conversão (fração da carga efetivamente convertida a produtos) e a qualidade dos produtos obtidos são dependentes de vários fatores, dentre os quais, os mais importantes são:

. Severidade de reação, quantificada pelos seguintes parâmetros: Temperatura de reação, Tempo de contato entre a carga e o catalisador e Relação catalisador/carga.

. Qualidade da carga ou craqueabilidade da carga, a qual apresenta uma relação direta com a percentagem de hidrocarbonetos parafínicos (compostos facilmente craqueáveis quando comparados aos demais tipos de hidrocarbonetos) e impurezas presentes.

. Atividade do leito catalítico.

O catalisador zeolítico a base de sílica-alumina, é dotado de um controle rigoroso das propriedades físicas e químicas tanto nas fases de produção quanto durante todo o tempo de uso deste no processo, garantindo sempre boa atividade e seletividade.

A energia necessária as reações de craqueamento provém da queima do coque que fica impregnado no catalisador durante as reações de craqueamento em risers. Na fase de regeneração, recupera-se a atividade do catalisador que retorna aos risers fechando o ciclo, e os gases de combustão, contendo CO, seguem para uma caldeira geradora de vapor (caldeira de CO). Os produtos das reações de craqueamento, após passarem pelos ciclones do vaso separador, seguem para a seção de fracionamento e recuperação de produtos, entrando na região inferior da fracionadora principal.

A seção de fracionamento e recuperação de produtos, objeto desse estudo, inclui o resfriamento e fracionamento dos gases superaquecidos efluentes do reator catalítico, compressão em duplo estágio seguida de resfriamento, absorção, retificação e fracionamento dos produtos que seguem para a seção de tratamentos.

A seção de tratamentos dos produtos, tem como objetivo remover impurezas e contaminantes das correntes de GC, GLP e GLN.

O tratamento DEA (DiEtanolAmina) remove gás sulfídrico (H_2S) das correntes de GC e GLP (remove também o CO_2 no caso do GC), em torres absorvedora e extratora respectivamente, gerando o Gás Ácido (GA) na fase de regeneração da DEA, a qual retorna às torres absorvedora e extratora fechando o ciclo. O GA gerado na fase de regeneração da DEA, é a carga da Unidade de Recuperação de Enxofre (URE).

Os tratamentos Merox (Mercaptans Oxidation) do GLP e da GLN removem os compostos de carbono ligados a enxofre (mercaptans), presentes nestas correntes. Os mercaptans removidos do GLP são transformados em dissulfeto no próprio tratamento, e recuperados como sub-produto, enquanto que os mercaptans presentes na gasolina são também transformados em dissulfetos, contudo não são removidos, permanecendo na corrente de gasolina (adoçamento da gasolina).

A figura II.1 apresenta um diagrama de blocos da UFCC-I da REPLAN, destacando a seção de fracionamento e recuperação de produtos, que é descrita a seguir.

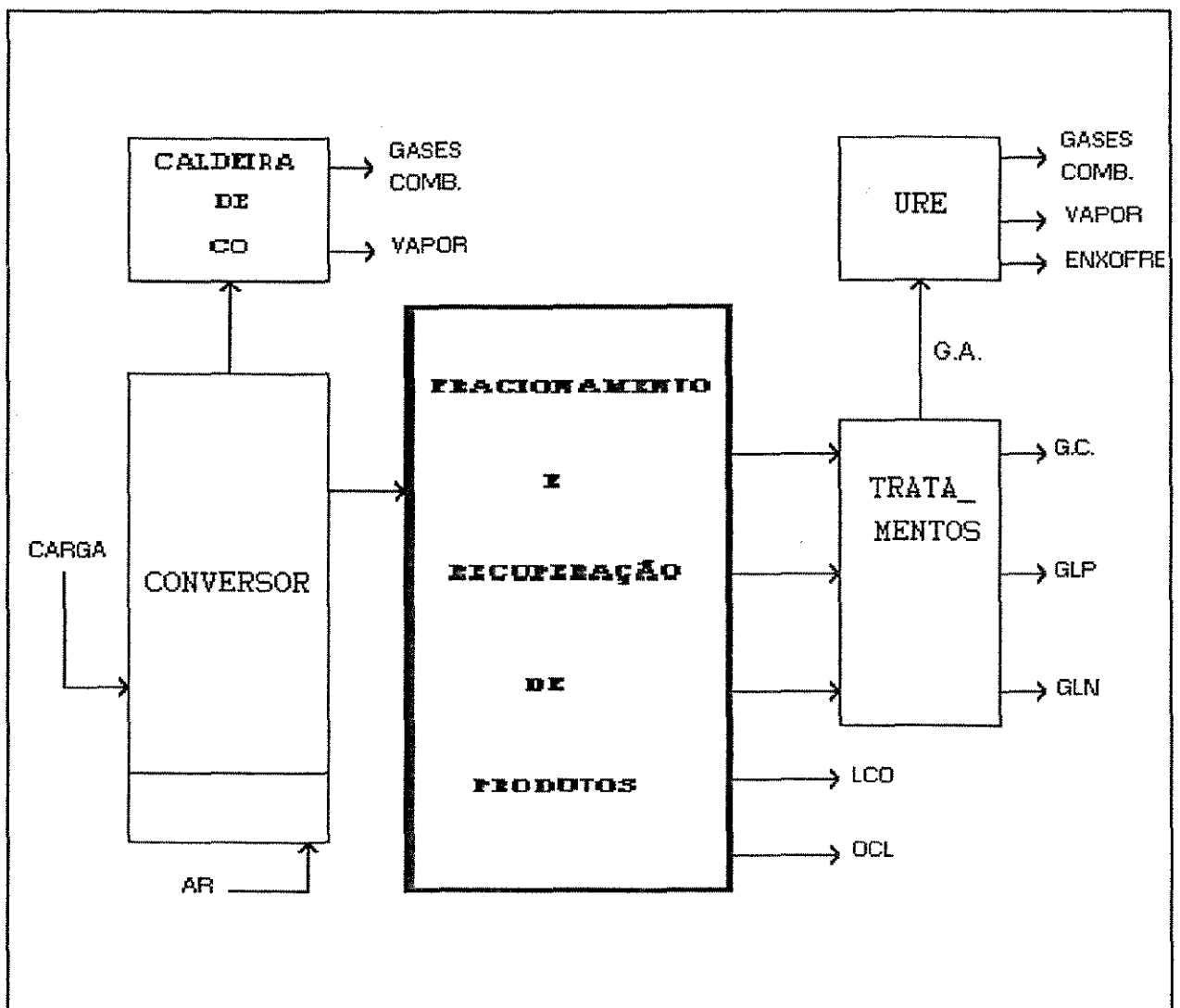


Fig. II.1 - Diagrama de blocos da UFCC-I da REPLAN

II.2 - Seção de fracionamento e recuperação de produtos

A seção de fracionamento e recuperação dos produtos da unidade de craqueamento catalítico fluido tem como objetivo, separar da melhor maneira possível, a corrente efluente do conversor. Recuperando o máximo do produto desejado, sem comprometer a qualidade requerida do produto em questão.

Para efeito de facilidade de entendimento do processo e descrição da unidade, a seção de fracionamento e recuperação de produtos será sub-dividida em três áreas:

- . Fracionadora Principal;
- . Recuperação de Gases ou Área Fria e
- . Debutanizadora.

II.2.1 - Fracionadora principal

A torre fracionadora principal tem como objetivo resfriar e fracionar o efluente gasoso do conversor da UFCC.

Esta torre apresenta duas regiões bem distintas: a primeira, composta por chicanas, é fundamentalmente uma região de troca térmica que resfria o efluente do conversor a níveis em que possa haver o fracionamento sem grandes riscos de formação de coque na região de fundo da torre; e a segunda é onde ocorre o fracionamento propriamente dito, composta por pratos valvulados.

Outra característica da fracionadora principal que a difere das torres de fracionamento comuns, é o fato de não se ter nenhum controle e caracterização da carga da torre, a qual é dependente das condições operacionais do conversor.

DESCRIÇÃO DOS FLUXOS

Os gases superaquecidos efluentes do reator catalítico a temperaturas de 500/530 °C entram na região de fundo da fracionadora principal, onde são resfriados rapidamente a temperaturas inferiores a 370 °C, através dos refluxos circulantes. Nesta torre são separadas três correntes:

. Produto de fundo, o OCL (Óleo Clarificado ou Óleo Decantado), que é enviado para tanques de armazenamento após trocar calor com a carga da unidade e resfriamento final.

. Produto intermediário, o LCO (Light Cycle Oil ou Óleo Leve), que passa pela retificadora lateral da fracionadora, e segue para tanques de armazenamento após trocar calor com a carga da unidade e resfriamento final.

. Produto de topo, constituído de gasolina e produtos mais leves, que seguem para a seção de recuperação de gases.

Além desses produtos a fracionadora principal tem vários refluxos circulantes que trocam calor com a carga da unidade, em trocadores geradores de vapor e refervedores da retificadora e debutanizadora. Possui injeções de vapor d'água no fundo da torre e retificadora lateral, um reciclo que serve de absorção na absorvedora secundária, injeção de água de lavagem dos gases e recebimento de gases externos no vaso de topo.

A fracionadora principal contém 20 pratos e 5 chicanas e a retificadora lateral 4 pratos e operam a pressões de 1 a 1.5 Kgf/cm² manométrica.

As temperaturas de topo e fundo da fracionadora são ajustadas de acordo com a qualidade desejada dos produtos e tipo de campanha, sendo que em condições normais, essas temperaturas ficam na faixa de 120 a 140 e 320 a 350 °C para as temperaturas de topo e fundo, respectivamente.

A fracionadora principal é muito flexível do ponto de vista das condições operacionais, evidenciando a importância de estabelecer o ponto ótimo para cada tipo de operação.

II.2.2 - Recuperação de gases

A seção de recuperação de gases ou área fria como é conhecida pelo pessoal dessa área, separa a corrente de topo da fracionadora principal em três correntes, uma gasosa ou gás combustível não tratado, uma líquida denominada nafta instabilizada e uma corrente aquosa que segue para a unidade de tratamento de águas ácidas da

refinaria.

DESCRIÇÃO DOS FLUXOS

O líquido do vaso de topo da fracionadora principal é enviado a torre absorvedora primária (sob controle de nível do vaso) e os incondensáveis, nas condições de temperatura e pressão do vaso, são comprimidos em duplo estágio (compressor centrífugo acionado por turbina a vapor) com resfriador inter-estágios, elevando a pressão para 16 a 20 Kgf/cm² man., e controlando a pressão do vaso de topo da fracionadora. Esses gases juntamente com o líquido do vaso condensador inter-estágios chegam ao vaso de alta pressão.

Os gases desse vaso de alta pressão é carga da absorvedora primária onde o líquido de absorção é o líquido do condensador de topo da fracionadora principal mais um reciclo de nafta estabilizada. O produto de fundo dessa torre retorna ao mesmo vaso de alta pressão e o produto de topo segue para a absorvedora secundária onde o líquido de absorção desta vez é uma corrente de reciclo da fracionadora principal. O produto de topo da absorvedora secundária é o gás combustível não tratado que segue, sob controle de pressão, para o tratamento DEA (DiEtanolAmina) para remoção do gás sulfídrico.

As absorvedoras têm como objetivo recuperar as frações mais pesadas que o C₂.

O líquido do vaso de alta pressão é a carga da retificadora ou deetanizadora, onde são removidos os componentes mais leves que o C₃ que retornam ao vaso de alta pressão, e o produto de fundo é a nafta instabilizada.

As absorvedoras primária e secundária têm 30 e 24 pratos, respectivamente e a retificadora contém 20 pratos e operam a pressões de 14 a 20 Kgf/cm² man.

A área fria, assim como a fracionadora principal, pode ser operada nas condições as mais diversas, quanto à pressão de descarga do compressor, reciclo de nafta estabilizada, reciclo de óleo de absorção secundária, temperaturas de fundo da retificadora, injeção de água de lavagem de gases etc.

II.2.3 - Debutanizadora

A debutanizadora é uma torre de fracionamento do tipo convencional com uma carga, produtos de topo e fundo, refeedor, condensadores e refluxo de topo.

Os produtos desta torre, o GLP (Gás Liquefeito de Petróleo) e a GLN (Nafta Craqueada) ou gasolina como é mais conhecida, são os produtos de maior valor comercial da unidade.

DESCRIÇÃO DOS FLUXOS

A nafta instabilizada, sob controle de nível de fundo da retificadora, é enviada por diferença de pressão para a torre debutanizadora, entrando na região intermediária após pré-aquecimento com o produto de fundo da própria torre.

A debutanizadora separa a carga em duas correntes, pelo topo sai o GLP e pelo fundo a GLN, esses dois produtos seguem para os seus respectivos tratamentos para remoção de impurezas.

Parte da gasolina (Nafta Estabilizada), após resfriamento, retorna para a absorvedora primária, como descrito anteriormente, com o objetivo de melhorar a absorção, reduzindo as perdas de GLP para gás combustível.

A debutanizadora contém 31 pratos e opera a pressões de 10 a 12 Kgf/cm² manométrica.

As temperaturas de operação da debutanizadora também são dependentes do tipo de campanha, ou seja, qual produto se deseja maximizar: GLP limitado pelo intemperismo (temperatura correspondente a 95% vaporizado em volume) ou GLN limitada pela PVR (Pressão de Vapor Reid). Em condições normais de operação, essas temperaturas ficam na faixa de 52 a 58 e 175 a 185 °C para as temperaturas de topo e fundo, respectivamente.

A figura II.2 mostra o fluxograma simplificado da seção de fracionamento e recuperação dos produtos da Unidade de Craqueamento Catalítico Fluido (UFCC-I) da REPLAN.

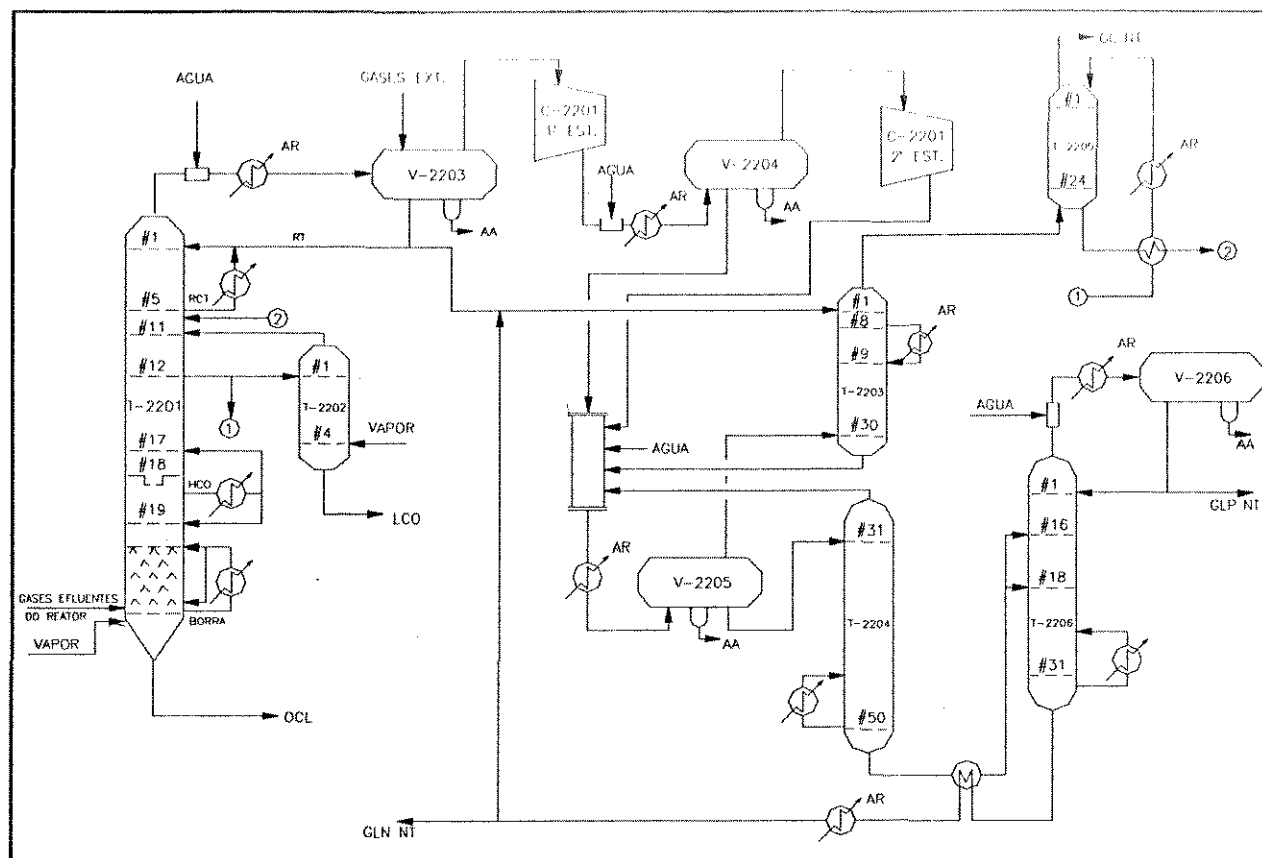


Fig. II.2 - Seção de fracionamento e recuperação de produtos da Unidade de Craqueamento Catalítico Fluido

Descrição dos principais equipamentos

- . C-2201 - Compressor de gases
- . T-2201 - Fracionadora principal
- . T-2202 - Retificadora lateral de LCO
- . T-2203 - Absorvedora primária
- . T-2204 - Retificadora
- . T-2205 - Absorvedora secundária
- . T-2206 - Debutanizadora
- . V-2203 - Vaso condensador de topo da fracionadora principal
- . V-2204 - Vaso condensador inter-estágio do compressor
- . V-2205 - Vaso de alta pressão
- . V-2206 - Vaso condensador de topo da debutanizadora

CAPÍTULO III - SIMULAÇÃO DA PLANTA

O projeto de processos com a ajuda do computador vem se tornando uma disciplina muito importante na engenharia química. Recentemente, com o aumento de capacidade e flexibilidade dos PC's e subsequente proliferação dos "softwares", cada dia mais amigáveis, tem se observado uma melhora da qualidade e aumento de produtividade, resultado desse avanço tecnológico e sinergismo homem-máquina (VYSNIAUSKAS, 1989).

A simulação de processos é um meio de representar um processo químico através de modelos matemáticos projetados para prever a performance desse processo, pela incorporação de equações de balanço material e de energia das operações unitárias, tais como, trocadores de calor, resfriadores, compressores, expansores, bombas, válvulas, separadores, reatores ou colunas de destilação.

Nas simulações de plantas químicas complexas, onde é requerido um alto grau de certeza dos resultados, faz-se normalmente uso de simuladores específicos e dedicados ao processo em questão.

III.1 - Simuladores de processos

A simulação de processos em estado estacionário é uma rotina relativamente antiga da engenharia de análise, otimização e projeto de processos. Um dos primeiros trabalhos que discutia os aspectos gerais de projetos de programas computacionais para auxiliarem simulações de processos foi realizado por Shah (1967), e a partir daí surgiram outros, mostrando diferentes técnicas de simulação, sendo Lorenz (1989) um dos mais recentes.

Nos últimos tempos têm surgido no mercado, vários simuladores comerciais tais como: Aspen, Process, Ascena, Capes, Chemasim, Design-II, Genesis, PRO-II, Hysim (simulador usado neste trabalho), etc.. cada um com as suas particularidades e campos de aplicações as vezes específicas.

III.1.1 - Simulador de processos Hysim

O Hysim, Hyprotec Simulator, um dos vários simuladores de processos disponíveis no mercado, pertence à Hyprotec Ltd. e é especialmente aplicável em indústrias de processamento de gases, refino de petróleo, petroquímicas e combustíveis sintéticos.

O Hysim é totalmente interativo e possui uma interface usuário/simulador bastante amigável e de fácil compreensão. É constituído de módulos ou unidades de operação que representam quase a totalidade dos processos das indústrias químicas. O Hysim, nas suas versões mais recentes, não apresenta restrições quanto ao número de componentes e operações unitárias.

O Hysim oferece vários modelos para cálculo de propriedades termodinâmicas, incluindo equações de estado, correlações semi-empíricas e modelos de atividade.

O Hysim é baseado na estrutura modular não sequencial, que permite especificar por exemplo uma corrente de saída ou intermediária e encontrar a corrente de entrada.

III.2 - Metodologia de simulação

A metodologia apresentada aqui é a metodologia convencional de simulações de unidades deste tipo (seção de fracionamento e recuperação dos produtos da unidade de craqueamento catalítico).

Em função da impossibilidade de caracterizar a carga da fracionadora principal, (gases superaquecidos efluentes do conversor), esta foi composta a partir dos produtos. Uma vez conhecidos todos os produtos: cromatografia dos produtos gasosos, destilação dos produtos líquidos e vazões de todos os produtos, a carga da fracionadora principal foi composta por um simples balanço de massa, usando o simulador de processos.

A figura III.1 mostra o esquema de composição da carga a partir dos produtos e vapor d'água injetado no reator, onde se observa que a única corrente desconhecida é a carga da fracionadora principal.

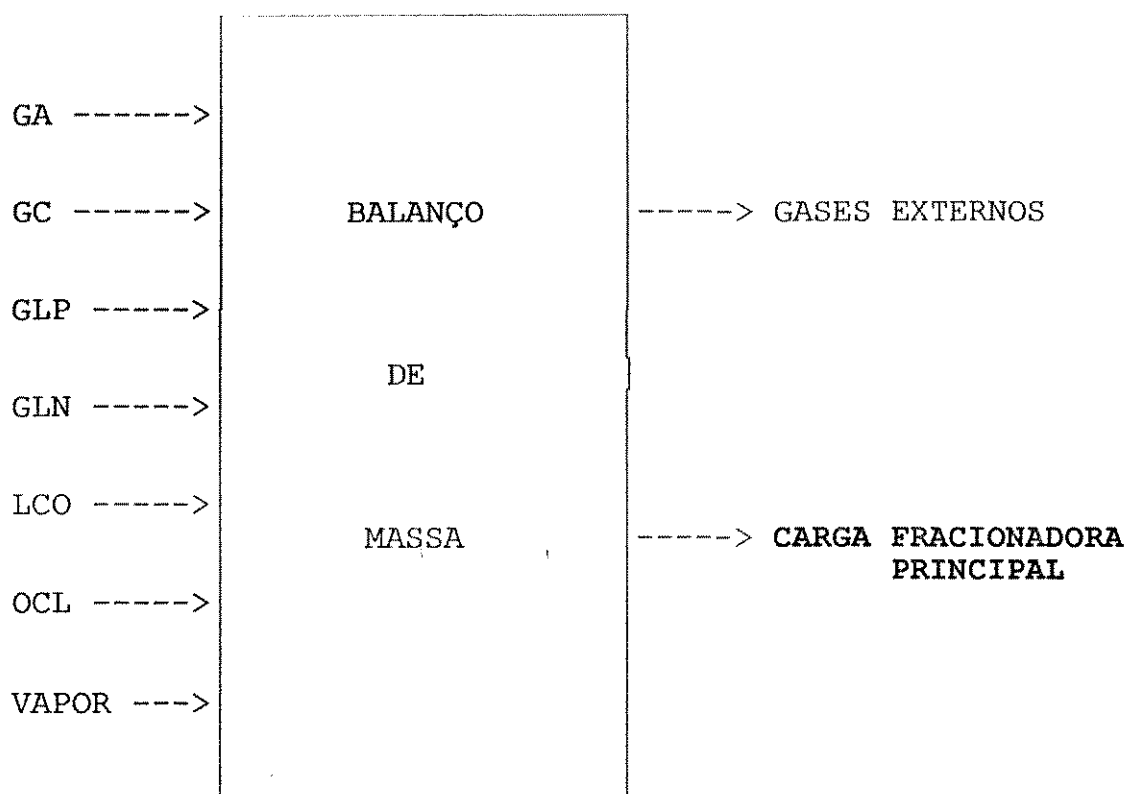


Fig. III.1 - Esquema da composição da carga da fracionadora

As correntes gasosas (GA, GC, Gases Externos e GLP) foram caracterizadas por cromatografia e agrupados em 18 componentes puros e as frações líquidas (GLN, LCO e OCL) caracterizadas por destilações e representadas por 32 pseudo-componentes, somando um total de 50 componentes, quantidade suficientemente grande para não comprometer a exatidão dos resultados e pequeno o bastante para não tornar o tempo de simulação exageradamente grande.

O apêndice B apresenta as vazões, os rendimentos e a qualidade dos produtos adotados na simulação.

O princípio da simulação consistiu inicialmente de especificar vazões (produtos de topo e/ou fundo, vazões de retiradas laterais e vazões de refluxos circulantes) e quantidade de calor trocado pelos refluxos circulantes, que são as especificações "default" do simulador. Posteriormente, as especificações de quantidade de calor trocado pelos refluxos circulantes foram substituídas por temperaturas de retorno desses refluxos circulantes, e o ajuste dos perfis de temperaturas ao longo das torres e as qualidades dos

produtos finais e correntes intermediárias, foram obtidos variando-se as eficiências de pratos, determinando assim o número de estágios teóricos de todas as torres de fracionamento.

A partir do momento em que a simulação passou a representar bem as condições operacionais da unidade e as qualidades dos produtos estavam compatíveis com as obtidas de análises de laboratório, as especificações adotadas inicialmente foram trocadas por outras como temperaturas de topo e fundo, temperaturas de pratos intermediários, pontos finais de destilações de produtos, refluxos internos e outras, tornando a simulação mais geral, dispensando mudanças dos valores das especificações quando mudar, por exemplo, a vazão e/ou a composição da carga da unidade.

Na simulação houve uma combinação de pratos teóricos e pratos reais associados a eficiências. No caso da fracionadora principal, optou-se por usar pratos reais e variar as eficiências para ajustar o perfil de temperatura e a qualidade dos produtos da torre, porque a inclusão/remoção de pratos envolve grandes alterações na torre devido à sua complexidade, e nas demais torres optou-se pelo uso de pratos teóricos por serem menos complexas possibilitando a economia de memória e redução do tempo de simulação.

A simulação foi avaliada para vários modelos termodinâmicos que fazem parte do simulador HYSIM, e não se observou grandes diferenças nos resultados. Então, definiu-se a equação de Peng-Robinson como "default" da simulação.

CAPÍTULO IV - PREVISÃO DE DESEMPENHO

Depois que os resultados da simulação refletiam a realidade da unidade na região em torno das condições normais de operação, iniciou-se a previsão de desempenho, isto é, previsão das condições de saída compatíveis com as diferentes condições de entrada.

As eficiências de separação de frações adjacentes e a recuperação de produtos (ou componentes) desejados foram avaliadas em diferentes condições operacionais. A avaliação foi feita individualmente para as variáveis de processo mais importantes.

