

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
ESCOLA DE ENGENHARIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

**Recuperação de Águas de Processos -
Desenvolvimento de um Problema Padrão**

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

Daniela Fontana

Porto Alegre

2002

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
ESCOLA DE ENGENHARIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

Recuperação de Águas de Processos - Desenvolvimento de um Problema Padrão

Daniela Fontana

Dissertação de Mestrado apresentada como
requisito parcial para obtenção do título de
Mestre em Engenharia

Área de concentração:

Pesquisa e Desenvolvimento de Processos.

Orientador:

Prof. Dr. Argimiro Resende Secchi

Co-orientador:

Prof. Dr. Jorge Otávio Trierweiler

Porto Alegre

2002

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
ESCOLA DE ENGENHARIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

A Comissão Examinadora, abaixo assinada, aprova a Dissertação ***Recuperação de Águas de Processos - Desenvolvimento de um Problema Padrão***, elaborada por Daniela Fontana, como requisito parcial para obtenção do Grau de Mestre em Engenharia.

Comissão Examinadora:

Prof.^a. Dr.^a. Isabel Cristina Tessaro

Eng. Dr. Luís Gustavo Soares Longhi

Prof.^a. Dr.^a. Marla Azário Lansarin

Agradecimentos

Agradeço

Primeiramente, a Deus pela vida e pela oportunidade de conviver com pessoas que me ajudam a buscar meus ideais e crescer, tanto profissionalmente, como pessoalmente.

Aos meus orientadores: Argimiro Resende Secchi e Jorge Otávio Trierweiler pelo incentivo, ensinamento e diversas horas despendidas colaborando no meu trabalho. Obrigada por atuarem como verdadeiros mestres. Não posso deixar de agradecer ao professor visitante da Alemanha, Jorg Thöming, pela sua grande contribuição em meu trabalho, ao sugerir o problema padrão proposto.

A minha família que sempre me deu todo o apoio e incentivo, em todos os sentidos, essenciais para poder realizar meus objetivos.

As minhas amigas do pensionato, pela amizade, ajuda, incentivo e colaboração em meu trabalho.

Aos meus colegas de mestrado e todo o pessoal do LASCIP, pela ajuda em meu trabalho e pela amizade.

Ao engenheiro Moisés Augusto pela amizade e colaboração em meu trabalho de dissertação.

Aos professores do departamento de engenharia química, principalmente da pós-graduação, por empenhar-se em promover melhorias em nosso curso.

Ao meu Nahuel, muito obrigada pelos conselhos em todos os aspectos de minha vida e, principalmente, pelos carinhos que me fazem tão feliz.

Resumo

Atualmente, a consciência de que os recursos naturais são esgotáveis e que a geração de poluentes deve ser evitada para impedir um sério problema ambiental, são aspectos que já estão sendo considerados na indústria química. Isto se reflete em uma das principais preocupações enfrentadas por este setor: a minimização de efluentes. O presente trabalho tem por objetivo desenvolver um problema padrão na área de integração mássica para recuperação de água de processos, sugerindo uma metodologia que ajude a solucionar esta grande preocupação.

O problema padrão proposto é suficientemente simples para sua rápida compreensão, e complexo o suficiente para representar uma típica situação industrial. Na metodologia empregada, técnicas de integração mássica como: reuso, reciclo e regeneração são utilizadas, alternativamente ao tratamento de final de tubulação, a fim de reduzir a demanda de água consumida e minimizar a quantidade de efluente líquido tratado e descartado. A síntese da rede de integração mássica foi feita através da construção de uma superestrutura, contendo todas as possíveis configurações em potencial para o sistema proposto. A solução do problema foi obtida via programação não linear mista inteira (MINLP). Um estudo comparativo entre as diversas configurações obtidas foi realizado. Uma análise da operabilidade das principais configurações da rede de integração mássica foi feita para garantir que a rede sintetizada seja operável.

Palavras chaves: recuperação de águas de processos, integração mássica, redução de efluente líquido, superestrutura, operabilidade de redes de integração.

Abstract

Nowadays, the conscience that natural resources are exhaustive and pollutant generation should be avoided to prevent serious environmental problems, are aspects that already are considered in the chemical industry. This fact reflects in one of the primary concerns faced by the industry: the wastewater minimization. The present work has as goal: to develop a benchmark problem in the mass integration area for water process recovery, suggesting one approach that helps to solve it.

The proposed benchmark problem is sufficiently simple for a fast understanding, and sufficiently complex to represent a typical industrial scenery. Alternatively to the end-of-pipe treatment, in the employed methodology, mass integration techniques as reuse, recycle, and regeneration are used to reduce the water consumption and to minimize the amount of the wastewater to be treated and discharged. The mass exchange network design was done through the building of a superstructure that embeds all potential configurations of interest for the proposed problem. The solution of this problem was obtained by mixed-integer nonlinear programming (MINLP). A comparative study among the several obtained configurations was carried out. An operability analysis of the main mass exchange network configurations was done in order to guarantee that the synthesized net be possible of operating.

Keywords: water process recovery, mass integration, wastewater reduction, superstructure, mass exchange network operability.

Sumário

Introdução	1
1.1 Motivação.....	1
1.2 Objetivo.....	2
1.3 Estrutura da dissertação.....	2
Redução de Poluentes Através da Integração de Processos	5
2.1 Evolução histórica.....	5
2.2 Definição de Integração de Processos.....	7
2.2.1 Síntese de Processos.....	8
2.2.2 Análise de Processos.....	10
2.2.3 Otimização de Processos.....	10
2.3 Técnicas de integração mássica de processos	10
2.3.1 Tecnologia Pinch.....	12
2.3.2 Otimização via programação matemática	14
Programação matemática versus tecnologia pinch	15
Projeto da Rede de Integração Mássica	17
3.1 Síntese da superestrutura.....	17
3.2 Formulação do tipo NLP	20
3.3 Formulação do tipo MINLP	23
3.4 Formulação do tipo LP.....	24
Desenvolvimento de um Problema Padrão	27
4.1 Descrição do problema.....	27
4.2 Síntese da Superestrutura	29
4.3 Formulação do problema de otimização	29
4.4 Modelo matemático.....	30
4.5 Solução do problema de otimização	32
Estudo da Operabilidade da Rede de Integração.....	39
5.1 Caracterização do modelo	39
5.2 Modelo dinâmico	40
5.2.1 Equações do modelo	41
Modelagem dos processos.....	41
Modelagem dos regeneradores.....	43
Definição da conexão entre as unidades, água fresca de makeup e efluente líquido eliminado pelo sistema.	44
5.2.2 Especificações	46
5.3 Modelo linearizado.....	46
5.4 Critérios de análise.....	48
5.4.1 RGA (matriz de ganhos relativos).....	51
5.4.2 Condicionamento mínimo do sistema.....	52
5.4.3 RHP-zeros (zeros no semi plano positivo).....	52
5.4.4 RPN (índice de desempenho robusto).....	53

5.5 Resultados	54
5.5.1 Análise considerando apenas os makeups e splits existentes	54
Estrutura de controle da configuração $F_{\text{máx}} = 1,4 \text{ t/h}$	55
Estruturas de controle da configuração $F_{\text{máx}} = 2,2 \text{ t/h}$	55
Estruturas de controle da configuração $F_{\text{máx}} = 5 \text{ t/h}$	56
Resultados da primeira análise	57
Conclusões da primeira análise	61
5.5.2 Estudo da adição de graus de liberdade no sistema	61
Análise da adição do split	62
Resultados da análise da adição do split	62
Conclusões da análise da adição do split	66
Análise da adição de makeup	66
Resultados da análise da adição de makeup	67
Conclusões da análise da adição de makeup	70
Análise comparativa das melhores estruturas de controle	71
5.5.3 Conclusões gerais do estudo de operabilidade	72
Conclusões e Sugestões para Trabalhos Futuros	75
Nomenclatura	79
Glossário	81
Soluções dos Problemas de Otimização	83
Matrizes da Linearização do Modelo Dinâmico	91
Linearização das unidades	92
Linearização dos processos	92
Linearização dos regeneradores	94
Linearização da conexão entre as unidades, água fresca de <i>makeup</i> e efluente líquido eliminado pelo sistema	95
Subsistema Divisor de Correntes	97
Subsistema Água Fresca	97
Subsistema Efluente Líquido	97
Matrizes RGA	99
Resultados da primeira análise	99
Resultados da análise da adição do <i>split</i>	102
Resultados da análise da adição de <i>makeup</i>	103
Referências Bibliográficas	107

Lista de figuras

Figura 2.1: Comparação entre o tratamento <i>end-of-pipe</i> e o tratamento distribuído.....	6
Figura 2.2: Síntese e análise de processos.....	8
Figura 2.3: Diagrama “cebola” usado na síntese de processos (SMITH, 1995).....	9
Figura 2.4: Representação total da alocação de massa de um sistema.	11
Figura 2.5: Reuso, regeneração-reuso e regeneração-reciclo.	12
Figura 2.6: Unidades de sistemas de água segundo a tecnologia <i>pinch</i>	13
Figura 2.7: Diagrama <i>Pinch</i>	14
Figura 3.1: Esquema da superestrutura.....	19
Figura 3.2: Esquema do balanço de massa global do sistema.	20
Figura 4.2: Esquema da superestrutura.....	29
Figura 4.3: Configuração para $F_{m\acute{a}x} = 1$ t/h.	33
Figura 4.4: Configuração para $F_{m\acute{a}x} = 1,4$ t/h.	33
Figura 4.5: Configuração para $F_{m\acute{a}x} = 2$ t/h.	34
Figura 4.6: Configuração para $F_{m\acute{a}x} = 2,2$ t/h.	34
Figura 4.7: Configuração para $F_{m\acute{a}x} = 4$ t/h.	35
Figura 4.8: Configuração para $F_{m\acute{a}x} = 5, 6, 7$ e 9 t/h.....	35
Figura 4.9: Resultados da otimização da superestrutura: distância total <i>versus</i> vazão de água fresca para <i>makeup</i>	36
Figura 4.10: Resultados da otimização da superestrutura: redução no consumo de água <i>versus</i> vazão de água fresca para <i>makeup</i>	36
Figura 4.11: Resultados da otimização da superestrutura: número de ciclos/reusos <i>versus</i> vazão de água fresca para <i>makeup</i>	37
Figura 5.1: Esquema do controlador para o <i>holdup</i> dos processos.....	42
Figura 5.2: Esquema dos regeneradores.	43
Figura 5.3: Entradas e saídas do sistema usadas na linearização da rede.	47
Figura 5.4: Esquema da malha de conexões usada para a linearização da rede.	48
Figura 5.5: Representação das variáveis manipuladas na configuração $F_{m\acute{a}x} = 1,4$ t/h.	49
Figura 5.6: Representação das variáveis manipuladas na configuração $F_{m\acute{a}x} = 2,2$ t/h.	50
Figura 5.7: Representação das variáveis manipuladas na configuração $F_{m\acute{a}x} = 5$ t/h.	51
Figura 5.8: Variáveis manipuladas na configuração $F_{m\acute{a}x} = 1,4$ t/h.....	55
Figura 5.9: Variáveis manipuladas na configuração $F_{m\acute{a}x} = 2,2$ t/h.....	56
Figura 5.10: Variáveis manipuladas na configuração $F_{m\acute{a}x} = 5$ t/h.....	57
Figura 5.11: Curvas do RPN para as melhores estruturas de controle na primeira análise da operabilidade.	60
Figura 5.12: Condicionamento mínimo das melhores estruturas de controle na primeira análise da operabilidade.....	60
Figura 5.13: Variáveis manipuladas na configuração $F_{m\acute{a}x} = 2,2$ t/h com a adição do <i>split</i>	62
Figura 5.14: Curvas do RPN para as melhores estruturas de controle na análise da adição do <i>split</i>	65
Figura 5.15: Número de condicionamento mínimo das melhores estruturas de controle na análise da adição do <i>split</i>	65

Figura 5.16: Variáveis manipuladas na configuração $F_{\text{máx}} = 1,4$ t/h com a adição do <i>makeup</i> do processo 2.	67
Figura 5.17: Variáveis manipuladas na configuração $F_{\text{máx}} = 1,4$ t/h com a adição do <i>makeup</i> do processo 4.	67
Figura 5.18: Curvas do RPN para as melhores estruturas na análise da adição do <i>makeup</i>	70
Figura 5.19: Condicionamento mínimo das melhores estruturas na análise da adição do <i>makeup</i>	70
Figura 5.20: Curvas do RPN para as melhores estruturas de cada configuração.	72
Figura C.1: Configuração para $F_{\text{máx}} = 1$ t/h.	83
Figura C.2: Configuração para $F_{\text{máx}} = 1,4$ t/h.	84
Figura C.3: Configuração para $F_{\text{máx}} = 2$ t/h.	85
Figura C.4: Configuração para $F_{\text{máx}} = 2,2$ t/h.	86
Figura C.5: Configuração para $F_{\text{máx}} = 4$ t/h.	87
Figura C.6: Configuração para $F_{\text{máx}} = 5, 6, 7$ e 9 t/h.....	88
Figura D.1: Esquema do sistema usado na linearização da rede.	91

Lista de tabelas

Tabela 2.1: Comparação entre as duas principais técnicas de integração mássica para sistemas que fazem uso de água.....	15
Tabela 4.1: Vazão operacional, carga de poluente e concentração máxima de poluente especificadas na otimização da superestrutura.....	28
Tabela 4.2: Distância entre as unidades especificadas na otimização da superestrutura.....	28
Tabela 5.1: Especificações do modelo dinâmico da superestrutura.....	46
Tabela 5.2: Variáveis controladas das configurações analisadas.....	49
Tabela 5.3: Variáveis manipuladas na configuração $F_{m\acute{a}x} = 1,4$ t/h.....	49
Tabela 5.4: Variáveis manipuladas na configuração $F_{m\acute{a}x} = 2,2$ t/h.....	50
Tabela 5.5: Variáveis manipuladas na configuração $F_{m\acute{a}x} = 5$ t/h.....	50
Tabela 5.6: Estrutura de controle analisada na configuração $F_{m\acute{a}x} = 1,4$ t/h.....	55
Tabela 5.7: Estruturas de controle analisadas na configuração $F_{m\acute{a}x} = 2,2$ t/h.....	56
Tabela 5.8: Estruturas de controle analisadas na configuração $F_{m\acute{a}x} = 5$ t/h.....	56
Tabela 5.9: RHP-zeros das estruturas de controle analisadas.....	57
Tabela 5.10: RPN das estruturas de controle analisadas.....	58
Tabela 5.11: RGA da estrutura de controle ES1-1.....	58
Tabela 5.12: RGA da estrutura de controle ES2-2.....	59
Tabela 5.13: RGA da estrutura de controle ES5-1.....	59
Tabela 5.14: RGA da estrutura de controle ES5-2.....	59
Tabela 5.15: RGA da estrutura de controle ES5-3.....	59
Tabela 5.16: Estruturas de controle analisadas com o <i>split</i> adicionado como variável manipulada.....	62
Tabela 5.17: RHP-zeros das estruturas de controle estudadas na análise da adição do <i>split</i>	63
Tabela 5.18: RPN das estruturas de controle estudadas na análise da adição do <i>split</i>	63
Tabela 5.19: RGA da estrutura de controle ES2-10.....	64
Tabela 5.20: RGA da estrutura de controle ES2-9.....	64
Tabela 5.21: Estruturas de controle analisadas com o <i>makeup</i> do processo 2 adicionado como variável manipulada.....	66
Tabela 5.22: Estruturas de controle analisadas com o <i>makeup</i> do processo 4 adicionado como variável manipulada.....	67
Tabela 5.23: RHP-zeros das estruturas de controle estudadas na análise da adição dos <i>makeups</i>	68
Tabela 5.24: RPN das estruturas de controle estudadas na análise da adição dos <i>makeups</i>	68
Tabela 5.25: RGA da estrutura de controle ES1-7.....	69
Tabela 5.26: RGA da estrutura de controle ES1-8.....	69
Tabela 5.27: RPN das melhores estruturas de controle de cada configuração.....	71
Tabela A.1: Lista de índices da otimização da superestrutura.....	79
Tabela A.2: Lista de variáveis da otimização da superestrutura.....	79
Tabela A.3: Lista de índices do modelo dinâmico da superestrutura.....	80
Tabela A.4: Lista de variáveis do modelo dinâmico da superestrutura.....	80
Tabela C.1: Soluções do problema de otimização: $F_{m\acute{a}x} = 1$ t/h.....	83

Tabela C.2: Conexões do problema de otimização: $F_{\text{máx}} = 1$ t/h.....	84
Tabela C.3: Soluções do problema de otimização: $F_{\text{máx}} = 1,4$ t/h.....	84
Tabela C.4: Conexões do problema de otimização: $F_{\text{máx}} = 1,4$ t/h.....	85
Tabela C.5: Soluções do problema de otimização: $F_{\text{máx}} = 2$ t/h.....	85
Tabela C.6: Conexões do problema de otimização: $F_{\text{máx}} = 2$ t/h.....	86
Tabela C.7: Soluções do problema de otimização: $F_{\text{máx}} = 2,2$ t/h.....	86
Tabela C.8: Conexões do problema de otimização: $F_{\text{máx}} = 2,2$ t/h.....	87
Tabela C.9: Soluções do problema de otimização: $F_{\text{máx}} = 4$ t/h.....	87
Tabela C.10: Conexões do problema de otimização: $F_{\text{máx}} = 4$ t/h.....	88
Tabela C.11: Soluções do problema de otimização: $F_{\text{máx}} = 5, 6, 7$ e 9 t/h.....	88
Tabela C.12: Conexões do problema de otimização: $F_{\text{máx}} = 5, 6, 7$ e 9 t/h.....	89
Tabela E.1: RGA da estrutura de controle ES1-1.....	99
Tabela E.2: RGA da estrutura de controle ES2-1.....	99
Tabela E.3: RGA da estrutura de controle ES2-2.....	100
Tabela E.4: RGA da estrutura de controle ES2-3.....	100
Tabela E.5: RGA da estrutura de controle ES2-4.....	100
Tabela E.6: RGA da estrutura de controle ES2-5.....	100
Tabela E.7: RGA da estrutura de controle ES5-1.....	101
Tabela E.8: RGA da estrutura de controle ES5-2.....	101
Tabela E.9: RGA da estrutura de controle ES5-3.....	101
Tabela E.10: RGA da estrutura de controle ES5-4.....	101
Tabela E.11: RGA da estrutura de controle ES5-5.....	102
Tabela E.12: RGA da estrutura de controle ES2-6.....	102
Tabela E.13: RGA da estrutura de controle ES2-7.....	102
Tabela E.14: RGA da estrutura de controle ES2-8.....	102
Tabela E.15: RGA da estrutura de controle ES2-9.....	103
Tabela E.16: RGA da estrutura de controle ES2-10.....	103
Tabela E.17: RGA da estrutura de controle ES1-2.....	103
Tabela E.18: RGA da estrutura de controle ES1-3.....	103
Tabela E.19: RGA da estrutura de controle ES1-4.....	104
Tabela E.20: RGA da estrutura controle ES1-5.....	104
Tabela E.21: RGA da estrutura de controle ES1-6.....	104
Tabela E.22: RGA da estrutura de controle ES1-7.....	104
Tabela E.23: RGA da estrutura de controle ES1-8.....	105
Tabela E.24: RGA da estrutura de controle ES1-9.....	105

*“Se o desejo de alcançar a meta estiver
vigorosamente vivo dentro de nós, não nos faltará
forças para encontrar os meios de alcançá-la e
traduzi-la em atos.”*

Albert Einstein

Capítulo 1

Introdução

1.1 Motivação

Processos na indústria química e petroquímica fazem intensivo uso de água em seu funcionamento normal. Como resultado, correntes de efluente líquido contendo diversos poluentes (fenóis, amônia, benzeno, óleo, metais dissolvidos,...) são geradas, criando um sério problema de poluição ambiental. A recuperação da água do efluente líquido têm sido objeto de muitos programas de melhorias da indústria, e a legislação ambiental existe para regular e estabelecer as metas para estes esforços.