IV.1 - Eficiência de separação GLN / LCO

A eficiência de separação ou a qualidade do fracionamento entre duas frações líquidas adjacentes com grande número de componentes, é normalmente medida pelo parâmetro "GAP" entre as duas correntes, definido como:

$$GAP = T_{5\% \text{ Pesado}} - t_{95\% \text{ Leve}} \quad (\text{IV.1})$$

Onde: $T_{5\% \text{ Pesado}}$ - Temperatura correspondente a 5% vaporizado em volume do produto mais pesado na curva de destilação ASTM.

$t_{95\% \text{ Leve}}$ - Temperatura correspondente a 95% vaporizado em volume do produto mais leve na curva de destilação ASTM.

Quanto maior o GAP melhor o grau de fracionamento. Em casos de mau fracionamento ou pequenas faixas de pontos de ebulição das frações, esse valor pode ser negativo (OVERLAP).

A figura IV.1 mostra as curvas de destilações de duas frações adjacentes e o GAP entre elas.

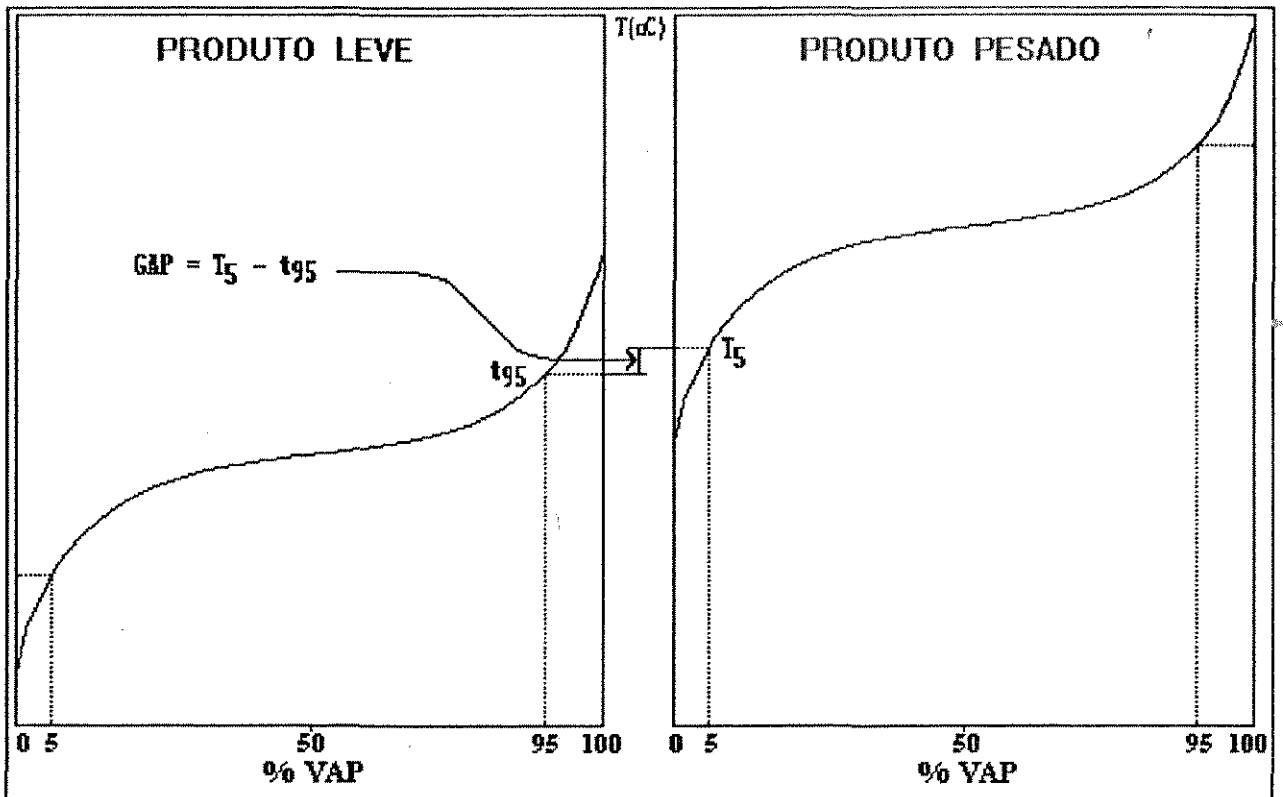


Fig. IV.1 - GAP entre duas frações adjacentes

Quando se analisa o efeito de uma determinada variável no grau de fracionamento entre duas frações adjacentes, onde o ponto final de ebulição do produto mais pesado varia muito de um caso para outro (efeito da temperatura de fundo da fracionadora no ponto final do LCO por exemplo), deve-se fazer a correção da curva de destilação do produto mais pesado, colocando-a na mesma base da curva de referência, quanto ao ponto final de ebulição.

Procedimento de correção:

Usando as curvas de destilações do produto mais pesado; curva real e curva na condição de referência:

. toma-se a temperatura igual a T_{100}^r (na curva de referência), vai-se até a curva de destilação que se deseja corrigir, determinando a percentagem vaporizada para esta temperatura (P_{100}^c).

. Determina-se P_5^c , onde $P_5^c = 0,05 P_{100}^c$.

. Com P_5^c vai-se até a curva que se deseja corrigir determinando T_5^c .

O GAP corrigido será então:

$$GAP^c = T_{5\% \text{ Pesado}}^c - t_{95\% \text{ Leve}} \quad (\text{IV.2})$$

A figura IV.2 mostra a forma gráfica de correção da curva de destilação, para o mesmo ponto final de ebulição.

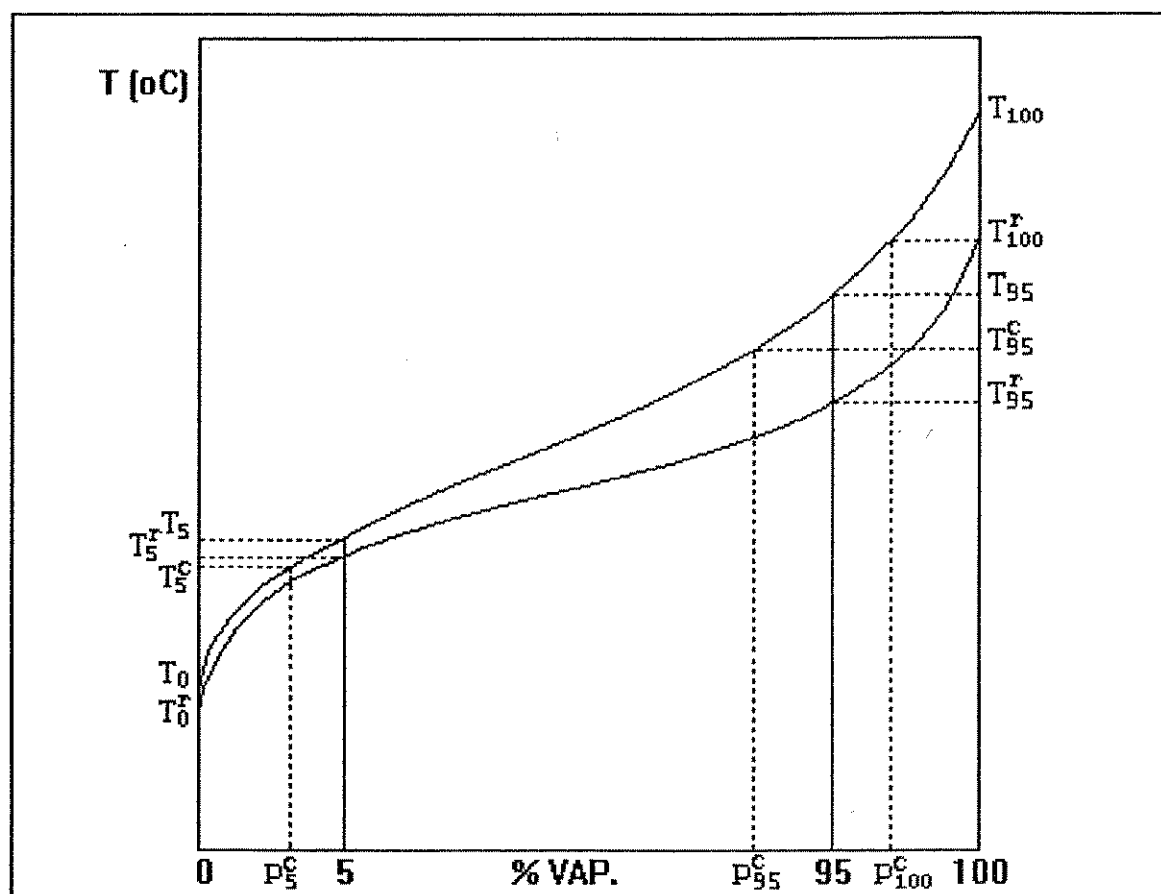


Fig. IV.2 - Correção da curva de destilação

O GAP entre a GLN e o LCO, e o diferencial de recuperação do produto de topo, comparados ao caso base (razão de refluxo igual a 0, e temperatura de fundo igual a 330 °C), foram medidos para diferentes valores da razão de refluxo e da temperatura de fundo da fracionadora principal.

O capítulo VII apresenta os resultados na forma de gráficos.

IV.2 - Eficiência de separação GC / GLP

O GC é composto basicamente de H_2 , C_1 (metano), C_2 (etano e eteno) e outros componentes em menores quantidades como: CO , CO_2 , N_2 etc, e o GLP é composto de C_3 (propano e propeno) e C_4 (butanos, butenos e butadienos).

A eficiência da separação entre o GC e o GLP está relacionada com as concentrações de C_2 e C_3 nessas correntes.

Matematicamente essa medida da eficiência de separação pode ser quantificada pelo Fator de Separação (FS) entre o C_2 e o C_3 , definido como (Castro, 1991):

$$FS_{(C_2^-/C_3^+)} = 100 \frac{1}{2} \left[\left(1 - \frac{MPC_{2\text{ GLP}}^-}{MPC_{2\text{ GC}}^-}\right) + \left(1 - \frac{MPC_{3\text{ GC}}^+}{MPC_{3\text{ GLP}}^+}\right) \right] \quad (\text{IV.3})$$

Onde: $MPC_{2\text{ GLP}}^-$ - Percentual Molar de C_2^- no GLP
 $MPC_{3\text{ GC}}^+$ - Percentual Molar de C_3^+ no GC
 $MPC_{2\text{ GC}}^-$ - Percentual Molar de C_2^- no GC
 $MPC_{3\text{ GLP}}^+$ - Percentual Molar de C_3^+ no GLP

Analogamente ao FS, pode ser definido um Fator de Recuperação (FR) dos componentes de interesse.

Recuperação do C_2^- :

$$FR_{(C_2^-)} = 100 \frac{WPC_{2\text{ GC}}^- W_{GC}}{(WPC_{2\text{ GC}}^- W_{GC} + WPC_{2\text{ GLP}}^- W_{GLP})} \quad (\text{IV.4})$$

Recuperação do C_3^+ :

$$FR_{(C_3^+)} = 100 \frac{WPC_{3\text{ GLP}}^+ W_{GLP}}{(WPC_{3\text{ GLP}}^+ W_{GLP} + WPC_{3\text{ GC}}^+ W_{GC})} \quad (\text{IV.5})$$

Recuperação do H₂S:

$$FR_{(H_2S)} = 100 \frac{WPH_2S_{GC} W_{GC}}{(WPH_2S_{GC} W_{GC} + WPH_2S_{GLP} W_{GLP})} \quad (IV.6)$$

Onde: WP - Percentual Mássico

W - Vazão Mássica

O C₂⁻ no GLP em baixas concentrações não é problema, pelo contrário, é até desejado, contudo o C₃⁺ no GC é indesejado pois representa perda de produto, uma vez que o GLP tem maior valor que o GC.

Quanto ao H₂S, é desejado que este esteja presente no GC em detrimento ao GLP para melhorar a eficiência do tratamento DEA e reduzir possibilidades de corrosão na gasolina. Recuperar H₂S significa transferí-lo para o GC, ou seja, o H₂S presente no GC é considerado como recuperado e o restante, presente no GLP, é considerado como "perdido", para efeito do que é normalmente desejado para o H₂S.

O Fator de Separação entre C₂⁻ e C₃⁺ e o Fator de Recuperação do C₂⁻, C₃⁺ e H₂S foram medidos em função das seguintes variáveis:

- . Pressão de descarga do compressor;
- . Temperatura de fundo da retificadora;
- . Reciclo de nafta estabilizada para absorvedora primária e
- . Reciclo de óleo leve para absorvedora secundária.

O capítulo VII apresenta os resultados na forma de gráficos.

IV.3 - Eficiência de separação GLP / GLN

A gasolina é composta de hidrocarbonetos na faixa de C₅ a C₁₂, e a eficiência de separação entre a GLN e o GLP está relacionada com as concentrações de C₄ e C₅ nessas correntes, quantificada pelo Fator de Separação (FS) entre o C₄ e o C₅, definido como:

$$FS_{(c_4^-/c_5^+)} = 100 \frac{1}{2} \left[\left(1 - \frac{MPC_{4\text{ GLN}}^-}{MPC_{4\text{ GLP}}^-}\right) + \left(1 - \frac{MPC_{5\text{ GLP}}^+}{MPC_{5\text{ GLN}}^+}\right) \right] \quad (\text{IV. 7})$$

Onde: $MPC_{4\text{ GLN}}^-$ - Percentual Molar de C_4^- na GLN
 $MPC_{5\text{ GLP}}^+$ - Percentual Molar de C_5^+ no GLP
 $MPC_{4\text{ GLP}}^-$ - Percentual Molar de C_4^- no GLP
 $MPC_{5\text{ GLN}}^+$ - Percentual Molar de C_5^+ no GLN

E os Fatores de Recuperação (FR) de C_4^- na corrente de GLP e C_5^+ na corrente de GLN podem ser calculados pelas relações:

Recuperação do C_4^- :

$$FR_{(C_4^-)} = 100 \frac{WPC_{4\text{ GLP}}^- W_{GLP}}{(WPC_{4\text{ GLP}}^- W_{GLP} + WPC_{4\text{ GLN}}^- W_{GLN})} \quad (\text{IV. 8})$$

Recuperação do C_5^+ :

$$FR_{(C_5^+)} = 100 \frac{WPC_{5\text{ GLN}}^+ W_{GLN}}{(WPC_{5\text{ GLN}}^+ W_{GLN} + WPC_{5\text{ GLP}}^+ W_{GLP})} \quad (\text{IV. 9})$$

Onde: WP - Percentual Mássico
W - Vazão Mássica

O Fator de Separação entre C_4^- e C_5^+ e o Fator de Recuperação do C_4^- e C_5^+ foram medidos em função da razão de refluxo e da temperatura de fundo da debutanizadora.

O capítulo VII apresenta os resultados na forma de gráficos.

CAPÍTULO V - OTIMIZAÇÃO DE PROCESSOS

REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

O termo otimização no seu significado mais amplo pode ser definido como sendo a busca da melhor solução (solução ótima) dentre as diversas soluções possíveis de um problema, segundo um critério previamente estabelecido. No campo da matemática, o termo otimização consiste na determinação dos máximos e mínimos de funções de uma ou mais variáveis.

V.1 - Elementos básicos de um problema de otimização

Todo problema de otimização compreende os seguintes elementos básicos:

- . Função objetivo;
- . Variáveis de decisão;
- . Restrições e
- . Região de busca

FUNÇÃO OBJETIVO - É a função matemática cujo máximo ou mínimo se deseja determinar. Na engenharia de processos, ela consiste, quase sempre, em um lucro ou um custo.

VARIÁVEIS DE DECISÃO - São as variáveis independentes do problema de otimização. Na engenharia de processo, elas são as variáveis de projeto que correspondem, em número, ao excesso de incógnitas (variáveis não especificadas) em relação ao número de equações (graus de liberdade).

RESTRIÇÕES - São os limites estabelecidos pelas leis naturais que governam o comportamento do sistema, as quais estão sujeitas as variáveis de decisão. Essas restrições podem ser de igualdade ou desigualdade.

REGIÃO DE BUSCA OU REGIÃO VIÁVEL - É a região do espaço definida pelas variáveis de decisão, delimitada pelas restrições, em cujo interior ou em cuja fronteira, se localiza o máximo ou o mínimo da função objetivo.

V.2 - Características da função objetivo

A função objetivo do ponto de vista puramente matemático, pode assumir aspectos os mais diversos, influenciando decisivamente no modo de abordar o problema de otimização e na probabilidade de sucesso na sua resolução, por isso, antes de se resolver um problema de otimização, é indispensável reconhecê-la segundo três características fundamentais: continuidade, modalidade e convexidade.

CONTINUIDADE - Quanto à continuidade, uma função objetivo pode ser:

. **CONTÍNUA**: Quando $f(x) = \lim_{h \rightarrow 0} f(x+h)$ para todas as maneiras possíveis em que $h \rightarrow 0$. Uma função pode ser contínua mas apresentar descontinuidades na sua derivada em relação a variável de decisão.

. **DESCONTÍNUA**: É o caso da função não ser definida para certos valores da variável de decisão ou apresentar dois ou mais valores diferentes para o mesmo valor da variável de decisão.

. **DISCRETA**: É um tipo de descontinuidade em que a variável de decisão assume apenas valores discretos (ex.: número de estágios, diâmetros de tubos, etc.).

MODALIDADE - Uma função objetivo é unimodal quando exibe apenas um valor extremo e é multimodal quando apresentar mais de um extremo, um dos quais é global e os demais locais. A multimodalidade de uma função é fonte de dificuldade na resolução de um problema de otimização, uma vez que o método adotado pode convergir para um extremo local e não para o extremo global.

CONVEXIDADE - Trata-se de uma propriedade exibida por certas funções unimodais. Quanto a convexidade uma função pode ser côncava ou convexa, caso seja unimodal.

Uma função é côncava se: $f[(1-a)x_1 + ax_2] \geq (1-a)f(x_1) + af(x_2)$, e é convexa quando se verifica a desigualdade invertida.

A convexidade pode ser determinada pelo exame da matriz Hessiana $\mathbf{H}(\mathbf{x})$ da função objetivo, segundo critérios da tabela V.1.

Tab. V.1 - Critérios de convexidade da função objetivo

$f(\mathbf{x})$	$\mathbf{H}(\mathbf{x})$	Todos os valores caract. de $\mathbf{H}(\mathbf{x})$
Estritamente convexa	Positiva definida	> 0
Convexa	Positiva semi-definida	≥ 0
Côncava	Negativa semi-definida	≤ 0
Estritamente côncava	Negativa definida	< 0

V.3 - Condições gerais para valores ótimos

Os valores ótimos de uma função só podem ser encontrados em certos pontos da região de busca, os quais, por conseguinte, são os únicos que precisam ser investigados durante a busca.

FUNÇÕES CONTÍNUAS - A existência de um ponto de máximo ou de mínimo para toda função contínua é garantida pelo teorema de Weierstrass: "Toda função contínua, num domínio fechado, possui um valor mais alto e um mais baixo, no interior ou na fronteira da região"; e a localização do ponto ótimo, no interior de uma região, pode ser determinada pelo teorema: "Uma função contínua $f(\mathbf{x})$ de n variáveis independentes $x_1, x_2, x_3, \dots, x_n$, alcançará um máximo ou um mínimo no interior de uma região, apenas nos valores das variáveis x_i para os quais as derivadas parciais $\partial f / \partial x_i$ se anulam simultaneamente (ponto estacionário) ou nos quais uma ou mais dessas derivadas deixam de existir numa descontinuidade".

FUNÇÕES DESCONTÍNUAS - Problemas com essa característica normalmente são resolvidos por divisões da região, colocando-se fronteiras nas descontinuidades, decompondo o problema em diversos problemas de funções contínuas.

FUNÇÕES DISCRETAS - Normalmente, comparam-se os valores da função em cada um dos pontos em que ela existe, fazendo uso, quando possível, das características de unimodalidade da função.

V.4 - Métodos de otimização

A complexidade de um problema de otimização depende dos seguintes fatores principais:

- . Descontinuidade na função objetivo e nas restrições;
- . Não-linearidade da função objetivo e das restrições;
- . Multimodalidade da função objetivo e
- . Sensibilidade da função objetivo em relação as variáveis de projeto.

Disso resulta a inexistência de um método universal que resolva de forma eficiente qualquer problema de otimização. Na verdade, os métodos existem e são escolhidos em função do tipo de problema que se deseja resolver.

Os problemas podem ser classificados:

- . Quanto ao número de variáveis: Univariáveis e Multivariáveis.
- . Quanto à existência de restrições: Irrestritos e Restritos.

Os métodos, por sua vez, podem ser classificados:

- . Quanto a natureza: Analíticos e Numéricos.
- . Quanto à estratégia: Diretos e Indiretos (empregam derivadas da função).

A apresentação dos métodos de otimização pode seguir qualquer ordem em função dessas classificações. Neste trabalho, seguiu-se Edgar & Himmelblau (1988).

V.4.1 - Busca irrestrita univariável

O estudo dos métodos de busca irrestrita univariável é importante porque:

- . Embora em pequena quantidade, existem problemas univariáveis.
- . Em certos problemas multivariáveis e restritos, as restrições são incorporadas à função objetivo, transformando-os em problemas

univariáveis.

. Muitos métodos de resolução de problemas multivariáveis, restritos e irrestritos, incorporam etapas em que se resolve repetidamente um problema univariável.

V.4.1.1 - Método analítico

Esse método se vale das próprias condições de existência de pontos extremos na função objetivo. As condições necessárias para que x^* seja um ponto extremo de uma função $f(x)$ são: que ela seja duas vezes diferenciável em x^* e que a derivada primeira seja nula nesse ponto, i.e., $f'(x^*)=0$. Daí, basta derivar $f(x)$ em relação a x e resolver a equação $f'(x)=0$ para determinar o ponto ou os pontos extremos de $f(x)$.

Em problemas práticos de engenharia, a própria natureza da função objetivo já indica se tratar de um ponto de máximo ou de mínimo. Em geral, no entanto, a natureza do ponto extremo é determinada pela condição suficiente baseada na derivada segunda.

- . $f''(x^*) < 0$ --> ponto de máximo
- . $f''(x^*) > 0$ --> ponto de mínimo
- . $f''(x^*) = 0$ --> ponto de inflexão

O método analítico fornece a solução "exata", limitada apenas pela precisão do dispositivo de cálculo usado na resolução da equação $f'(x)=0$.

Esse método, no entanto, tem a sua aplicação restrita a problemas relativamente simples, devido às seguintes circunstâncias:

- . Se a função objetivo apresentar um grande número de descontinuidades, o número de pesquisas de extremos é grande.
- . A função objetivo nem sempre é diferenciável.
- . Mesmo quando a derivada é determinada com facilidade, a resolução de $f'(x)=0$ pode não ser direta, exigindo cálculos iterativos.

V.4.1.2 - Métodos numéricos

Esses métodos têm em comum a característica de buscar a solução por tentativas, calculando a função objetivo, e as vezes a sua derivada, para diferentes valores de x , até que a diferença entre os dois últimos valores arbitrados seja menor que uma tolerância estabelecida previamente. Nesse momento, qualquer dos dois últimos valores de x pode ser considerado como solução, x^* desejado. Outra característica comum é a suposição de unimodalidade da função, o que exige um conhecimento prévio da forma da mesma, não havendo tal garantia, os métodos podem convergir para extremos locais.

Os métodos numéricos que visam a busca de um ponto extremo minimizando o número de tentativas (esforço computacional), são chamados de métodos lógicos, que podem ser classificados em:

. Método de busca planejada: em que todas as experiências são planejadas com antecedência e os resultados de cada uma não influencia a posição das demais.

. Métodos de busca sequencial: em que a localização de cada experiência é determinada em função dos resultados das experiências anteriores, procurando explorar intervalos mais promissores.

Ao contrário do método analítico, os métodos numéricos não fornecem a solução exata do problema, mas uma faixa de valores aceitáveis em função da tolerância pré-estabelecida.

Os métodos numéricos existentes diferem quanto a natureza da informação utilizada:

Métodos diretos - utilizam apenas o valor da função objetivo calculado a cada tentativa.

Métodos indiretos - utilizam como informação adicional, o valor da derivada da função objetivo nesses mesmos pontos. Essa derivada tanto pode ser analítica como uma aproximação numérica da mesma por diferenças finitas.

V.4.1.2.1 - Métodos diretos

A - Busca com intervalo fixo

A busca se inicia com um dado intervalo até que:

$$f[X_k^{(1)}] < f[X_{k-1}^{(1)}]$$

A busca é reiniciada a partir de $X_{k-2}^{(2)}$ com um intervalo menor (a metade por exemplo), onde k se refere ao ponto e (1) e (2) se referem aos tamanhos dos intervalos das iterações. O procedimento prossegue até se obter a precisão desejada.

B - Busca com intervalo variável (Aceleração)

O procedimento é semelhante ao anterior, diferindo no fato de que os intervalos são variados (dobrados por exemplo) a cada experiência. Um ponto fraco do método reside no fato de que o teste pode ultrapassar em muito o ponto ótimo.

V.4.1.2.2 - Métodos indiretos

Nesse método, a função $f(x)$ e a sua derivada $f'(x)$ são calculadas na sequência de pontos:

$$X_0; X_1=X_0+s; X_2=X_1+2s; X_3=X_2+2^2s; \dots; X_k=X_{k-1}+2^{k-1}s,$$

onde X_k é o último ponto de busca, sendo o primeiro ponto onde $f'(x)$ muda de sinal ou a função f deixa de crescer. O uso da derivada permite cercar o ponto ótimo com um teste a menos, em comparação com a busca direta, e dentro de um intervalo único, ou seja, $2^{k-1}s$.

V.4.2 - Busca restrita univariável

V.4.2.1 - Método analítico

O procedimento geral é semelhante ao caso da busca irrestrita, diferindo apenas no fato de que a pesquisa é feita apenas na região viável, delimitada pelas restrições do problema.

V.4.2.2 - Métodos numéricos

V.4.2.2.1 - Métodos diretos

A - Métodos de busca com intervalos regulares

A.1 - Busca planejada

A função é calculada em pontos colocados a intervalos regulares que dividem a região de busca em intervalos iguais. Essa busca é ineficiente face a busca sequencial, ficando restrita a situações muito específicas de testes experimentais em que as circunstâncias permitem apenas um determinado número de experimentos simultâneos.

A.2 - Busca sequencial

Inicialmente, a função é calculada em um certo número de pontos colocados a intervalos regulares que dividem a região de busca em intervalos iguais. A partir do valor da função em cada ponto, sendo a função unimodal no intervalo de busca, é possível eliminar parte do mesmo. Novos pontos são colocados de modo que, com os pontos remanescentes, se repita a configuração que permitiu a eliminação do intervalo anterior. O procedimento é repetido até que o intervalo de busca se reduza a uma fração previamente estabelecida.

B - Métodos de busca com intervalos irregulares

B.1 - Busca planejada por dicotomia

Na busca planejada, a localização dos pares de pontos é decidida a priori, normalmente, divide-se o intervalo de busca num determinado número (par ou ímpar) de segmentos. O intervalo de incerteza resultante para um número ímpar de pares de pontos é igual ao do número par imediatamente inferior. Logo, para um mesmo intervalo de incerteza deve-se usar um número par de pares de pontos.

B.2 - Busca sequencial por dicotomia

Os métodos de busca por dicotomia procuram colocar pares de valores de x separados por um pequeno intervalo D que, no entanto, é suficientemente grande para permitir distinguir os resultados dos testes. A busca sequencial, consiste em colocar cada par de pontos no centro do intervalo de busca, permitindo que seja eliminada a sua metade a cada par de teste.

B.3 - Método de Fibonacci

Este método se inicia com dois experimentos, acrescentando mais um a cada ciclo. A localização dos experimentos se baseia nos números da série de Fibonacci, definidos por,

$$F_0 = F_1 = 1 ; F_j = F_{j-1} + F_{j-2} \quad (j = 2, 3, \dots)$$

Ou seja, cada elemento da série corresponde à soma dos dois elementos anteriores.

O termo geral dessa série é dado por:

$$F_j = \frac{1}{\sqrt{5}} \left[\left(\frac{1 + \sqrt{5}}{2} \right)^{j+1} - \left(\frac{1 - \sqrt{5}}{2} \right)^{j+1} \right] \quad (\text{V.1})$$

Os dois primeiros experimentos são colocados à igual distância de cada extremidade do intervalo de busca. Essa distância é função do intervalo final desejado L_n . Com L_n calcula-se o número de Fibonacci, F_n igual ao primeiro termo superior a $1/L_n$ e a distância, $D_1 = F_{n-2}/F_n$, de cada extremidade. Como resultado desses experimentos, sendo a função unimodal, elimina-se um dos intervalos extremos de comprimento D_1 , permanecendo um intervalo $L_2 = L_1 - D_1$. Um novo experimento é colocado a partir da extremidade remanescente a uma distância $D_2 = L_2 - D_1$, podendo-se verificar que o ponto remanescente fica a essa mesma distância da nova extremidade. Repete-se o procedimento até que o intervalo se reduza a L_n . Maiores detalhes podem ser encontrados em Beveridge & Schechter.

Este método é o mais eficiente dentre todos os métodos de busca univariável.

B.4 - Método da seção áurea

O método da Seção Áurea pode ser considerado como uma extensão do método de Fibonacci no sentido de que utiliza dois experimentos iniciais e um novo experimento por iteração, mas com duas diferenças básicas: a colocação dos experimentos independe do intervalo final desejado e a fração do intervalo de busca remanescente é constante em todas as iterações. Essa constante possui um valor único, (ϵ) calculado de forma a satisfazer essa condição. Os dois pontos iniciais devem ser colocados à distância $(D - \epsilon)$ de cada extremidade do intervalo de busca inicial, onde D é o intervalo inicial de busca. Logo, ao ser eliminado qualquer dos dois intervalos extremos, o seu comprimento será $(D - \epsilon)$, permanecendo ϵ . Nesse intervalo pode-se identificar dois sub-intervalos; um de comprimento $D - \epsilon$ entre o ponto e a extremidade remanescente, outro de comprimento $\epsilon - (D - \epsilon) = 2\epsilon - D$.

Este último será um dos intervalos extremos iguais da iteração seguinte; sendo ele eliminado permanece o outro. Logo, para que a fração remanescente seja constante, é preciso que:

$$\frac{\epsilon}{D} = \frac{(D - \epsilon)}{\epsilon} \quad (\text{V.2})$$

$$\text{Ou seja: } \epsilon^2 + D\epsilon - D^2 = 0 \text{ ---> } \epsilon = 0.618D$$

O tamanho do intervalo D na i-ésima iteração é dado por: $D_i = \epsilon^i D$

B.5 - Método de aproximação polinomial

Se a função objetivo for aproximada por uma função polinomial, função quadrática por exemplo:

$f(x) = a + b x + c x^2$; o seu extremo pode ser estimado resolvendo-se a equação $f'(x) = 0$, obtendo-se $x^* = -b/2c$. Conhecendo-se a função em 3 pontos, x_1 , x_2 e x_3 ; por manipulações algébricas, x^* pode ser calculado sem o conhecimento de b e c, i.é.:

$$x^* = \frac{1}{2} \frac{(x_2^2 - x_3^2) f(x_1) + (x_3^2 - x_1^2) f(x_2) + (x_1^2 - x_2^2) f(x_3)}{(x_2 - x_3) f(x_1) + (x_3 - x_1) f(x_2) + (x_1 - x_2) f(x_3)} \quad (\text{V.3})$$

Partindo-se da suposição de unimodalidade da função, pode-se eliminar um dos 4 pontos x_1 , x_2 , x_3 e x^* , aproximar a função objetivo por uma nova polinomial através dos 3 pontos remanescentes, obter uma nova aproximação de x^* do ótimo; repetindo-se o procedimento até que dois valores sucessivos de x^* difiram a menos de uma tolerância pré-estabelecida.

A função objetivo pode ser aproximada por uma função cúbica, contudo o algoritmo se complica um pouco porque envolve cálculos de derivadas e inversão de matrizes.

V.4.2.2.2 - Métodos indiretos

Esses métodos se aplicam quando a equação $f'(x) = 0$ não pode ser resolvida explicitamente para x , que é a meta do método analítico. Por outro lado, ao se buscar as raízes de $f'(x) = 0$ por tentativas, há quem prefira efetuar tentativas diretamente na função objetivo, evitando o trabalho de desenvolver a sua derivada analítica.

O método mais conhecido é o método de Newton que, no caso, determina a posição de cada experimento $k+1$ por:

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f'(x_k)}{f''(x_k)} \quad (\text{V. 4})$$

Há casos em que a função objetivo é muito complexa e a sua derivada não pode ser obtida analiticamente e há casos em que a função objetivo não é uma função explícita de x , como nos casos de processos químicos; nesses casos, pode se utilizar um método do tipo quasi-Newton.

$$x_{k+1} = x_k - \frac{[f(x+h) - f(x-h)]/2h}{[f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)]/h^2} \quad (\text{V. 5})$$

com h selecionado de acordo com a precisão permitida pelo dispositivo computacional disponível.

V.4.3 - Busca irrestrita multivariável

V.4.3.1 - Método analítico

Como no caso da busca univariável, o método analítico decorre naturalmente das condições necessárias e suficientes para um ponto extremo da função objetivo.

As condições necessárias para que \mathbf{x}^* seja um ponto extremo de $f(\mathbf{x})$, são:

- . $f(\mathbf{x})$ ser diferenciável duas vezes em \mathbf{x}^* .
- . $\nabla f(\mathbf{x}^*) = 0$, ou seja, o vetor gradiente das derivadas primeiras de $f(\mathbf{x})$ ser nulo em \mathbf{x}^* .

A condição suficiente para o ponto extremo ser um máximo ou mínimo é que a matriz Hessiana $\mathbf{H}(\mathbf{x}^*)$ das derivadas segundas em \mathbf{x}^* seja negativa definida ou positiva definida, respectivamente. A matriz Hessiana $\mathbf{H}(\mathbf{x})$ é positiva definida quando todos os seus valores característicos (eigenvalues) são positivos, e é negativa definida, quando todos os seus valores característicos são negativos. Essas são também as condições para que a função $f(\mathbf{x})$ seja côncava ou convexa, respectivamente.

V.4.3.2 - Métodos numéricos

Os métodos numéricos devem apresentar duas características indispensáveis ao sucesso na solução de problemas de otimização de função multivariável: eficiência e robustez.

Eficiência significa alcançar o ótimo com o mínimo de esforço computacional.

Robustez significa sucesso na busca do ótimo nas circunstâncias mais desfavoráveis (forma da função objetivo).

Como regra geral, os métodos numéricos partem de um certo ponto inicial e executam uma busca constituída de duas etapas, direção de busca e tamanho do passo para cada iteração, que se repetem iterativamente até que um dado critério de convergência seja satisfeito.

V.4.3.2.1 - Métodos diretos

Nos métodos diretos a direção de busca, direção mais provável do ótimo, é função somente das informações de cada ponto de busca.

A - Métodos de busca aleatória

Trata-se de uma família de métodos em que a direção de busca e o tamanho do incremento são selecionados simultânea e aleatoriamente.

B - Método de busca seccionada

Trata-se de executar uma busca univariável em cada uma das direções, mantendo-se fixas as variáveis correspondentes às demais direções. Esse método exhibe eficiência máxima quando aplicado a uma função quadrática, cujos eixos se encontram alinhados com os eixos principais, caso em que o ótimo é encontrado em n iterações, onde n é igual ao número de variáveis.

C - Método de Hooke & Jeeves

Trata-se de um método conceitualmente simples, eficiente e de fácil implementação.

O procedimento é iterativo e se inicia com a seleção de um ponto base, com o cálculo da função objetivo neste ponto. Seguem-se duas fases que se alternam até o encontro do ponto extremo da função objetivo: a fase de exploração e a fase de progressão.

A fase de exploração consiste em calcular o valor da função objetivo em pontos vizinhos à base, mediante a incrementos d_1 e d_2 previamente selecionados, na direção de cada variável de busca e, em cada direção nos dois sentidos. O resultado da exploração é a direção mais provável do ponto extremo da função objetivo.

A fase de progressão consiste em caminhar na direção prevista na exploração, com os mesmos incrementos, enquanto se conseguir sucessos. Ao primeiro insucesso, inicia-se um novo ciclo com uma exploração em torno da base vigente.

O procedimento se encerra quando, após um insucesso nas duas direções, os incrementos já se encontrarem menores do que uma

tolerância pré-estabelecida. Nesse caso, qualquer ponto da região de busca nessa vizinhança pode ser considerado o ótimo.

D - Método simplex

O método emprega figuras geométricas regulares, chamadas simplex, em cujos vértices são efetuados experimentos. O vértice mais desfavorável é rejeitado e um novo vértice é localizado em posição oposta ao mesmo, na direção do centróide da figura. Dessa forma o simplex percorre a região viável até "montar" sobre o ótimo, quando então o passo é reduzido. O procedimento termina quando o tamanho do simplex se torna inferior a uma tolerância pré-estabelecida.

Spendley, Hext e Himsworth (1962) apresentam uma descrição detalhada do método simplex na sua forma original, e uma variante mais elaborada, proposta por Box (1965), reconhecida como muito eficiente, fácil de ser implementada em computadores e que permite a alteração geométrica do poliedro, foi usada neste trabalho como método de otimização.

O APÊNDICE A, apresenta o método de Box com algoritmo e listagem do programa computacional.

V.4.3.2.2 - Métodos indiretos

A - Método do gradiente ou métodos de primeira ordem

Dos métodos indiretos, esse é o mais intuitivo. Adota-se como direção mais provável do ótimo aquela da maior variação da função objetivo, ou seja, a do seu gradiente. No caso de maximização, a direção é a do próprio gradiente; no caso de minimização, é a do negativo do gradiente. Por esse motivo, esses métodos também são denominados de subida mais íngreme (steepest ascent) ou descida mais íngreme (steepest descent).

No caso da minimização, isso corresponde a:

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + l_k \mathbf{d}_k = \mathbf{x}_k - l_k \nabla f(\mathbf{x}_k) \quad (\text{V.6})$$

Diferentes versões diferem quanto ao comprimento do passo l_k . O ponto ótimo terá sido encontrado, quando a diferença entre \mathbf{x}_{k+1} e \mathbf{x}_k for menor que uma tolerância pré-estabelecida.

Na verdade, o método converge para pontos onde o gradiente é nulo. Assim não havendo um conhecimento prévio da função, há que se testar a matriz Hessiana nesses pontos para verificar a natureza do ponto encontrado.

Os métodos de gradiente tal como descritos, tendem a ser lentos a medida que se aproximam do ótimo, devido a redução cada vez maior do passo de progressão. Modificações introduzidas nesses métodos, conduzem a uma maior eficiência, como as que seguem.

A.1 - Método das direções conjugadas

O objetivo deste método é determinar o valor ótimo do tamanho do passo l_{kot} , na direção do gradiente.

$$l_{\text{kot}} = \frac{\nabla^T f(\mathbf{x}_k) \mathbf{d}_k}{(\mathbf{d}_k)^T H(\mathbf{x}_k) \mathbf{d}_k} \quad (\text{V.7})$$

e a equação para cálculo de \mathbf{x}_{k+1} fica:

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \left(\frac{\nabla^T f(\mathbf{x}_k) \nabla f(\mathbf{x}_k)}{\nabla^T f(\mathbf{x}_k) H(\mathbf{x}_k) \nabla f(\mathbf{x}_k)} \right) \nabla f(\mathbf{x}_k) \quad (\text{V.8})$$

A.2 - Método do gradiente conjugado

Uma modificação importante introduzida por Fletcher e Reeves, sem aumento substancial no esforço computacional, consiste em memorizar a direção de busca usado num passo para utilizá-la como informação adicional no passo seguinte. Assim, a direção de busca no passo $k+1$ é dada por:

$$d_{k+1} = -\nabla f(x_{k+1}) + d_k \frac{\nabla^T f(x_{k+1}) \nabla f(x_{k+1})}{\nabla^T f(x_k) \nabla f(x_k)} \quad (\text{V.9})$$

Para funções quadráticas, as duas direções são conjugadas, daí o nome do método.

B - Método de Newton ou método de segunda ordem

Os métodos de segunda ordem, usam além das derivadas primeiras, a curvatura da função objetivo em cada ponto. Para isso, consideram uma aproximação quadrática da mesma nesses pontos.

$$f(x) \approx f(x_k) + \nabla^T f(x_k) \Delta x_k + (1/2) (\Delta x_k)^T H(x_k) \Delta x_k \quad (\text{V.10})$$

Para uma função quadrática acima, o mínimo pode ser encontrado igualando a zero cada uma das suas derivadas e resolvendo o sistema resultante para $\Delta \mathbf{x}_k = \mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k$, resultando em:

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - [H(x_k)]^{-1} \nabla f(x_k) \quad (\text{V.11})$$

Pode-se demonstrar que para funções quadráticas o valor ótimo é encontrado na primeira tentativa.

Outros métodos dessa categoria podem ser encontrados em Edgar & Himmelblau (1988).

V.4.4 - Busca restrita multivariável - Programação Linear

Os problemas em que tanto a função objetivo quanto as restrições são todas lineares aparecem com bastante frequência em diversos campos de aplicação, e admitem um tipo muito especial de resolução denominada programação linear (PL) e, portanto, são problemas tratados em separado.

O problema de programação linear pode ser apresentado como uma evolução do problema de resolução de sistemas de equações lineares em direção à resolução de sistemas de inequações lineares

O problema pode ser resolvido graficamente, e pode-se demonstrar matematicamente que, num problema de programação linear, a solução ótima se localiza num dos vértices da região viável.

Do ponto de vista numérico, o problema pode ser resolvido aplicando-se o método de Gauss-Jordan à matriz aumentada do sistema de equações lineares, caso as restrições sejam de igualdade.

No caso de restrições de desigualdade, define-se folgas F_i relativas às restrições, dadas pela diferença entre os lados direito e esquerdo das respectivas inequações, por exemplo:

$$2x_1 + x_2 \leq 8 \quad \text{--->} \quad F_1 = 8 - 2x_1 - x_2$$

$$4x_1 + x_2 \leq 10 \quad \text{--->} \quad F_2 = 10 - 4x_1 - x_2$$

Uma folga negativa significa que o ponto em questão se encontra violando a restrição relativa a essa folga. Quando as folgas são todas positivas ou nulas, o ponto respeita todas as restrições, sendo portanto solução viável do problema.

V.4.5 - Busca restrita multivariável - programação não-linear

V.4.5.1 - Restrições de igualdade

V.4.5.1.1 - Método analítico

Sendo a função $f=f(\mathbf{x},\mathbf{y})$, com as variáveis \mathbf{x} independentes e \mathbf{y} dependentes, $\mathbf{y}=\mathbf{y}(\mathbf{x})$, O número de variáveis independentes é igual ao número de variáveis totais menos o número de restrições:

$$NVI = NVT - NR$$

e o problema se resume em determinar o extremo da função $F=F(\mathbf{x})$, pelos métodos já vistos.

Ex.: seja:

$$f(\mathbf{x},\mathbf{y})=x_1^2+y_1^2-(x_2+y_2); \quad \text{com: } y_1=x_1x_2 \text{ e } y_2=x_1+x_2;$$

então:

$$F(\mathbf{x})=x_1^2+(x_1x_2)^2-(x_1+2x_2);$$

e o ponto extremo é determinado encontrando \mathbf{x} para que $\nabla F(\mathbf{x})=0$.

V.4.5.1.2 - Métodos numéricos

Nos casos em que as variáveis dependentes \mathbf{y} não podem ser explicitadas, o problema deve ser resolvido numericamente.

A - Método do gradiente

Para a função $f=f(\mathbf{x},\mathbf{y})=f(\mathbf{x},\mathbf{y}(\mathbf{x}))$, tem-se que:

$$\nabla f = \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{y}} \frac{\partial \mathbf{y}}{\partial \mathbf{x}} \quad (\text{V.12})$$

com as restrições de igualdade $\mathbf{g}(\mathbf{x},\mathbf{y})=0 \rightarrow d\mathbf{g} = 0$ ou:

$$\frac{\partial g}{\partial x} + \frac{\partial g}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial x} = 0 \rightarrow \frac{\partial y}{\partial x} = -\left(\frac{\partial g}{\partial y}\right)^{-1} \frac{\partial g}{\partial x} \quad (\text{V.13})$$

Logo:

$$\nabla f = \frac{\partial f}{\partial x} - \frac{\partial f}{\partial y} \left(\frac{\partial g}{\partial y}\right)^{-1} \frac{\partial g}{\partial x} \quad (\text{V.14})$$

O problema pode então ser resolvido pelos métodos já vistos, usando o gradiente modificado pela consideração das equações de restrições.

A grande desvantagem do método, além de envolver inversões de matrizes, é que em cada passo da iteração, passa pelo problema de determinar valores de \mathbf{y} para os valores de \mathbf{x} , ou seja, tem-se que resolver o sistema de equações não-linear $\mathbf{g}(\mathbf{x}, \mathbf{y})=0$ das restrições, usando o método de Newton-Raphson por exemplo.

Para fugir deste tipo de problemas usa-se métodos alternativos, como mostrado a seguir.

B - Método da penalidade

Com a função objetivo, $f=f(\mathbf{x}, \mathbf{y})$, e as restrições $\mathbf{g}(\mathbf{x}, \mathbf{y})=0$ define-se a função:

$$f1(x, y) = f(x, y) + \sum_{i=1}^{nr} \sigma_i g_i^2(x, y) \quad (\text{V.15})$$

onde σ_i é o parâmetro que quantifica o efeito das restrições (penalidade), quanto maior σ_i , maior o efeito das restrições contudo as equações se tornam mal conformadas para valores crescentes de σ_i .

O problema então se resume em minimizar a função $f1(\mathbf{x}, \mathbf{y})$,

resolvendo-se para valores crescentes de σ_i até que seja satisfeito algum critério de convergência, por exemplo: $\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_{k-1} < \text{tolerância}$.

C - Método dos multiplicadores de Lagrange

Analogamente ao método da penalidade, define-se uma função:

$$f1(x, y, \lambda) = f(x, y) + \sum_{i=1}^{nr} \lambda_i g_i(x, y) \quad (\text{V.16})$$

aumentando o número de variáveis do problema pela inclusão dos multiplicadores de Lagrange (λ_i).

$$\text{NVI} = \text{NVT} + \text{NR}$$

$$\text{Então: } \nabla f1 = \mathbf{0}$$

$$\frac{\partial f1}{\partial x} = \frac{\partial f}{\partial x} + \sum_{i=1}^{nr} \lambda_i \frac{\partial g_i}{\partial x} = 0 \quad (\text{V.17})$$

$$\frac{\partial f1}{\partial y} = \frac{\partial f}{\partial y} + \sum_{i=1}^{nr} \lambda_i \frac{\partial g_i}{\partial y} = 0 \quad (\text{V.18})$$

$$\frac{\partial f1}{\partial \lambda_i} = g_i(x, y) = 0 \quad (\text{V.19})$$

Na função $f1$, \mathbf{x} e \mathbf{y} não é ponto de mínimo e sim ponto de sela, ou seja, a função não apresenta ponto de mínimo, mas tem pontos onde as derivadas são nulas, por isto o problema a ser resolvido é: $\nabla f1 = \mathbf{0}$, usando por exemplo Newton-Raphson.

V.4.5.2 - Restrições de desigualdade

Dada a função $f=f(\mathbf{x},\mathbf{y})$ com:

$\mathbf{g}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = 0$ --> equações de igualdade e

$\mathbf{h}(\mathbf{x},\mathbf{y}) \leq 0$ --> equações de desigualdade,

O problema pode ser resolvido por duas técnicas distintas:

A - Técnica 1

1. Resolver o problema como se não houvesse as restrições de desigualdade, pelos métodos já vistos para resolução de problemas com restrições de igualdade.

2. Verificar se alguma das restrições de desigualdade foi violada.

2.1 Caso nenhuma das restrições tenha sido violada, o problema está resolvido.

2.2 Caso alguma das restrições tenham sido violada, inclua estas como restrições de igualdade e retorne a 1, repita o procedimento até que todas as restrições tenham sido satisfeitas.

O grande inconveniente do método é que a inclusão de restrições de desigualdade como igualdades na função objetivo, resulta num problema de análise combinatorial, tendo que se incluir as equações das restrições de desigualdade uma a uma, combinadas aos pares, combinadas três a três e assim por diante, a cada vez que pelo menos uma delas seja violada. Na prática, portanto, essa técnica é aplicada apenas quando o número de equações de restrições de desigualdade é pequeno.

B - Técnica 2 - Método das folgas

Seja $f=f(\mathbf{x},\mathbf{y})$ com:

$\mathbf{g}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \mathbf{0}$ --> equações de igualdade e

$\mathbf{h}(\mathbf{x},\mathbf{y}) \leq \mathbf{0}$ --> equações de desigualdade,

As funções $\mathbf{h}(\mathbf{x},\mathbf{y}) \leq \mathbf{0}$, podem ser reescritas como: $h_i(\mathbf{x},\mathbf{y}) = -\tau_i^2$.
ou $\mathbf{h}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = h_i(\mathbf{x},\mathbf{y}) + \tau_i^2 = 0$.

Portanto as restrições de desigualdade se transformaram em restrições de igualdade e o problema pode ser resolvido pelos métodos já vistos, por exemplo aplicando multiplicadores de Lagrange.

Observa-se que a transformação das restrições de desigualdade em restrições de igualdade aumenta o número de variáveis do problema (parâmetros τ_i), sendo i o número de equações de restrições de desigualdade; além dos λ_j (multiplicadores de Lagrange) onde j é o número total de equações de restrições (igualdade mais desigualdade).

V.5 - Análise de sensibilidade

A solução de qualquer problema de otimização é função dos valores dos parâmetros que figuram na função objetivo e nas restrições. Geralmente esses valores são incertos: ou são estimados ou variam com o tempo. Por esse motivo, após a resolução de um problema de otimização, torna-se imperativa a avaliação do efeito dessas incertezas sobre o resultado final.

Essa avaliação recebe o nome de análise de sensibilidade ou análise pós-otimização.

CAPITULO VI - OTIMIZAÇÃO DA PLANTA INDUSTRIAL

Concluídas as fases de ajustes da simulação e avaliação de desempenho da unidade perante diferentes condições operacionais, iniciou-se a fase de otimização da unidade de fracionamento e recuperação dos produtos e completou-se o estudo com a análise de sensibilidade da função objetivo mediante variações nos preços dos derivados de petróleo.

VI.1 - Função Objetivo

A função objetivo a ser otimizada é a rentabilidade diária da unidade, definida como:

$$FO = \text{Receitas} - \text{Despesas} \quad (\text{US\$/d}) \quad (\text{VI.1})$$

onde: Receitas = (Preço de venda dos produtos). (Produção)
Despesas = (Preço da matéria-prima). (Consumo) +
+ (Custos com Energia e Utilidades)

A metodologia de cálculo do custo da matéria-prima, valorização dos produtos e custos de energia e utilidades está descrita no apêndice C.

VI.2 - Variáveis de decisão

A escolha das variáveis de decisão (denominadas variáveis de otimização) deve se basear em suas relevâncias frente à função objetivo (maior efeito no cálculo desta função) e em suas implicações no grau de liberdade operacional. Portanto, trata-se de uma escolha que depende fortemente da função que se deseja otimizar e das restrições intrínsecas da unidade, fatores que muitas vezes

são variáveis com o tempo e as circunstâncias de operação.

As quatro variáveis selecionadas foram:

- . Temperatura de fundo da fracionadora principal - Tffp
- . Pressão de descarga do segundo estágio do compressor - Pdse
- . Reciclo de nafta estabilizada de absorção primária - Rneap
- . Reciclo de óleo leve para absorvedora secundária - Rolas

VI.3 - Restrições nas variáveis de otimização

Foram estabelecidos limites inferiores e superiores para cada variável em função das restrições do processo, limitações de equipamentos e limites de especificações de produtos.

As faixas aceitáveis para as variáveis de otimização são apresentadas na tabela VI.1.

Tab. VI.1 - Faixas aceitáveis das variáveis de otimização

	Limite inferior	Limite superior
Tffp (°C)	310	370
Pdse (Kgf/cm ²)	15	20
Rneap (m ³ /d)	0	1000
Rolas (m ³ /d)	600	1200

Os critérios de escolha das variáveis de otimização e definição dessas faixas são discutidas no apêndice C.

VI.4 - Mudança de escala das variáveis de otimização

O simulador e o otimizador trabalham com as mesmas variáveis, contudo em escalas diferentes. Enquanto o simulador opera com as variáveis nos seus valores reais de grandeza, o otimizador opera com variáveis normalizadas, com o objetivo de manter a regularidade das figuras geométricas do simplex.

A mudança de coordenadas foi feita de forma que as variáveis normalizadas variássem entre ZERO e UM, correspondentes aos valores MÍNIMO e MÁXIMO das variáveis nas suas grandezas reais.

A transformação da variável na sua grandeza real (X_r), na variável normalizada entre zero e um (X_n), e a transformação inversa são obtidas pelas equações abaixo:

$$X_n = \frac{X_r - X_{\min}}{X_{\max} - X_{\min}}, \quad X_r = X_{\min} + X_n (X_{\max} - X_{\min}) \quad (\text{VI.2})$$

VI.5 - Interface simulador-otimizador

O otimizador Simplex foi adaptado para fazer interface com o simulador de processos Hysim. Os dois módulos são gerenciados por um programa que permite o trabalho integrado Simulador-Otimizador até a convergência final, isto é, a determinação do ponto ótimo.