Existem diversas medidas para assegurar a qualidade da água de descarte. Por exemplo, o carbono orgânico total (COT), a demanda bioquímica de oxigênio (DBO) e a demanda química de oxigênio (DQO) indicam a quantidade de matéria orgânica. Óleos e graxas (OeG) e hidrocarbonetos totais de petróleo (THP) medem a presença de óleo, graxas e outros hidrocarbonetos, respectivamente. As características físicas do efluente, tais como: total de sólidos suspensos (TSS), pH, cor e odor, também devem ser ajustados. Segundo BAGAJEWICZ (2000), em complacência com o ato das Águas Limpas de 1977 do EPA (*Environmental Protection Agency*), Estados Unidos, o efluente líquido deve ser tratado antes do descarte.

Há duas décadas, esforços significativos têm sido direcionados para a redução do desperdício industrial em geral, incluindo redução no efluente líquido. O foco desses esforços tem sido trocado gradualmente e, ao invés de um controle de poluição a jusante, que é uma técnica mais agressiva, tenta-se prevenir a poluição em primeiro lugar.

Durante décadas, o tratamento de final de tubulação foi usado para atingir o limite de descarga imposto pela legislação. Devido a motivos como: escassez da água, aumento nos custos de energia e regulamentações mais restritas no efluente líquido, mudou-se o ponto de vista em relação ao uso da água. Quando os poluentes são seletivamente removidos durante o processo, o efluente líquido pode ser reutilizado e/ou reciclado. Este procedimento,

denominado de integração mássica do processo, leva a uma redução no consumo total de água fresca, bem como na quantidade de efluente que deve ser tratado e descartado.

Segundo YANG *et al.* (2000), uma das principais preocupações da prevenção de poluentes nas indústrias de processos e manufaturas é a minimização de efluente líquido. Assim, de acordo com as tendências atuais de tecnologias mais limpas, neste trabalho, é apresentada uma alternativa para projeto de sistemas que fazem uso de água em seu processamento, usando técnicas que contribuem para reduzir um dos principais problemas enfrentados atualmente pela indústria.

1.2 Objetivo

O presente trabalho tem o objetivo de desenvolver um problema padrão na área de integração mássica com ênfase na recuperação de água de processos. Técnicas de integração mássica como: reuso, reciclo e regeneração são utilizadas com intuito de reduzir a demanda de água e minimizar a quantidade de efluente líquido a ser tratado e descartado. A síntese da rede de integração mássica foi feita através da construção de uma superestrutura, contendo todas as possíveis configurações em potencial para o sistema proposto. A solução do problema proposto foi obtida via programação não linear mista inteira (MINLP). Um estudo comparativo entre as diversas configurações obtidas foi realizado. Uma análise da operabilidade das principais configurações da rede de integração mássica foi feita, para garantir que a rede sintetizada seja possível de operar.

1.3 Estrutura da dissertação

Esta dissertação é estruturada em seis capítulos, dentro dos quais é apresentado o desenvolvimento do problema padrão para a recuperação de águas, cujas soluções obtidas foram analisadas e comparadas, fundamentadas em embasamentos teóricos encontrados na literatura.

No capítulo 2 é apresentada uma revisão bibliográfica enfatizando o uso de integração mássica, como uma técnica alternativa e mais eficiente que o tratamento de final de tubulação. Apresentam-se também as diferentes técnicas usadas para fazer a integração mássica de processos. No desfecho do capítulo, é feita uma comparação entre as duas principais técnicas de integração mássica.

O capítulo 3 apresenta as diversas formulações propostas para o projeto de uma rede de integração mássica para recuperação de água de processos, através da abordagem de otimização via programação matemática. Como critério comparativo, algumas formulações encontradas na literatura são também mencionadas.

No capítulo 4 é apresentado o desenvolvimento do problema padrão, na área de integração mássica, para a recuperação de água de processos. Primeiramente é feita uma descrição do problema, apresentando o sistema proposto e suas respectivas restrições operacionais. A solução do problema é obtida através da otimização da superestrutura criada,

utilizando a formulação do capítulo 3. As diversas configurações da superestrutura obtidas como resultado da otimização, são comparadas segundo critérios econômicos e estruturais.

O capítulo 5 contém a metodologia usada na análise da operabilidade da rede de integração mássica e a análise, propriamente dita, usando ferramentas disponíveis na literatura. Apresenta-se, inicialmente, o modelo dinâmico da superestrutura e sua linearização, necessários para prever o comportamento dinâmico do sistema e utilizar as ferramentas de análise da operabilidade. Neste capítulo, também está incluída a caracterização do modelo, quanto as suas variáveis controladas e manipuladas. Realiza-se, então, uma análise comparativa entre as configurações mais significativas da superestrutura quanto a facilidade de ser operada. Além disso, um estudo é feito a fim de deixar as configurações mais flexíveis operacionalmente.

Finalmente, no capítulo 6 são relatadas as conclusões gerais do trabalho e algumas sugestões para trabalhos futuros.

Capítulo 2

Redução de Poluentes Através da Integração de Processos

2.1 Evolução histórica

O impacto ambiental é um dos mais sérios desafios que as indústrias químicas e petroquímicas enfrentam atualmente. Somente nos EUA, está estimado que 12 bilhões de toneladas de resíduos são desperdiçados anualmente (ALLEN & ROSSELOT, 1994). A magnitude do desperdício industrial aliado ao crescimento da consciência ambiental, frente as consequências do descarte dos efluentes aos recursos naturais, têm feito com que as indústrias adotem medidas mais significativas para melhorar essa situação.

Na década de 70, a principal estratégia usada pelas indústrias de processos para a redução de poluição foi o tratamento de final de tubulação (*end-of-pipe*). Esta técnica é baseada na captação de correntes exaustas, que são submetidas a uma série de tecnologias apropriadas, utilizadas para deixá-las em níveis aceitáveis para o despejo. Apesar de ser uma técnica muito utilizada atualmente, este tipo de gerenciamento de resíduos fundamenta-se na consideração dos recursos naturais como inesgotáveis. Contudo, as evidências de recursos limitados tornam ultrapassado este modelo de gestão de resíduos.

Outro problema com o tratamento de final de tubulação é que, uma vez que os resíduos são gerados, não podem ser destruídos. Os resíduos são concentrados ou diluídos, podem sofrer alterações químicas ou físicas, porém não podem ser destruídos. Assim, o problema do tratamento de final de tubulação é apenas transferido de um lugar para o outro. Como exemplo, efluentes líquidos que contém metais pesados podem ser tratados por precipitação química para remoção dos metais. Se o sistema de tratamento foi projetado e opera corretamente, este efluente pode ser encaminhado para outro tratamento ou descarregado no meio ambiente. Mas onde será disposto o lodo, lama precipitada contendo os metais pesados? Normalmente é depositado em aterros. Aterros estes que estão sujeitos aos problemas de fiscalização de algum órgão governamental responsável pela proteção do meio ambiente.

O problema terá menor dimensão se a formação destes resíduos for evitada, isto é, minimizando as perdas. Se os resíduos são minimizados, resultam dois benefícios: redução dos custos do tratamento de efluente e redução dos custos em matérias primas.

A partir da década de 80, as indústrias de processos químicos têm mostrado um grande interesse na implementação de políticas de reciclo/reuso em que os poluentes são recuperados em correntes terminais, usando tipicamente processos de separação, e reaproveitados ou vendidos. Adicionalmente, a possibilidade de distribuir o tratamento ao longo das várias correntes poluídas está ganhando aceitabilidade. A estas técnicas dá-se o nome de integração mássica de processos.

A Figura 2.1 mostra, através de uma representação esquemática, uma comparação entre as técnicas de tratamento *end-of-pipe* e tratamento distribuído (integração mássica de processos).

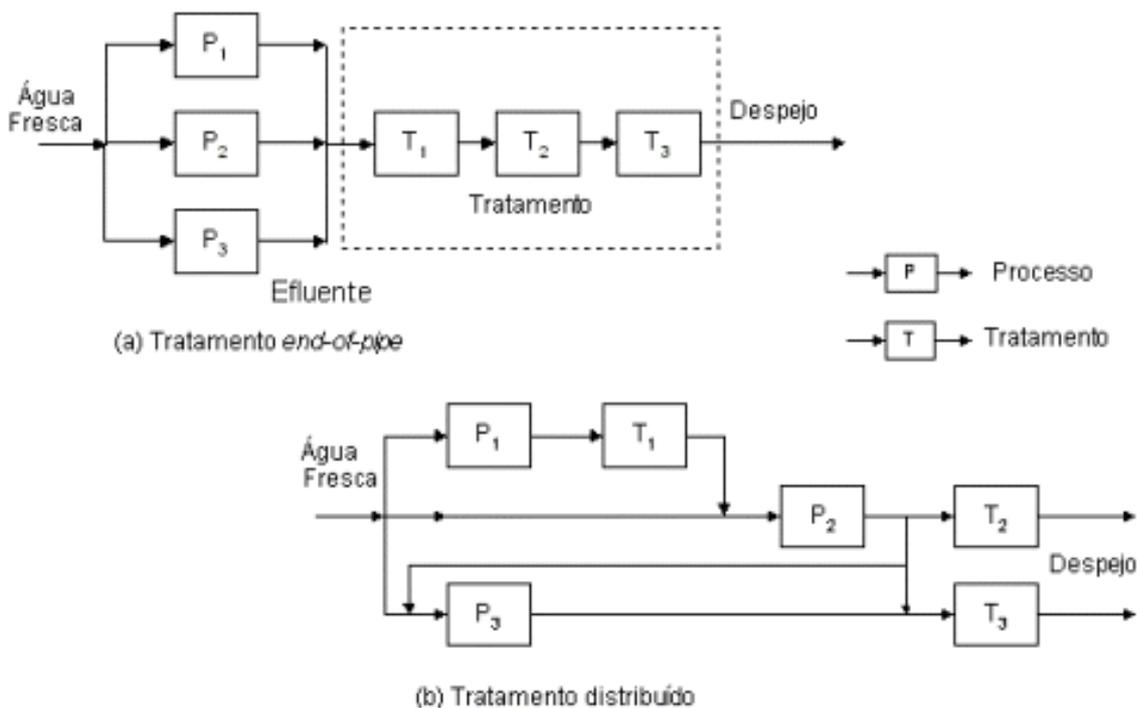


Figura 2.1: Comparação entre o tratamento *end-of-pipe* e o tratamento distribuído.

Assim, a integração mássica surge como uma técnica alternativa e mais eficiente, ao tratamento *end-of-pipe* para a redução de poluentes na indústria de processos.

Existe uma hierarquia entre as quatro principais estratégias que podem ser usadas para reduzir o desperdício industrial num processo químico (EL-HALWAGI, 1997). Estabelecendo em que ordem estas estratégias devem ser empregadas para gerenciar o resíduo industrial:

1. **Redução na fonte:** incluem ações na planta industrial para reduzir a quantidade ou toxicidade do desperdício na fonte onde é gerado. Exemplos incluem: modificação de equipamentos, mudanças operacionais em processos, reformulação de produtos, substituição de matérias-primas, purificação de correntes de alimentação, eliminação de vazamentos.
2. **Reciclo/reuso:** envolve a reutilização de correntes já processadas, que carregam consigo poluentes. Tipicamente, tecnologias de separação são os elementos-chaves em sistemas com reciclo/reuso para recuperar materiais de valor como solventes, metais, espécies inorgânicas e água.
3. **Tratamento:** refere-se a aplicação de processos físicos, biológicos e químicos para reduzir a toxicidade ou volume das correntes de efluentes que serão descartadas.
4. **Disposição:** envolve técnicas empregadas após os processos, que manipulam o que será desperdiçado. Os locais onde são armazenados os materiais desperdiçados são projetados e, geralmente, fiscalizados segundo uma legislação ambiental.

É importante salientar que a segunda estratégia compreende as técnicas de integração mássica de processos, enquanto a terceira equivale ao tratamento de final de tubulação. Isto enfatiza que a integração mássica de processos deve ser usada preferencialmente, ou previamente, ao tratamento de final de tubulação. Ou seja, a integração mássica não necessariamente exclui o tratamento de final de tubulação. De acordo com YANG *et al.* (2000), a minimização de efluente líquido é a principal preocupação da prevenção de poluentes nas indústrias de processos e manufaturas.

2.2 Definição de Integração de Processos

Um processo da indústria química é um sistema de unidades e correntes, que devem ser tratadas de modo integrado. Integração de processos é uma metodologia holística usada no projeto, em modificações e melhorias de processos e operações já existentes, para melhorar o aproveitamento de massa e energia, com ênfase nas unidades do processo. A grande interação existente entre as unidades e correntes faz da Integração de Processos uma ferramenta única para entendimento do processo como um todo. Conhecendo-se o objetivo da integração, esta ferramenta ajuda tomar as principais decisões para atingir este objetivo. Em qualquer metodologia de integração de processos, estão presentes essencialmente três etapas: síntese, análise e otimização.

A seguir, é explicado o que compreende cada uma das três etapas da integração de processos. A Figura 2.2 apresenta uma comparação entre a síntese e a análise de processos.

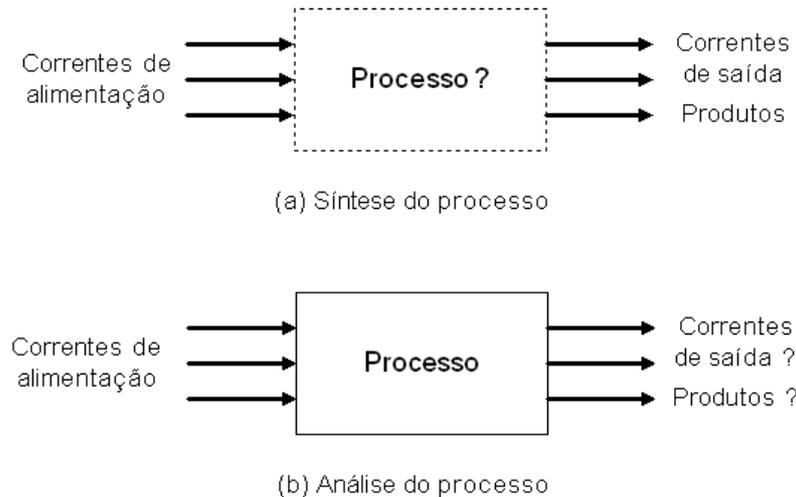


Figura 2.2: Síntese e análise de processos.

2.2.1 Síntese de Processos

A síntese de processos pode ser definida (WESTERBERG, 1987) como: “a escolha de como as partes dos componentes disponíveis devem ser usadas e como elas deveriam estar conectadas para estruturar a melhor solução para um dado problema de projeto”. Por essa razão, o campo da síntese de processos se preocupa como os elementos do processo estão integrados e com o fluxograma do sistema que está sendo gerado, para atingir certos objetivos. Revisões neste campo podem ser encontradas na literatura (EL-HALWAGI & EL-HALWAGI, 1992; DOUGLAS, 1992; WESTERBERG, 1987; STEPHANOPOULOS & TOWNSEND, 1986; NISHIDA *et al.* 1981).

A síntese de processos engloba a geração e escolha entre diversas tecnologias alternativas de processos, configurações e condições operacionais. Na maioria das aplicações, o número de alternativas é muito elevado (em muitos casos, infinito). Sem uma metodologia sistemática para síntese de processos, o engenheiro envolvido, normalmente, sintetiza algumas destas alternativas, baseando-se na experiência e na preferência adquirida. O projetista, então, seleciona a alternativa mais promissora e tenta obter a solução ótima. Entretanto, tendo acesso somente a um número limitado de alternativas, outras podem ser facilmente perdidas, nas quais pode estar incluída a real solução ótima, ou, então ser escolhida em uma região que é significativamente diferente da ótima. Adicionalmente, a probabilidade de criar projetos inovadores é severamente reduzida pela dependência de experiências prévias.

Devido a um vasto número de alternativas de processos, é essencial que as técnicas de síntese sejam capazes de extrair a(s) solução(ões) ótima(s), dentre as existentes sem, necessariamente, enumerar estas opções. Duas principais metodologias de síntese podem ser empregadas para determinar estas soluções: *estrutura irredutível* e *estrutura redutível*.

A técnica da *estrutura irreduzível* é baseada no projeto hierárquico, que segue a seqüência sugerida pelo diagrama “cebola” (SMITH, 1995). A Figura 2.3 mostra uma representação do diagrama “cebola”. Este diagrama propõe que o projeto inicie pelo reator, geralmente o equipamento mais crítico do processo, continuando pelos sistemas de separação e reciclo, sistemas de troca térmica e, finalmente, sistemas de utilidades. A cada camada do diagrama, deve-se tomar decisões baseadas nas informações disponíveis em cada um dos estágios. Baseado nestas informações, um equipamento somente é adicionado se for economicamente viável. Assim, é possível manter a estrutura irreduzível, e características que são tecnicamente ou economicamente redundantes não são incluídas.

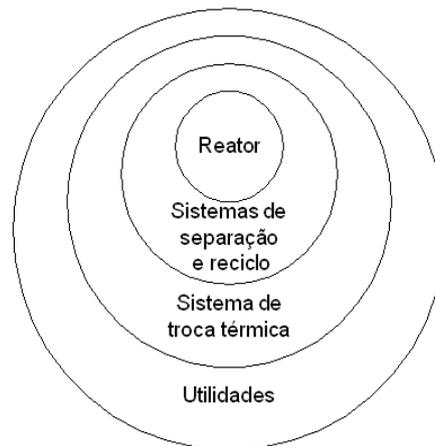


Figura 2.3: Diagrama “cebola” usado na síntese de processos (SMITH, 1995).

Esta técnica apresenta duas principais desvantagens:

- diferentes opções são possíveis em cada estágio do projeto. Para assegurar que a melhor decisão foi tomada, muitas possibilidades devem ser avaliadas e otimizadas, com o intuito de se encontrar a melhor delas;
- freqüentemente, o procedimento descrito no item anterior, não garante que a melhor decisão foi tomada. Isto se deve ao fato que complexas interações podem ocorrer entre diferentes equipamentos do processo. O esforço para manter o sistema simples e não adicionar equipamentos estágios iniciais do projeto, pode resultar em perdas de benefícios oriundos das interações entre os equipamentos num sistema mais complexo.

A principal vantagem desta técnica esta no fato de que, em cada estágio, a dimensão do problema é reduzida a um tamanho manejável.

A segunda técnica, *estrutura redutível*, envolve o desenvolvimento de uma sistemática que inclui todas as configurações de interesse. Exemplos dessas técnicas são representações na forma de espaço de estado, superestruturas e representações gráficas (SAVELSKI & BAGAJEWICZ 2000; FRIEDLER *et al.*, 1995; BAGAJEWICZ & MANOUSIOUTHAKIS, 1992; FLOUDAS *et al.*, 1986). A otimização usada nesta metodologia é tipicamente na forma de programação não linear mista inteira (MINLP), abordada neste trabalho em capítulos

posteriores. Embora potencialmente mais robusta do que a técnica de *estrutura irreduzível*, o sucesso desta técnica depende fortemente de dois fatores. Primeiro, a representação do sistema deve conter em potencial as diversas alternativas possíveis. Segundo, se o problema de otimização a ser resolvido é não linear e não convexo, a obtenção do ótimo global deve ser garantida, o que nem sempre é possível.