A figura VI.1 mostra o esquema de interface entre o simulador de processos Hysim e o otimizador Simplex.

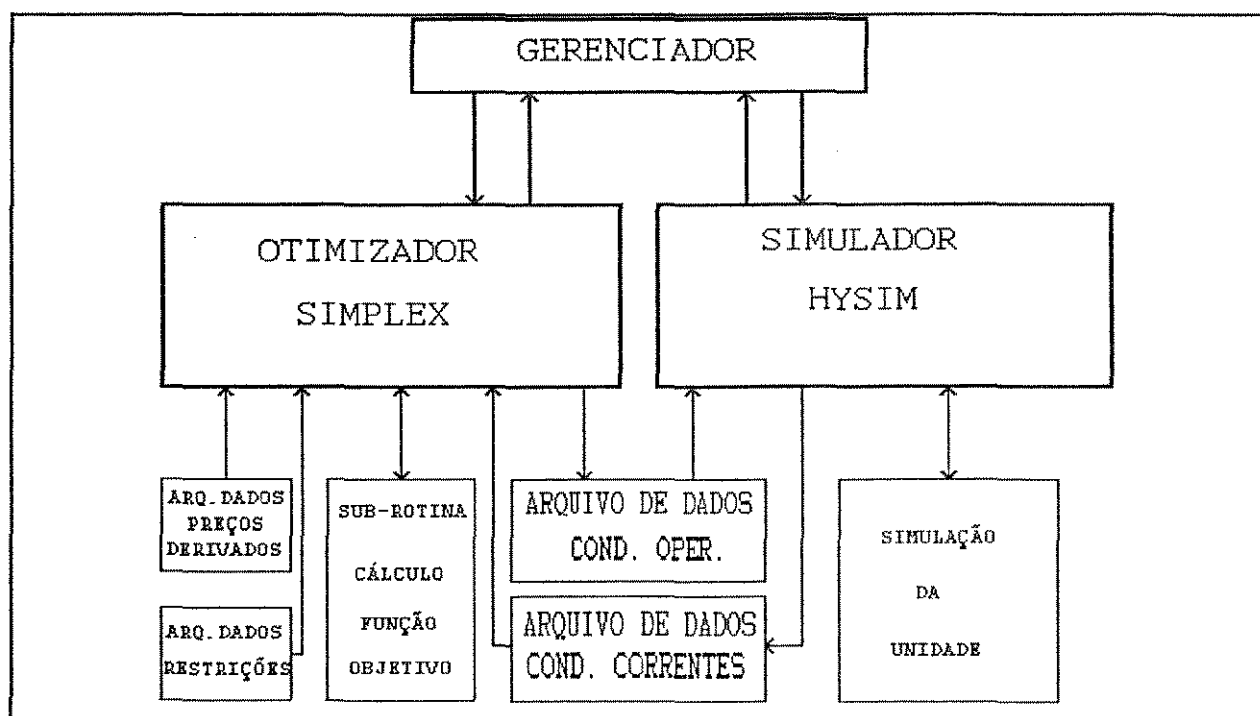


Fig. VI.1 - Esquema de interface Simulador-Otimizador

CAPÍTULO VII - APRESENTAÇÃO E DISCUSSÃO DOS RESULTADOS

Os resultados mais importantes da simulação, previsão de desempenho e otimização da seção de fracionamento e recuperação dos produtos da unidade de craqueamento catalítico, são apresentados e discutidos a seguir.

VII.I - Eficiências de pratos

As eficiências de pratos das torres e/ou regiões de fracionamento que melhor reproduziram os perfis de temperaturas e qualidade dos produtos obtidos dessas torres, são apresentadas nas tabelas a seguir.

1 - Fracionadora principal - (T-2201)

Tab. VII.1 - Eficiências de pratos da fracionadora principal

Região de Fracionamento	Nº de Pratos Reais	Nº de Estágios no Simulador	Eficiência no Simulador (%) ¹	Eficiência Real (%) ²
Condensadores	---	1	100	---
Ref.Circ.Topo	4	4	75	75
Frac. RCT/LCO	8	8	80	80
Fra. LCO/RHCO	4	4	75	75
Fra. RHCO/HCO	2	2	70	70
Reg. Lavagem	2	2	70	70
Chicanas	5	2	75	30
Striper LCO	4	2	80	40
Total	20 Pratos 5 Chicanas 4 Pr. Striper	25 Estágios	---	---

1 - Eficiências de estágios consideradas no simulador

2 - Eficiência real = (número estágios do simulador * eficiência)/(pratos reais)

2 - Absorvedora primária - (T-2203)

Tab. VII.2 - Eficiências de pratos da absorvedora primária

Região de Fracionamento	Nº de Pratos Reais	Nº de Estágios no simulador	Eficiência no simulador(%)	Eficiência Real (%)
Frac. Sup.	8	3	100	37.5
Frac. Inf.	22	7	100	31.8
Total	30	10	---	---

3 - Retificadora - (T-2204)

Tab. VII.3 - Eficiências de pratos da retificadora

Região de Fracionamento	Nº de Pratos Reais	Nº de Estágios no Simulador	Eficiência no Simulador(%)	Eficiência Real (%)
Fracionamento	20	8	100	40
Reboiler	---	1	100	---
Total	20	9	---	---

4 - Absorvedora secundária - (T-2205)

Tab. VII.4 - Eficiências de pratos da absorvedora secundária

Região de Fracionamento	Nº de Pratos Reais	Nº de Estágios no Simulador	Eficiência no Simulador(%)	Eficiência Real (%)
Fracionamneto	24	8	100	33.3
Total	24	8	---	---

5 - Debutanizadora - (T-2206)

Tab. VII.5 - Eficiências de pratos da debutanizadora

Região de Fracionamento	Nº de pratos Reais	Nº de Estágios no Simulador	Eficiência no Simulador(%)	Eficiência Real (%)
Condensadores	---	1	100	---
Reg. Absorção	17	11	100	64.7
Reg. Retif.	14	9	100	64.3
Reboiler	---	1	100	---
Total	31	22	---	---

VII.2 - Previsão de desempenho da unidade

Os resultados da previsão de desempenho da unidade para diferentes condições operacionais são resumidos a seguir.

VII.2.1 - Fracionadora principal - (T-2201)

A qualidade do fracionamento entre a GLN e o LCO e a recuperação do produto de topo da fracionadora, mantendo o ponto final de ebulição da gasolina, foram avaliadas para diferentes valores de razão de refluxo e temperatura de fundo da fracionadora principal.

1 - Razão de refluxo da fracionadora principal

A figura VII.1 mostra o efeito da razão de refluxo da fracionadora, no GAP entre a gasolina e o óleo leve, e o delta de recuperação de gasolina (produto de topo da fracionadora) em relação ao caso base (razão de refluxo igual a zero).

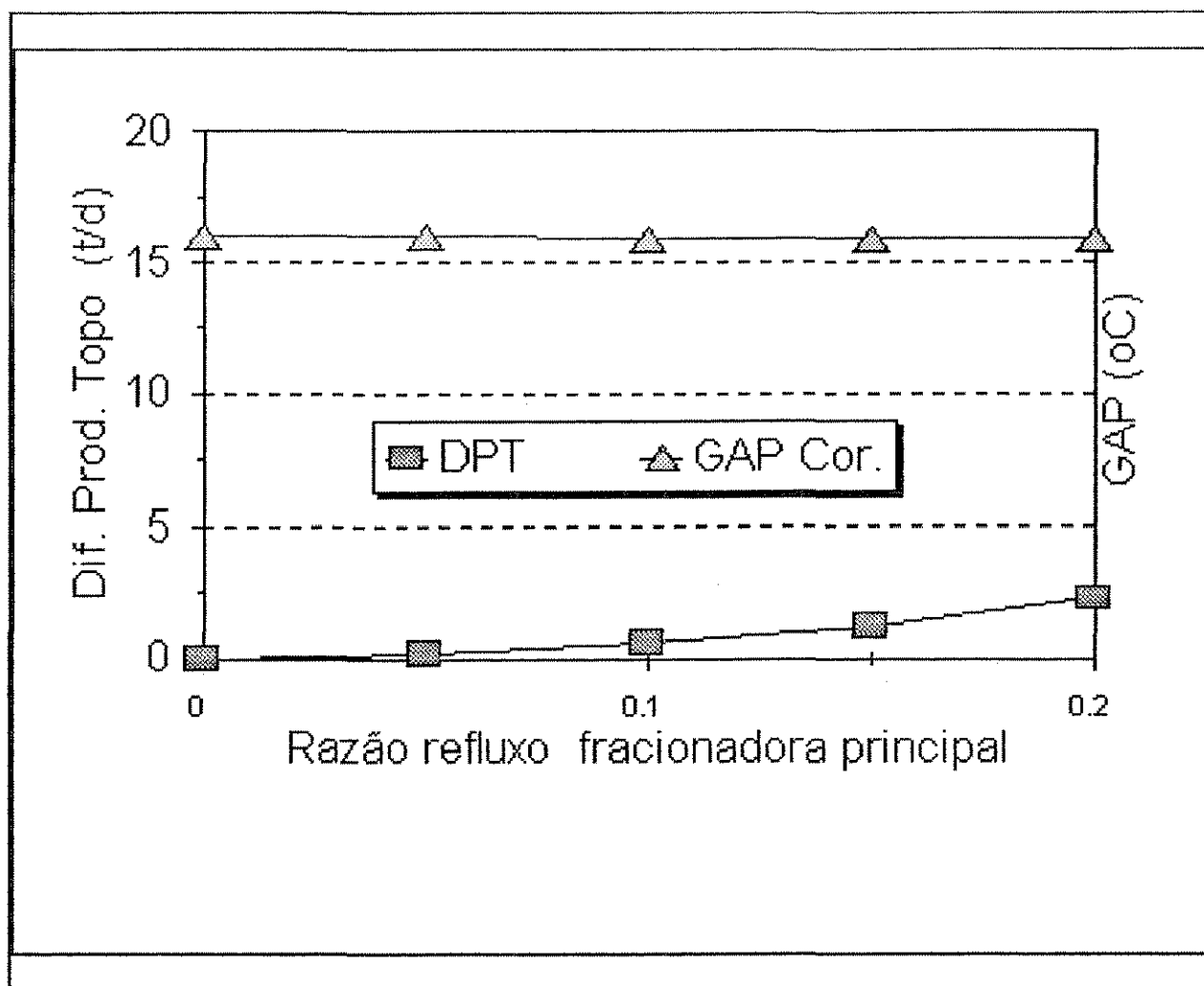


Fig. VII.1 - Efeito razão refluxo da fracionadora principal

Pode-se observar que esta variável (razão de refluxo) não tem praticamente nenhum efeito, tanto na qualidade do fracionamento (GAP) quanto na recuperação da gasolina (DPT), isto é, o GAP se manteve constante para variações da razão de refluxo de 0 a 0,2 e o ganho de gasolina foi de apenas 2 a 3 t, para a mesma variação na razão de refluxo da fracionadora principal. Vale ressaltar que o refluxo interno na região de topo da torre é garantido pelo refluxo circulante de topo, que sai do prato 5 e retorna no primeiro prato.

2 - Temperatura de fundo da fracionadora principal

A temperatura de fundo da fracionadora principal tem grande influência no ponto final de ebulição do LCO, e também no ponto inicial que se relaciona ao GAP GLN/LCO, por isto, a análise da qualidade do fracionamento GLN/LCO foi feita com base na curva real de destilação e na curva de destilação corrigida (correção feita conforme procedimento descrito no capítulo IV).

A figura VII.2 mostra o efeito da temperatura de fundo da fracionadora, nos GAP's (corrigidos e não corrigidos) entre a gasolina e o óleo leve, e o delta de recuperação de gasolina (produto de topo da fracionadora) em relação ao caso base (temperatura de fundo igual a 330 °C).

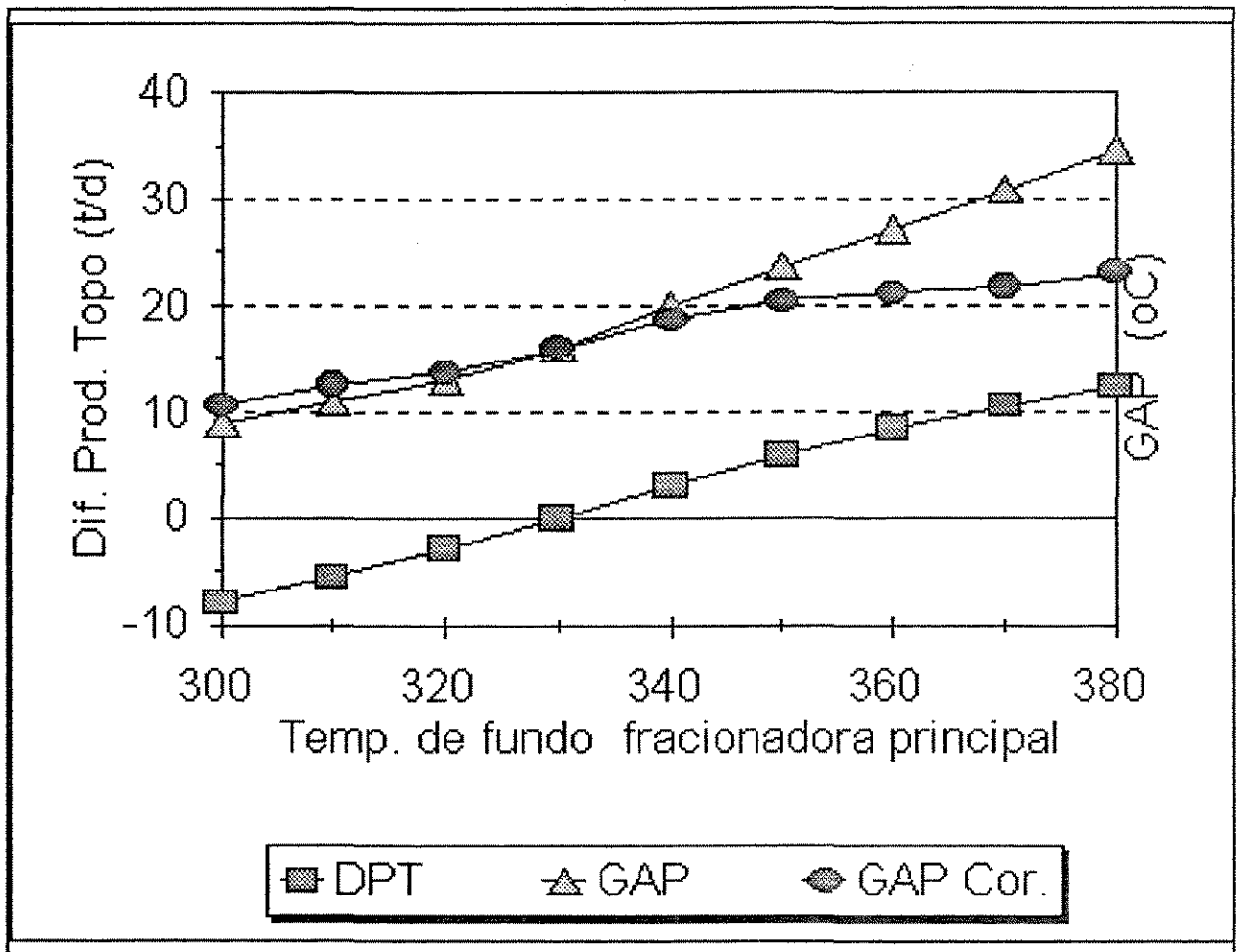


Fig. VII.2 - Efeito temp. fundo da fracionadora principal

Observa-se que esta variável (temperatura de fundo) tem efeito considerável, tanto na qualidade do fracionamento (GAP) quanto na recuperação da gasolina (DPT). Aumentando-se a temperatura de fundo de 300 para 380 °C, o GAP e o GAP corrigido aumentam em 25 e 13 °C, respectivamente, e a recuperação de gasolina aumenta de cerca 20 t/d, considerando a carga da unidade de 8000 m³/d.

O comportamento do GAP LCO/GLN aqui apresentado, resultado de simulações, foi comprovado através de análises de laboratório, comparando resultados das destilações desses produtos para diferentes valores de temperaturas de fundo da fracionadora principal, (Pedrosa Neto, 1991).

Não foi analisado o efeito da temperatura de fundo da fracionadora principal na qualidade do fracionamento LCO / OCL, porque esses produtos são misturados no limite de bateria da unidade e usados como diluentes de óleo combustível, nesse caso a qualidade do fracionamento não tem relevância, ou porque o OCL está sendo usado como Resíduo Aromático (RARO, matéria-prima para a produção de borracha) e nesta situação existe a necessidade de se operar com a temperatura de fundo da fracionadora mais baixa para atender as especificações do RARO, prejudicando a recuperação de nafta e a qualidade do fracionamento GLN/LCO.

VII.2.2 - Recuperação de gases - Área Fria

A qualidade do fracionamento C₂⁻/C₃⁺, a recuperação do C₂⁻ e C₃⁺ bem como recuperação e perda de H₂S, foram medidas para diferentes condições de operação da área fria, variando individualmente; a pressão de descarga do compressor, temperatura de fundo da retificadora, reciclo de nafta estabilizada para a absorvedora primária e reciclo de óleo leve para a absorvedora secundária, sendo a condição de referência:

- . Pressão descarga do compressor = 19.0 Kgf/cm² man.;
- . Temperatura de fundo da retificadora = 112 °C;
- . Reciclo de nafta estabilizada = 400 m³/d e
- . Reciclo de óleo leve de abs. secundária = 800 m³/d.

1 - Pressão de descarga do compressor

O compressor comprime os gases do vaso de topo da fracionadora principal, controlando a pressão neste vaso, até a pressão de operação da área fria, controlada no final da unidade (topo da absorvedora secundária).

A figura VII.3a mostra o efeito da pressão de descarga do compressor na qualidade da separação C_2^-/C_3^+ , recuperação de C_2^- e recuperação de C_3^+ ; e a figura VII.3b mostra o efeito desta mesma variável na recuperação e perda de H_2S .

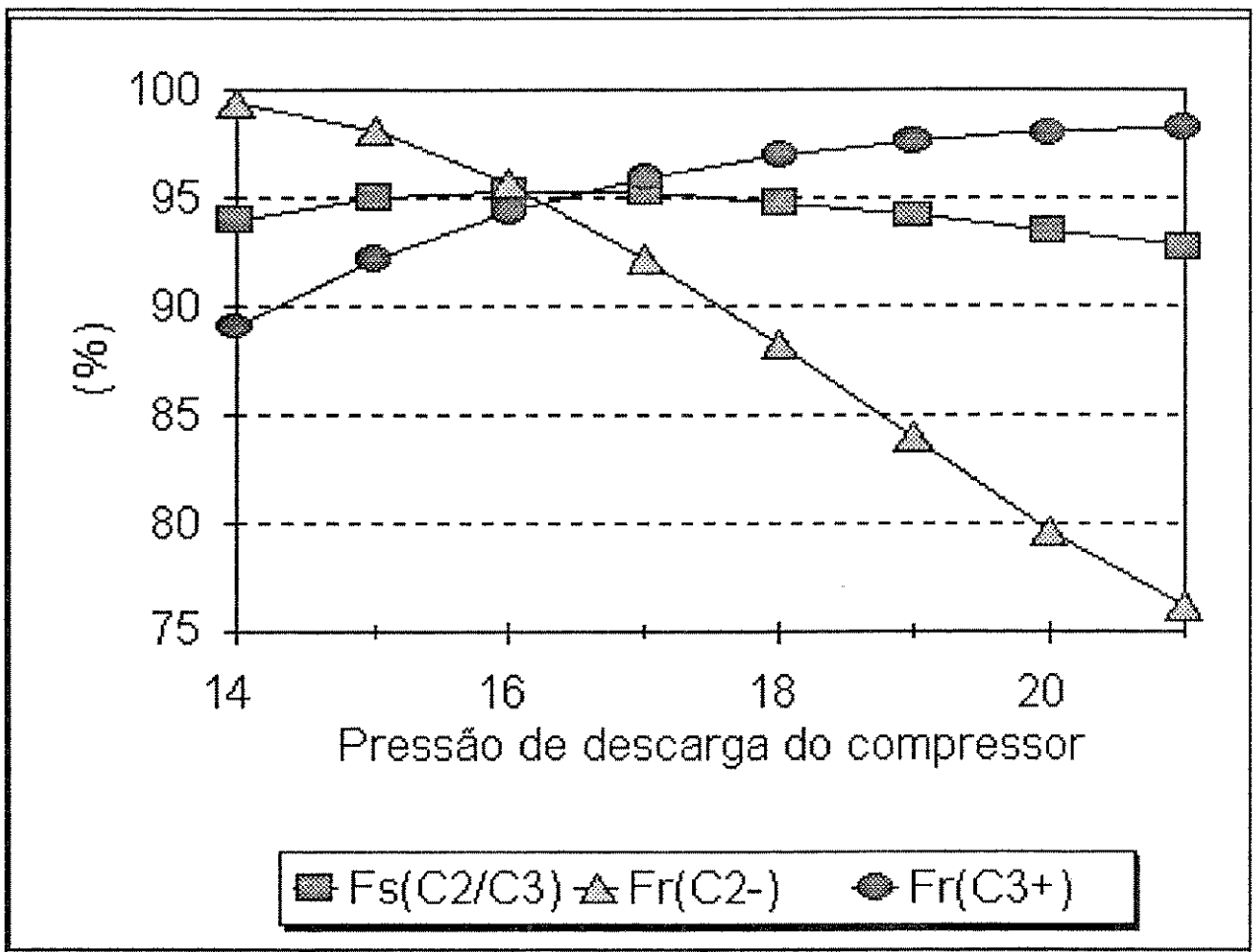


Fig. VII.3a - Efeito da pressão de descarga do compressor na separação C_2^-/C_3^+ e recuperação de C_2^- e C_3^+

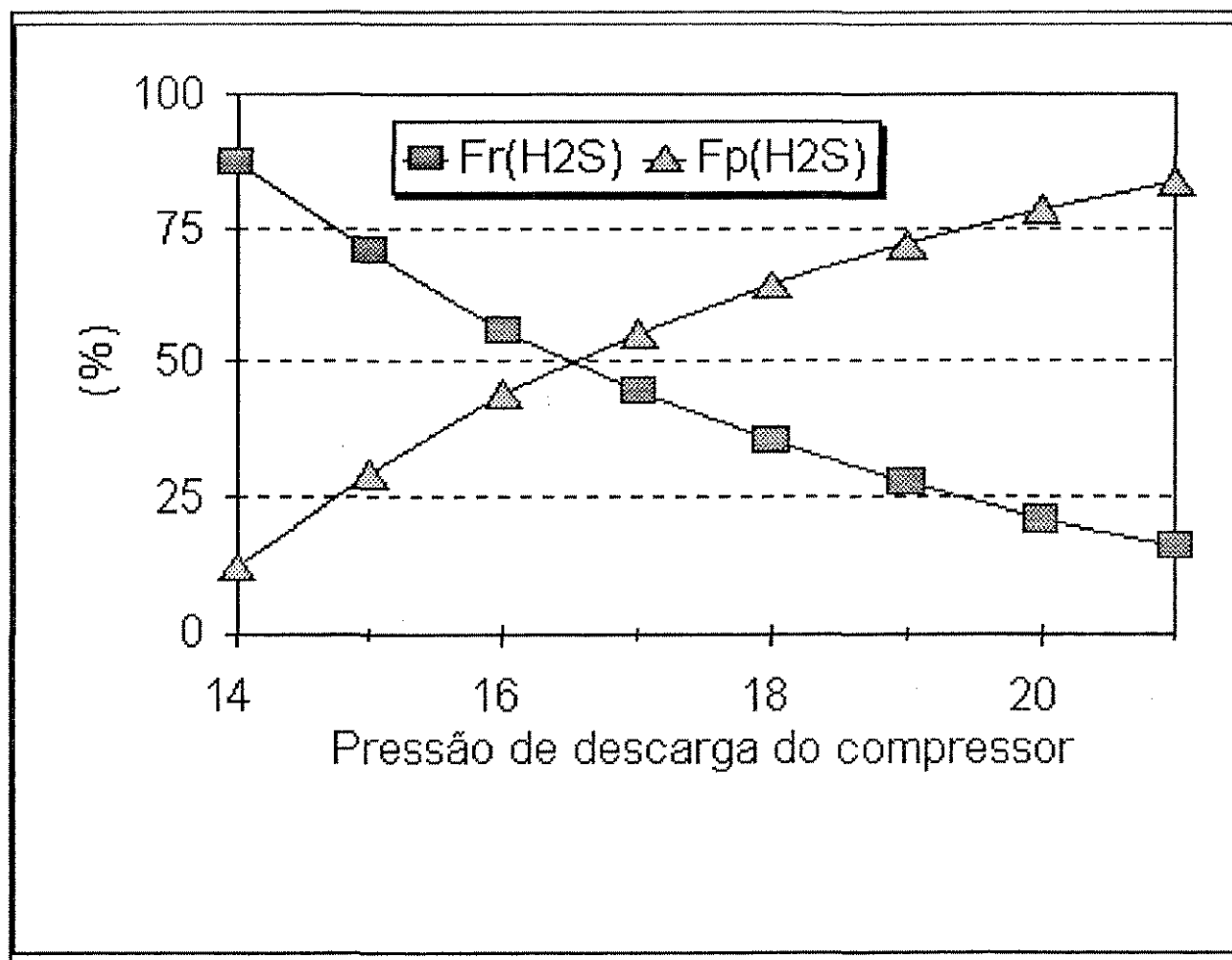


Fig. VII.3b - Efeito da pressão de descarga do compressor na recuperação e perda de H₂S

A pressão de operação da área fria é sem dúvida a variável operacional de maior efeito na recuperação de GLP (recuperação de C₃⁺), reduzindo as perdas de C₃⁺ em 10% em peso, correspondente a 110 t/d, quando se passa da pressão de 14 para 21 Kgf/cm² man.

A qualidade do fracionamento C₂⁻/C₃⁺ passa por um máximo na pressão de 16 a 17 Kgf/cm² man.

A pressão tem grande efeito na distribuição do H₂S entre as correntes GC e GLP, reduzindo as perdas de H₂S de 88 para 16 % em peso, quando a pressão passa de 14 para 21 Kgf/cm² man.

2 - Temperatura de fundo da retificadora

A figura VII.4a mostra o efeito da temperatura de fundo da retificadora na qualidade da separação C_2^-/C_3^+ , recuperação de C_2^- e recuperação de C_3^+ ; e a figura VII.4b mostra o efeito desta mesma variável na recuperação e perda de H_2S .

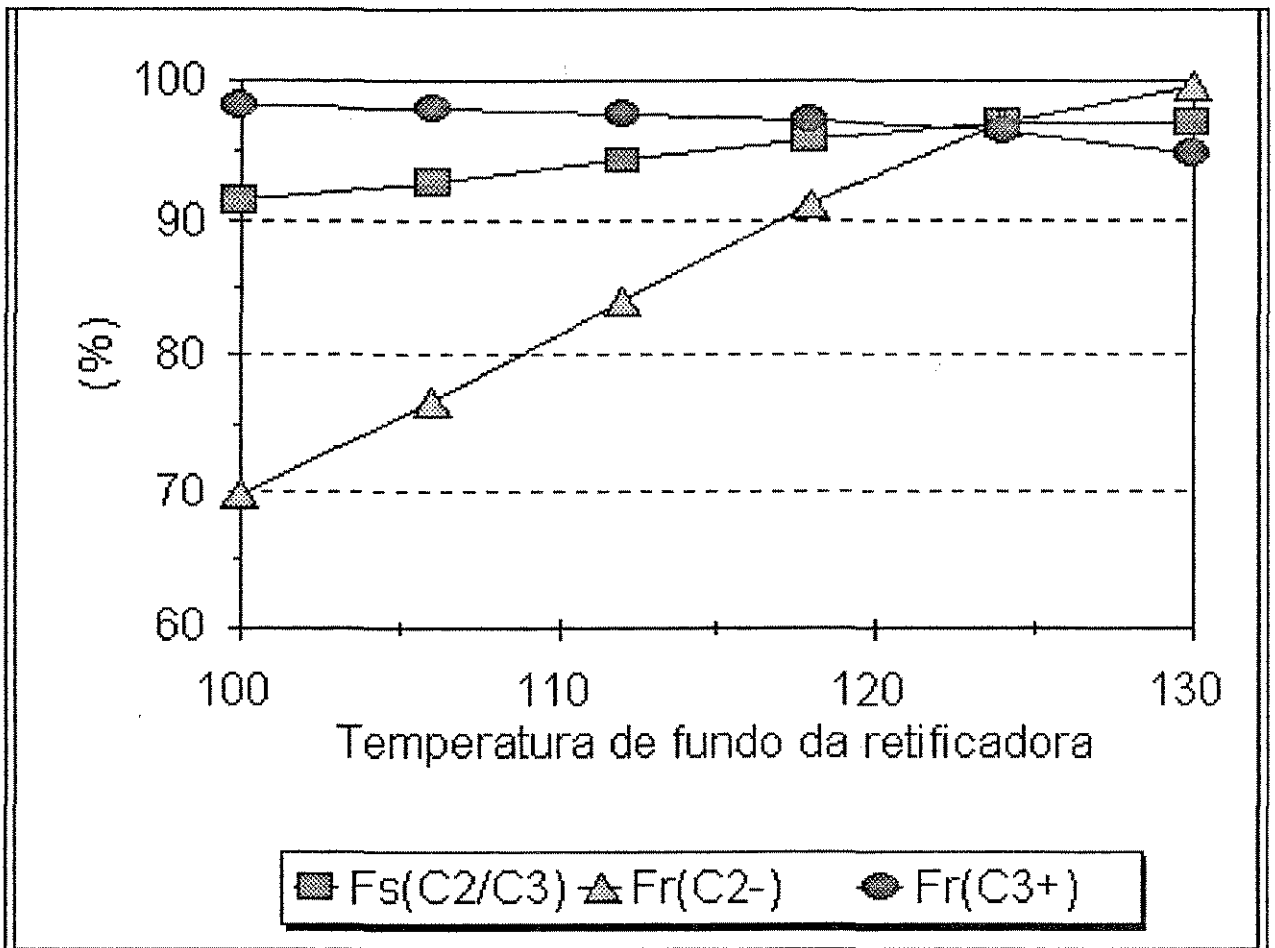


Fig. VII.4a - Efeito da temperatura de fundo da retificadora na separação C_2^-/C_3^+ e recuperação de C_2^- e C_3^+

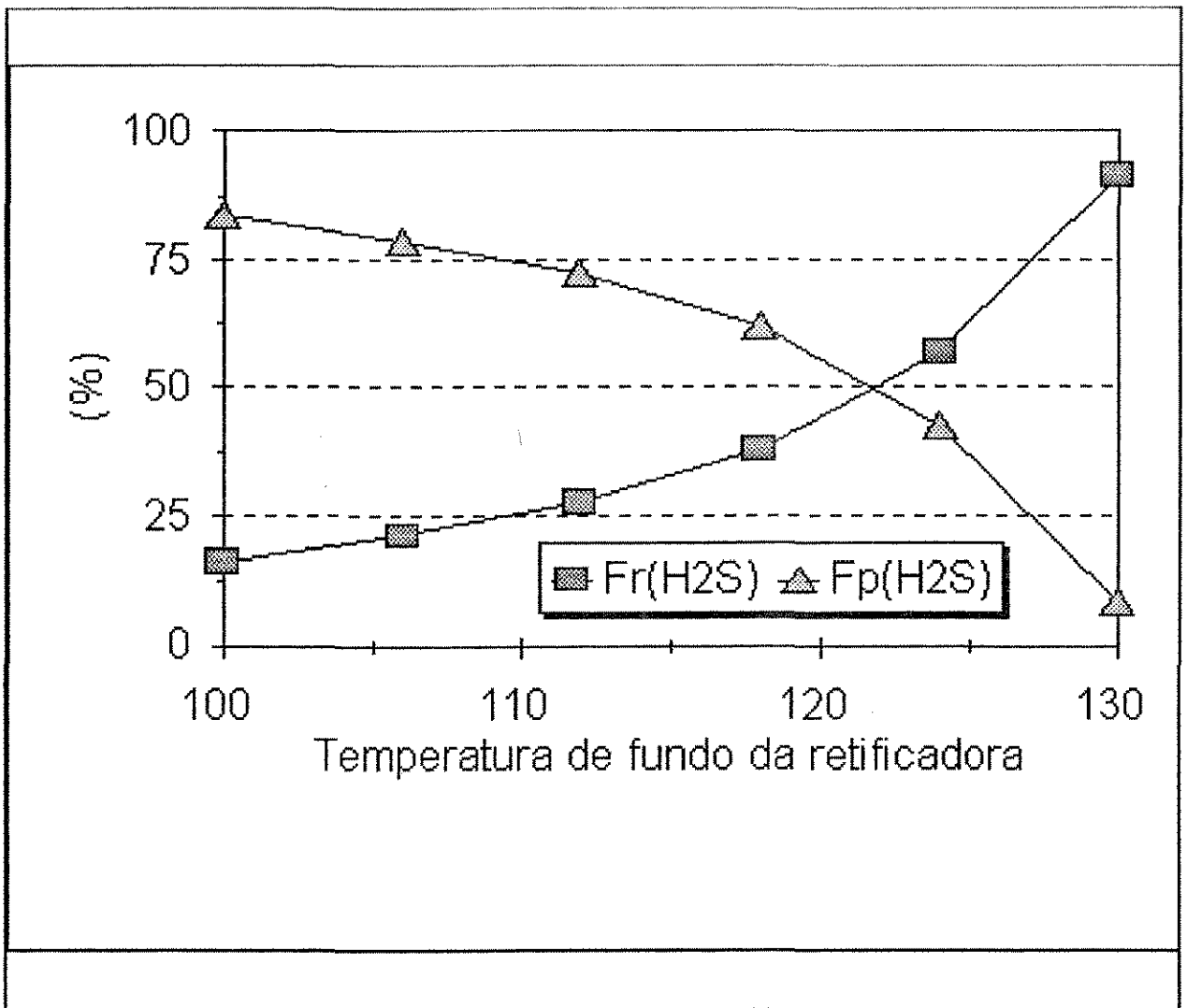


Fig. VII.4b - Efeito da temperatura de fundo da retificadora na recuperação e perda de H₂S.

A temperatura de fundo da retificadora tem efeito inverso ao da pressão de descarga do compressor, contudo menos acentuado, com queda de apenas 3% em peso da recuperação do C₃⁺, quando a temperatura da retificadora é aumentada de 100 para 130 °C.

Esta é a principal variável de controle do teor de C₂⁻ no GLP, aumentando a recuperação de C₂⁻ em 30% em peso, quando a temperatura de fundo da retificadora é aumentada de 100 para 130 °C.

O efeito da temperatura de fundo da retificadora sobre a distribuição do H₂S é semelhante e inverso ao efeito da pressão.

3 - Reciclo de nafta estabilizada para a absorvedora primária

O topo da absorvedora primária recebe uma mistura de nafta do vaso de topo da fracionadora principal (corrente principal) com nafta estabilizada (corrente de reciclo). Essa mistura é o líquido de absorção cujo objetivo é o de reduzir perdas de GLP para GC.

Dado seu melhor poder de absorção, normalmente se procura maximizar a participação do reciclo na mistura, obedecendo as restrições operacionais.

A figura VII.5a mostra o efeito do reciclo de nafta estabilizada para a absorvedora primária na qualidade da separação C_2^-/C_3^+ , recuperação de C_2^- e recuperação de C_3^+ ; e a figura VII.5b mostra o efeito desta mesma variável na recuperação e perda de H_2S .

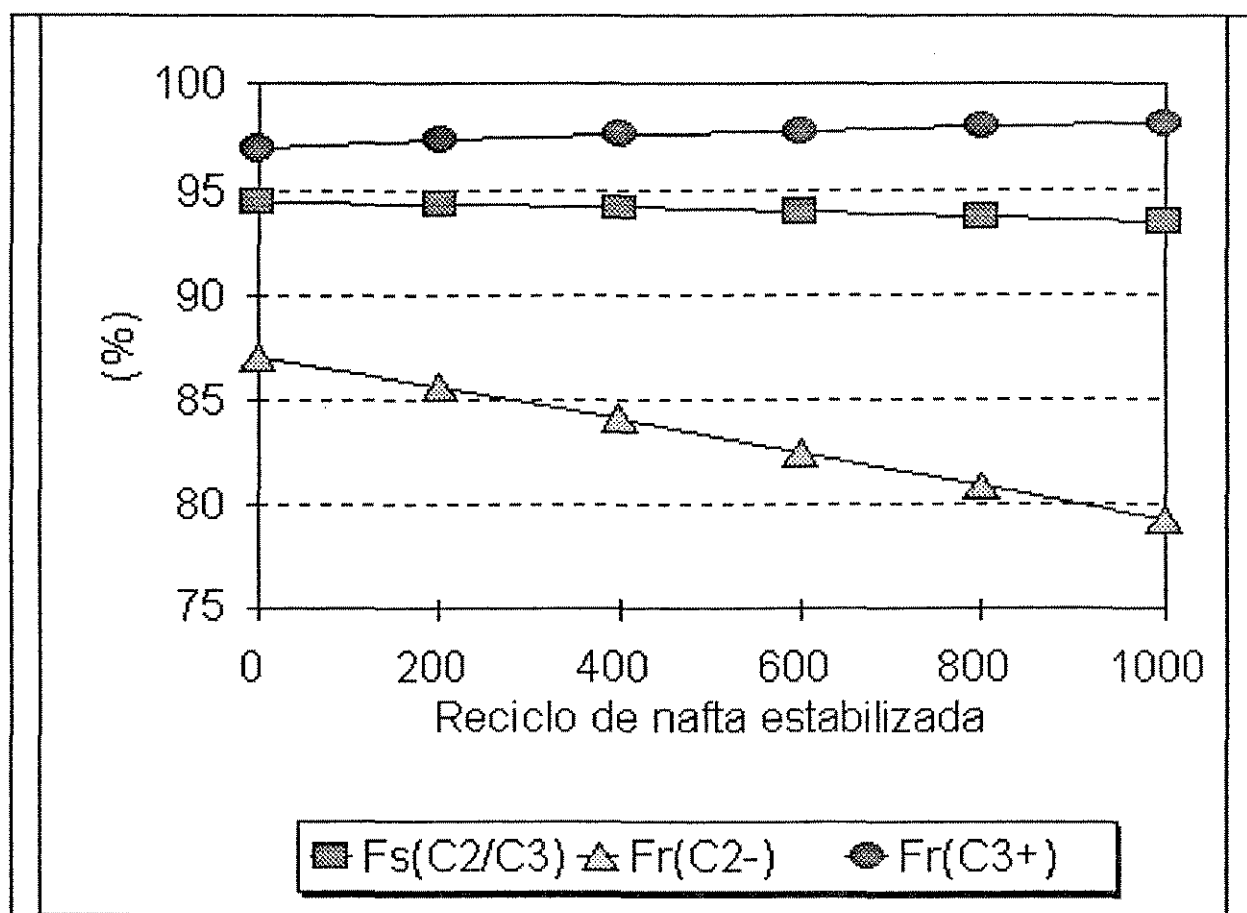


Fig. VII.5a - Efeito do reciclo de nafta estabilizada na separação C_2^-/C_3^+ e recuperação de C_2^- e C_3^+

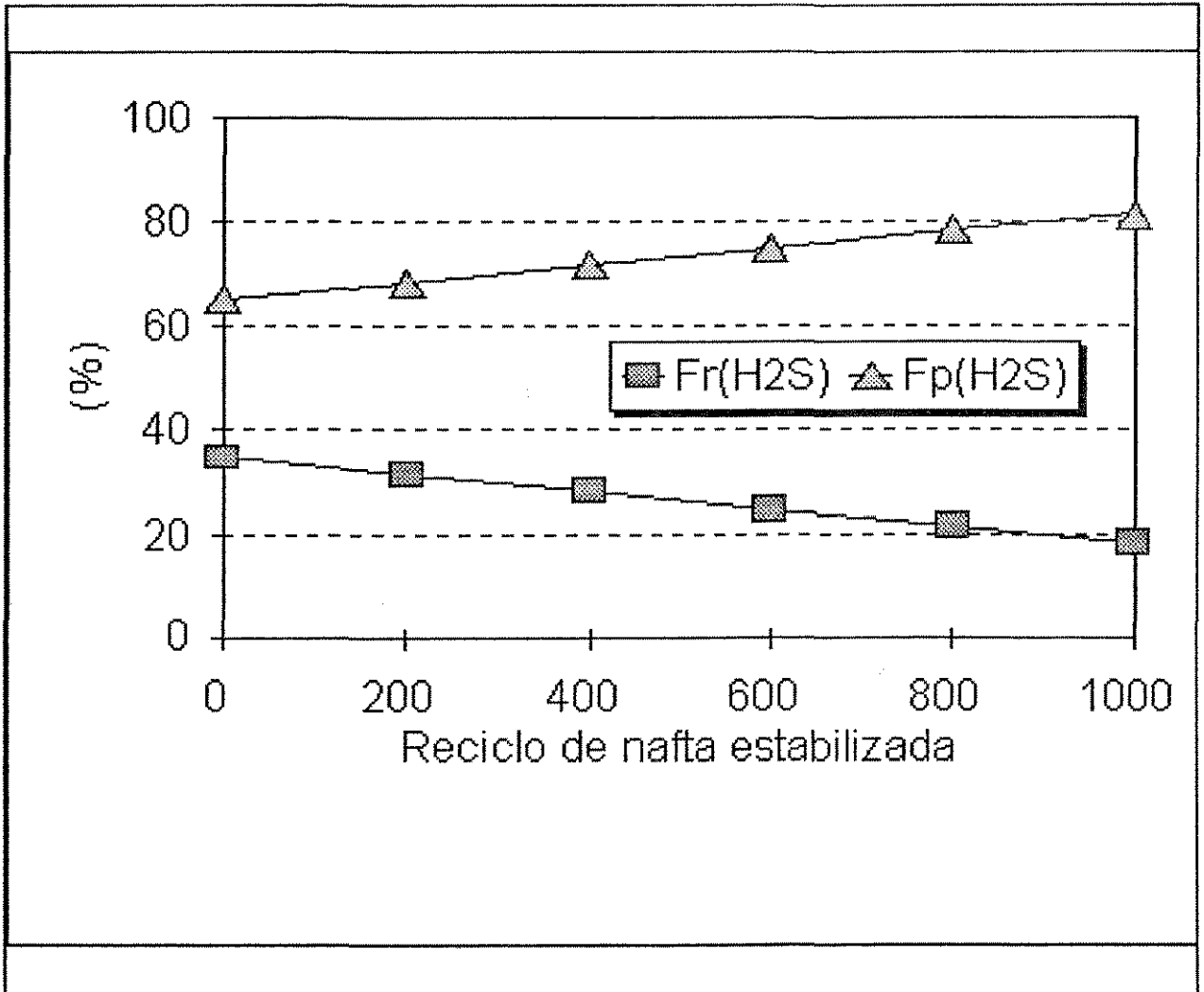


Fig. VII.5b - Efeito do reciclo de nafta estabilizada na recuperação e perda de H₂S

O reciclo de nafta estabilizada para absorvedora primária tem efeito considerável na recuperação do C₂⁻ e do H₂S, reduzindo as recuperações de C₂⁻ e H₂S em 8 e 16% em peso respectivamente, quando o reciclo é aumentado de 0 para 1000 m³/d.

Esta variável é pouco eficaz quando o objetivo é recuperar C₃⁺, aumentando em apenas 1% em peso a recuperação do C₃⁺, quando o reciclo é aumentado de 0 para 1000 m³/d.

4 - Reciclo de óleo leve para a absorvedora secundária

O reciclo de óleo leve para o topo da absorvedora secundária, também é feito com o objetivo de reduzir perdas de GLP para GC e principalmente recuperar compostos na faixa da gasolina que ainda permanecem na corrente de topo da absorvedora primária.

A figura VII.6a mostra o efeito do reciclo de óleo leve para a absorvedora secundária na qualidade da separação C_2^-/C_3^+ , recuperação de C_2^- e recuperação de C_3^+ ; e a figura VII.6b mostra o efeito desta mesma variável na recuperação e perda de H_2S .

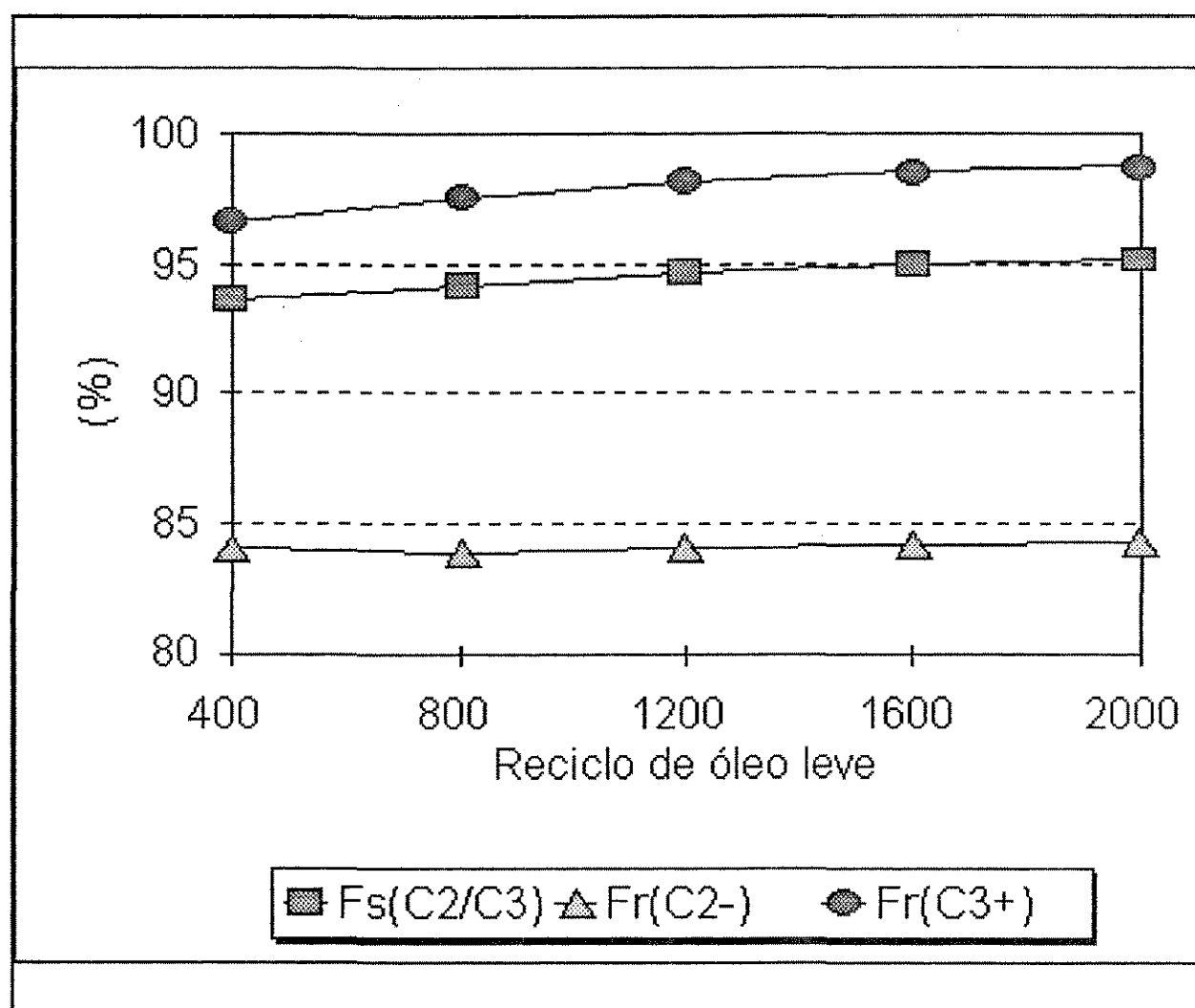


Fig. VII.6a - Efeito do reciclo de óleo leve abs. secundária na separação C_2^-/C_3^+ e recuperação de C_2^- e C_3^+

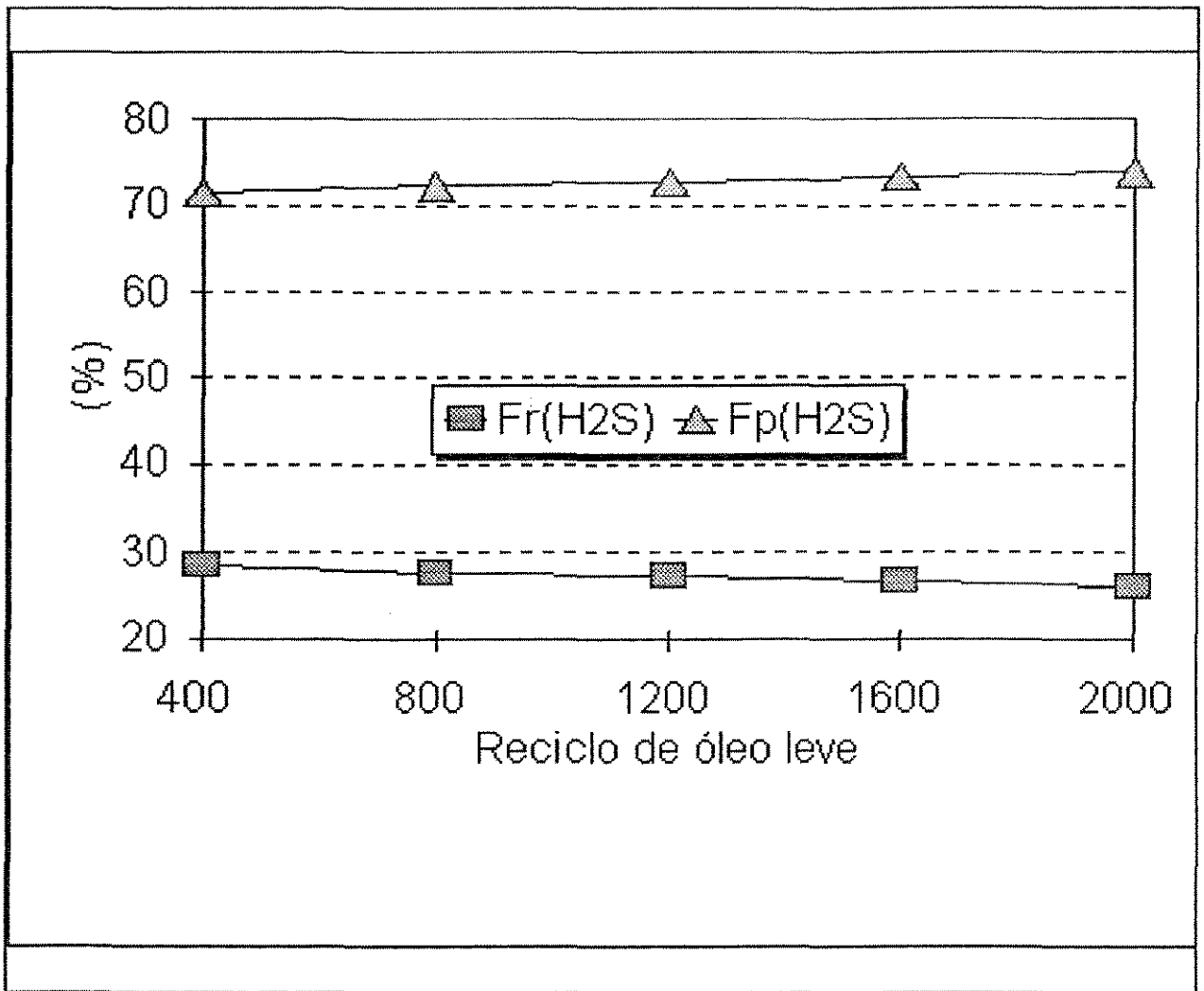


Fig. VII.6b - Efeito do reciclo de óleo leve abs. secundária na recuperação e perda de H_2S .

O efeito do reciclo de óleo leve de absorção secundária é desprezível na recuperação de C_2^- e H_2S , mas é considerável na recuperação de C_3^+ , maior que o efeito do reciclo de nafta estabilizada e menor que os efeitos da pressão de descarga do compressor e temperatura de fundo da retificadora. O aumento do reciclo de óleo leve de absorção secundária de 400 para 2000 m^3/d , aumenta a recuperação de C_3^+ em 2% em peso.

VII.2.3 - Debutanizadora - (T-2206)

A qualidade do fracionamento C_4^-/C_5^+ e a recuperação do C_4^- e C_5^+ , foram medidas para diferentes valores da razão de refluxo e temperatura de fundo da debutanizadora, e a condição de referência foi:

- . Razão de refluxo da debutanizadora = 1.6;
- . Temperatura de fundo da debutanizadora = 177 °C.

1 - Razão de refluxo da debutanizadora

A figura VII.7 mostra o efeito da razão de refluxo da debutanizadora na qualidade da separação C_4^-/C_5^+ , recuperação de C_4^- e recuperação de C_5^+ .