O resultado da síntese de processos é um fluxograma que representa a configuração dos vários equipamentos que o compõem e suas conexões. Posteriormente, é necessário uma análise do desempenho do processo obtido.

2.2.2 Análise de Processos

Enquanto a síntese é a combinação dos elementos do processo dentro de uma conjuntura, a análise envolve a decomposição de todos os elementos constituintes para um estudo individual do desempenho. Conseqüentemente, uma vez que o processo é sintetizado, suas características mais detalhadas (vazão, composição, temperatura, pressão) são preditas usando-se técnicas de análise. Estas técnicas incluem modelos matemáticos, correlações empíricas e ferramentas computacionais usadas para simular os processos. Além disso, a análise de processos pode envolver a predição e validação do desempenho usando experimentos de laboratório, ou em escalas de planta piloto, entre outras facilidades.

2.2.3 Otimização de Processos

Uma vez que o processo é sintetizado e seu desempenho é bem caracterizado pode-se determinar se os objetivos serão ou não alcançados. Então, as etapas de síntese e análise são iterativamente perseguidas até os objetivos serem alcançados. Esse procedimento implica na obtenção de uma solução, mas não garante, necessariamente, que seja a solução ótima. Portanto, é necessário incluir a otimização na metodologia de integração de processos. A otimização envolve a seleção da melhor solução a partir do conjunto de soluções possíveis.

A otimização na integração de processos conduz a interação entre síntese e análise em direção a uma conclusão ótima. Em muitos casos, a otimização é também usada na síntese. Por exemplo, na técnica de *estrutura irreduzível*, os diversos objetivos são reconciliados usando otimização. Na técnica de *estrutura reduzível*, a otimização é tipicamente a principal ferramenta para formular e resolver a etapa de síntese do processo.

2.3 Técnicas de integração mássica de processos

Nesta seção são apresentadas as principais técnicas usadas na integração mássica de processos. Para elucidar melhor estas técnicas, são apresentados alguns conceitos básicos.

Segundo EL-HALWAGI (1997), a integração mássica é baseada em princípios de engenharia química combinados com análise de sistemas usando ferramentas gráficas ou de otimização. O primeiro passo a ser tomado ao se usar técnicas de integração mássica é o desenvolvimento de uma representação total da alocação de massa de todo sistema a partir do ponto de vista das espécies envolvidas, conforme representado na Figura 2.4.

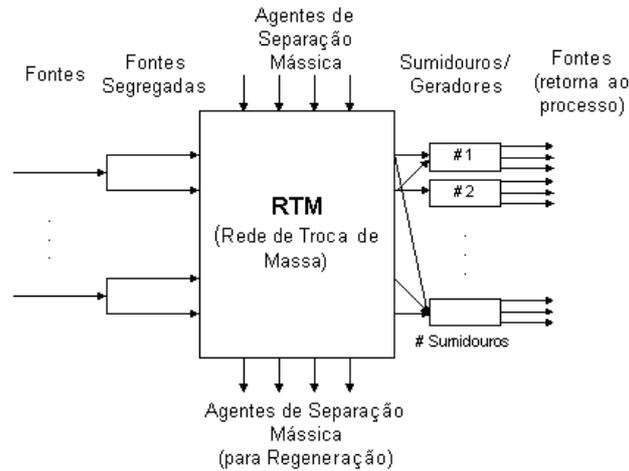


Figura 2.4: Representação total da alocação de massa de um sistema.

Para cada espécie designada, isto é, para cada poluente existem fontes, correntes que carregam as espécies e sumidouros, unidades que podem aceitar as espécies. Sumidouros incluem reatores, aquecedores, resfriadores, estações de tratamento, descargas de resíduos, etc. Correntes que saem dos sumidouros (correntes exaustas) tornam-se fontes. Assim, sumidouros são também geradores das espécies designadas. Geralmente, as fontes são preparadas para poderem ser usadas nos sumidouros, os quais apresentam restrições quanto à concentração das espécies, através da segregação e separação. Uma prevenção efetiva da poluição pode ser alcançada através da combinação de segregação, mistura, regeneração, reciclo e reuso de correntes. Os principais conceitos são sumarizados, segundo WANG & SMITH (1994) e EL-HALWAGI (1997), a seguir:

- **Segregação:** consiste, simplesmente, em evitar a mistura de correntes. Em muitos casos, segregar correntes com resíduos na fonte faz com que estas correntes sejam ambientalmente aceitas reduzindo, conseqüentemente, o custo de tratamento. Além disso, segregação de correntes com diferentes composições evita diluições desnecessárias de correntes, reduzindo o custo de remoção de poluente a partir de uma corrente mais concentrada. A segregação pode também resultar em níveis de composição que permitam que estas correntes segregadas sejam recicladas diretamente nas unidades;
- **Reuso:** correntes exaustas podem ser reutilizadas diretamente em outras unidades em que o nível de poluente não interfere com as operações dos equipamentos da unidade;
- **Regeneração-reuso:** correntes exaustas podem ser regeneradas através do parcial ou total tratamento para remoção de poluentes que, caso contrário, impediriam o reuso e, então, podem ser reutilizadas em outra unidade;

- **Regeneração-reciclo:** correntes exaustas podem ser regeneradas através do parcial ou total tratamento para remoção de poluentes que, caso contrário, impediriam o reciclo e, então, podem ser recicladas na mesma unidade.

A Figura 2.5 mostra as principais diferenças entre reuso, regeneração-reuso e regeneração-reciclo com ênfase em efluentes líquidos.

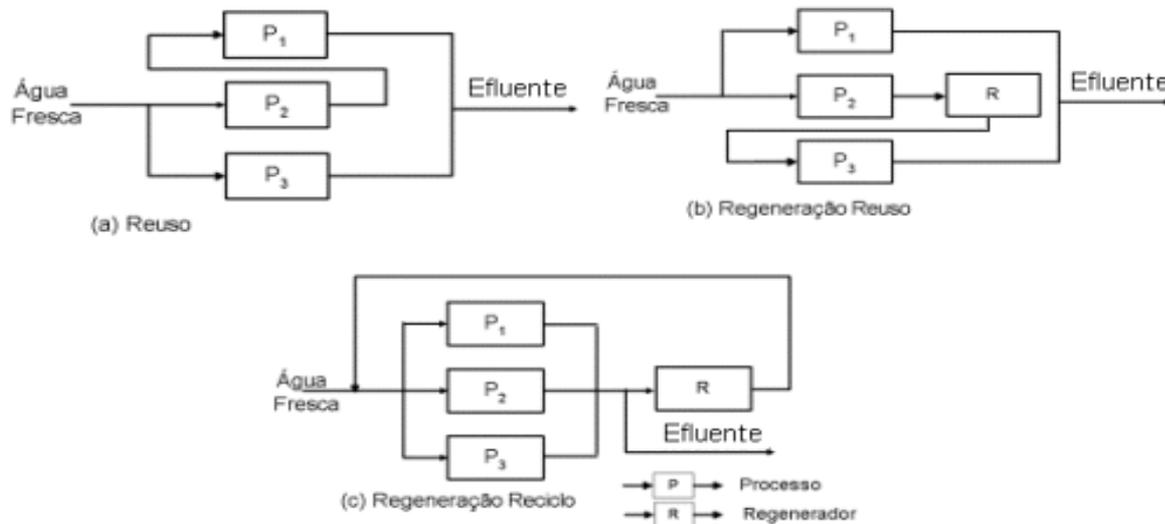


Figura 2.5: Reuso, regeneração-reuso e regeneração-reciclo.

2.3.1 Tecnologia Pinch

Em meados da década de 1990, a tecnologia *pinch*, até então muito usada para a integração energética de processos, surge como uma nova metodologia, com enfoque para sistemas de água, para problemas industriais de reutilização de correntes aquosas exaustas, minimização de efluentes líquidos e projeto de sistemas para tratar efluentes. Esta tecnologia permite a determinação:

- da quantidade mínima de água visando reduzir o consumo total de água;
- da quantidade mínima de água visando reduzir a geração de efluente líquido;
- de técnicas apropriadas para uma síntese sistemática de sistemas de água e de tratamento de efluente, incluindo técnicas para modificar e melhorar sistemas já existentes.

As principais metas da tecnologia *pinch* são: maximizar a reutilização de água, reduzir a geração de efluente líquido e minimizar os custos com o tratamento de efluente.

A tecnologia *pinch* trata as unidades que fazem uso de água como uma fonte de poluente que necessita de água, ou seja, trata como um problema de transferência de massa de uma corrente rica em poluente para uma corrente aquosa pobre. A Figura 2.6 mostra um esquema das unidades de sistemas de água, segundo a tecnologia *pinch*.



Figura 2.6: Unidades de sistemas de água segundo a tecnologia *pinch*.

Tratando o problema de alocação de água como um problema de transferência de massa, a tecnologia *pinch* se baseia nas seguintes considerações:

- a carga do poluente é considerada constante em cada processo;
- as máximas concentrações de entrada e saída em cada processo são especificadas a partir de limitações na vazão das correntes, limitações na solubilidade dos poluentes na água e limitações impostas pela legislação ambiental.

Partindo das considerações acima e fazendo uso do método gráfico, obtém-se o diagrama *Pinch*, principal ferramenta usada nesta técnica. A Figura 2.7 mostra um exemplo do diagrama *Pinch*. As decisões tomadas para a solução do problema de alocação de água, quando empregada a tecnologia *pinch*, são obtidas da análise deste diagrama.

O diagrama *Pinch* é construído plotando-se a massa transferida *versus* sua composição para todas as correntes ricas e pobres. Cada corrente é representada por uma seta cujo final corresponde a sua composição de entrada e seu início a sua composição de saída. A inclinação da seta corresponde à vazão da corrente. Combinando-se todas as correntes ricas em um único perfil, através da regra da superposição da diagonal, a curva de composição para as correntes ricas é determinada. Do mesmo modo determina-se a curva de composição para as correntes pobres. Quando a curva correspondente as correntes ricas tocar a curva das correntes pobres caracteriza-se o ponto de *pinch*. O ponto de *pinch* é o ponto crítico no qual a partir dele a transferência entre as correntes torna-se inviável.

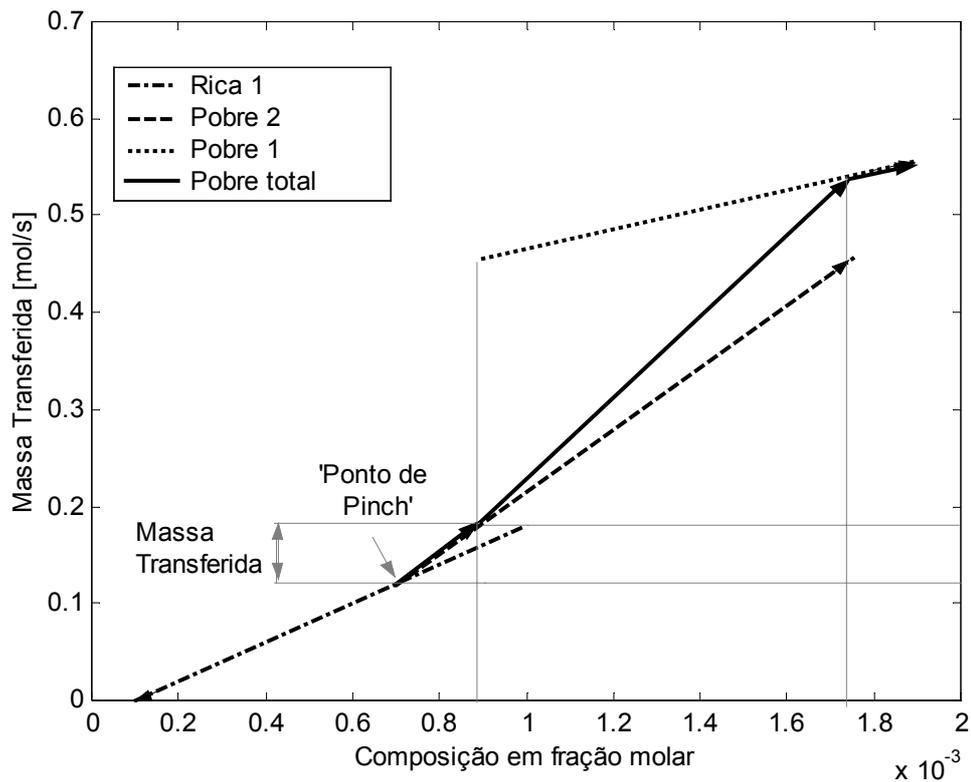


Figura 2.7: Diagrama *Pinch*.

Embora a metodologia *pinch* traga informações sobre o potencial de integração que as correntes possuem, ela não contribui muito para a determinação da rede de integração que irá atingir esses benefícios. Desta forma, a tecnologia *pinch* não será utilizada neste trabalho, mais informações sobre esta técnica podem ser obtidas através dos livros de EL-HALWAGI (1997) e de MANN & LIU (1999).

2.3.2 Otimização via programação matemática

Segundo SMITH (2000), o uso de programação matemática, juntamente com bases conceituais, é uma das grandes tendências no desenvolvimento da tecnologia de integração de processos. As técnicas de otimização matemática são ferramentas efetivas para minimizar objetivos, como o consumo de água ou geração de efluentes, sujeita a restrições relacionadas às variáveis operacionais dos processos.

A programação linear é uma ferramenta capaz de encontrar o mínimo (ou máximo) valor de uma função objetivo linear, sujeito à restrições lineares, enquanto que, a programação não linear é útil para minimizar (ou maximizar) casos em que a função objetivo ou alguma restrição seja não linear.

A seguir, é feita uma comparação entre, as duas principais técnicas de integração de processos, programação matemática e tecnologia *pinch*.

Programação matemática versus tecnologia pinch

De acordo com MANN & LIU (1999), em muitos casos, resultados idênticos são obtidos através de programação matemática e da tecnologia *pinch*. Entretanto a programação matemática é a ferramenta mais eficiente em certos casos.

A tecnologia *pinch* é uma técnica executada por etapas que levam a identificar a vazão mínima de água e projetar o sistema que satisfaça esta vazão de água. É também uma técnica efetiva para descobrir o gargalo operacional (ponto mais crítico do sistema). Entretanto, MANN & LIU (1999) identificaram regiões onde o reuso de água foi limitado e sugeriam mudanças nos processos para mais adiante reduzir a vazão mínima de água.

A programação matemática encontra o valor mínimo para a vazão de água sujeita a restrições definidas pelo engenheiro. Em comparação com a tecnologia *pinch*, a programação matemática é uma técnica onde o engenheiro necessita de pouco conhecimento prévio para compreender como as unidades do sistema que fazem uso de água são construídas. Mas por outro lado, necessita de muita fundamentação para julgar se a solução obtida é adequada. Em certas situações (como para sistemas com múltiplos poluentes), a programação matemática é mais eficiente que a tecnologia *pinch*. Adicionalmente, a programação matemática apresenta a vantagens de ser mais flexível na escolha do modelo de cada unidade.

Alguns aspectos comparativos entre as duas principais técnicas de integração mássica estão sumarizados na Tabela 2.1.

Tabela 2.1: Comparação entre as duas principais técnicas de integração mássica para sistemas que fazem uso de água.

	Tecnologia <i>Pinch</i>	Programação matemática
Múltiplos poluentes	Mais utilizada em sistemas com simples poluente	Fácil de incorporar
Flexibilidade quanto ao tipo de modelo	Pouco flexível	Muito flexível
Mínimo global <i>versus</i> mínimo local	Garante encontrar a mínima vazão de água	Não garante a mínima vazão de água em problemas não convexos
Síntese da rede	Não é automática sem o auxílio de outra técnica	Automática
Adição de considerações práticas	Difícil de incorporar	Fácil de incorporar

Neste trabalho optou-se pelo uso da programação matemática, pois uma das principais desvantagens da tecnologia *pinch* consiste no fato da síntese da rede não ser automática. Para sintetizar a rede, parte-se do ponto de *pinch* e, se o sistema for complexo, logo se chega a um ponto onde a síntese não é mais tão fácil de ser gerada. Por outro lado, a programação matemática não linear permite obter diretamente a rede, além de possibilitar a adição de uma série de considerações práticas, tais como, distância entre as unidades, custo, etc.

Capítulo 3

Projeto da Rede de Integração Mássica

Este capítulo tem por objetivo mostrar e comparar as diversas formulações empregadas, neste trabalho, no projeto de uma rede de integração mássica para a recuperação de águas de processos, através da abordagem de otimização.

Como descrito anteriormente (seção 2.2), uma das três etapas da integração de processos é a síntese do processo. Seguindo a técnica de *estrutura redutível* e fazendo uso de programação matemática, neste capítulo é construída a superestrutura para o projeto de uma rede de integração mássica. Na seqüência, são mostradas e comparadas as diversas formulações da programação matemática empregadas para recuperação de água de processos. Como critério comparativo, algumas formulações encontradas na literatura são também mencionadas no texto.

3.1 Síntese da superestrutura

A construção da superestrutura deve contemplar todas as possíveis unidades e conexões entre as unidades que são candidatas a um projeto ótimo. Inicialmente, configurações redundantes podem estar incluídas na superestrutura, para garantir que as configurações que podem fazer parte da solução ótima não sejam perdidas.

O projeto da superestrutura é formulado como um problema de programação matemática com equações e variáveis de projeto. As equações de projeto correspondem aos modelos das unidades e suas especificações incluídas como restrições do problema. As variáveis de projeto são de dois tipos: contínuas e discretas. As variáveis contínuas descrevem cada uma das unidades (vazão, composição, temperatura e pressão), seu tamanho (volume, área de troca térmica, etc.), bem como custos ou lucros associados a cada unidade. As variáveis discretas definem a estrutura do fluxograma do processo, descrevendo a existência ou não de uma unidade em particular ou de uma conexão.

Uma vez que o problema é formulado matematicamente, a solução é obtida através da utilização de um algoritmo de otimização. Geralmente, o critério a ser otimizado é o potencial

econômico ou o custo da estrutura. Quando uma variável discreta assume valor nulo, como resultado da otimização, a característica correspondente a esta variável é removida da superestrutura, reduzindo a complexidade da mesma. Assim, a superestrutura inicial é otimizada até reduzi-la a seu projeto final.

Uma representação típica dos problemas de otimização apresenta a seguinte forma:

$$\begin{aligned}
 \min \quad & z = f(x, y) \\
 & h(x, y) = 0 \\
 & g(x, y) \leq 0 \\
 & x \in X \subseteq \mathfrak{R}^n \\
 & y \in Y \subseteq \mathfrak{T}^m
 \end{aligned} \tag{3.1}$$

onde: $f(x, y)$ = função objetivo;
 $h(x, y)$ = restrições de igualdade;
 $g(x, y)$ = restrições de desigualdade.

Na representação acima, a variável “z” representa o parâmetro a ser otimizado, minimizado neste caso; “x” representa as variáveis contínuas e “y” representa as variáveis discretas.

Um problema de otimização em que a função objetivo e todas suas restrições são lineares é classificado como programação linear (LP), caso contrário, se uma delas for não linear, é classificado como programação não linear (NLP). Os tipos de variáveis de otimização envolvidas na formulação também afetam na classificação dos problemas de otimização. Uma otimização que apresenta variáveis contínuas e variáveis discretas é chamada de programação mista inteira (MIP). Dependendo da linearidade ou não linearidade dos MIPs são designados como programação mista inteira linear (MILPs) e programação mista inteira não linear (MINLPs).