Observamos que existe um valor ótimo para a razão de refluxo, por volta de 1.5, a partir da qual não se observa ganhos na qualidade do fracionamento C_4^-/C_5^+ e recuperação de C_4^- e C_5^+ , pois tanto a qualidade do fracionamento quanto a recuperação de C_4^- atingem patamares que não são melhorados com o aumento da razão de refluxo da torre. Para valores da razão de refluxo abaixo de 1,5 a qualidade do fracionamento e as recuperações de C_4^- e C_5^+ caem muito.

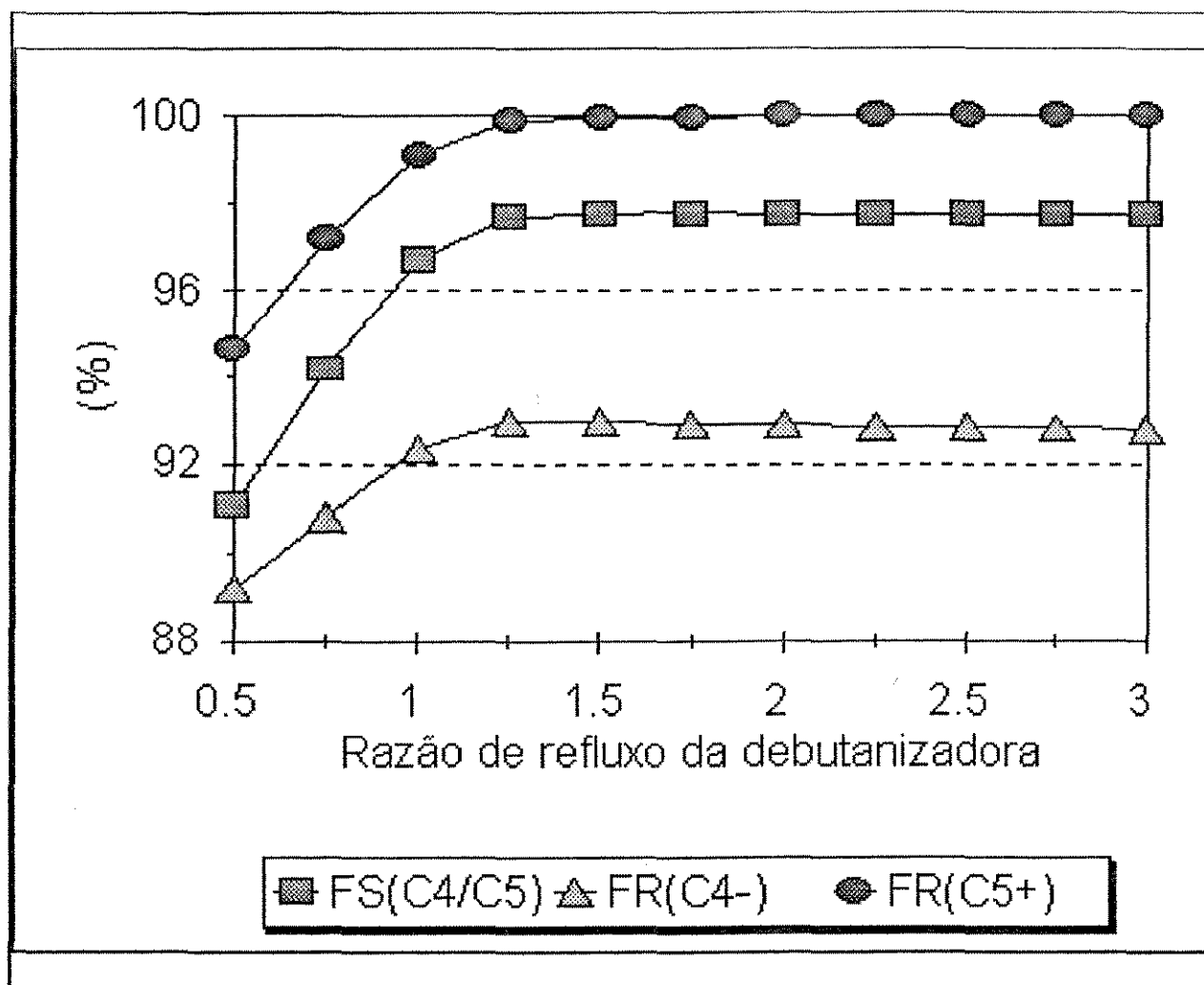


Fig. VII.7 - Efeito da razão de refluxo da debutanizadora na separação C_4^-/C_5^+ e recuperação de C_4^- e C_5^+

2 - Temperatura de fundo da debutanizadora

A figura VII.8 mostra o efeito da temperatura de fundo da debutanizadora na qualidade da separação C_4^-/C_5^+ , recuperação de C_4^- e recuperação de C_5^+ .

A temperatura de fundo da debutanizadora tem grande efeito no fracionamento e recuperação de C_4^- e C_5^+ , devendo ser ajustada de acordo com a campanha, máximo GLP (máxima recuperação de C_4^-), limitado pelo intemperismo ou máxima GLN (máxima recuperação de C_5^+), limitada pela PVR.

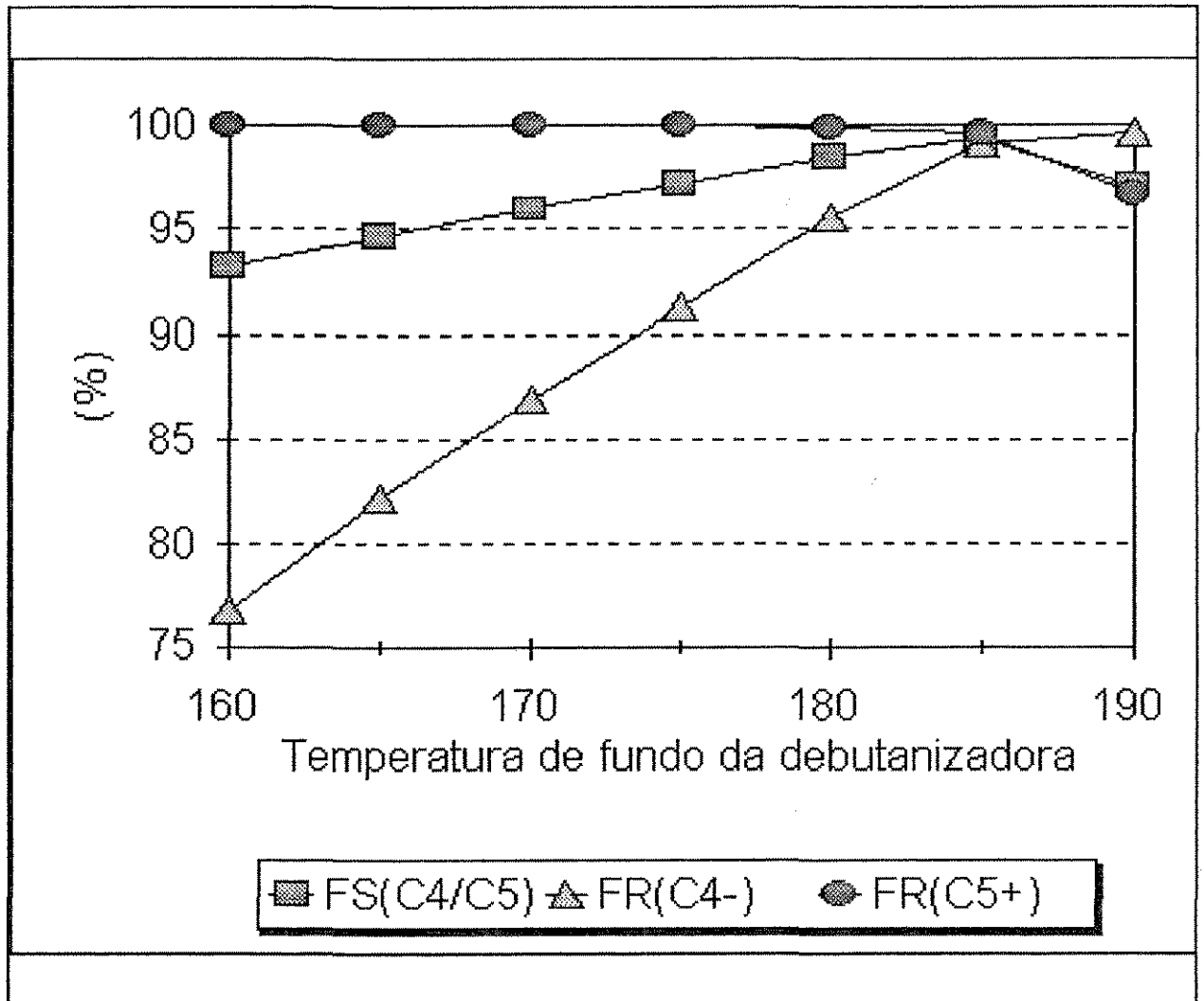


Fig. VII.8 - Efeito da temp. de fundo da debutanizadora na separação C_4^-/C_5^+ e recuperação de C_4^- e C_5^+

VII.3 - Otimização da unidade

A condição operacional ótima, correspondente aos valores ótimos das variáveis de otimização, foi determinada para a situação normal dos preços de derivados, e depois experimentadas variações nesses parâmetros para análise de sensibilidade da função objetivo e determinação das novas condições ótimas de operação.

As tabelas a seguir resumem as entradas do simulador/otimizador e os resultados obtidos:

Tab. VII.6 - Preços de derivados considerados (US\$/t)

CASO	I	II	III	IV	V
Preço G.A.	80.00	80.00	80.00	80.00	80.00
Preço G.C.	100.00	100.00	120.00	130.00	100.00
Preço GLP	140.00	140.00	140.00	140.00	140.00
Preço GLN	160.00	160.00	160.00	160.00	160.00
Preço LCO	140.00	120.00	120.00	120.00	120.00
Preço OCL	100.00	120.00	120.00	120.00	120.00
Preço O.C.	90.00	90.00	90.00	90.00	100.00

Comentários:

Os outros parâmetros que influenciam no cálculo da função objetivo e que não constam da tabela acima, permaneceram constantes em todos os casos.

O caso I, considera os valores normais de preços de derivados.

Nos casos II a V, os preços de LCO e OCL foram considerados iguais (esses produtos são normalmente misturados no limite de bateria da unidade e usados como diluentes), para anular o efeito na temperatura de fundo da fracionadora.

Nos casos II, III e IV experimentou-se preços crescentes do GC.

No caso V foi considerado um valor mais alto do preço do OC.

Tab. VII.7 - Resultados da otimização

(US\$/d)

CASO	I	II	III	IV	V
Valor Produtos	1003030.00	1001050.00	1006360.00	1009500.00	1001030.00
Custo Carga	790893.00	790893.00	790893.00	790893.00	790893.00
Custo Energia Utilidades	9740.30	9737.90	9192.30	8929.80	10716.20
Valor Energia Recuperada	18563.30	18562.90	18751.30	18586.80	20627.20
Função Objetivo Rentabil.	220960.00	218982.00	225026.00	228264.00	220048.00

Tab. VII.8 - Resultados da otimização (valores ótimos das variáveis de otimização)

CASO	I	II	III	IV	V
Número de Iterações	18	18	15	15	11
Temperat. Fundo Fracion.	370	370	370	370	370
Pressão Descarga Compressor	20	20	20	19.7	20
Reciclo Nafta Estabiliz.	1000	1000	390	0.0	1000
Reciclo Óleo Leve	1200	1200	650	1130	1200

Comentários:

O custo da carga é o mesmo em todos os casos, porque foi considerado o preço da carga da unidade de fracionamento e recuperação de produtos (carga da fracionadora principal) igual ao preço do gás-óleo, e este permaneceu constante em todos os casos.

O valor da energia recuperada é alto porque a carga da fracionadora é superaquecida e todos os produtos no limite de bateria da unidade estão a temperatura pouco acima da temperatura ambiente, recuperando grande quantidade de energia na troca de calor com a carga da unidade (bateria de pré-aquecimento) e na geração de vapor.

A rentabilidade é função dos preços dos derivados e condições operacionais.

Quanto aos valores ótimos das variáveis de otimização valem os seguintes comentários:

Nos casos I e II, que são os casos de preços normais de derivados com e sem diferenciação dos preços do LCO e OCL, respectivamente, as variáveis de otimização estão todos nos seus valores máximos.

Nos casos III e IV (aumento do preço do GC ou redução do diferencial dos preços do GLP e GC) observa-se que algumas das variáveis saem dos seus máximos. No caso III os ciclos de nafta estabilizada e óleo leve não são os máximos e no caso IV a pressão também deixa de ser a máxima.

O caso V, que é semelhante ao caso II, diferenciando apenas no preço do OC, observa-se que as variáveis de otimização permanecem todas nos seus valores máximos, contudo a rentabilidade aumenta porque o aumento da energia recuperada supera o aumento da energia consumida. Neste caso, vale ressaltar que a análise está sendo feita apenas em parte da unidade (seção de fracionamento e recuperação dos produtos); numa análise global da unidade, incluindo pré-aquecimento da carga e o reator, deve se observar uma queda da rentabilidade com o aumento do preço da energia (aumento do preço do OC).

CAPÍTULO VIII - CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES

O refluxo de topo da fracionadora principal não tem praticamente nenhum efeito na qualidade do fracionamento GLN/LCO ou na recuperação de produto de topo da torre. Portanto, deve ser usado apenas em casos de real necessidade, por exemplo, para abaixar o PFE da gasolina ou em caso de deficiência no sistema de troca de calor do refluxo circulante de topo da torre. Uma vez que o uso do refluxo de topo implica em perdas de energia nos condensadores de topo da torre fracionadora, seu uso deve ser evitado, deixando-o apenas para solucionar esses casos críticos.

A temperatura de fundo da fracionadora principal tem grande efeito na qualidade do fracionamento GLN/LCO e na recuperação do produto de topo da torre (gasolina). Aumentando esta temperatura, há melhora no fracionamento GLN/LCO (aumenta o GAP LCO/GLN) e recupera-se mais produto pelo topo da fracionadora (mantendo-se o PFE da gasolina). Este é o motivo por que a temperatura de fundo da fracionadora principal esteve no seu valor máximo, em todos os casos de otimização e, por essa razão se recomenda operar a torre sempre com altas temperaturas de fundo, exceto em casos de necessidade de especificar o produto de fundo como RARO e/ou especificar o LCO como diesel direto, sem tratamento.

A pressão de descarga do compressor tem grande efeito na recuperação de GLP e na distribuição de H_2S nas correntes de GC e GLP. Aumentando a pressão, aumenta-se a recuperação de GLP mas se transfere o H_2S para o GLP (o que normalmente é indesejado). Nos casos de otimização, a pressão de descarga do compressor quase sempre esteve no seu valor máximo, só deixando de ser máxima para diferenças de preços entre GLP e GC entre 10 a 20 US\$/t. Nessa situação, as perdas de GLP, função da menor pressão, são compensadas pelo menor consumo de energia (menor consumo de vapor no compressor).

A temperatura de fundo da retificadora tem efeito inverso, mas muito semelhante a pressão: aumentando-se a temperatura, aumenta-se as perdas de GLP e se transfere o H₂S para o GC. Esta variável tem grande efeito na retificação do C₂.

O reciclo de nafta estabilizada para a absorvedora primária tem efeito semelhante à pressão, porém menos acentuado. Por isso é que, nos casos de otimização, ele só se manteve no seu valor máximo para grandes diferenças de preços entre o GLP e o GC.

O reciclo de óleo leve de absorção secundária tem efeito parecido ao da nafta estabilizada de absorção primária, contudo, apresenta grande poder de absorção de compostos na faixa da gasolina ainda presentes na corrente de topo da absorvedora primária. Por isso é que se mantém no seu valor máximo ou próximo do máximo em todos os casos de otimização.

O refluxo de topo da debutanizadora apresenta um valor ótimo, em torno de 1.5. Refluxos acima deste valor levam a um aumento do consumo de energia no refeedor e nos condensadores, sem ganhos na qualidade do fracionamento GLP/GLN. Valores muito baixos implicam numa queda acentuada da qualidade do fracionamento.

A temperatura de fundo da debutanizadora tem grande efeito no fracionamento GLP/GLN e é a principal variável a ser manipulada em casos de maximização de GLP limitado pelo intemperismo ou maximização da GLN limitada pela PVR.

Para as condições normais de preços de derivados de petróleo, as variáveis de otimização consideradas: Temperatura de Fundo da Fracionadora Principal, Pressão de Descarga do Compressor, Reciclo de Nafta Estabilizada para a Absorvedora Primária e Reciclo de Óleo Leve de Absorção Secundária, estão todas nos seus valores máximos aceitáveis, isto é, 370 °C, 20 Kgf/cm² man., 1000 m³/d e 1200 m³/d respectivamente. Em condições anormais de preços de derivados no mercado, os valores dessas variáveis, que otimizam a rentabilidade

da unidade, precisam ser recalculados.

Em situações em que se tenha algum problema operacional ou limitações de qualidade de produtos (necessidade de transferir H_2S para a corrente de GC, por exemplo) as variáveis devem ser diferentes dos seus ótimos econômicos para atender a necessidade em questão. No exemplo citado, deve-se reduzir a pressão, reduzir o reciclo de nafta estabilizada e aumentar a temperatura de fundo da retificadora, condições que não levam à otimização da unidade, pois há aumento de GLP, mas atende a necessidade de transferir o H_2S para a corrente de GC.

Os resultados das simulações da seção de fracionamento e recuperação dos produtos da UFCC-I da REPLAN, usando o simulador de processos HYSIM, são muito semelhantes aos valores obtidos da prática da operação da unidade, donde se conclui que esta é uma ferramenta muito poderosa da engenharia de análise e otimização de processos.

RECOMENDAÇÕES PARA A CONTINUIDADE DESTES TRABALHOS:

Determinar condições operacionais ótimas da unidade de craqueamento catalítico fluido como um todo, incluindo pre-aquecimento da carga, conversor e tratamentos.

Pesquisar metodologias mais apuradas para quantificar os custos de energia e utilidades e o valor da energia recuperada, incluindo uma análise exergética.

APÊNDICE A - MÉTODO DE BOX

O método de Box (uma das variantes do método Simplex) é particularmente apropriado para a resolução de problemas de otimização de função não-linear com restrições envolvendo número elevado de variáveis.

A.1 - Simplex inicial

A posição do simplex inicial é definida por regras geométricas. O método independe da posição inicial do poliedro, motivo pelo qual a origem do sistema de coordenadas é escolhida como um de seus vértices.

Para o caso de n variáveis independentes, outros n pontos são selecionados obedecendo o critério de simetria da figura geométrica em relação aos eixos coordenados.

Desse modo, as coordenadas do simplex inicial são dadas por:

Tab. A.1 - Coordenadas do simplex inicial

Coordenada Ponto	X1	X2	X3	. . .	X _{n-1}	X _n
1	0	0	0	. . .	0	0
2	p	q	q	. . .	q	q
3	q	p	q	. . .	q	q
.
.
.
n	q	q	q	. . .	p	q
$n+1$	q	q	q	. . .	q	p

Este é o conjunto de pontos mais simples que pode ser assumido para o simplex inicial, uma vez que apenas duas condições precisam ser postuladas para que a figura forme um simplex:

1- Distância de cada ponto a origem igual à aresta a do simplex:

$$p^2 + (n-1)q^2 = a^2 \quad (\text{A.1})$$

2- Distância entre dois pontos igual à aresta a do simplex:

$$2(p-q)^2 = a^2 \quad (\text{A.2})$$

Os valores de p e q que satisfazem as duas equações acima, são dados por:

$$p = \frac{a \sqrt{2} (n - 1 + \sqrt{n + 1})}{2 n} \quad (\text{A.3})$$

$$q = \frac{a \sqrt{2} (-1 + \sqrt{n + 1})}{2 n} \quad (\text{A.4})$$

O simplex inicial é portanto um poliedro regular em relação aos eixos coordenados. Quando as variáveis a serem otimizadas tiverem ordem de grandeza diferentes, faz-se uma mudança de coordenadas, mediante normalização para a escala do tamanho da aresta do simplex. Desse modo, o otimizador trabalha com um poliedro que tende a manter sua regularidade, enquanto que o cálculo da função objetivo é feito com base na ordem de grandeza real das variáveis.

A.2 - Prosseguimento da pesquisa

Uma vez montado o simplex inicial, calcula-se a função objetivo, (F_i) para todos os vértices (P_i) . Define-se F_{\min} o valor mínimo calculado (vértice P_{\min}) e F_{\max} o valor máximo (vértice P_{\max}), também denota-se por C_m o centro de massa de todos os vértices resultantes pela exclusão do ponto P_{\min} , (caso de maximização).

$$C_m = \sum P_i / n, \quad i = 1, 2, \dots, n+1, \quad \text{com } i \neq \min \quad (\text{centróide}).$$

O procedimento consiste em aplicar a regra de reflexão proposta no método original, permitindo que a geometria do simplex seja modificada por coeficientes de reflexão, expansão e contração, aplicados do seguinte modo:

REFLEXÃO - Obtem-se o ponto refletido desde P_{\min} , através do centróide C_m ; esse é o ponto P_r calculado com a expressão: $P_r = C_m + C_r(C_m - P_{\min})$, onde C_r é o coeficiente de reflexão. A função objetivo é calculada nesse vértice (F_r).

EXPANSÃO - Se $F_r > F_{\max}$, faz-se uma expansão da reflexão de acordo com a expressão $P_e = C_m + C_e(C_m - P_{\min})$, onde C_e é o coeficiente de expansão. O valor da função objetivo no vértice expandido é calculado (F_e). Havendo sucesso na expansão, ou seja, $F_e > F_r$, então substitui P_{\min} por P_e ; caso contrário, substitui-se P_{\min} por P_r .

CONTRAÇÃO - Se $F_r < F_{\min}$, faz-se uma contração da reflexão de acordo com a expressão $P_c = C_m + C_c(P_{\min} - C_m)$, onde C_c é o coeficiente de contração. O valor da função objetivo no vértice contraído é calculado (F_c). Havendo sucesso na contração, ou seja, $F_c > F_{\min}$, então substitui P_{\min} por P_c ; caso contrário, reduz-se todo o simplex em torno de P_{\max} por um fator de escala (f_e), ou seja, para todos os vértices se faz $P_i = f_e(P_{\max} + P_i)$.

Evidentemente, o fator de escala fica na faixa $0 < f_e < 1$, e os coeficientes de reflexão, expansão e contração são: igual, maior e menor que 1 (um), respectivamente.

A.3 - Critério de precisão

O teste de precisão é o critério de parada da pesquisa. A precisão pode ser requerida para as variáveis independentes ou para a função objetivo. A exigência de precisão para as variáveis independentes requer uma regra adicional para vinculação das

variáveis entre si quanto à precisão. Normalmente, portanto, aplica-se um critério de precisão para a função objetivo.

Himmelblau (1969), recomenda o uso da variância da função objetivo calculada em cada vértice do simplex, como critério de precisão, ou seja, exige-se que:

$$\sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (F_i - F_m)^2}{n}} < E_p \quad (\text{A.5})$$

Onde E_p é a precisão requerida e F_m é o valor médio de F_i .

Neste trabalho usou-se como critério de precisão a variância dividida pelo valor médio da função (F_m), com o objetivo de minimizar o efeito da ordem de grandeza da função objetivo e dar melhor idéia do valor da precisão requerida, ou seja:

$$\sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (F_i - F_m)^2}{n}} \frac{1}{F_m} < E_p \quad (\text{A.6})$$

Esta modificação de Box é uma adaptação do método simplex original com algumas características de uma outra proposta sua inteiramente diferente, denominada método complex.

O método complex foi idealizado para superar os problemas de montagem do simplex inicial, para possibilitar a incorporação de restrições na pesquisa e permitir movimentação da figura ao redor de regiões altamente convexas.

Basicamente, o método utilizado introduziu o conceito de não regularidade dos poliedros e o uso de figuras geométricas com $n+1$ vértices. A idéia básica de reflexão das figuras baseou-se ainda no método simplex original.

Assim, o método utilizado neste trabalho incorpora as principais vantagens do método complex e a simplicidade do método simplex original.

A.4 - Diagrama de blocos do método de box

A figura A.1 traduz de maneira mais clara a sequência de cálculos do método de Box, conforme aplicado neste trabalho.

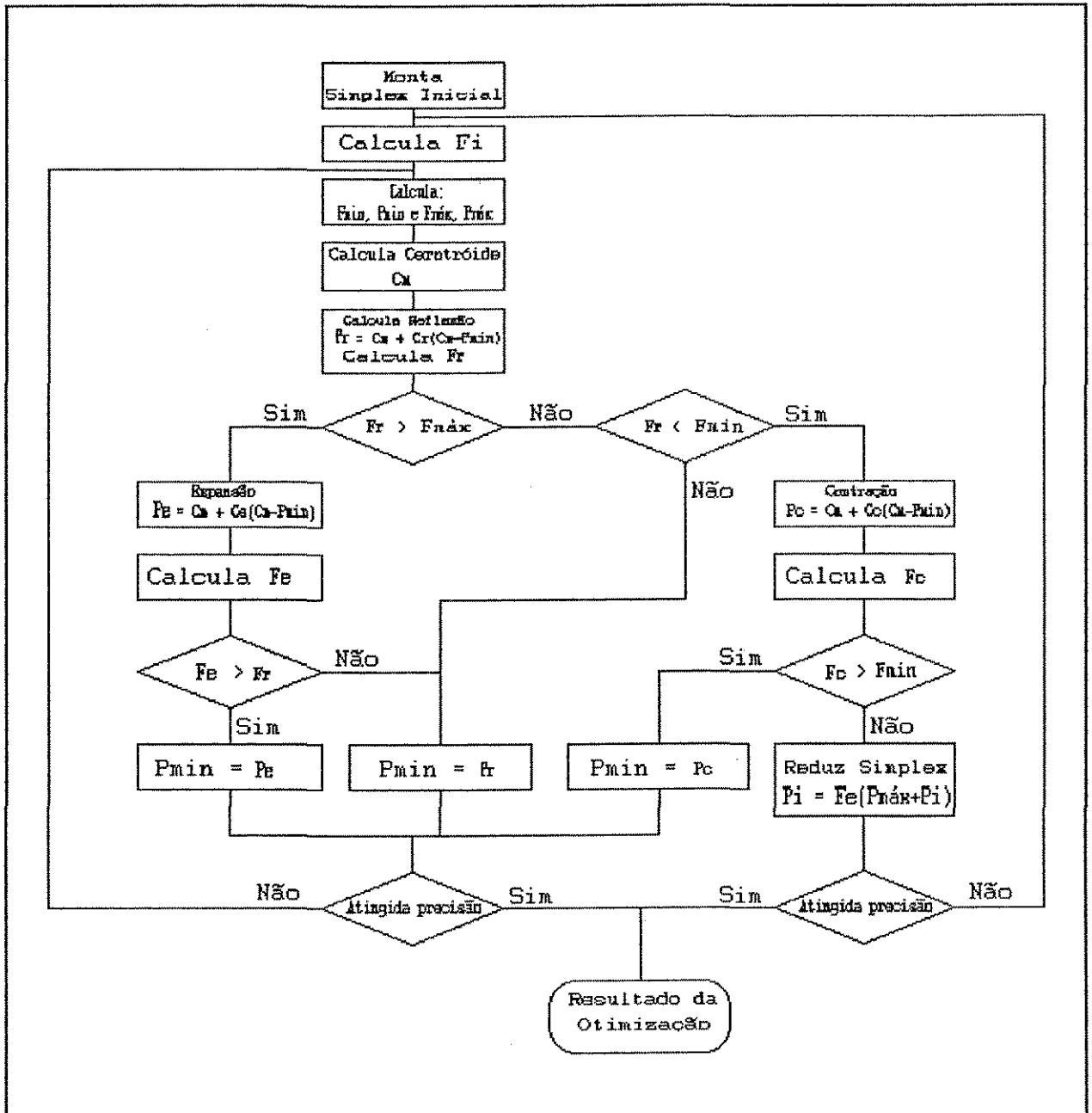


Fig. A.1 - Diagrama de blocos do método de BOX

A.5 - Listagem dos programas computacionais

As listagens apresentadas a seguir referem-se ao programa gerenciador (arquivo "batch"), otimizador (Método de Box) modificado para fazer interface com o simulador de processos Hysim, e arquivos de dados usados nos programas.

A.5.1 - PROGRAMA GERENCIADOR

```
:INICIO
COPY DADOS6.DAT DADOS5.DAT
SIMPLEX >PRN
IF EXIST TERMINO.TXT GOTO FIM
HYSIM USP.SIM /D SIMUSP.CMD
GOTO INICIO
:FIM
DEL TERMINO.TXT
```

A.5.2 - OTIMIZADOR SIMPLEX - (MÉTODO DE BOX)

ADAPTADO PARA INTERFACE COM SIMULADOR (HYSIM)

```
PROGRAM SIMPLEX
$DEBUG
C      !!!!!      PROGRAMA PRINCIPAL      !!!!!

C      1- DESCRICAO DO PROGRAMA
C      OTIMIZADOR SIMPLEX (METODO DE BOX)
C      Obs.: ESTE PROGRAMA ESTA ADAPTADO PARA FAZER INTERFACE COM O
C      SIMULADOR DE PROCESSOS - HYSIM

C      2- DESCRICAO DAS VARIAVEIS
C      ITM - NUMERO DE ITERACOES MAXIMO
C      CP  - CRITERIO DE PARADA DO OTIMIZADOR (PRECISAO)
C      N   - NUMERO DE VARIAVEIS INDEPENDENTES
C      N1  - NUMERO DE VERTICES DO POLIGONO
C      A   - ARESTA DO POLIEDRO
C      A1  - ARESTA DO POLIEDRO INICIAL
C      CREF - COEFICIENTE DE REFLEXAO
C      CEXP - COEFICIENTE DE EXPANSAO
C      CCON - COEFICIENTE DE CONTRACAO
C      FRED - FATOR DE REDUCAO DO POLIGONO
C      X(i,j) - COORDENADAS DOS VERTICES
C      F(i)   - VALOR DA FUNCAO OBJETIVO NOS VERTICES
```

```

C      XCOR(j) - COORDENADAS DO VERTICE
C      XCEN(j) - COORDENADAS DO CENTROIDE
C      XREF(j) - COORDENADAS DO PONTO REFLETIDO
C      XCON(j) - COORDENADAS DO PONTO CONTRAIDO
C      XEXP(j) - COORDENADAS DO PONTO EXPANDIDO
C      XAUX(j) - COORDENADAS DO PONTO AUXILIAR
C      i - CONTADOR (i = 1, 2, ..., N1)
C      j - CONTADOR (J = 1, 2, ..., N)
C      K - VARIAVEL AUXILIAR DE POSICIONAMENTO DO OTIMIZADOR
C           IDENTIFICA O NUMERO DO VERTICE DO POLIGONO (K=1,2,...,N1)
C      M - VARIAVEL AUXILIAR DE POSICIONAMENTO DO OTIMIZADOR
C           IDENTIFICA A CONDICAO DO VERTICE (M=0,1,2,3,4)
C           M = 0, VERTICE CALCULADO PELA PRIMEIRA VEZ
C           M = 1, VERTICE REFLETICO
C           M = 2, VERTICE EXPANDIDO
C           M = 3, VERTICE CONTRAIDO
C           M = 4, POLIGONO CONTRAIDO

C      3- DECLARACAO DE VARIAVEIS
      DIMENSION X(5,4), F(5), XCOR(4), XCEN(4), XREF(4), XCON(4), XEXP(4)
      DIMENSION XAUX(4)

C      4- DEFINICAO DOS ARQUIVOS DE DADOS
      DADOS5.DAT - ARQUIVO DE LEITURA DAS COORDENADAS DOS VERTICES
                  E FUNCAO OBJETIVO
      DADOS6.DAT - ARQUIVO DE IMPRESSAO DAS COORDENADAS DOS VERTICES
                  E FUNCAO OBJETIVO

C      5- ARQUIVOS DE LEITURA E IMPRESSAO
      OPEN(UNIT=5, FILE='DADOS5.DAT', STATUS='OLD')
      OPEN(UNIT=6, FILE='DADOS6.DAT', STATUS='OLD')

C      6- INICIALIZACAO DAS VARIAVEIS
      ITM=50
      CP=0.0001
      N=4
      A=1.
      CREF=1.
      CEXP=2.
      CCON=.5
      FRED=.5
      N1=N+1
      A1=0.5*A

```

```

C      7- LEITURA DO ARQUIVO DE DADOS    ( DADOS5.DAT )
      READ(5,*)K,M

C      8- POSICIONAMENTO DO OTIMIZADOR
      IF(M.GT.0)GO TO 1
      IF(K.GT.N1)GO TO 1
      IF(K.GT.1)GO TO 2

C      9- COORDENADAS DOS VERTICES DO SIMPLEX - ORIGEM DAS COORDENADAS
      DO 100 J=1,N
      X(1,J)=0.
100  XCOR(J)=X(1,J)

C      10- DEFINICAO DO ARQUIVO DE DADOS PARA O SIMULADOR
      CALL COR(XCOR,N)

C      11- IMPRESSAO DO ARQUIVO DE DADOS    ( DADOS6.DAT )
      K=K+1
      WRITE(6,*)K,M
      WRITE(6,*) (X(1,J), J=1,N)
      STOP

C      12- COORDENADAS DOS VERTICES DO SIMPLEX INICIAL - ORIGEM COORD.
      2  K1=K-1
      K2=K-2
      DO 3 I=1,K1
      3  READ(5,*) (X(I,J), J=1,N)
      IF(K.LE.2)GO TO 4
      READ(5,*) (F(I), I=1,K2)

C      13- CALCULO DA FUNCAO OBJETIVO
      4  CALL FOB(FO)
      F(K1)=FO

C      14- COORDENADAS DOS VERTICES DO SIMPLEX INICIAL - DEMAIS VERTICES
      P=(A1/FLOAT(N)/(2.**.5))*(FLOAT(N+1.)**.5-1.+FLOAT(N))
      Q=(A1/FLOAT(N)/(2.**.5))*(FLOAT(N+1.)**.5-1.)
      DO 110 J=1,N
      IF(K1.NE.J)GO TO 105
      X(K,J)=P
      GO TO 110
105  X(K,J)=Q
110  XCOR(J)=X(K,J)

```

CONTINUE

```

C    15- DEFINICAO DO ARQUIVO DE DADOS PARA O SIMULADOR
      CALL COR(XCOR,N)

C    16- IMPRESSAO DO ARQUIVO DE DADOS    ( DADOS6.DAT )
      K3=K+1
      WRITE(6,*)K3,M
      DO 6 I=1,K
6    WRITE(6,*) (X(I,J),J=1,N)
      WRITE(6,*) (F(I),I=1,K1)
      STOP

C    17- REPOSICIONAMENTO DO OTIMIZADOR
      1 IF(M.EQ.1)GO TO 11
      IF(M.EQ.2)GO TO 21
      IF(M.EQ.3)GO TO 31
      IF(M.EQ.4)GO TO 41

C    18- LEITURA DO ARQUIVO DE DADOS    ( DADOS5.DAT )
C      POLIGONO INICIAL COMPLETO
      K1=K-1
      K2=K-2
      DO 7 I=1,K1
7    READ(5,*) (X(I,J),J=1,N)
      READ(5,*) (F(I),I=1,K2)

C    19- CALCULO DA FUNCAO OBJETIVO
      CALL FOB(FO)
      F(K1)=FO

C    20- PRIMEIRA ITERACAO
      ITR=0
      GOTO 160

C    21- REDUCAO DO POLIGONO EM TORNO DO PONTO DE MAIOR VALOR DA FO
150 DO 151 J=1,N
      XAUX(J)=X(1,J)
      X(1,J)=X(IHI,J)
151 X(IHI,J)=XAUX(J)
      FAUX=F(1)
      F(1)=F(IHI)
      F(IHI)=FAUX

```

K=2
M=4

C 22- CASO DO PLIGONO REDUZIDO

```
41 K1=K-1
   K2=K-2
   IF(K.LE.2)GO TO 152
   READ(5,*)ITR,ICT
   DO 153 I=1,N1
153 READ(5,*)(X(I,J),J=1,N)
   READ(5,*)(F(I),I=1,K2)
```

C 23- CALCULO DA FUNCAO OBJETIVO

```
CALL FOB(FO)
F(K1)=FO

   IF(K.GT.N1)GO TO 160
152 DO 155 J=1,N
155 XCOR(J)=X(K,J)
```

C 24- DEFINICAO DO ARQUIVO DE DADOS PARA O SIMULADOR

```
CALL COR(XCOR,N)
```

C 25- IMPRESSAO DO ARQUIVO DE DADOS (DADOS6.DAT)

```
K=K+1
WRITE(6,*)K,M
WRITE(6,*)ITR,ICT
DO 156 I=1,N1
156 WRITE(6,*)(X(I,J),J=1,N)
   WRITE(6,*)(F(I),I=1,K1)
STOP
```

C 26- IMPRESSAO DAS COORDENADAS DOS VERTICES E VALOR DA FO

```
160 ITR=ITR+1
   ICT=0
   IF(ITR.LT.ITM) GO TO 161
```

C 27- PROGRAMA NAO CONVERGE EM ITM ITERACOES

```
WRITE(*,162)ITM
162 FORMAT(//,1X,' NAO CONVERGE EM ',I5,' ITERACOES')
GOTO 1010
```

C 28- IMPRESSAO DAS COORD. DOS VETRICES DO POLIGONO E FO

```
161 WRITE(*,163) ITR
163 FORMAT(//,1X,'ITERACAO ',I3)
      DO 164 I=1,N1
164 WRITE(*,*) (X(I,J),J=1,N),F(I)
```

C 29- PESQUISA DOS VERTICES DE MAXIMO E MINIMO DO SIMPLEX

```
FHI=F(1)
FLO=F(1)
IHI=1
ILO=1
DO 166 I=1,N1
IF(F(I).LE.FHI)GO TO 165
FHI=F(I)
IHI=I
GO TO 166
165 IF(F(I).GE.FLO)GO TO 166
      FLO=F(I)
      ILO=I
166 CONTINUE
```

C 30- CALCULO DO CENTROIDE

```
DO 180 J=1,N
SUM=0.
DO 175 I=1,N1
IF(I.EQ.ILO)GO TO 175
SUM=SUM+X(I,J)
175 CONTINUE
180 XCEN(J)=SUM/FLOAT(N)
```

C 31- REFLEXAO DO SIMPLEX

```
DO 190 J=1,N
XREF(J)=XCEN(J)+CREF*(XCEN(J)-X(ILO,J))
```

C 32- LIMITA O VALOR DO PONTO REFLETIDO

```
IF(XREF(J).GE.0)GO TO 191
XREF(J)=0
GO TO 190
191 IF(XREF(J).LE.A)GO TO 190
      XREF(J)=1
190 CONTINUE
```

C 33- DEFINICAO DO ARQUIVO DE DADOS PARA O SIMULADOR

```
CALL COR(XREF,N)
```

```
C 34- IMPRESSAO DO ARQUIVO DE DADOS ( DADOS6.DAT )
C VERTICE REFLETIDO
M=1
WRITE(6,*)K,M
WRITE(6,*)ITR,ICT
DO 12 I=1,N1
12 WRITE(6,*) (X(I,J),J=1,N)
WRITE(6,*) (F(I),I=1,N1)
WRITE(6,*) FHI, IHI, FLO, ILO
WRITE(6,*) (XCEN(J),J=1,N)
WRITE(6,*) (XREF(J),J=1,N)
STOP

C 35- LEITURA DO ARQUIVO DE DADOS ( DADOS5.DAT )
C VERTICE REFLETIDO
11 READ(5,*) ITR, ICT
DO 13 I=1,N1
13 READ(5,*) (X(I,J),J=1,N)
READ(5,*) (F(I),I=1,N1)
READ(5,*) FHI, IHI, FLO, ILO
READ(5,*) (XCEN(J),J=1,N)
READ(5,*) (XREF(J),J=1,N)

C 36- CALCULO DO VALOR DA FUNCAO OBJETIVO NO VERTICE REFLETIDO
CALL FOB(FO)
FREF=FO

C 37- TESTE DO SIMPLEX REFLETIDO

C 37.1- DESVIA PARA O CASO DE EXPANSAO
IF(FREF.GT.FHI)GO TO 240

C 37.2- DESVIA PARA O CASO DE CONTRACAO
IF(FREF.LT.FLO)GO TO 215

C 37.3- SUBSTITUI AS COORDENADAS DO PONTO DE MINIMO PELO REFLETIDO
GO TO 210

C 38- CASO DE CONTRACAO
215 DO 220 J=1,N
220 XCON(J)=XCEN(J)+CCON*(X(ILO,J)-XCEN(J))

C 39- LIMITA O VALOR DO PONTO CONTRAIDO
```

```

DO 224 J=1,N
IF(XCON(J).GT.0)GO TO 226
XCON(J)=0
GO TO 224
226 IF(XCON(J).LE.A)GO TO 224
XCON(J)=1
224 CONTINUE

C 40- DEFINICAO DO ARQUIVO DE DADOS PARA O SIMULADOR
CALL COR(XCON,N)

C 41- IMPRESSAO DO ARQUIVO DE DADOS ( DADOS6.DAT )
C VERTICE CONTRAIDO
M=3
WRITE(6,*)K,M
WRITE(6,*)ITR,ICT
DO 32 I=1,N1
32 WRITE(6,*)(X(I,J),J=1,N)
WRITE(6,*)(F(I),I=1,N1)
WRITE(6,*)FHI,IHI,FLO,ILO
WRITE(6,*)(XCEN(J),J=1,N)
WRITE(6,*)(XCON(J),J=1,N)
STOP

C 42- LEITURA DO ARQUIVO DE DADOS ( DADOS5.DAT )
C VERTICE CONTRAIDO
31 READ(5,*)ITR,ICT
DO 33 I=1,N1
33 READ(5,*)(X(I,J),J=1,N)
READ(5,*)(F(I),I=1,N1)
READ(5,*)FHI,IHI,FLO,ILO
READ(5,*)(XCEN(J),J=1,N)
READ(5,*)(XCON(J),J=1,N)

C 43- CALCULO DO VALOR DA FUNCAO OBJETIVO NO VERTICE CONTRAIDO
CALL FOB(FO)
FCON=FO

C 44- TESTE DA FO NO VERTICE CONTRAIDO
IF(FCON.GT.FLO)GO TO 230

C 45- CASO EM QUE NAO SE CONSEGUE MELHORAR A CONVERGENCIA
DO 225 J=1,N

```



```

DO 225 I=1,N1
225 X(I,J)=FRED*(X(I,J)+X(IHI,J))
WRITE(*,*)'O POLIGONO FOI REDUZIDO'
ICT=1
GO TO 300

C 46- CONTRACAO BEM SUCEDIDA
230 DO 235 J=1,N
235 X(ILO,J)=XCON(J)
F(ILO)=FCON
GO TO 300

C 47- CASO DE EXPANSAO
240 DO 245 J=1,N
XEXP(J)=XCEN(J)+CEXP*(XCEN(J)-X(ILO,J))

C 48- LIMITA O VALOR DO PONTO EXPANDIDO
IF(XEXP(J).GE.0)GO TO 246
XEXP(J)=0
GO TO 245
246 IF(XEXP(J).LE.A)GO TO 245
XEXP(J)=1
245 CONTINUE

C 49- DEFINICAO DO ARQUIVO DE DADOS PARA O SIMULADOR
CALL COR(XEXP,N)

C 50- IMPRESSAO DO ARQUIVO DE DADOS ( DADOS6.DAT )
C VERTICE EXPANDIDO
M=2
WRITE(6,*)K,M
WRITE(6,*)ITR,ICT
DO 22 I=1,N1
22 WRITE(6,*)(X(I,J),J=1,N)
WRITE(6,*)(F(I),I=1,N1)
WRITE(6,*)FHI,IHI,FLO,ILO
WRITE(6,*)(XCEN(J),J=1,N)
WRITE(6,*)(XEXP(J),J=1,N)
STOP

C 51- LEITURA DO ARQUIVO DE DADOS ( DADOS5.DAT )
C VERTICE EXPANDIDO
21 READ(5,*)ITR,ICT

```

```
DO 23 I=1,N1
23 READ(5,*) (X(I,J),J=1,N)
   READ(5,*) (F(I),I=1,N1)
   READ(5,*) FHI,IHI,FLO,ILO
   READ(5,*) (XCEN(J),J=1,N)
   READ(5,*) (XEXP(J),J=1,N)

C   52- CALCULO DO VALOR DA FUNCAO OBJETIVO NO VERTICE EXPANDIDO
   CALL FOB(FO)
   FEXP=FO

C   53- TESTE DA EXPANSAO
   IF(FEXP.GT.FREF)GO TO 255

C   53.1- EXPANSAO FALHA
210 DO 250 J=1,N
250 X(ILO,J)=XREF(J)
   F(ILO)=FREF
   GO TO 300

C   53.2- EXPANSAO BEM SUCEDIDA
255 DO 260 J=1,N
260 X(ILO,J)=XEXP(J)
   F(ILO)=FEXP

C   54- CRITERIO DE CONVERGENCIA DO OTIMIZADOR
300 S1=0.
   S2=0.
   DO 305 I=1,N1
   S1=S1+F(I)
305 S2=S2+F(I)**2
   SUM=ABS((S2-S1*S1/FLOAT(N1))/FLOAT(N1))
   E=SQRT(SUM)/(S1/N1)

C   55- IMPRESSAO DE RESULTADOS
   WRITE(*,310)E
310 FORMAT(/,' ERRO = ',E12.6)

C   56- TESTE DE PARADA DO PROGRAMA (PRECISAO REQUERIDA)
   IF(E.LT.CP)GO TO 1000
   IF(ICT.GT.0)GO TO 150
   GO TO 160
```

```

C      57- COORDENADAS DO PONTO OTIMO E VALOR DA FO NO PONTO OTIMO
1000 WRITE(*,61)FHI
      61 FORMAT(/,1X,' VALOR OTIMO DA FUNCAO = ',E16.8)
      WRITE(*,62)
      62 FORMAT(/,1X,' VALOR OTIMO DAS VARIAVEIS',/)
      DO 1005 J=1,N
1005 WRITE(*,63)J,X(IHI,J)
      63 FORMAT(/,1X,' X(',I1,') = ',E16.8)

C      58- IMPRESSAO DO ARQUIVO DE DADOS   ( DADOS6.DAT )
C      FINAL DO PROGRAMA
1010 K=1
      M=0
      WRITE(6,*)K,M

C      59- ARQUIVO DE IDENTIFICACAO DO TERMINO DO PROGRAMA
      OPEN(UNIT=7, FILE='TERMINO.TXT', STATUS='NEW')
      WRITE(7,*)'!!!!!!!!!!!! FINAL DO PROGRAMA !!!!!!!!!!!!!'

      STOP
      END

C=====

C      SUBROTINA QUE CALCULA A FUNCAO OBJETIVO
C
C      1- FUNCAO OBJETIVO = RENTABILIDADE DIARIA DA UFCC-I DA REPLAN
C      OBS.: ESTA SUBROTINA E ESPECIFICA DO CASO PARTICULAR DO ESTUDO

      SUBROUTINE FOB(FO)

C      2- DECLARACAO DE VARIAVEIS
      DIMENSION FRM(50),TC(50),PM(50),FM(50),FW(50),FV(50),FE(50),PD(10)

C      3- DEFINICAO DOS ARQUIVOS DE DADOS
C      DADOS1.DAT - CONTEM OS PRECOS DE DERIVADOS E OUTROS DADOS
C      STREAM.TRN - ARQUIVO DE DADOS DEFINIDO PELO SIMULADOR

C      4- ARQUIVOS DE LEITURA E IMPRESSAO
      OPEN(UNIT=1, FILE='DADOS1.DAT', STATUS='OLD')
      OPEN(UNIT=3, FILE='STREAM.TRN', STATUS='OLD')

C      5- DESCRICAO DAS VARIAVEIS

```

C PD(i) - PRECOS DE DERIVADOS (i = 1, 2, ..., 8)
 C POCPE - PRECO DO OLEO COMBUSTIVEL PADRAO EQUIVALENTE
 C PAR - PRECO DA AGUA DE RESFRIAMENTO
 C PCIOCPE - PODER CALORIFICO DO OLEO COMBUSTIVEL PADRAO EQUIVALENTE
 C HAR - ENTALPIA DA AGUA DE RESFRIAMENTO
 C HVB - ENTALPIA DO VAPOR DE BAIXA PRESSAO
 C HVM - ENTALPIA DO VAPOR DE MEDIA PRESSAO
 C HVA - ENTALPIA DO VAPOR DE ALTA PRESSAO
 C EC - EFICIENCIA DAS CALDEIRA GERADORAS DE VAPOR
 C
 C FO - FUNCAO OBJETIVO
 C VP - VALORIZACAO DOS PRODUTOS
 C CC - CUSTO DA CARGA
 C CVB - CUSTO DO VAPOR DE BAIXA PRESSAO
 C CEE - CUSTO DA ENERGIA ELETRICA
 C CVC - CUSTO DO VAPOR CUNSUMIDO NO COMPRESSOR
 C CER - CUSTO DA ENERGIA DOS REFERVEDORES
 C CEC - CUSTO DA ENERGIA DOS CONDENSADORES
 C VER - VALORIZACAO DA ENERGIA RECUPERADA
 C PVB - PRECO DO VAPOR DE BAIXA PRESSAO
 C PVM - PRECO DO VAPOR DE MEDIA PRESSAO
 C PVA - PRECO DO VAPOR DE ALTA PRESSAO

C 6- LEITURA DO ARQUIVO DE DADOS - DADOS1.DAT
 DO 10 I=1,8

10 READ(1,*) PD(I)
 READ(1,*) POCPE, PAR, PCIOCPE, HAR, HVB, HVM, HVA, EC

C 7- DESCRICAO DO ARQUIVO DE DADOS - STREAM.TRN
 C ARQUIVO GERADO PELA OPERACAO USEROP.HCO MODIFICADA
 C SAIDA DO HYSIM PARA UNIDADES DEFINIDAS (USERUNIT.CFG)

C 7.1- VARIAVEIS DO ARQUIVO STREAM.TRN
 C NOME DA CORRENTE ---- STREAM(I)
 C FRACAO MOLAR ----- FRM(I)
 C TEMPERATURA ----- TC(I) ----- oC
 C PRESSAO ----- PM(I) ----- Kgf/cm2 man.
 C FLUXO MOLAR ----- FM(I) ----- Kgmol/h
 C FLUXO MASSICA ----- FW(I) ----- t/d
 C FLUXO VOLUMETRICA --- FV(I) ----- m3/d
 C FLUXO DE ENERGIA ---- FE(I) ----- Gcal/h

C 7.2- CORRENTES DE SAIDA DO HYSIM

C 1 - GA (GAS ACIDO)
 C 2 - GC (GAS COMBUSTIVEL)
 C 3 - GLP (GAS LIQUEFEITO DE PETROLEO)
 C 4 - GLN (NAFTA CRAQUEADA)
 C 5 - LCO (OLEO LEVE OU LIGHT CYCLE OIL))
 C 6 - OCL (OLEO CLARIFICADO)
 C 7 - CARGA (GASOLEOS)
 C 8 - GASES EXTERNOS
 C 9 - VAPOR DA T-2201
 C 10 - VAPOR DA T-2202
 C 11 - ENREGIA DA B-2202A/B
 C 12 - ENERGIA DA B-2203A/B
 C 13 - ENERGIA DA B-2207A/B
 C 14 - ENREGIA DA B-2210A/B
 C 15 - ENERGIA DA B-2211A/B
 C 16 - ENERGIA DA B-2214A/B
 C 17 - ENERGIA DA B-2217A/B
 C 18 - ENREGIA DO PRIMEIRO ESTAGIO DO COMPRESSOR - C-2201/1
 C 19 - ENERGIA DO SEGUNDO ESTAGIO DO COMPRESSOR - C-2201/2
 C 20 - CALOR ABSORVIDO NO P-2214A/B - QA-P2214A/B
 C 21 - CALOR ABSORVIDO NO P-2219 - QA-P2219
 C 22 - CALOR DO COND. DE TOPO T-2201 - QC-P2201A/H
 C 23 - CALOR DO COND. INTER-ESTAGIO - QC-P2212A/D
 C 24 - CALOR DO COND. AFTER-ESTAGIO - QC-P2213A/B
 C 25 - CALOR DO RESF. OLEO ABS. SEC. - QC-P2216A/B
 C 26 - CALOR DO COND. DE TOPO T-2206 - QC-P2218A/D
 C 27 - CALOR DO RESF. DE NAFTA - QC-P2221A/B
 C 28 - CALOR DO RESF. REF. CIRC. T03 - QC-P2230
 C 29 - CALOR RECUPERADO NO P-2208 - QR-P08/09A/B
 C 30 - CALOR RECUPERADO NO P-2209A/D - QR-P08/09C/D
 C 31 - CALOR RECUPERADO NO P-2210A/B - QR-P10A/11A
 C 32 - CALOR RECUPERADO NO P-2214/02 - QR-P14/02/03
 C 33 - CALOR RECUPERADO NO P-2204 - QR-P2204/05
 C 34 - CALOR RECUPERADO NO P-2206 - QR-P2206/07

C 8- LEITURA DO ARQUIVO DE DADOS - STREAM.TRN

DO 20 I=1,34

READ(3,*)

20 READ(3,*)FRM(I),TC(I),PM(I),FM(I),FW(I),FV(I),FE(I)

C 9- NORMALIZACAO DOS PRODUTOS DA UNIDADE

PRO=0.