Com o intuito de se obter todas as alternativas possíveis a um projeto ótimo da rede de integração mássica, a superestrutura para recuperação de água de processos, empregada neste trabalho, foi sintetizada seguindo as etapas listadas abaixo:

1º) Um nó é adicionado na saída de cada uma das unidades (fontes), para a divisão da corrente de saída;

2º) Um nó é adicionado na entrada de cada uma das unidades, para a mistura de todas as correntes que, possivelmente, serão alimentadas nos sumidouros (consumidores de efluente líquido e de água);

3º) O número de correntes de saída de cada unidade é igual ao número de possíveis sumidouros mais uma corrente para a purga do sistema;

4º) Um nó é adicionado aos nós fontes, representando a água fresca de *makeup* que possivelmente será adicionada em cada um dos processos.

A Figura 3.1 mostra uma representação esquemática da superestrutura contendo todas as possíveis alternativas.

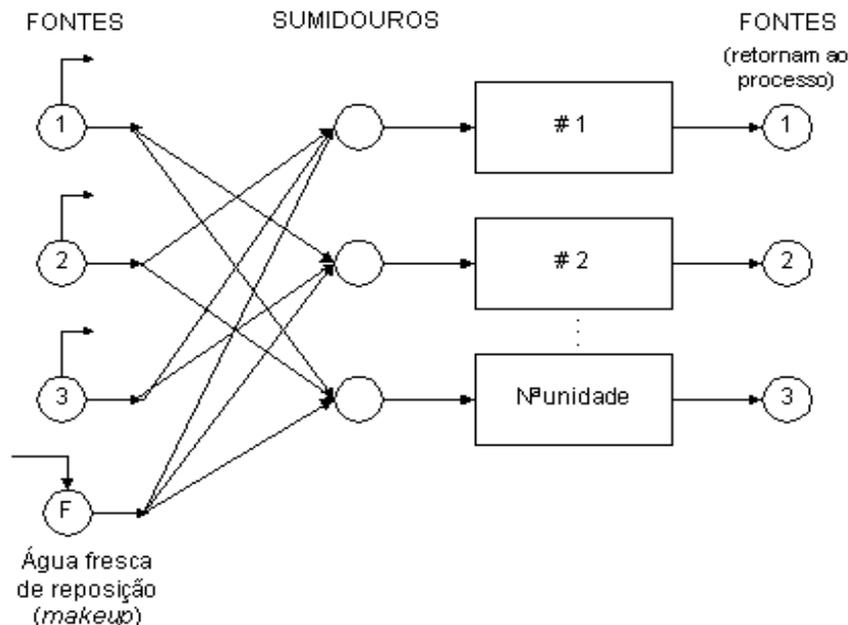


Figura 3.1: Esquema da superestrutura.

A representação da Figura 3.1 contém em potencial todas as configurações de interesse que permitem que cada fonte seja segregada, misturada, alocada numa unidade, e reciclada/reutilizada no processo. A tarefa da otimização é encontrar as vazões e composições de cada corrente, enquanto considera as equações de balanço de massa para incorporar as interações entre as unidades e correntes.

As unidades, representadas nos blocos da Figura 3.1, podem corresponder aos processos que fazem uso de água ou aos regeneradores. Cabe salientar que normalmente os processos atuam como fontes, enquanto os regeneradores atuam como sumidouros, apesar de que ambos podem atuar como fontes e sumidouros.

A seguir são mostradas as diversas formulações empregadas, neste trabalho, na síntese de redes de integração mássica, com a finalidade de recuperação de água de processos. Cada formulação é caracterizada pelo objetivo a ser alcançado e o equacionamento empregado. A título de comparação são citadas algumas formulações encontradas na literatura.

A metodologia descrita neste capítulo é aplicada no capítulo 4, onde é desenvolvido e solucionado um problema padrão para a recuperação de águas de processos.

3.2 Formulação do tipo NLP

Na maioria dos trabalhos disponíveis na literatura, a formulação natural de problemas para recuperação de água de processos com o objetivo de minimizar a demanda de água é do tipo NLP. A não linearidade associada a este tipo de problema deve-se, essencialmente, ao fato das restrições provenientes do balanço de massa dos componentes serem bilineares em relação a vazão e concentração.

Com o objetivo primordial de reduzir o consumo de água em sistemas contendo “NoC” unidades que fazem uso de água, “NoR” unidades regeneradoras de poluentes e “NoP” tipos de poluentes contidos no efluente é proposta a seguinte formulação:

$$\min F = \sum_{i \in \{C\}} F_i \quad (3.2)$$

Sujeito às seguintes restrições:

a) Balanço de massa global:

$$\sum_{i \in \{C\}} F_i = \sum_{i=1}^{\text{NoU}} W_i - \left(\sum_{i \in \{C\}} \sum_{j=1}^{\text{NoP}} M_{i,j} - \sum_{i \in \{R\}} \sum_{j=1}^{\text{NoP}} SM_{i,j} \right), \quad (3.3)$$

onde: F = vazão mássica de água fresca para *makeup*;

W = vazão mássica de efluente líquido (*wastewater*);

M = carga ou vazão mássica de poluente que entra nos processos;

SM = carga ou vazão mássica de poluente removida pelos regeneradores;

NoU = número total de unidades (NoU = NoR + NoC);

{C} = conjunto das unidades que fazem uso de água;

{R} = conjunto dos regeneradores;

A Figura 3.2 mostra um esquema do balanço de massa global para o sistema considerado.

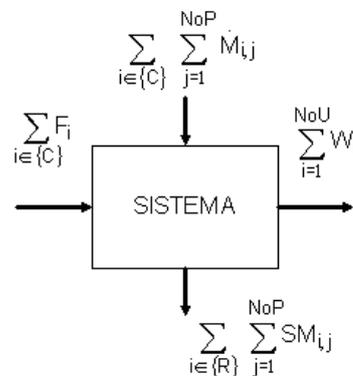


Figura 3.2: Esquema do balanço de massa global do sistema.

b) Balanço de massa em volta de cada unidade:

$$\sum_{j=1}^{\text{NoP}} \dot{SM}_{i,j} + \dot{Lout}_i = \sum_{j=1}^{\text{NoP}} \dot{M}_{i,j} + \dot{Lin}_i \quad (3.4)$$

com:

$$\dot{SM}_{i,j} = 0, \text{ para } i \in \{C\} \text{ e } j = 1, \dots, \text{NoP}, \quad (3.5)$$

$$\dot{M}_{i,j} = 0, \text{ para } i \in \{R\} \text{ e } j = 1, \dots, \text{NoP}, \quad (3.6)$$

onde: \dot{Lin} = vazão mássica de entrada;

\dot{Lout} = vazão mássica de saída.

A Figura 3.3 ilustra um esquema das unidades que fazem uso de água e das unidades regeneradoras, mostrando que, na formulação proposta, a carga de poluentes de cada uma das unidades que fazem uso de água foi considerada como uma corrente adicionada na unidade, enquanto nas unidades regeneradoras a carga de poluente regenerada foi considerada como uma corrente de saída do regenerador.

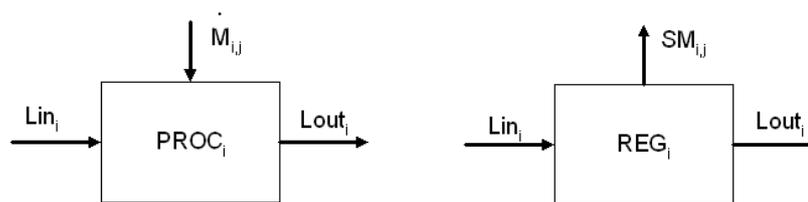


Figura 3.3: Esquema representativo das unidades que fazem uso da água e das unidades regeneradoras.

c) Balanço de massa em volta de cada nó de mistura de correntes:

$$F_k + \sum_{i \neq k}^{\text{NoU}} L_{k,i} = \dot{Lin}_k, \quad (3.7)$$

com:

$$F_k = 0 \text{ para } k \in \{R\}, \quad (3.8)$$

onde: $L_{k,i}$ = vazão mássica de reciclo/reuso que sai da unidade i e entra na unidade k .

d) Balanço de massa em volta de cada nó de divisão de corrente:

$$W_k + \sum_{i \neq k}^{NoU} L_{i,k} = L_{out,k}, \quad (3.9)$$

onde: $L_{i,k}$ = vazão mássica de reciclo/reuso que sai da unidade k e entra na unidade i .

e) Balanço de massa por componente em volta de cada nó de mistura de correntes:

$$XF_j \cdot F_k + \sum_{i \neq k}^{NoU} X_{out,i,j} \cdot L_{k,i} = X_{in,k,j} \cdot Lin_k \quad (3.10)$$

onde: XF = fração mássica de poluente na água fresca de *makeup*;

X_{in} = fração mássica de poluente na entrada das unidades;

X_{out} = fração mássica de poluente na saída das unidades.

f) Balanço de massa por componente em volta de cada unidade:

$$SM_{i,j} + X_{out,i,j} \cdot L_{out,i} = \dot{M}_{i,j} + X_{in,i,j} \cdot Lin_i \quad (3.11)$$

g) Restrição associada à seletividade de cada regenerador:

$$SM_{i,j} \neq 0 \text{ e } SM_{i,k} = 0, \text{ para } k \in \{1,2,\dots, NoP\} - j, \quad (3.12)$$

pois nesta formulação considera-se que existe um tipo de regenerador “ i ” para cada tipo de poluente envolvido “ j ”, ou seja, cada regenerador é seletivo para apenas um poluente.

h) Restrições de entrada de cada unidade que faz uso de água:

$$X_{in,i,j} \leq X_{in,i,j}^{máx}, \text{ para } i \in \{C\} \text{ e } j = 1,\dots, NoP \text{ e} \quad (3.13)$$

$$L_{sup,i} = Lin_i, \text{ para } i \in \{C\}, \quad (3.14)$$

onde: L_{sup} = limite máximo da vazão mássica operacional, ou seja as unidades estão operando sempre em sua carga máxima.

O limite superior da concentração de poluentes indica que as unidades podem operar até um limite aceitável de poluentes na sua alimentação.

i) Restrição de saída de cada regenerador:

$$X_{out,i,j} = X_{outR,i,j}^{máx}, \text{ para } i \in \{R\} \text{ e } j = 1,\dots, NoP. \quad (3.15)$$

Cabe salientar, que na modelagem sugerida acima, foi considerado, por simplificação, que os regeneradores operam na condição de saturação. Ou seja, a concentração de saída dos regeneradores assume o valor da máxima concentração admissível para os regeneradores. Motivo pelo qual na restrição associada à equação 3.15 foi considerada uma igualdade, ao invés de uma desigualdade. Além disso, ao ser considerada uma igualdade, o máximo reuso/reciclo entre as unidades é buscado através do máximo uso dos regeneradores seletivos.

Outra consideração importante feita neste tipo de modelagem foi que as espécies envolvidas não interagem entre si. Não interagir entre si significa: não sofrer reações químicas entre as espécies ou não sofrer alterações químicas e/ou físicas. No caso em que há interações entre as espécies essa formulação pode ser seguida, desde que se altere o equacionamento, inserindo as taxas de consumo e produção das espécies.

As hipóteses do modelo são sumarizadas a seguir:

- toda a água fresca de *makeup* sai do sistema na forma de efluente líquido;
- somente os processos admitem água fresca de *makeup* (ou de reposição);
- os regeneradores operam na condição de saturação;
- as espécies envolvidas não interagem entre si.

A busca de um mínimo consumo de água, decorre do fato de levar-se em conta critérios econômicos, pois quanto menor a demanda de água no sistema, mais baixo será o custo operacional. Além de minimizar o consumo de água, a quantidade de efluente líquido a ser tratada e descartada é menor, acarretando um menor impacto ambiental.

Ainda levando-se em conta critérios econômicos, o custo fixo de instalação pode ser incluído em formulações como a descrita acima, considerando que para vazões de reciclo/reuso menores que um certo valor, não existirá a conexão. Como cada conexão implica em uma nova tubulação, quanto menos tubulações, menor será o custo fixo de instalação.

3.3 Formulação do tipo MINLP

Grande parte das superestruturas são formuladas como MINLPs, pois envolvem variáveis discretas e certas decisões são naturalmente discretas. Como por exemplo, o número de unidades regeneradoras em uma rede de integração mássica para a recuperação de água.

Com o intuito de se obter uma formulação mais apropriada para reduzir o custo fixo de instalações, propõe-se a inclusão da distância entre as conexões como objetivo a ser alcançado. A formulação NLP proposta na seção 3.2 é reformulada, incluindo a distância entre as conexões, como um problema do tipo MINLP. A função objetivo para esta formulação torna-se:

$$\min Dt_{tot} = \sum_{i=1}^{NoU} \sum_{k=1}^{NoU} y_{i,k} \cdot D_{i,k}, \quad (3.16)$$

onde: $y_{i,k}$ = variável binária, que representa a conexão entre duas unidades.

Associada ao objetivo acima proposto, deve-se considerar que existe um diâmetro máximo de tubulação no projeto da rede de integração mássica. Esta consideração é feita incluindo-se a seguinte restrição:

$$L_{i,k} - y_{i,k} \cdot L_{máx} \leq 0, \quad (3.17)$$

onde: $L_{máx}$ = limite máximo da vazão mássica de reciclo/reuso entre as unidades.

Nesta formulação, o mínimo consumo de água é adicionado como uma restrição. Assim, a equação 3.2, nesta nova formulação, torna-se:

$$\sum_{i \in \{C\}} F_i \leq F_{máx}, \quad (3.18)$$

onde: $F_{máx}$ = limite máximo da vazão mássica de água fresca para *makeup*.

As outras restrições permanecem as mesmas da proposta na formulação NLP, ou seja, as equações 3.3 à 3.15.

A formulação MINLP, que inclui as distâncias entre as conexões como objetivo e a máxima demanda de água como restrição, foi preferida ao invés de uma formulação do tipo multi-objetivo. A formulação multi-objetivo seria muito similar a formulação MINLP proposta, com exceção da equação 3.18, que seria substituída pela equação 3.2. Neste trabalho, optou-se por não seguir a formulação multi-objetivo devido a grande dificuldade para encontrar algoritmos capazes de resolvê-la.

Com objetivo final de obter uma rede de integração com menor custo fixo de instalações, SALVELSKI & BAGAJEWICZ (2000) propõem em seu trabalho uma formulação do tipo MILP, para um sistema contendo apenas um poluente, considerando o número de conexões como o parâmetro a ser otimizado.

A formulação incluindo as distâncias mostra-se mais apropriada, pois minimizar o número de conexões é relevante, mas não garante o mínimo custo fixo de instalações quando as conexões não possuem o mesmo capital fixo de investimento. Como por exemplo, uma conexão de 100 m comparada com três conexões de 15, 20 e 35 m de mesmo material e mesmo diâmetro, tem um custo mais elevado do que a soma das outras três conexões. BAGAJEWICZ (2000) em seu trabalho, salienta que minimizar o número de conexões não é muito representativo na redução do custo fixo total e, para solucionar este problema, sugere

uma formulação que leva em conta o custo fixo total anualizado como o objetivo a ser alcançado.

É importante salientar que ao minimizar as distâncias, além de reduzir o custo fixo de instalação, reduz-se também o custo operacional de bombeamento. Ou seja, esta formulação também apresenta a vantagem das distâncias poderem ser traduzidas em fatores operacionais. Como por exemplo, em uma corrente que sai de uma unidade, que está em um nível de pressão mais elevado do que a unidade destino, pode ser incluído um fator de redução no parâmetro que representa a distância entre estas unidades. Este fator de redução representa um custo menor de bombeamento na respectiva linha de ligação entre as unidades em questão.

3.4 Formulação do tipo LP

Os problemas de programação linear formam o menor subconjunto dentro das formulações dos problemas de programação matemática. Portanto, um número menor de superestruturas podem ser formulados com este tipo de programação.

Com o objetivo de minimizar o consumo de água de processos, SAVELSKI & BAGAJEWICZ (2000), mostraram que uma superestrutura do tipo LP pode ser empregada para um sistema com um único poluente. Para isto, foi considerado que cada uma das unidades que fazem uso de água é caracterizada por uma carga de poluente que deve ser removida através de restrições de máxima concentração de entrada e saída.

Uma outra técnica que faz uso de programação matemática na síntese de redes de integração mássica, sem o uso de superestruturas, pode ser encontrada na literatura. Esta técnica denomina-se modelo de *transshipment*.

Segundo MANN & LIU (1999), o modelo de *transshipment* consiste na aplicação de um modelo tipo LP para determinar a vazão mínima de água nas unidades, envolvendo um único poluente, ou um poluente chave. No modelo de *transshipment*, a representação do problema de transferência de massa é feita através da passagem da massa de poluente proveniente das fontes (correntes ricas em poluente), através de intervalos de concentração, para seus destinatários (correntes pobres em poluente).

O modelo de *transshipment*, além da vazão mínima de água, é usado para responder a seguinte questão: que corrente pobre pode ser usada para remover o poluente de uma corrente rica num certo intervalo de concentração? Ou seja, conhecendo diversos agentes de separação mássica capazes de remover um certo tipo de poluente, este modelo ajuda a selecionar os agentes mais eficientes.

Uma desvantagem do modelo de *transshipment*, em relação a superestrutura, é que a rede não é sintetizada somente com uso desta técnica.

Mais informações sobre o modelo de *transshipment* podem ser obtidas através dos livros de EL-HALWAGI (1997) e de MANN & LIU (1999).

Capítulo 4

Desenvolvimento de um Problema Padrão

4.1 Descrição do problema

Com objetivo de desenvolver e analisar um problema padrão para recuperação de águas de processos construiu-se uma superestrutura seguindo a metodologia descrita no capítulo 3.

Um dos motivos pelos quais resolveu-se sugerir um problema padrão reside no fato de que na literatura não há um problema disponível com as características a seguir mencionadas. O problema proposto é suficientemente simples para sua rápida compreensão e, ao mesmo tempo, suficientemente complexo para representar uma típica situação industrial. O problema envolve dois poluentes, pois os casos normalmente estudados na literatura são de sistemas com somente um poluente. Além disso, o problema possui características dinâmicas interessantes, estudadas no capítulo 5.

Na construção da superestrutura foi empregado um sistema constituído por 6 unidades: 4 processos e 2 regeneradores. Cada processo apresenta 2 tipos de poluentes: metais dissolvidos, poluente A, e matéria orgânica caracterizada por DQO (demanda química de oxigênio), poluente B, que devem ser removidos por uma resina trocadora de íons (regenerador 1) e uma coluna de absorção (regenerador 2), respectivamente. A Figura 4.1 mostra uma representação esquemática do *layout* do sistema.

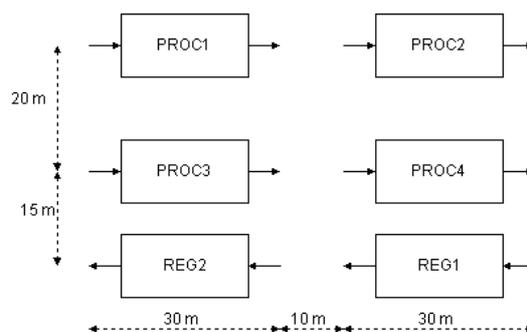


Figura 4.1: *Layout* do sistema.