DO 30 I=1,6

```

30 PRO=PRO+FW(I)
   CAR=FW(7)+FW(8)-165
   FAT=CAR/PRO
   DO 40 I=1,6
40 FW(I)=FW(I)*FAT

```

```

C   10- PARCELAS DA FUNCAO OBJETIVO ----- RENTABILIDADE (MMUS$/d)
C     FO = RECEITAS - DESPESAS

```

```

C     10.1- VALORIZACAO DOS PRODUTOS ----- (MMUS$/d)
      VP=0.
      DO 50 I=1,6
50 VP=VP+FW(I)*PD(I)
      VP=VP/1000

```

```

C     10.2- CUSTO DA CARGA ----- (MMUS$/d)
      CC=0.
      DO 60 I=7,8
60 CC=CC+FW(I)*PD(I)
      CC=CC/1000

```

```

C     10.3- CUSTO DO VAPOR DE BAIXA ----- (MMUS$/d)
C     10.3.1- CUSTO DO VAPOR DE BAIXA ----- (US$/t)
      PVB=POCPE*(HVB/PCIOCPE)*(1/EC)
      CVB=0.
      DO 70 I=9,10
70 CVB=CVB+FW(I)
      CVB=CVB*PVB/1000

```

```

C     10.4- CUSTO DA ENERGIA ELETRICA ----- (MMUS$/d)
C     10.4.1- CUSTO DO VAPOR DE MEDIA ----- (US$/t)
      PVM=POCPE*(HVM/PCIOCPE)*(1/EC)
      CEE=0.
      DO 80 I=11,17
80 CEE=CEE+ABS(FE(I))
      CEE=(24000*CEE)*(PVM/HVM)/1000

```

```

C     10.5- CUSTO DO VAPOR CONSUMIDO NO COMPRESSOR ----- (MMUS$/d)
C     10.5.1- CUSTO DO VAPOR DE ALTA ----- (US$/t)
      PVA=POCPE*(HVA/PCIOCPE)*(1/EC)
      CVC=0.
      DO 90 I=18,19
90 CVC=CVC+ABS(FE(I))

```

CVC=(24000*CVC)*(PVA/HVA)/1000

C 10.6- CUSTO DA ENERGIA DOS REFERVEDORES ----- (MMUS\$/d)

CER=0.

DO 100 I=20,21

100 CER=CER+ABS (FE(I))

CER=(24000*CER)*(PVB/HVB)/1000

C 10.7- CUSTO DA ENERGIA DOS CONDENSADORES ----- (MMUS\$/d)

CEC=0.

DO 110 I=22,28

110 CEC=CEC+ABS (FE(I))

CEC=(24000*CEC)*(PAR/HAR)/1000

C 10.8- VALORIZACAO DA ENERGIA RECUPERADA ----- (MMUS\$/d)

VER=0.

DO 120 I=29,34

120 VER=VER+ABS (FE(I))

VER=(24000*VER)*(PVB/HVB)/1000

C 11- IMPRESSAO DE RESULTADOS (VALORES DAS PARCELAS DA FO)

WRITE(*,130)VP,CC

130 FORMAT(/,' VALORIZACAO DOS PRODUTOS',E12.6,/, ' CUSTO DA CARGA',E12
*.6)

WRITE(*,140)CVB,CEE,CVC,CER,CEC,VER

140 FORMAT(/,' CUSTO DO VAPOR DE BAIXA',E12.6,/, ' CUSTO DA ENERGIA ELE
*TRICA',E12.6,/, ' CUSTO DO VAPOR DO COMPRESSOR',E12.6,/, ' CUSTO DA
*ENERGIA DOS REFERVEDORES',E12.6,/, ' CUSTO DA ENERGIA DOS CONDENSAD
*ORES',E12.6,/, ' VALORIZACAO DA ENERGIA RECUPERADA',E12.6)

C 12- CALCULO DA FUNCAO OBJETIVO ----- RENTABILIDADE DIARIA (MMUS\$/d)

FO=VP-CC-CVB-CEE-CVC-CER-CEC+VER

C 13- IMPRESSAO DE RESULTADOS (VALOR DA FUNCAO OBJETIVO)

WRITE(*,150)FO

150 FORMAT(//,' O VALOR DA FUNCAO OBJETIVO E:',E12.6,'milhares US\$/d')

RETURN

END

C=====

C 1- SUBROTINA QUE CALCULA AS COORDENADAS (VALORES DE T, P, V1 e V2)

C CRIA O ARQUIVO DE DADOS PARA O SIMULADOR - HYSIM
 C OBS.: ESTA SUBROTINA E ESPECIFICA DO CASO PARTICULAR DO ESTUDO

SUBROUTINE COR(X,N)

C 2- DECLARACAO DE VARIAVEIS
 DIMENSION X(N)

C 3- DEFINICAO DOS ARQUIVOS DE DADOS
 C DADOS2.DAT - CONTEM AS RESTRICOES DAS VARIAVEIS DE OTIMIZACAO
 C SIMUSP.CMD - DEFINE OS VALORES DAS VARIAVEIS PARA O SIMULADOR

C 4- ARQUIVOS DE LEITURA E IMPRESSAO
 OPEN(UNIT=2, FILE='DADOS2.DAT', STATUS='OLD')
 OPEN(UNIT=4, FILE='SIMUSP.CMD', STATUS='OLD')

C 5- DESCRICAO DAS VARIAVEIS
 C X(i) - VALORES DAS VARIAVEIS NORMALIZADAS (i=1,2,...N)
 C T - TEMPERATURA DE FUNDO DA FRACIONADORA PRINCIPAL
 C P - PRESSAO DE DESCARGA DO SEGUNDO ESTAGIO DO COMPRESSOR
 C V1 - RECICLO DE NAFTA ESTABILIZADA PARA A ABSORVEDORA PRIMARIA
 C V2 - RECICLO DE OLEO LEVE PARA A ABSORVEDORA SECUNDARIA
 C PT3 - PRESSAO DE TOPO DA ABSORVEDORA PRIMARIA (T-2203)
 C PF3 - PRESSAO DE FUNDO DA ABSORVEDORA PRIMARIA (T-3302)
 C PT4 - PRESSAO DE TOPO DA RETIFICADORA (T-2204)
 C PF4 - PRESSAO DE FUNDO DA RETIFICADORA (T-2204)
 C PT5 - PRESSAO DE TOPO DA ABSORVEDORA SECUNDARIA (T-2205)
 C PF5 - PRESSAO DE FUNDO DA ABSORVEDORA SECUNDARIA (T-2205)

C 6- LEITURA DO ARQUIVO DE DADOS (DADOS2.DAT)
 READ(2,*)TMIN,TMAX,PMIN,PMAX,V1MIN,V1MAX,V2MIN,V2MAX

C 7- CONVERSÃO DE VARIAVEIS NAS SUAS GRANDEZAS REAIS
 T=TMIN+X(1)*(TMAX-TMIN)
 P=PMIN+X(2)*(PMAX-PMIN)
 V1=V1MIN+X(3)*(V1MAX-V1MIN)
 V2=V2MIN+X(4)*(V2MAX-V2MIN)

C 8- DEFINICAO DAS PRESSOES DAS TORRES
 PT3=P-2.0
 PF3=P-1.6
 PT4=P-0.1
 PF4=P+0.2

PT5=P-2.4

PF5=P-2.1

```

C      9- IMPRESSAO DO ARQUIVO DE DADOS PARA O SIMULADOR   ( SIMUSP.CMD )
      WRITE(4,1)T,V2,P,V1
      1 FORMAT('HOLD',/, 'OPER T-2201 CH SPEC_VAL 3 ',E12.6,' ~ CH SPEC_VAL
      * 5 ',E12.6,' ~ Q',/, 'SP PRES DSE ',E12.6,/, 'SP LIQV RRGLN ',E12.6)
      WRITE(4,2)PT3,PF3,PT4,PF4,PT5,PF5
      2 FORMAT('OPER T-2203 CHAN PRES 1 ',E12.6,' ~ CHAN PRES 10 ',E12.6,
      *' ~ Q',/, 'OPER T-2204 CHAN PRES 1 ',E12.6,' ~ CHAN PRES 9 ',E12.6,
      *' ~ Q',/, 'OPER T-2205 CHAN PRES 1 ',E12.6,' ~ CHAN PRES 8 ',E12.6,
      *' ~ Q',/, 'GO',/, 'EXIT Y Y')

      RETURN
      END

```

A.5.3 - ARQUIVOS DE DADOS

80.00	PRECO DO GAS ACIDO	- (US\$/T)
100.00	PRECO DO GAS COMBUSTIVEL	- (US\$/t)
140.00	PRECO DO GLP	- (US\$/t) - PRECO CIF
160.00	PRECO DA GASOLINA	- (US\$/t) - PRECO FOB
140.00	PRECO DO LCO	- (US\$/t)
100.00	PRECO DO OCL	- (US\$/t)
110.00	VALORIZACAO DA CARGA	- (US\$/t)
120.00	VALORIZACAO DO GAS EXTERNO	- (US\$/t)
90.00	PRECO DO OLEO COMBUSTIVEL	- (US\$/t)
0.0066	CUSTO DA AGUA DE RESFRIAMENTO	- (US\$/m3 de agua circulada)
9833.0	PODER CALORIFICO DO OLEO COMBUSTIVEL PADRAO EQUIVALENTE	- (Kcal/Kg)
11.0	DELTA DE ENTALPIA DA AGUA DE RESFRIAMENTO	- (Kcal/Kg)
670.5	ENTALPIA DO VAPOR DE BAIXA PRESSAO	- (Kcal/Kg)
696.9	ENTALPIA DO VAPOR DE MEDIA PRESSAO	- (Kcal/Kg)
795.5	ENTALPIA DO VAPOR DE ALTA PRESSAO	- (Kcal/Kg)
.88	EFICIENCIA DAS CALDEIRAS GERADORAS DE VAPOR	
310	TEMPERATURA MINIMA DE FUNDO DA FRACIONADORA PRINCIPAL	
370	TEMPERATURA MAXIMA DE FUNDO DA FRACIONADORA PRINCIPAL	
15	PRESSAO MINIMA NA DESCARGA DO COMPRESSOR	
20	PRESSAO MAXIMA NA DESCARGA DO COMPRESSOR	
0	VAZAO MINIMA DE GASOLINA DE ABSORCAO PRIMARIA	
1000	VAZAO MAXIMA DE GASOLINA DE ABSORCAO PRIMARIA	
600	VAZAO MINIMA DE OLEO LEVE DE ABSORCAO SECUNDARIA	
1200	VAZAO MAXIMA DE OLEO LEVE DE ABSORCAO SECUNDARIA	

APÊNDICE B - RENDIMENTOS E QUALIDADE DE PRODUTOS

Os rendimentos e qualidade dos produtos obtidos numa unidade de craqueamento catalítico é bastante variável; dependendo da qualidade da carga processada, severidade de reação, tipo de catalisador e condições operacionais da unidade de um modo geral.

As tabelas B.1, B.2 e B.3 apresentam as vazões, os rendimentos e qualidade dos produtos considerados na simulação.

Tab. B.1 - Vazões e rendimentos de produtos

PRODUTOS	t/d	% Peso (*)
GA	83.0	1.1
GC	360.0	4.9
GLP	1167.0	15.8
GLN	3534.0	47.7
LCO	667.0	9.0
OCL	1107.0	15.0
COQUE	482.0	6.5
TOTAL	7400.0	100.0

(*) - Rendimentos em relação à carga da unidade (gasóleo)

Carga da unidade - 8000 m³/d ($d_{20/4} = 0.925$)

Vapor d'água injetado no reator - 165 t/d

Gases externos (Unidades de destilação) - 98.3 t/d

Os principais resultados das análises de laboratório são:

Tab. B.2 - Cromatografias dos produtos gasosos

CROMATOG. (% Vol.)	GA	GC	GLP	GASES EXT.
Hidrogênio	0.00	19.28	0.00	0.62
Oxigênio	1.02	0.07	0.00	0.30
Nitrogênio	0.34	7.03	0.00	3.63
CO	0.08	1.09	0.00	0.20
CO ₂	15.70	0.17	0.01	1.19
H ₂ S	79.52	0.03	0.01	0.47
H ₂ O	0.05	0.05	0.05	0.10
Metano	0.00	35.38	0.00	7.04
Eteno	0.19	15.18	0.25	0.29
Etano	0.20	15.18	4.43	18.65
Propeno	1.71	1.48	33.59	0.32
Propano	0.22	0.49	14.49	45.88
i-Butano	0.12	0.17	14.98	10.19
n-Butano	0.07	0.01	4.63	9.90
i-Buteno	0.52	0.95	27.38	0.25
1,3-Butadieno	0.01	0.01	0.11	0.00
i-Pentano	0.23	0.16	0.08	0.67
n-Pentano	0.00	0.08	0.00	0.30
Total	100.00	100.00	100.00	100.00

Tab. B.3 - Destilações dos produtos líquidos

% Vap. vol.	GLN	LCO	OCL	GASOLEO
0	32	189	238	302
5	43	229	308	365
10	49	243	325	394
20	58	251	346	427
30	69	257	362	449
40	82	260	377	471
50	98	263	396	492
60	116	267	419	510
70	140	270	443	530
80	161	275	470	547
90	185	282	506	572
95	202	287	534	588
100	220	295	587	611

Destilações: GLN e LCO - ASTM D-86

OCL e GASÓLEO - PEV Atm

APÊNDICE C - METODOLOGIA DE CÁLCULO DA FUNÇÃO OBJETIVO
VARIÁVEIS DE OTIMIZAÇÃO E RESTRIÇÕES

C.1 - Metodologia de cálculo da função objetivo

$$FO = \text{Receitas} - \text{Despesas} \quad (\text{US\$/d}) \quad (\text{C.1})$$

onde: $\text{Receitas} = (\text{Preço de venda dos produtos}) \cdot (\text{Produção})$

$\text{Despesas} = (\text{Preço da matéria-prima}) \cdot (\text{Consumo}) +$
 $+ (\text{Custos com Energia e Utilidades})$

1 - Custo da matéria-prima ou carga da unidade - (Cc)
Matéria-prima = Carga da fracionadora principal
(considerado o valor do Gasóleo) e gases externos

$$Cc = [\text{Preço de cada matéria-prima (US\$/t)}] \cdot [\text{Consumo (t/d)}]$$

2 - Valorização dos produtos - (Vp)
Produtos = GC, GLP, GLN, LCO e OCL

$$Vp = [\text{Preço de cada produto (US\$/t)}] \cdot [\text{Produção (t/d)}]$$

3 - Custos com Energia e Utilidades - (CeU)

A - Custo do vapor - (Cv)

A.1 - Vapor de baixa pressão (3.5 Kgf/cm² / 175 °C)

$$Pvb = P\text{ocpe (US\$/t)} \quad Hvb (\text{Kcal/Kg}) / P\text{CIocpe (Kcal/Kg)} / E\text{cald} \quad [\text{US\$/t}]$$

$$Cvb = Pvb (\text{US\$/t}) \quad \text{Consumo (t/d)} \quad [\text{US\$/d}]$$

A.2 - Vapor de média pressão (13.5 Kgf/cm² / 245 °C)

$$Pvm = POCPE(US\$/t) \cdot Hvm(Kcal/Kg) / PCIocPE(Kcal/Kg) / Ecald \quad [US\$/t]$$

$$Cvm = Pvm(US\$/t) \cdot Consumo(t/d) \quad [US\$/d]$$

A.3 - Vapor de alta pressão (88.5 Kgf/cm² / 475 °C)

$$Pva = POCPE(US\$/t) \cdot Hva(Kcal/Kg) / PCIocPE(Kcal/Kg) / Ecald \quad [US\$/t]$$

$$Cva = Pva(US\$/t) \cdot Consumo(t/d) \quad [US\$/d]$$

$$\text{Logo: } Cv = Cvb + Cvm + Cva \quad [US\$/d]$$

B - Custo da energia consumida nos refervedores - (Cer)

$$Cer = Er(Kcal/d) / Hvm(Kcal/t) \cdot Pvm(US\$/t) \quad [US\$/d]$$

C - Custo da energia consumida nos condensadores - (Cec)

$$Cec = Ec(Kcal/d) / Har(Kcal/t) \cdot Par(US\$/t) \quad [US\$/d]$$

D - Valorização da energia recuperada nos trocadores - (Ver)

$$Ver = Et(Kcal/d) / Hvm(Kcal/t) \cdot Pvm(US\$/t) \quad [US\$/d]$$

E - Custo da energia elétrica consumida - (Cee)

$$Cee = Ee(Kcal/d) / Hvm(Kcal/t) \cdot Pvm(US\$/t) \quad [US\$/d]$$

Portanto, o custo total com energia e utilidades será:

$$CeU = Cv + Cer + Cec - Ver + Cee \quad [US\$/d]$$

E a Função Objetivo pode ser finalmente calculada como:

$$FO = Vp - Cc - Ceu \quad [US\$/d]$$

C.2 - Variáveis de otimização

Na seção de fracionamento e recuperação dos produtos da unidade de craqueamento catalítico fluido, as variáveis de maior influência na rentabilidade da unidade são:

1 - Temperatura de fundo da fracionadora principal.

É a variável de maior influência no fracionamento GLN/LCO e principalmente no fracionamento LCO/OCL. Em situações onde não se dá importância ao fracionamento LCO/OCL, (ambos estejam sendo usados como diluentes de óleo combustível), o efeito desta variável reside apenas na qualidade do fracionamento GLN/LCO e recuperação de energia. O ponto ótimo de operação foi determinado para as duas condições operacionais, ou seja, situações onde se dá importância ao fracionamento LCO/OCL (valorizando diferentemente esses dois produtos) e situações em que o fracionamento é irrelevante (mesmo valor dos dois produtos).

2 - Pressão de descarga do segundo estágio do compressor.

A variável de maior influência na recuperação de gases é a pressão de operação da área fria. Obtendo-se maior recuperação de produtos nobres para pressões mais elevadas, em contrapartida os custos operacionais aumentam com a pressão de descarga do compressor devido ao maior consumo de vapor na turbina do turbo compressor.

A pressão de operação da área fria está diretamente relacionada à pressão de descarga do compressor, e na simulação considerou-se:

Pressões da área fria:

Pressão de referência - Pressão de descarga do segundo estágio do compressor - Pdse.

- . Pressão de descarga do primeiro est. comp. = $0.2 Pdse + 0.6$
- . Pressão de topo da absorvedora primária = $Pdse - 2.0$
- . Pressão de fundo da absorvedora primária = $Pdse - 1.6$
- . Pressão de topo da absorvedora secundária = $Pdse - 2.4$
- . Pressão de fundo da absorvedora secundária = $Pdse - 2.1$
- . Pressão de topo da retificadora = $Pdse - 0.1$
- . Pressão de fundo da retificadora = $Pdse + 0.2$

(*) - Pressões em Kgf/cm² man.

3 - Reciclo de nafta estabilizada para absorvedora primária.

A nafta estabilizada tem grande poder de absorção de componentes leves do GLP, por ter maior afinidade pelos componentes na faixa do C₃, comparada ao líquido do vaso de topo da fracionadora, além de aumentar a relação líquido/vapor na absorvedora. O reciclo de nafta estabilizada tem, por outro lado, o inconveniente de aumentar os custos operacionais e aumentar a absorção de componentes indesejados do GC, H₂S por exemplo.

4 - Reciclo de óleo leve de absorção secundária.

O efeito do óleo leve de absorção secundária é muito semelhante a nafta estabilizada de absorção primária, com vantagem do maior poder de absorção de componentes na faixa da gasolina.

Vale ressaltar que quaisquer outras variáveis operacionais podem ser escolhidas como variáveis de otimização, bem como qualquer outra função objetivo pode ser definida, bastando para isto, fazer algumas adaptações no programa otimizador.

C.3 - Restrições nas variáveis de otimização

Foram estabelecidos faixas de variações permissíveis para cada variável em função das restrições do processo, limitações de equipamentos e limites de especificações de produtos. As faixas aceitáveis para cada variável de otimização foram:

1 - Temperatura de fundo da fracionadora principal.

Limite inferior = 310 °C limitada pela qualidade do fracionamento
Limite superior = 370 °C limitada pela possibilidade de formação de coque na região de fundo da fracionadora.

2 - Pressão de descarga do segundo estágio do compressor.

Limite inferior = 15 Kgf/cm² man. limitada pela recuperação de gases.

Limite superior = 20 Kgf/cm² man. limitada pela pressão de projeto da área fria e teor de C₂⁻ no GLP (PVR do GLP).

3 - Reciclo de nafta estabilizada para absorvedora primária.

Limite inferior = não tem (pode ser zerado o reciclo de nafta).

Limite superior = 1000 m³/d. limitada pela capacidade da absorvedora primária (arraste) e teor de C₂⁻ no GLP (PVR do GLP).

4 - Reciclo de óleo leve de absorção secundária.

Limite inferior = 600 m³/d, condições de projeto da torre.

Limite superior = 1200 m³/d, condições de projeto da torre.

BIBLIOGRAFIA CONSULTADA

1. AHERN, J. E. *The exergy method of energy systems analysis*. New York: John Wiley, 1980.
2. AMERICAN PETROLEUM INSTITUTE. *Technical data book Petroleum refinin.* 2. ed. Washington: 1983. 3v.
3. BEVERIDGE, Gordon S. G.; SCHECHTER, Robert Samuel. *Optimization: Theory and practice*. Tokio: McGraw-Hill, 1970.
4. BOX, M. J. A new methods of constrained optimization and a comparison with other methods. *Computer J.* V.8 p.42-52, 1965.
5. CASTRO, A. R.; BERNARDO, L. F. *Fracionadora e recuperação de gases*. Rio de Janeiro: PETROBRÁS.SEREC.CEN-SUD, 1991. (IV Curso funcional de craqueamento catalítico fluidizado).
6. EDGAR, Thomas F.; HIMMELBLAU, David Mautner. *Optimization of chemical processes*. New York: McGraw-Hill, 1988. 652p.
7. HIMMELBLAU, David Mautner. *Applied nonlinear programming*. New York: McGraw-Hill, 1972. 448p.
8. _____ . *Process analysis by statistical methods*. New York: John Wiley, 1969.
9. HYPROTECH. *Hysim user`s guide and reference manual*. Calgary: Hyprotech Ltd, 1991.
10. LORENZ, T. B. *Chem. Engng. Prog.* 1989 (10) 50.
11. MAXWELL, J. B. *Data book on hydrocarbons*. Princeton: D. Van Nostrand Company, Inc. 1950. 259p.
12. MORAES JÚNIOR, D. *Recomendações para elaboração de relatórios de experimentos didáticos e de iniciação científica*. São Carlos: Gráfica da UFScar, 1988.
13. Moran M. J. *Availability analysis: A guide to efficient energy use*. Englewoot Clissf: Prentice-Hall, 1982.
14. MORRIS, C. G.; SIM, W. D.; VYSNIAUSKAS T. *Ingeniería asistida por computadora*. Calgary: Hyprotech Ltd. 1985.
15. NELSON, W. L. *Petroleum refinery engineering*. 4. ed. New York: McGraw-Hill, 1958.

16. NORMAS ABNT - Associação Brasileira de Normas Técnicas
17. NORMAS ASTM - American Society for Testing Materials
18. PEDROSA NETO, Pedro. *Efeito da temperatura de fundo da fracionadora principal*. Paulínia: PETROBRÁS.REPLAN, 1991.
19. _____.; MORI, Milton. *Simulação de uma planta industrial usando simulador de processos*. In: CONGRESSO BRASILEIRO DE ENGENHARIA QUÍMICA, 9, Salvador. Trabalhos técnicos. Salvador: Associação Brasileira de Engenharia Química, 1992. 3v. V.2, p.33-40.
20. PERRY, Robert H.; GREEN, Don W. *Perry's Chemical engineers' handbook*. 6. ed. New York: McGraw-Hill, 1984.
21. REIS, José Antonio Duarte. *Simulação de uma unidade de síntese de amônia*. Dissertação (mestrado em Engenharia Química) Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, 1992.
22. RODRIGUES, Paulo Sérgio Barbosa. *Compressores industriais*. Rio de Janeiro: Editora Didática e Científica, 1991. 515p.
23. SGARBOSA, Marcelo. *Otimização on-line de uma coluna debutanizadora*. Dissertação (mestrado em Engenharia Química) Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, 1993. 100p.
24. SHAH, M. J. *Ind. Engng. Chem.* 1967 59(1) 73.
25. SILVA, Marcelo Bacci da. *Desenvolvimento de um simulador PVT para caracterizar misturas de hidrocarbonetos*. Dissertação (mestrado em Engenharia Química) - Faculdade de Engenharia Mecânica, Universidade Estadual de Campinas, 1991. 99p.
26. SPANDRI, Renato. *Modelagem e otimização de planta de estireno*. Dissertação (mestrado em Engenharia Química) - Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, 1992.
27. SPENDLEY, W.; HEXT, G. R.; HIMSWORTH, F. R. Sequential application of simplex designs in optimization and evolutionary operation. *Technometrics*. n.4, p.441-461, 1962.
28. VYSNIAUSKAS, T. *Computer-aided design and the effect of personal computers*. Calgary: Hyprotech Ltd. [1989].
29. WILDE, Douglas J.; BEIGHTLER, Charles S. *Foundations of optimization*. New Jersey: Prentice-Hall, 1979. 480p.

ABSTRACT

This paper concerns a simulation, forecast of performance and optimization of the section of fractionation and recovery of effluent products from the reactor of the Fluid Catalytic Cracking Unit, FCCU-I, of Paulínia Refinery (REPLAN).

The unit has been simulated by using the HYSIM (Hyprotech Simulator), a commercial process simulator widely used in the oil industry.

Simulation has been carried out to the point that it presented results consistent with those obtained in practice, both in what concerns operational conditions and yields of products obtained in the unit as well as quality of products obtained through laboratory analyses.

Performance of the unit under different operational conditions, with respect to the efficiency of the recovery of noble products and distribution of the components of greater interest in the various streams, has been analysed. Such analysis has been made for each variable of interest, individually.

A computer program has been developed - a Modified Simplex type optimizer (Box Method), which interfaces with the process simulator, enabling to find the values of the operational variables of optimization, which maximizes the objective function.

The objective function portrays the daily profitability of the unit, taking into account: raw material costs, valorization of the products and costs of energy and utilities involved in the process.

The conclusion has been reached that the operational optimum of the plant is a function of the price profile of the petroleum derivatives and costs of utilities.