Operacionalmente, cada um dos processos exige uma demanda de água. Ao passar pelo processo, a água carrega consigo uma carga de poluente, gerando efluente líquido. Deseja-se diminuir o consumo total de água do sistema, minimizando a quantidade de efluente a ser tratada, utilizando técnicas de integração de processos.

As especificações para o problema proposto são as seguintes:

- Vazão mássica máxima de reciclo/reuso: $L_{\text{máx}} = 9 \text{ t/h}$;
- Fração de poluentes na água fresca de *makeup*: $XF_A = 4 \text{ ppm}$ e $XF_B = 4 \text{ ppm}$, pois considerou-se que a água fresca não é isenta de poluente;
- Concentração de poluentes na saída dos regeneradores: $C_{\text{OUTR5,A}} = 4 \text{ ppmw}^*$ e $C_{\text{OUTR5,B}} = 20 \text{ ppmw}$, $C_{\text{OUTR6,A}} = 40 \text{ ppmw}$ e $C_{\text{OUTR6,B}} = 12 \text{ ppmw}$;
- Vazões operacionais dos processos, mostradas na Tabela 4.1;
- Cargas de poluente dos processos, mostradas na Tabela 4.1;
- Concentrações máximas de poluente na entrada de cada processo, mostradas na Tabela 4.1;
- Distâncias entre as unidades, mostradas na Tabela 4.2.

Tabela 4.1: Vazão operacional, carga de poluente e concentração máxima de poluente especificadas na otimização da superestrutura.

Processo	Limite máximo da vazão operacional [t/h]	Carga de Poluente [g/h]		$C^{\text{máx.in}}$ [ppmw]*	
		A	B	A	B
1	2	15	9	22	8
2	2	42	218	4	20
3	3	30	30	30	90
4	3	37	15	21	15
Total	10	124	272		

Tabela 4.2: Distância entre as unidades especificadas na otimização da superestrutura.

Distância entre a entrada do processo i e a saída do processo k [m]						
i / k	Processo 1	Processo 2	Processo 3	Processo 4	Regenerador 1	Regenerador 2
Processo 1		70	50	90	75	35
Processo 2	10		30	50	35	75
Processo 3	50	90		70	55	15
Processo 4	30	50	10		15	55
Regenerador 1	75	35	55	15		70
Regenerador 2	35	75	15	55	10	

* A unidade ppmw significa ppm em base isenta de poluente, ou seja, em água pura.

4.2 Síntese da Superestrutura

A síntese da rede de integração mássica usada no desenvolvimento deste problema foi feita através do uso de uma superestrutura, otimizada via programação matemática para obter a melhor configuração. A Figura 4.2 mostra uma representação da superestrutura usada no desenvolvimento deste problema, contendo todas as possíveis configurações.

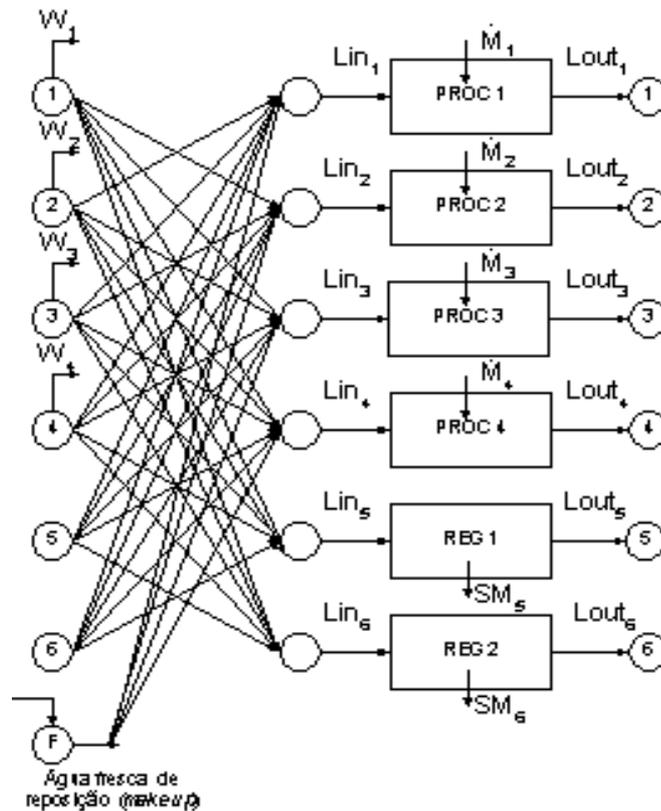


Figura 4.2: Esquema da superestrutura.

É importante salientar que não foi considerada a conexão entre a corrente de saída de uma unidade alimentando o sumidouro correspondente da própria unidade. Este tipo de consideração deve ser feita, pois ao se tentar reciclar diretamente, sem uma regeneração prévia, uma corrente para a própria unidade de origem dificultaria muito a sua operabilidade. Além disto, o nível de poluente que a corrente possui ao deixar uma unidade dificilmente se encontrará no nível aceitável de poluente na entrada desta unidade.

4.3 Formulação do problema de otimização

A síntese da superestrutura empregada no desenvolvimento do problema recai num problema de otimização. O problema se enquadra na categoria de programação não linear mista inteira (MINLP). As variáveis contínuas de projeto descrevem as operações envolvidas em cada uma das unidades (vazão, composição, cargas de poluentes). As variáveis discretas do projeto são variáveis binárias, que descrevem a existência, ou não, da conexão entre as unidades. Neste caso, se a variável binária assumir valor igual a um a conexão existe, se assumir valor nulo, não existe.

Neste problema deseja-se minimizar a distância total entre as conexões sujeita às:

- Equações de balanço de massa global e por componentes, inerentes a cada uma das etapas da síntese da superestrutura, mencionadas anteriormente;
- Restrições quanto à vazão máxima de reciclo/reuso, pois o projeto leva em conta um diâmetro máximo de tubulação;
- Restrições quanto à concentração máxima de poluente na entrada de cada processo, impostas operacionalmente;
- Restrições quanto à seletividade dos regeneradores, pois cada regenerador é seletivo a apenas um dos poluentes;
- Restrições quanto à concentração máxima de poluente na saída dos regeneradores, pois na sua modelagem, por simplificação, foi considerado que os regeneradores operam apenas na condição de saturação.

A seguir, são enumeradas as equações do modelo matemático empregadas na formulação do problema de otimização.

4.4 Modelo matemático

Nesta seção é apresentada a modelagem matemática empregada na formulação do problema, seguindo a metodologia descrita no capítulo 3.

A função objetivo que representa este problema de otimização é dada por:

$$\min \text{Dtot} = \sum_{i=1}^6 \sum_{k=1}^6 y_{i,k} \cdot D_{i,k}, \quad (4.1)$$

onde: $y_{i,k}$ = variável binária, que representa a conexão entre duas unidades.

Restrições:

$$L_{i,k} - y_{i,k} \cdot L_{\text{máx}} \leq 0 \quad (4.2)$$

$$F = \sum_{i=1}^4 F_i \leq F_{\text{máx}} \quad (4.3)$$

a) Balanço de massa global:

$$\sum_{i=1}^4 F_i = \sum_{i=1}^6 W_i - \left(\sum_{i=1}^4 \sum_{j=1}^2 \dot{M}_{i,j} - \sum_{i=5}^6 \sum_{j=1}^2 SM_{i,j} \right) \cdot 10^{-6} \quad (4.4)$$

$$\text{com } W_i = 0, \text{ para } i = 5, 6. \quad (4.5)$$

O fator 10^{-6} presente na equação é devido a conversão de unidades usadas para escalonar o sistema, tornando-o numericamente mais estável. Em sistemas de recuperação de água, que geralmente apresentam correntes diluídas, as vazões das correntes são da ordem de toneladas por hora, enquanto as taxas de remoção e adição de poluentes são da ordem de gramas por hora. De modo similar, as frações mássicas de poluentes são expressas em partes por milhão (ppm).

b) Balanço de massa em volta de cada unidade:

$$\sum_{j=1}^2 SM_{i,j} \cdot 10^{-6} + L_{out,i} = \sum_{j=1}^2 \dot{M}_{i,j} \cdot 10^{-6} + Lin_i \quad (4.6)$$

$$\text{com } SM_{i,j} = 0, \text{ para } i \leq 4 \text{ e} \quad (4.7)$$

$$\dot{M}_{i,j} = 0, \text{ para } i = 5, 6 \quad (4.8)$$

c) Balanço de massa em volta de cada nó de mistura de correntes:

$$F_k + \sum_{i \neq k} L_{k,i} = Lin_k \quad (4.9)$$

$$\text{com } F_k = 0, \text{ para } k = 5, 6 \quad (4.10)$$

d) Balanço de massa em volta de cada nó de divisão de corrente:

$$W_k + \sum_{i \neq k} L_{i,k} = L_{out,k} \quad (4.11)$$

e) Balanço por componente em volta da mistura de correntes:

$$XF_j \cdot F_k + \sum_{i \neq k} X_{out,i,j} \cdot L_{k,i} = X_{in,k,j} \cdot Lin_k \quad (4.12)$$

f) Balanço por componente em volta de cada unidade:

$$SM_{i,j} + X_{out_{i,j}} \cdot L_{out_i} = \dot{M}_{i,j} + X_{in_{i,j}} \cdot L_{in_i} \quad (4.13)$$

g) Restrições associadas à seletividade dos regeneradores:

$$SM_{5,2} = 0 \text{ e } SM_{6,1} = 0 \quad (4.14)$$

h) Restrições de entrada:

$$X_{in_{i,j}} \leq \frac{C_{in_{i,j}}^{m\acute{a}x}}{\left(1 + 10^{-6} \cdot \sum_{m=1}^2 C_{in_{i,j}}^{m\acute{a}x}\right)}, \text{ para } i=1,\dots,4 \text{ e } j=1,2 \quad (4.15)$$

$$L_{sup_i} = L_{in_i}, \text{ para } i=1,\dots,4 \quad (4.16)$$

i) Restrições de saída dos regeneradores:

$$X_{out_{i,j}} = \frac{C_{OUTR_{i,j}}}{\left(1 + 10^{-6} \cdot \sum_{j=1}^2 C_{OUTR_{i,j}}\right)}, \text{ para } i=5,6 \text{ e } j=1,2 \quad (4.17)$$

As equações 4.15 e 4.17 estão expressas em termos de concentrações em base isenta de poluente (ppmw, o que justifica o uso do fator 10^{-6}), comumente encontrado na literatura.

Nas equações acima, onde não foram especificados os intervalos de validade dos índices, fica subentendido que é válido para todo intervalo, ou seja, $i=1,\dots,6$, $k=1,\dots,6$ e $j=1,2$.

4.5 Solução do problema de otimização

A solução do problema de otimização da superestrutura foi obtida através do *software* GAMS IDE 2.0.10.0 (Módulo: GAMS Rev. 118), usando o algoritmo SBB. Este algoritmo usa como técnica de busca o método *Branch and Bound*, fazendo uso de outros algoritmos pré-selecionados, já disponíveis no GAMS, para resolver os NLPs internos. Para o problema em questão selecionou-se o algoritmo CONOPT, que usa a técnica dos gradientes reduzidos generalizados (GRG), mais detalhes em Secchi (2001).

O problema de otimização é não linear, portanto, sem uma análise de convexidade, não é garantido que a solução encontrada é um ótimo global. Foram feitos diversos chutes iniciais e a solução encontrada foi a mesma, sendo um indício que a solução encontrou o valor ótimo.

Um fato importante a ser mencionado é a dificuldade de obtenção das soluções pelo GAMS decorrente do fato de que as variáveis apresentam ordens de grandeza muito distintas, gerando um problema de escalonamento. Esta dificuldade foi superada com a escolha do melhor conjunto de unidades para o sistema: vazões de água em t/h; vazões de poluente em g/h e concentração de poluentes em ppm.

Como já mencionado anteriormente, na síntese da superestrutura, além de minimizar a distância entre os ciclos/reusos, deseja-se reduzir o consumo total de água do sistema. O segundo objetivo foi alcançado, impondo-se um limite superior para o total de água fresca de *makeup* alimentada no sistema. Portanto, foram analisados os seguintes limites máximos de vazão de água fresca ($F_{\text{máx}}$): 1; 1,4; 2; 2,2; 4; 5; 6; 7 e 9 t/h.

É importante salientar que, nos casos analisados, as soluções obtidas pelo GAMS, para a faixa de 5 a 9 t/h de máxima vazão de *makeup*, foram iguais. Foram desconsideradas as vazões menores que 10^{-5} t/h, na representação das configurações obtidas. As Figuras 4.3, a 4.8 apresentam as representações esquemáticas das diversas configurações da estrutura final para cada um dos casos analisados.

Os valores que assumem cada uma das variáveis envolvidas no problema de otimização, para todos os casos analisados, encontram-se tabelados no apêndice C.

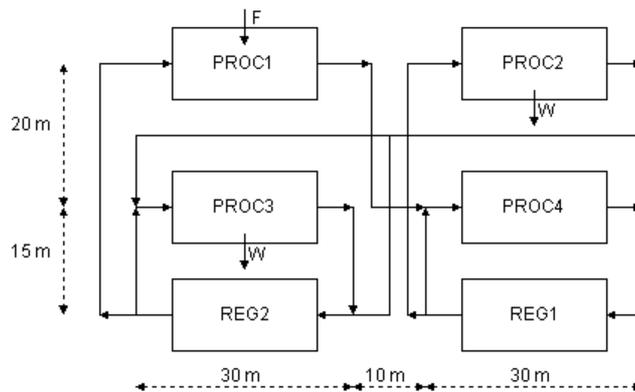


Figura 4.3: Configuração para $F_{\text{máx}} = 1$ t/h.

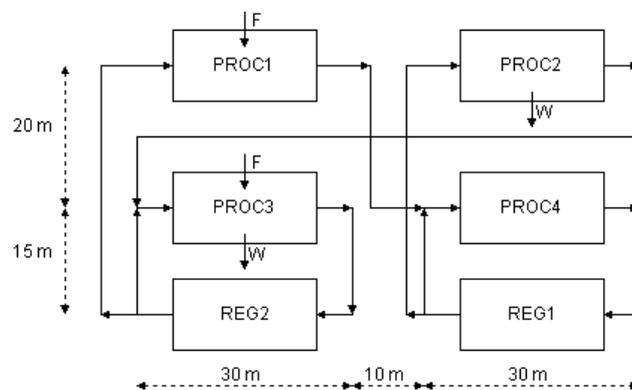


Figura 4.4: Configuração para $F_{\text{máx}} = 1,4$ t/h.

As duas configurações anteriores são muito similares. A única diferença consiste na corrente (vazão de *makeup* do processo 3) a mais da configuração representada na Figura 4.3, cuja a vazão é da ordem de 10^{-4} t/h. Nestas duas configurações há dois ciclos: a corrente que sai do processo 4, entra no regenerador 1 e depois retorna para o processo 4, e a corrente que sai do processo 3 e retorna para o mesmo processo, após passar pelo regenerador 2. Todas as outras conexões, existentes nas duas configurações analisadas, caracterizam o reuso entre as unidades do sistema.

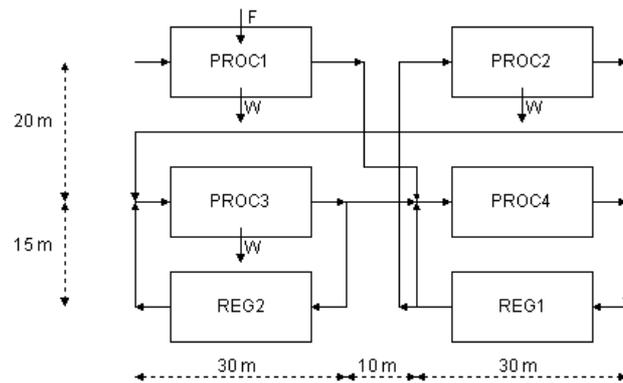


Figura 4.5: Configuração para $F_{máx} = 2$ t/h.

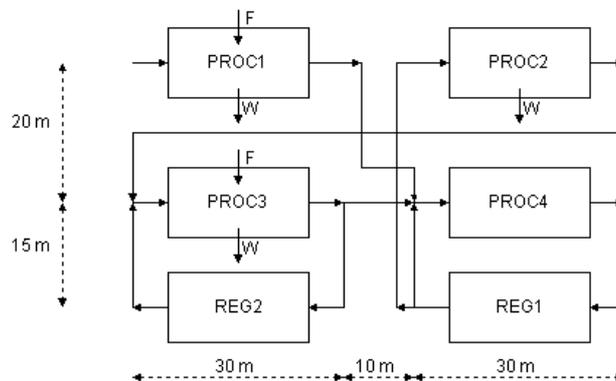


Figura 4.6: Configuração para $F_{máx} = 2,2$ t/h.

As configurações representadas nas Figuras 4.5 e 4.6 são muito similares, a única diferença está na alimentação de água fresca de *makeup* no processo 3. Apresentam as mesmas correntes de reciclo das configurações já apresentadas, enquanto que, as conexões restantes são correntes de reuso entre as unidades.

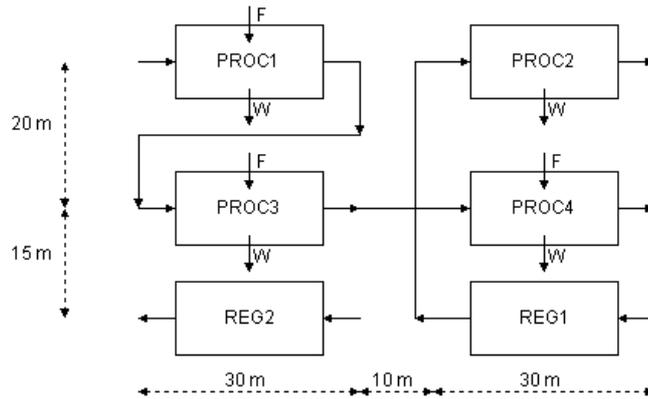


Figura 4.7: Configuração para $F_{máx} = 4$ t/h.

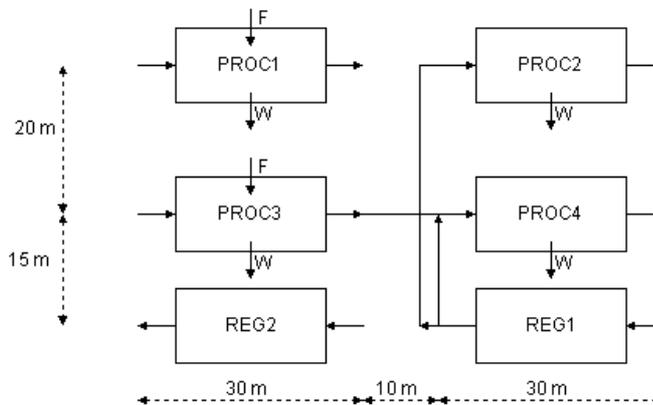


Figura 4.8: Configuração para $F_{máx} = 5, 6, 7$ e 9 t/h.

A configuração representada pela Figura 4.7 apresenta uma característica singular, dentre as configurações analisadas, uma vez que apresenta somente corrente de reusos entre as unidades. Já na configuração representada na Figura 4.8 tem-se uma unidade, processo 1, na qual toda a água fresca de *makeup* alimentada sai da unidade na forma de efluente líquido não reutilizável pelas outras unidades. Em ambos os casos, o regenerador 2 não é utilizado no sistema, pois a quantidade de água fresca de *makeup* é suficiente para diluir as correntes poluídas, sendo desnecessário que os dois regeneradores atuem no sistema.

Um aspecto importante a ser observado é que as configurações com menores vazões de água fresca de *makeup* (Figuras 4.3, 4.4, 4.5 e 4.6) são mais integradas massivamente, pois apresentam o maior número de correntes de reciclo/reuso, dentre todas as configurações obtidas.

Outro aspecto que deve ser salientado é que, na maioria das configurações analisadas, os únicos reciclos foram: a corrente que sai do processo 4, entra no regenerador 1 e depois retorna para o processo 4, e a corrente que sai do processo 3 e retorna para o mesmo processo, após passar pelo regenerador 2. Isto decorre do fato da inclusão das distâncias como critério

de decisão a ser minimizado no problema de otimização, já que a unidade mais próxima do processo 4 é o regenerador 1 e a unidade mais próxima da unidade 3 é o regenerador 2.

Algumas das variáveis obtidas na otimização da superestrutura foram representadas na forma gráfica (Figuras 4.9 a 4.12) para uma melhor análise das soluções obtidas.

A Figura 4.9 mostra que os casos com menor custo para a função objetivo estão contidos na faixa de 5 a 9 t/h de máxima vazão de *makeup*. Coerentemente com os resultados mostrados na Figura 4.11, para um número maior de ciclos/reusos, maior será a distância total das conexões.

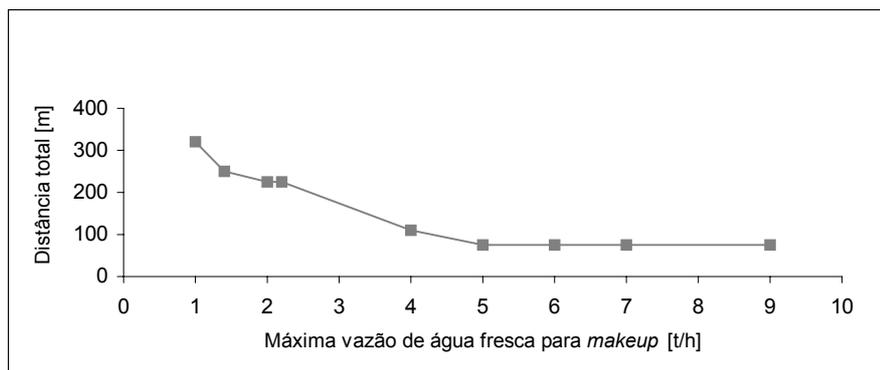


Figura 4.9: Resultados da otimização da superestrutura: distância total *versus* vazão de água fresca para *makeup*.

Naturalmente, quanto menor a vazão de água fresca de *makeup*, maior será a redução no consumo total de água no sistema, conforme mostra a Figura 4.10, onde as barras quantificam a redução no consumo de água quando comparado a quantidade total sem a integração mássica, que é de 10 t/h.

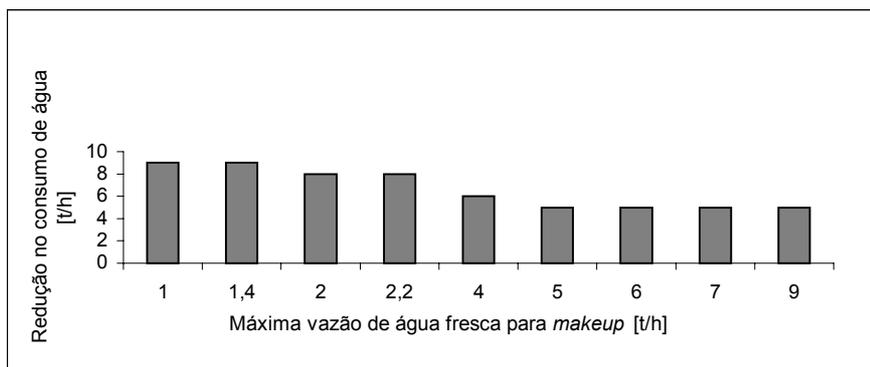


Figura 4.10: Resultados da otimização da superestrutura: redução no consumo de água *versus* vazão de água fresca para *makeup*.

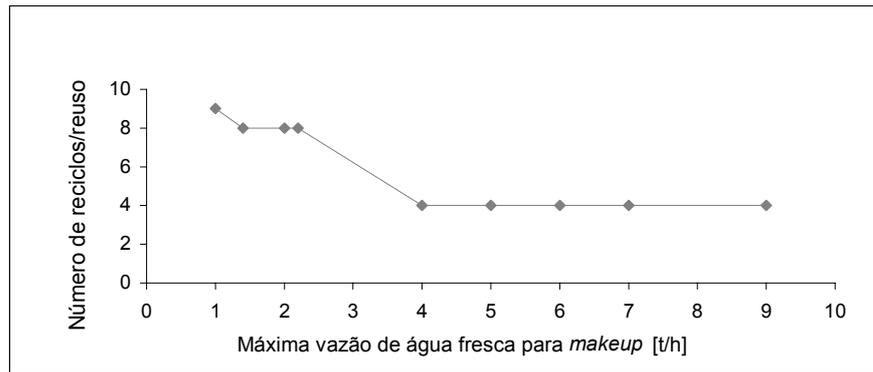


Figura 4.11: Resultados da otimização da superestrutura: número de ciclos/reusos *versus* vazão de água fresca para *makeup*.

A Figura 4.12 mostra que quanto menor a quantidade de água fresca de *makeup* adicionada no sistema, maior será a quantidade de poluente removida pelos regeneradores. Isto porque cada um dos processos apresenta um limite máximo de poluente admissível na sua corrente de entrada. Quando a vazão de água de *makeup* não é suficiente para diluir a concentração de poluente no nível admissível é necessário uma maior remoção dos poluentes.

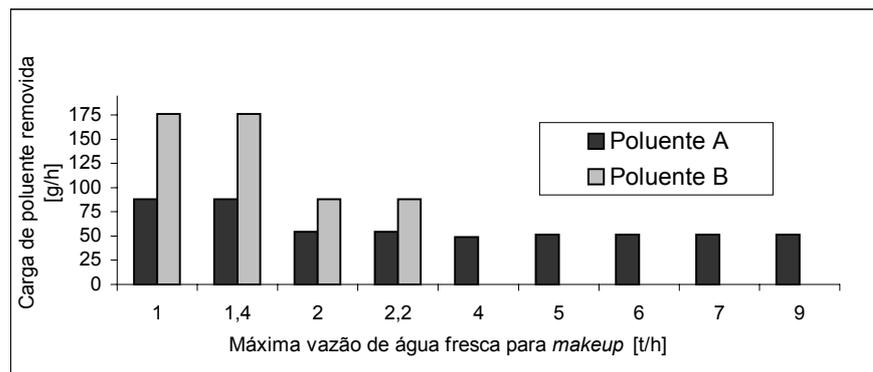


Figura 4.12: Resultados da otimização da superestrutura: poluente removido pelos regeneradores *versus* vazão de água fresca para *makeup*.

Em linhas gerais, fazendo uma análise das soluções obtidas, as configurações mais integradas massicamente, representadas pelas Figuras 4.3, 4.4, 4.5 e 4.6, apresentam as seguintes características:

- Menores vazões totais de água fresca de *makeup*;
- Maior número de conexões, ou seja, maior número de correntes de reciclo/reuso entre as unidades;
- Maior distância total entre as conexões;

- Maior quantidade de poluente removido pelos regeneradores;
- Maior redução no consumo total de água do sistema;
- Menor quantidade de efluente líquido que deve ser tratado e descartado no meio ambiente.

Um aspecto que deve ser levado em conta em projetos de rede de integração mássica deste tipo é que uma redução do consumo de água às custas de um aumento no número de ciclos entre as unidades, torna o sistema mais integrado e, portanto, mais difícil de operá-lo. Assim uma análise da operabilidade da rede faz-se necessária, para evitar que a rede projetada não seja possível de operar.

Capítulo 5

Estudo da Operabilidade da Rede de Integração

Este capítulo apresenta o estudo da operabilidade das estruturas para recuperação de água de processos, obtidas no capítulo anterior. Para esta análise, foram escolhidas três configurações provenientes da solução do problema de otimização da superestrutura.

Um modelo dinâmico simples foi desenvolvido para a análise de operabilidade do sistema, capaz de representar o comportamento dinâmico da rede de integração mássica, a influência das correntes de reciclo/reuso e a influência da capacidade dos processos e do tempo de residência dos regeneradores. A linearização do modelo dinâmico fez-se necessária para poder usar as ferramentas de análise da operabilidade do sistema disponíveis na literatura.

Os critérios usados neste trabalho, para análise da viabilidade operacional das configurações obtidas para o sistema, foram: RGA (matriz de ganhos relativos), condicionamento mínimo do sistema, RHP-zeros (zeros no semi-plano positivo) e RPN (índice de desempenho robusto).

5.1 Caracterização do modelo

A caracterização do modelo, em termos de variáveis controladas e manipuladas, é essencial para análise de operabilidade das configurações da rede de integração mássica. Neste trabalho, a operabilidade da rede é estudada em termos de sua controlabilidade, ou seja, se a rede é controlável então ela pode ser operada. Segundo ZIEGLER & NICHOLS (1943) a controlabilidade consiste na habilidade que um processo possui em alcançar e manter um estado estacionário.

Nesta etapa de caracterização do modelo, surgem questões como: O que se deseja controlar? O que é possível manipular para conseguir controlar o que é desejado? Ao responder estas indagações são escolhidas as variáveis manipuladas e controladas do sistema a ser analisado.

Sem esquecer o objetivo primordial da rede: recuperação de água de processos, reduzindo o impacto ambiental, outros critérios, como limitações operacionais, são levados em conta neste estudo, na seleção das variáveis controladas. De posse do que se deseja controlar, as variáveis que, ao serem modificadas pelo operador da planta, exercem alguma influência no que se deseja controlar podem ser usadas como variáveis manipuladas.

Critérios operacionais, como concentração de poluente na entrada dos processos, e critérios ambientais, como a concentração de poluente no efluente líquido que sai do sistema, foram escolhidos como variáveis a serem controladas. A concentração de poluente na entrada dos processos se enquadra nas restrições operacionais porque, caso não seja controlada, pode resultar em produtos fora de especificação, danificar equipamentos, reduzir o tempo de vida útil de equipamentos e pode causar outros problemas.

Em geral, as concentrações de poluentes nas saídas dos processos são escolhidas como variáveis a serem controladas, principalmente pelo fato de estarem intimamente relacionadas com o nível de poluição fora do sistema. Entretanto neste trabalho, optou-se por controlar a concentração de poluente na entrada dos processos e a concentração de poluente na corrente de efluente que saem do sistema. A corrente de efluente que sai do sistema é formada pela mistura das correntes de saída de cada processo, que não serão recirculadas no sistema. Portanto, implicitamente as concentrações de saídas estão sendo controladas.

As variáveis manipuladas escolhidas para o controle da concentração de poluente foram: vazões de água fresca de *makeup*, as vazões de reciclo e reuso entre as unidades, vazões do efluente líquido que sai do sistema. Sendo que estes dois últimos conjuntos de variáveis são manipuladas através dos *splits*, ou seja, através da razão da vazão que sai de uma unidade e é recirculada para outra, ou eliminada pelo sistema, pela vazão total de saída desta unidade.

As cargas de poluentes que entram nos processos e que são removidas nos regeneradores são consideradas como distúrbios do sistema.

Todas as variáveis manipuladas e controladas são listadas, e descritas detalhadamente na seção 5.4 onde o resultado da análise da operabilidade é apresentado. A seguir é descrito o modelo dinâmico utilizado.

5.2 Modelo dinâmico

O modelo dinâmico da superestrutura para o problema padrão, desenvolvido no capítulo 4, foi implementado no *simulink* (versão 3.0.1), ferramenta integrante do *software* MATLAB (versão 5.3). A implementação foi feita na forma de subsistemas (blocos), nos quais estão contidas as equações do modelo de cada uma das unidades que compõem a superestrutura. As conexões entre as unidades, a água fresca de *makeup* e o efluente líquido que sai do sistema, foram incluídos na implementação através da matriz de divisão de correntes (*splits*). As especificações e condições iniciais, usadas para a simulação do modelo dinâmico no *simulink*, foram obtidas através dos resultados da otimização da superestrutura.

As configurações escolhidas para serem analisadas quanto as suas operabilidades, caracterizadas no modelo dinâmico através das especificações e condições iniciais, foram implementadas através de arquivos de comandos (*script*). Um menu foi implementado no arquivo do *simulink* para seleção do arquivo *script* que contém os dados de uma determinada configuração.

O modelo dinâmico da superestrutura foi construído a partir do modelo estacionário (formulação MINLP da superestrutura, apresentada no capítulo 4) pela adição do termo de acúmulo nas equações de balanço de massa de cada uma das unidades do sistema.

Com intuito de desenvolver um modelo dinâmico, flexível quanto ao número de componentes, a sua implementação no *simulink* foi feita na forma vetorial. Portanto, para o problema proposto, a partir desta seção, o índice que representa os componentes do sistema, subíndice j , pode assumir três valores: 1 para poluente A, 2 para poluente B e 3 para água. Além disso, o índice usado na representação das correntes das unidades do sistema, subíndice i , pode também assumir o valor 7, representando a corrente de efluente líquido que sai do sistema.

5.2.1 Equações do modelo

Nesta seção, são mostradas as equações do modelo dinâmico de cada uma das unidades (processos e regeneradores) da superestrutura, implementadas na forma de subsistemas no *simulink*. É mostrada também a matriz de *splits* empregada na implementação do modelo.

Modelagem dos processos

A versão dinâmica do balanço de massa global dos processos é dada por:

$$\frac{dM_i}{dt} = Lin_i - Lout_i + \sum_{j=1}^2 M_{i,j} \cdot 10^{-6}, \text{ para } i=1, \dots, 4 \quad (5.1)$$

O acúmulo de massa (*holdup*) dos processos, M_i , foi controlado, para manter o nível no valor desejado (*setpoint*), inserindo-se um controlador proporcional. A ação de controle imposta pelo controlador é dada por:

$$Lout_i = Lout_{,bias_i} - Kp_i \cdot (Mset_i - M_i), \text{ para } i=1, \dots, 4, \quad (5.2)$$

onde: $Lout_{,bias_i}$ = valor do *bias* da vazão mássica de saída do processo i ;

$Mset_i$ = valor do *setpoint* para o acúmulo de massa do processo i ;

Kp_i = ganho do controlador do processo i .

A Figura 5.1 mostra um esquema do controlador para o *holdup* dos processos.

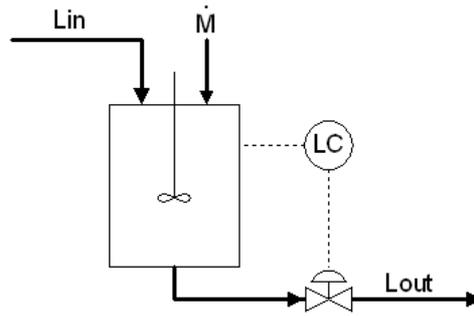


Figura 5.1: Esquema do controlador para o *holdup* dos processos.

O acúmulo de massa foi controlado através do erro entre o valor atual do *holdup* e o *setpoint*. Inserindo a expressão 5.2 na equação 5.1, tem-se:

$$\frac{dM_i}{dt} = Lin_i - Lout_i + bias_i + Kp_i \cdot (Mset_i - M_i) + \sum_{j=1}^2 \dot{M}_{i,j} \cdot 10^{-6}, \text{ para } i=1,\dots,4 \quad (5.3)$$

O balanço mássico por componente para os processos é dado por:

$$\frac{dM_i x_{i,j}}{dt} = Lin_{i,j} - Lout_i \cdot x_{i,j} + \dot{M}_{i,j}, \text{ para } i=1,\dots,4 \text{ e } j=1,\dots,3 \quad (5.4)$$

com:

$$\dot{M}_{i,3} = 0 \quad (5.5)$$

Como tanto a fração mássica do componente j quanto o *holdup* do processo i podem variar com o tempo, tem-se:

$$\frac{dM_i x_{i,j}}{dt} = M_i \frac{dx_{i,j}}{dt} + x_{i,j} \frac{dM_i}{dt}, \quad (5.6)$$

Substituindo a equação de balanço de massa global, equação 5.1, na equação 5.6, e retornando à equação 5.4, tem-se:

$$M_i \frac{dx_{i,j}}{dt} = Lin_{i,j} - Lin_i \cdot x_{i,j} + \dot{M}_{i,j} - x_{i,j} \cdot \sum_{j=1}^2 \dot{M}_{i,j} \cdot 10^{-6}, \text{ para } i=1,\dots,4 \text{ e } j=1,\dots,3. \quad (5.7)$$

Modelagem dos regeneradores

Visando simplificar a modelagem, a dinâmica dos regeneradores foi considerada pela inclusão de um vaso pulmão acoplado a um separador perfeito, conforme ilustra a Figura 5.2. O acúmulo do vaso pulmão é dado por:

$$\frac{dM_i}{dt} = Lin_i - Lmid_i, \text{ para } i=5,6 \quad (5.8)$$

De modo similar à modelagem dos processos, o acúmulo de massa (*holdup*) do vaso pulmão, M_i , foi controlado através de um controlador proporcional, cuja ação de controle é dada por:

$$Lmid_i = Lmid_{bias_i} - Kp_i \cdot (Mset_i - M_i), \text{ para } i=5,6 \quad (5.9)$$

onde: $Lout_{bias_i}$ = valor do *bias* da vazão mássica de saída do regenerador i ;
 $Mset_i$ = valor do *setpoint* para o acúmulo de massa do regenerador i ;
 Kp_i = ganho do controlador do regenerador i .

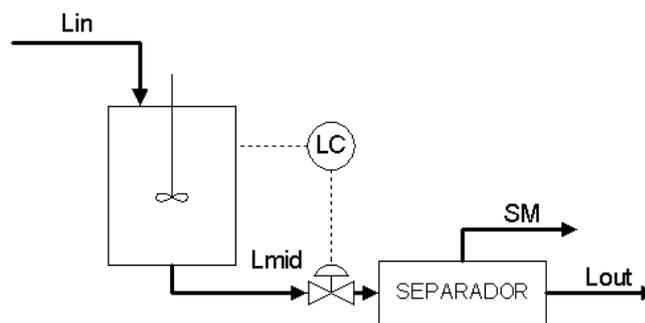


Figura 5.2: Esquema dos regeneradores.

O separador perfeito, usado na modelagem dinâmica dos regeneradores, é descrito pela equação 5.10.

$$Lout_i = Lmid_i - \sum_{j=1}^2 SM_{i,j} \cdot 10^{-6}, \text{ para } i=5,6 \quad (5.10)$$

Sendo cada regenerador restrito quanto à seletividade dos poluentes, tem-se:

$$SM_{5,2} = 0 \text{ e } SM_{6,1} = 0 \quad (5.11)$$

O balanço de massa por componentes no vaso pulmão, após a substituição da equação 5.8, é dado por:

$$M_i \cdot \frac{dx_{mid_{i,j}}}{dt} = Lin_{i,j} - Lin_i \cdot x_{mid_{i,j}}, \text{ para } i=5,6 \text{ e } j=1,\dots,3 \quad (5.12)$$

e no separador perfeito por:

$$Lout_i \cdot x_{i,j} = Lmid_i \cdot x_{mid_{i,j}} - SM_{i,j}, \text{ para } i=5,6 \text{ e } j=1,\dots,3 \quad (5.13)$$

com:

$$SM_{i,3} = 0 \quad (5.14)$$

Equivalentemente, isolando o acúmulo dos regeneradores descritos pela equação 5.9, tem-se:

$$M_i = \frac{Lmid_i - Lmid_{bias_i}}{Kp_i} + Mset_i \quad (5.15)$$

Derivando a equação acima obtém-se:

$$\frac{dM_i}{dt} = \frac{1}{Kp_i} \cdot \frac{dLmid_i}{dt} \quad (5.16)$$

Substituindo a equação 5.16 na equação 5.8, tem-se:

$$\tau_i \frac{dLmid_i}{dt} = Lin_i - Lmid_i, \quad (5.17)$$

onde: $\tau_i = \frac{1}{Kp_i}$ equivalente ao tempo de residência dos regeneradores.

Definição da conexão entre as unidades, água fresca de makeup e efluente líquido eliminado pelo sistema.

Na implementação do modelo dinâmico da superestrutura, as conexões entre as unidades, bem como as vazões da água fresca de *makeup* e do efluente líquido que saem do sistema foram incluídas na forma matricial, através da matriz de *splits*. Previamente a matriz de *splits* é necessário definir a matriz de recírculos/reusos, L , que apresenta a seguinte forma:

$$L = \begin{bmatrix} L_{1,1} & \cdots & L_{1,6} & F_1 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ L_{6,1} & \cdots & L_{6,6} & F_6 \\ W_1 & \cdots & W_6 & 0 \end{bmatrix}_{7 \times 7} \quad (5.18)$$

onde: $L_{i,k}$ = vazão mássica que sai da unidade k e entra na unidade i ;
 F_i = vazão de água fresca de *makeup* que entra na unidade i ;
 W_i = vazão mássica de efluente líquido que sai unidade i .

É importante salientar que as seis primeiras colunas da matriz L representam as correntes de saída de cada unidade, enquanto que as seis primeiras linhas representam as correntes de entrada de cada uma das unidades. Todos os elementos que compõem a matriz L são provenientes do resultado da otimização da superestrutura. A partir da matriz de reciclos/reusos, define-se a matriz de *splits*, s , como sendo:

$$s = L \cdot [\text{diag}(Ls)]^{-1}, \quad (5.19)$$

onde: L = matriz de reciclos/reusos entre as unidades;
 diag = operação que transforma um vetor em matriz diagonal;
 Ls = vetor que contém o somatório ao longo das colunas de L .

Cada elemento $s_{i,k}$ da matriz de *splits* representa a parcela da vazão que sai da unidade k e entra na unidade i . Por exemplo, o elemento $s_{2,3}$, representa a vazão de reciclo/reuso que sai do processo 3 e entra no processo 2, ou seja,

$$s_{2,3} = \frac{L_{2,3}}{Ls_3} = \frac{L_{2,3}}{W_3 + \sum_{i=1}^6 L_{i,3}}$$

As equações que definem a vazão e concentração de cada uma das espécies envolvidas no efluente líquido que sai do sistema são mostradas a seguir:

$$Lout_7 = \sum_{i=1}^6 W_i \quad (5.20)$$

$$x_{7,j} = \frac{\sum_{i=1}^6 W_i \cdot x_{i,j}}{Lout_7}, \text{ para } j=1, \dots, 3 \quad (5.21)$$

Como resultados da solução do modelo dinâmico da superestrutura, é possível obter, para cada uma das configurações analisadas, a vazão de saída de cada uma das unidades

($L_{out,i}$, $i=1,\dots,6$), a vazão do efluente líquido que sai do sistema ($L_{out,i}$, $i=7$) e a concentração de saída das espécies envolvidas (poluente A, poluente B e água) de cada uma das unidades e do efluente líquido que sai do sistema ($x_{i,j}$, $i=1,\dots,7$, e $j=1,\dots,3$).

5.2.2 Especificações

No modelo dinâmico da superestrutura, as seguintes variáveis foram fixadas:

- Tempo de residência dos regeneradores;
- Parâmetro K_p do controlador proporcional (ganho) do *holdup* de cada processo;
- Valor do *setpoint* para o *holdup* mássico dos processos;
- Valor do *bias* da vazão mássica de saída de cada processo, equivalente a vazão operacional, proveniente do modelo estacionário da superestrutura.

A Tabela 5.1 mostra os valores especificados no modelo dinâmico da superestrutura.

Tabela 5.1: Especificações do modelo dinâmico da superestrutura.

Unidades	Tempo de residência	Ganho do controlador	Valor do <i>setpoint</i>	Valor do <i>bias</i> da vazão
	τ [h]	K_p [h^{-1}]	Mset [t]	$L_{out,bias}$ [t/h]
Processo 1	-	100	2	2
Processo 2	-	100	2	2
Processo 3	-	100	3	3
Processo 4	-	100	3	3
Regenerador 1	0,5	-	-	-
Regenerador 2	0,5	-	-	-

Cabe ressaltar que o valor do *bias* da vazão para os regeneradores são equivalentes à vazão operacional dos regeneradores, provenientes da otimização da superestrutura, diferindo em relação a configuração escolhida.

5.3 Modelo linearizado

Um modelo linear, que represente o comportamento dinâmico do sistema, faz-se necessário para poder usar as ferramentas de análise da operabilidade desenvolvidas para sistemas lineares. Particularmente, o sistema proposto neste trabalho é bilinear em relação à vazão e concentração, sendo bem representado por um modelo linear. Nesta seção é mostrada a linearização do modelo dinâmico da superestrutura.

A partir do modelo dinâmico não linear dos processos e regeneradores, descrito na seção 5.2, com as entradas e saídas do sistema, descritas na seção 5.1, é possível obter o modelo linear destas unidades na representação de espaço de estados.

Sendo conhecido o modelo do sistema é possível linearizá-lo, expandindo as funções não lineares em série de *Taylor* truncando-as no termo linear. O mesmo pode ser feito para as funções que representam as saídas do sistema, gerando assim a representação na forma de espaço de estados. Esta representação é definida da seguinte forma:

$$\begin{aligned}\dot{\Delta x} &= A \cdot \Delta x + B \cdot \Delta u \\ \Delta y &= C \cdot \Delta x + D \cdot \Delta u\end{aligned}\quad (5.22)$$

onde: x = estados, ou seja, variáveis que caracterizam o sistema;
 Δx = variação nos estados em relação ao estacionário;
 Δu = variação nas entradas em relação ao estacionário;
 Δy = variação nas saídas em relação ao estacionário;
 A, B, C, D = matrizes resultantes das linearizações.

Conhecendo-se as matrizes em espaço de estados que representam o modelo linear de cada uma das unidades, as conexões entre elas, necessárias para representar a rede como um todo, foram implementadas no *software* MATLAB (versão 5.3), com auxílio do *μ -toolbox* (versão 3.0.4), uma de suas ferramentas. O *μ -toolbox* apresenta uma rotina chamada *sysic* que forma a conexão linear das matrizes do sistema, através da resolução da malha de conexões entre as unidades, gerando uma única representação na forma de espaço de estados para todo o sistema.

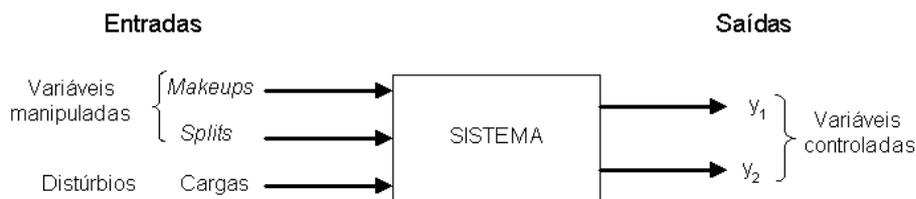


Figura 5.3: Entradas e saídas do sistema usadas na linearização da rede.

A caráter explicativo, a Figura 5.3 mostra um esquema do sistema considerado na linearização da rede. As vazões de *makeups*, as cargas de poluentes (cargas que entram nos processos e cargas que saem dos regeneradores) e os *splits* representam os conjuntos de entradas, enquanto y_1 e y_2 representam os conjuntos de saídas do sistema. No conjunto y_1 , estão incluídas as vazões e concentrações de saídas das unidades, enquanto no conjunto y_2 , estão incluídas as vazões e concentrações do efluente líquido que sai da rede. A Figura 5.4 mostra um esquema da malha usada na linearização da rede.

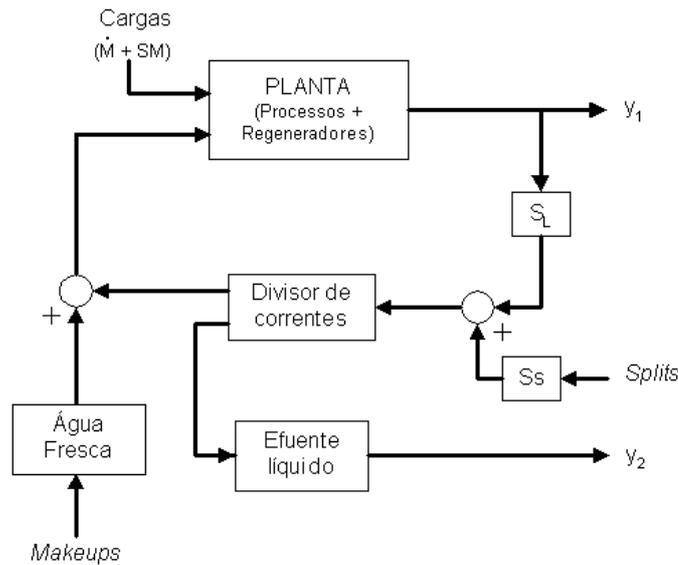


Figura 5.4: Esquema da malha de conexões usada para a linearização da rede.

As matrizes na forma de espaço de estados de cada um dos blocos representados na Figura 5.4 estão contidas no apêndice D.

5.4 Critérios de análise

Nesta seção, após a caracterização do problema para cada uma das configurações escolhidas, são apresentados os critérios de análise da operabilidade da rede de integração.

As configurações da rede de integração escolhidas para analisar sua viabilidade operacional foram: $F_{\text{máx}} = 1,4; 2,2$ e 5 t/h. A configuração $F_{\text{máx}} = 4$ t/h foi descartada da análise pois apresenta apenas correntes de reuso entre as unidades, enquanto as configurações restantes não foram analisadas pois são muito similares às configurações escolhidas.

Como já descrito anteriormente, na seção 5.1, para a caracterização do problema, foram escolhidas as vazões de água fresca de *makeup* e os *splits* como variáveis manipuladas. Os critérios usados para seleção dos *splits* manipulados foram:

- Levando-se em conta que os *splits* que saem de uma mesma unidade são linearmente dependentes entre si, devido a sua definição, pelo menos um não deve ser selecionado;
- Nos processos onde toda a corrente de saída vai para o efluente líquido gerado este *split* foi selecionado como uma variável manipulada;
- Os *splits* referentes à água fresca de *makeup* não foram selecionados, pois as vazões de *makeup* já foram selecionadas como variáveis manipuladas do sistema.

As variáveis controladas em todas as configurações, como mencionado na seção 5.1, estão mostradas na Tabela 5.2.

Tabela 5.2: Variáveis controladas das configurações analisadas.

Saída	Variável controlada	Nome da variável controlada
y(1)	$X_{in,1,1}$	Concentração de entrada no processo 1 de poluente A
y(2)	$X_{in,2,2}$	Concentração de entrada no processo 2 de poluente B
y(3)	$X_{in,3,2}$	Concentração de entrada no processo 3 de poluente B
y(4)	$X_{in,4,1}$	Concentração de entrada no processo 4 de poluente A
y(5)	$X_{waste,1}$	Concentração de poluente A no efluente líquido que sai do sistema
y(6)	$X_{waste,2}$	Concentração de poluente B no efluente líquido que sai do sistema

As possíveis variáveis manipuladas para cada configuração, segundo os critérios descritos anteriormente, são apresentadas nas Tabelas 5.3 à 5.5 e Figuras 5.5 à 5.7.

Tabela 5.3: Variáveis manipuladas na configuração $F_{m\acute{a}x} = 1,4$ t/h.

Entrada	Variável manipulada	Nome da variável manipulada
u(1)	F_1	Vazão de água fresca de <i>makeup</i> no processo 1
u(2)	F_2	Vazão de água fresca de <i>makeup</i> no processo 2
u(3)	F_3	Vazão de água fresca de <i>makeup</i> no processo 3
u(4)	F_4	Vazão de água fresca de <i>makeup</i> no processo 4
u(5)	$s_{3,2}$	<i>Split</i> que sai do processo 2 e entra no processo 3
u(6)	$s_{6,3}$	<i>Split</i> que sai do processo 3 e entra no regenerador 2
u(7)	$s_{2,5}$	<i>Split</i> que sai do regenerador 1 e entra no processo 2
u(8)	$s_{1,6}$	<i>Split</i> que sai do regenerador 2 e entra no processo 1

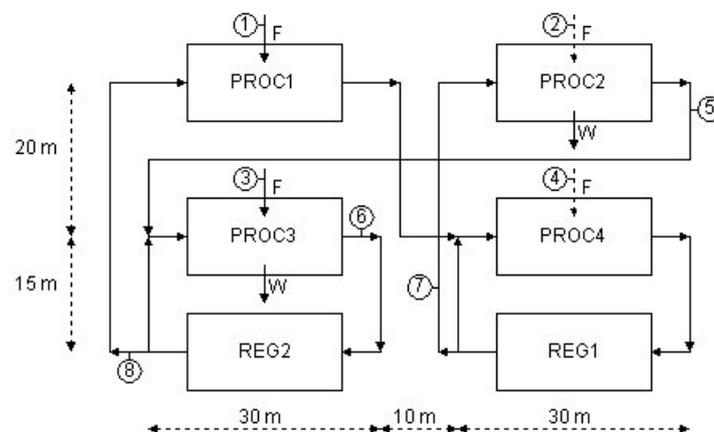
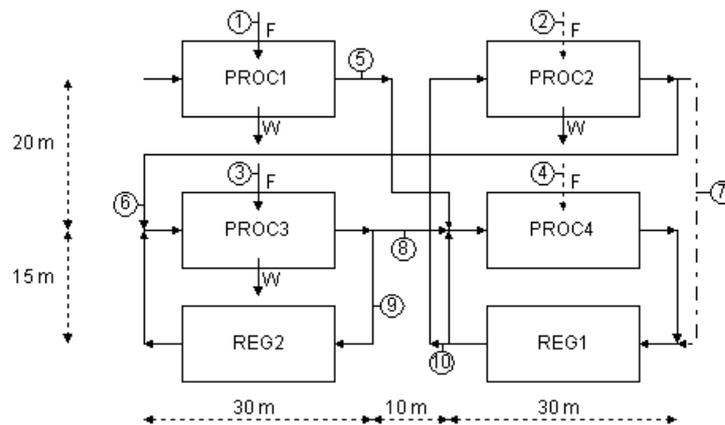
**Figura 5.5:** Representação das variáveis manipuladas na configuração $F_{m\acute{a}x} = 1,4$ t/h.

Tabela 5.4: Variáveis manipuladas na configuração $F_{\text{máx}} = 2,2$ t/h.

Entrada	Variável manipulada	Nome da variável manipulada
u(1)	F_1	Vazão de água fresca de <i>makeup</i> no processo 1
u(2)	F_2	Vazão de água fresca de <i>makeup</i> no processo 2
u(3)	F_3	Vazão de água fresca de <i>makeup</i> no processo 3
u(4)	F_4	Vazão de água fresca de <i>makeup</i> no processo 4
u(5)	$s_{4,1}$	<i>Split</i> que sai do processo 1 e entra no processo 4
u(6)	$s_{3,2}$	<i>Split</i> que sai do processo 2 e entra no processo 3
u(7)	$s_{5,2}$	<i>Split</i> que sai do processo 2 e entra no regenerador 1
u(8)	$s_{4,3}$	<i>Split</i> que sai do processo 3 e entra no processo 4
u(9)	$s_{6,3}$	<i>Split</i> que sai do processo 3 e entra no regenerador 2
u(10)	$s_{2,5}$	<i>Split</i> que sai regenerador 1 e entra no processo 2

**Figura 5.6:** Representação das variáveis manipuladas na configuração $F_{\text{máx}} = 2,2$ t/h.**Tabela 5.5:** Variáveis manipuladas na configuração $F_{\text{máx}} = 5$ t/h.

Entrada	Variável manipulada	Nome da variável manipulada
u(1)	F_1	Vazão de água fresca de <i>makeup</i> no processo 1
u(2)	F_2	Vazão de água fresca de <i>makeup</i> no processo 2
u(3)	F_3	Vazão de água fresca de <i>makeup</i> no processo 3
u(4)	F_4	Vazão de água fresca de <i>makeup</i> no processo 4
u(5)	$s_{7,1}$	<i>Split</i> que sai do processo 1
u(6)	$s_{7,2}$	<i>Split</i> que sai do processo 2
u(7)	$s_{4,3}$	<i>Split</i> que sai do processo 3 e entra no processo 4
u(8)	$s_{5,4}$	<i>Split</i> que sai do processo 4 e entra no regenerador 1
u(9)	$s_{2,5}$	<i>Split</i> que sai do regenerador 1 e entra no processo 2

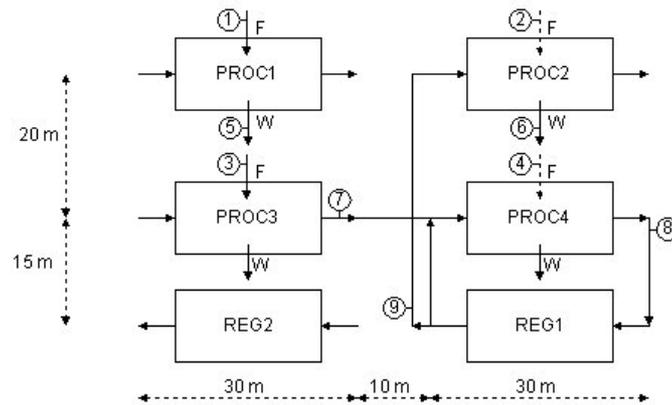


Figura 5.7: Representação das variáveis manipuladas na configuração $F_{\max} = 5$ t/h.

Na representação das variáveis manipuladas nas 3 configurações analisadas, Figuras 5.5, 5.6 e 5.7, as linhas tracejadas nas alimentações dos processos 2 e 4 (entradas $u(2)$ e $u(4)$) representam os *makeups* que não existem segundo o resultado da otimização da superestrutura, ou foram desconsiderados devido a baixa ordem de grandeza ($\leq 10^{-5}$ t/h). Na Figura 5.6, a linha tracejada que sai do processo 2 e entra no regenerador 1 (entrada $u(7)$), representa o *split* de uma corrente desconsiderada numa primeira análise, pois é da ordem de 10^{-6} t/h. Estas entradas foram consideradas para aumentar o número de variáveis possíveis a serem manipuladas, dando uma maior flexibilidade na operabilidade da rede. Maiores detalhes das considerações feitas na análise da operabilidade são explicados na seção 5.5.

A seguir, são sumarizadas as definições dos critérios usados na análise da viabilidade operacional das configurações da rede de integração. Estas definições podem ser encontradas de forma mais aprofundada em FARINA (2000).

5.4.1 RGA (matriz de ganhos relativos)

A matriz de ganho relativos ou RGA (*Relative Gain Array*) foi introduzida por BRISTOL (1966) como uma medida do grau de interação entre os pares de entradas e saídas (canais) de um sistema, informando qual o emparelhamento mais adequado.

O RGA de uma matriz $M_{n \times n}$ complexa não singular, conhecido como $RGA(M)$ é uma matriz definida por:

$$RGA(M) = M \otimes (M^{-1})^T, \quad (5.23)$$

onde: M é a matriz de ganhos do sistema e a operação “ \otimes ” denota a multiplicação elemento por elemento.

Cada elemento do RGA estacionário representa o fator que o ganho no canal em malha aberta (planta sem controlador) é alterado quando suas malhas são fechadas.

O critério usado para análise do RGA é avaliar o valor dos elementos da diagonal principal do RGA. Quando estes elementos estão próximos de um, o ganho entre a variável de entrada e a variável de saída não é afetado pelo fechamento das outras malhas, caracterizando um sistema com pouca interação. Portanto, um bom emparelhamento é aquele que apresenta uma matriz de RGA próxima à matriz identidade.

5.4.2 Condicionamento mínimo do sistema

De acordo com SKOGESTAD & POSTLETHWAITE (1996), a direcionalidade é usualmente calculada através da decomposição em valores singulares. Esta análise se baseia na generalização do conceito de ganho de sistemas monovariáveis (SISO) para sistemas multivariáveis (MIMO). Desta forma, o grau de direcionalidade pode ser entendido como a diferença entre os limites máximos e mínimo do ganho para sinais de entrada de mesma intensidade, mas em diferentes direções. Uma maneira de mensurar esta diferença é através do condicionamento do sistema (γ), que consiste em:

$$\gamma = \frac{\bar{\sigma}}{\underline{\sigma}}, \quad (5.24)$$

onde: $\bar{\sigma}$ = máximo valor singular da matriz de transferência;
 $\underline{\sigma}$ = mínimo valor singular da matriz de transferência.

Um problema do condicionamento do sistema é que ele depende do sistema de unidades (ou escalonamento) escolhido. Para anular este efeito utiliza-se o conceito de escalonamento mínimo das variáveis, que consiste em alterar os sistemas de medida do processo de tal forma que se obtenha o condicionamento mínimo (γ^*) do sistema.

Alguns sistemas apresentam ganhos equivalentes para uma série de direções de entradas. Estes sistemas possuem condicionamento baixo e são ditos bem condicionados. Devido a sua baixa direcionalidade, sistemas bem condicionados são poucos sensíveis às incertezas nas entradas, presentes em qualquer processo industrial, indicando uma certa facilidade no projeto do controlador.

Como esta medida varia com a frequência de operação do sistema é interessante que a mesma seja analisada na região de frequência de atuação do controlador.

5.4.3 RHP-zeros (zeros no semi plano positivo)

Um critério importante na seleção das estruturas de controle são os RHP-zeros, ou zeros positivos. Um sistema que possui zeros positivos apresenta desempenho alcançável limitado, pois estes limitam a velocidade de atuação do controlador.

Segundo TRIERWEILER (1997), os zeros de um sistema podem surgir quando existem efeitos competitivos anulando as saídas do sistema, sem que as entradas, ou estados, sejam nulos. Para sistemas multivariáveis (múltiplas entradas e múltiplas saídas), o conceito

de zeros usualmente adotado é o zero de transmissão, isto é, se “z” é um zero de transmissão do sistema então $G(z)$ apresenta posto inferior ao da matriz de transferência, $G(s)$, que representa o sistema.

A presença de zeros em determinados canais de um sistema não indica necessariamente que há zeros de transmissão e vice-versa: a matriz $G(s)$ pode ter um zero de transmissão mesmo que seus canais não tenham zeros.

O critério usado para análise dos zeros positivos é a distância do zero à origem, ou seja, quanto menor o valor do zero positivo, maior será a limitação imposta por ele ao sistema. Neste caso, as estruturas que não apresentam RHP-zeros são preferenciais às que apresentam algum RHP-zero, enquanto que as estruturas que apresentam RHP-zeros maiores são preferenciais aquelas que possuem RHP-zeros menores.

5.4.4 RPN (índice de desempenho robusto)

A metodologia RPN foi introduzida por TRIERWEILER (1997) como uma maneira sistemática para a determinação da controlabilidade de um dado sistema, definidos os pareamentos entre as variáveis de entrada e saída, baseando-se no Número de Desempenho Robusto ou RPN (*Robust Performance Number*).

O RPN indica o grau de dificuldade de se alcançar um desempenho robusto. O seu valor é influenciado pelo desempenho desejado para o controlador e pelo grau de direcionalidade do sistema. A sua definição é:

$$RPN = \Gamma_{\sup}^{\Delta}(G, T, \omega) = \sup_{\omega \in R} \{\Gamma(G, T)\} \quad (5.25)$$

$$\text{onde: } \Gamma(G, T) = \sqrt{\bar{\sigma}([1 - T(j\omega)]T(j\omega)) \left(\gamma^*(G(j\omega)) + \frac{1}{\gamma^*(G(j\omega))} \right)}$$

O termo $\bar{\sigma}([1 - T(j\omega)]T(j\omega))$ é o maior valor singular da função $[1 - T]T$ e o termo $\gamma^*(G(j\omega))$ é o condicionamento mínimo do sistema. G é o modelo nominal do processo. T é a função complementar de sensibilidade desejada alcançável para a saída. Plotando Γ em função da frequência (ω), o gráfico terá um valor máximo ao qual atribui-se o nome de RPN. A região onde se encontra este pico equivale ao intervalo onde está contida a frequência de corte. Na função T inserem-se as características desejadas para o controle, como o tempo de subida, o máximo *overshoot* e o máximo *offset* (erro em relação ao estacionário) aceitável para o controlador.

O critério de análise para o RPN é quanto mais próximo da unidade estiver este valor melhores serão os resultados da estrutura de controle.

5.5 Resultados

Os resultados da análise de operabilidade das configurações da superestrutura foram gerados através do RPN Toolbox (versão 2.0), a partir do modelo dinâmico linearizado das configurações. O RPN Toolbox é uma interface em ambiente MATLAB, desenvolvida no Departamento de Engenharia Química da UFRGS, por FARINA (2000).

A análise da operabilidade foi feita escolhendo estruturas de controle para cada uma das configurações analisadas. Entende-se por estruturas de controle, a seleção das variáveis manipuladas escolhidas para controlar as variáveis controladas. Comparando os resultados obtidos, para os conjuntos de estruturas de controle de cada uma das configurações, é possível caracterizar a facilidade de operar cada uma das configurações.

Primeiramente, a análise foi realizada considerando apenas os *makeups* e *splits* existentes nas configurações analisadas, conforme o resultado da síntese obtida através da otimização da superestrutura. Cabe salientar que nesta primeira análise foram desconsideradas as correntes com vazões menores que 10^{-5} t/h (10g/h). Isto se justifica pois o custo de instalação de tubulações para estas correntes, bem como o bombeamento das mesmas encareceria muito o projeto do sistema com baixo benefício.

Importante ressaltar que foi feita uma análise inserindo a concentração de poluente A na entrada do processo 3 como uma variável a ser controlada. Então, ao tentar controlar a concentração dos dois poluentes na entrada do processo 3, verificou-se a impossibilidade de controlar ambos os poluentes. Isto deve-se ao fato do sistema não possuir graus de liberdades suficientes.

Posteriormente, com o intuito de deixar as configurações mais flexíveis em relação a sua operabilidade, foi realizado um estudo adicionando-se graus de liberdade ao sistema. O grau de liberdade de um sistema é quantificado através da diferença entre o número de variáveis manipuladas e o número de variáveis controladas. O aumento no grau de liberdade foi feito através de duas formas: adições de *makeups* ou adições de *splits* que não existiam nas configurações ou foram desconsiderados devido a ordem de grandeza de suas vazões.

Um ponto importante a ser salientado consiste no fato que toda a análise de operabilidade foi feita sem definir o tipo de controlador. A única especificação do controlador foi quanto ao seu desempenho, contemplado na análise através do índice RPN.

A seguir, são apresentados os principais resultados obtidos nas análises descritas acima para as configurações analisadas.

5.5.1 Análise considerando apenas os *makeups* e *splits* existentes

Como já mencionado anteriormente, a primeira análise da operabilidade contempla as estruturas de controle que possuem apenas as variáveis manipuladas existentes e que não foram desconsideradas devido à baixa ordem de grandeza.

As estruturas de controle escolhidas para esta análise apresentam como variáveis manipuladas os dois *makeups* existentes em todas as configurações analisadas (entradas $u(1)$ e $u(3)$) mais uma combinação de quatro *splits* considerados, ou seja, uma variável manipulada para cada uma das seis variáveis controladas. Seguindo este critério, foram analisadas todas as possíveis estruturas de controle para cada configuração. Neste trabalho, cada estrutura é caracterizada pela escolha de 6 variáveis manipuladas (entradas), desde que, para todas as estruturas, as variáveis a serem controladas (saídas) são as mesmas.

A notação utilizada para identificar as diferentes estruturas de controle é dada por $ESc - n$, onde “c” corresponde à configuração usada (c=1, 2 e 5 para $F_{\text{máx}} = 1,4$; 2,2 e 5 t/h, respectivamente) e “n” é o número da estrutura considerada.

Estrutura de controle da configuração $F_{\text{máx}} = 1,4$ t/h

Na configuração $F_{\text{máx}} = 1,4$ t/h apenas uma estrutura de controle é possível, levando-se em conta somente os *makeups* e *splits* considerados. Esta estrutura é apresentada na Tabela 5.6 e suas variáveis manipuladas são mostradas na Figura 5.8.

Tabela 5.6: Estrutura de controle analisada na configuração $F_{\text{máx}} = 1,4$ t/h.

Estrutura Analisada	Entradas
ES1-1	$u(1)$, $u(3)$, $u(5)$, $u(6)$, $u(7)$ e $u(8)$

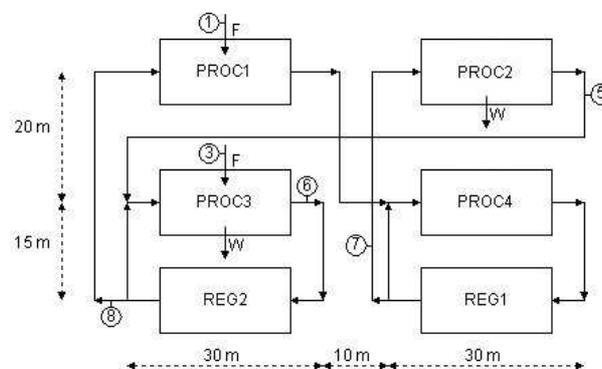


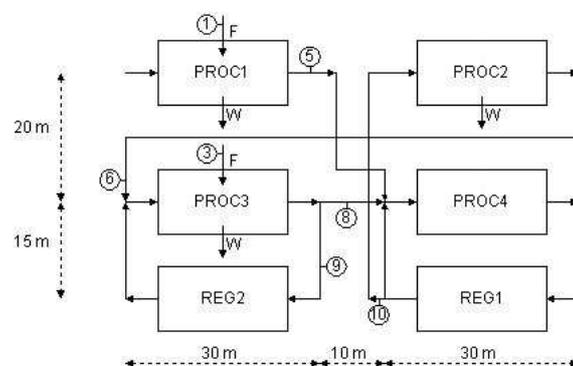
Figura 5.8: Variáveis manipuladas na configuração $F_{\text{máx}} = 1,4$ t/h.

Estruturas de controle da configuração $F_{\text{máx}} = 2,2$ t/h

A configuração $F_{\text{máx}} = 2,2$ t/h apresenta 5 estruturas de controle possíveis, levando-se em conta apenas os *makeups* e *splits* considerados. Estas estruturas se encontram na Tabela 5.7 e suas variáveis manipuladas são mostradas na Figura 5.9.

Tabela 5.7: Estruturas de controle analisadas na configuração $F_{\text{máx}} = 2,2 \text{ t/h}$.

Estruturas Analisadas	Entradas
ES2-1	$u(1), u(3), u(5), u(6), u(8) \text{ e } u(9)$
ES2-2	$u(1), u(3), u(5), u(6), u(8) \text{ e } u(10)$
ES2-3	$u(1), u(3), u(5), u(6), u(9) \text{ e } u(10)$
ES2-4	$u(1), u(3), u(5), u(8), u(9) \text{ e } u(10)$
ES2-5	$u(1), u(3), u(6), u(8), u(9) \text{ e } u(10)$

**Figura 5.9:** Variáveis manipuladas na configuração $F_{\text{máx}} = 2,2 \text{ t/h}$.

Estruturas de controle da configuração $F_{\text{máx}} = 5 \text{ t/h}$

Na configuração $F_{\text{máx}} = 5 \text{ t/h}$, levando-se em conta apenas os *makeups* e *splits* considerados, 5 estruturas de controle são possíveis. Estas estruturas se encontram na Tabela 5.8 e suas variáveis manipuladas são mostradas na Figura 5.10.

Tabela 5.8: Estruturas de controle analisadas na configuração $F_{\text{máx}} = 5 \text{ t/h}$.

Estruturas analisadas	Entradas
ES5-1	$u(1), u(3), u(5), u(6), u(7) \text{ e } u(8)$
ES5-2	$u(1), u(3), u(5), u(6), u(7) \text{ e } u(9)$
ES5-3	$u(1), u(3), u(5), u(6), u(8) \text{ e } u(9)$
ES5-4	$u(1), u(3), u(6), u(7), u(8) \text{ e } u(9)$
ES5-5	$u(1), u(3), u(6), u(8), u(9) \text{ e } u(10)$

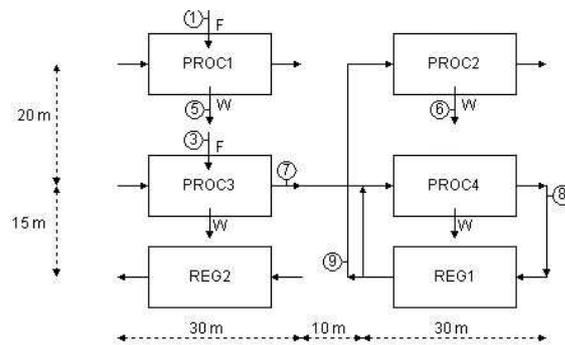


Figura 5.10: Variáveis manipuladas na configuração $F_{\text{máx}} = 5 \text{ t/h}$.

Resultados da primeira análise

Os valores dos RHP-zeros nas diversas possíveis estruturas de controle das configurações analisadas estão mostrados na Tabela 5.9.

Tabela 5.9: RHP-zeros das estruturas de controle analisadas.

Estruturas Analisadas	RHP-zeros
ES1-1	0,61947
ES2-1	0,004503 e $3,66 \cdot 10^9$
ES2-2	0,063508
ES2-3	0,04791
ES2-4	-
ES2-5	0,02055
ES5-1	-
ES5-2	-
ES5-3	-
ES5-4	0,38593
ES5-5	0,31701

Segundo o critério usado para análise dos RHP-zeros, observa-se que a configuração que apresenta mais estruturas de controle sem zeros positivos é a menos integrada ($F_{\text{máx}} = 5 \text{ t/h}$). A configuração $F_{\text{máx}} = 2,2 \text{ t/h}$ é a mais crítica em relação aos RHP-zeros, pois a maioria de suas estruturas possuem os zeros positivos mais próximos da origem. Portanto, a configuração $F_{\text{máx}} = 5 \text{ t/h}$ é que tem a menor limitação imposta pela presença de zeros positivos, enquanto a configuração $F_{\text{máx}} = 2,2 \text{ t/h}$ é a que possui a maior limitação. Importante salientar que, entre as estruturas que apresentam zeros positivos, a configuração $F_{\text{máx}} = 1,4 \text{ t/h}$ é a que apresenta o melhor valor de zero positivo.

O índice RPN, que leva em conta o desempenho desejado para o controlador, foi avaliado para todas as estruturas acima. O desempenho desejado, para as saídas de todas as

estruturas de controle foi uma resposta com 10% de *overshoot* e um tempo de subida igual a 3 horas. Os valores do índice RPN, para o desempenho especificado, nas possíveis estruturas de controle das configurações analisadas são apresentados na Tabela 5.10.

Tabela 5.10: RPN das estruturas de controle analisadas.

Estruturas Analisadas	RPN
ES1-1	4,30779
ES2-1	29,2673
ES2-2	4,79503
ES2-3	5,2020
ES2-4	8,94558
ES2-5	10,8179
ES5-1	3,34315
ES5-2	3,34276
ES5-3	3,34194
ES5-4	4,54618
ES5-5	4,46542

De acordo com os valores do índice RPN mostrados na tabela acima, observa-se que a configuração $F_{\text{máx}} = 5$ t/h é a que apresenta os menores valores, sendo caracterizada como a configuração mais fácil de ser operada. Enquanto que os piores valores do índice são evidenciados na configuração $F_{\text{máx}} = 2,2$ t/h.

Os RGAs das melhores estruturas de controle, segundo o índice RPN, de cada uma das configurações foram avaliados com o intuito de se escolher o melhor emparelhamento entre os conjuntos de entradas e saídas. De posse da escolha da estrutura (conjunto de entradas escolhidos para manipular um conjunto de saídas) o melhor emparelhamento é obtido através da permutação das linhas ou das colunas da matriz RGA, de modo a obter os elementos da diagonal principal próximos a um. Nas Tabelas 5.11 a 5.15 encontram-se os RGAs com os emparelhamentos mais adequados.

As matrizes RGA de todas as estruturas analisadas neste trabalho estão contidas no apêndice E.

Tabela 5.11: RGA da estrutura de controle ES1-1.

RGA ES1-1						
	u(1)	u(6)	u(8)	u(7)	u(3)	u(5)
y(1)	1,8218	-0,80595	0,031887	-0,3101	0,00265	0,25972
y(2)	0,080306	1,896	-0,66911	0,0009217	-0,36491	0,056761
y(3)	0,17175	-1,0437	2,5023	0,0001891	-1,5622	0,9316
y(4)	-0,40061	0,64522	0,57007	1,5168	-1,0814	-0,25014
y(5)	-0,41072	-0,061885	-0,73966	-0,031041	2,2432	9,81E-05
y(6)	-0,26253	0,37025	-0,69549	-0,17678	1,7626	0,001965

Tabela 5.12: RGA da estrutura de controle ES2-2.

RGA ES2-2						
	u(1)	u(10)	u(6)	u(8)	u(3)	u(5)
y(1)	1	0	0	0	0	0
y(2)	7,68E-11	1,5792	-0,09905	-0,95538	0,070517	0,40475
y(3)	-3,00E-12	-0,15836	1,1028	0,15352	-0,062872	-0,035047
y(4)	-3,97E-10	0,724	-0,11589	1,1966	-0,082229	-0,72246
y(5)	8,08E-10	0,099522	0,47936	-1,1143	3,6508	-2,1154
y(6)	-1,28E-10	-1,2443	-0,36718	1,7195	-2,5762	3,4682

Tabela 5.13: RGA da estrutura de controle ES5-1.

RGA ES5-1						
	u(1)	u(8)	u(3)	u(7)	u(5)	u(6)
y(1)	1	0	0	0	0	0
y(2)	0	1	6,91E-17	-2,07E-05	0	0
y(3)	0	0	1	0	0	0
y(4)	0	-2,07E-05	-6,35E-17	1	0	0
y(5)	2,51E-16	-1,97E-16	4,52E-17	4,48E-16	2,9684	-1,9684
y(6)	-9,03E-19	1,58E-16	-7,34E-17	3,06E-16	-1,9684	2,9684

Tabela 5.14: RGA da estrutura de controle ES5-2.

RGA ES5-2						
	u(1)	u(9)	u(3)	u(7)	u(5)	u(6)
y(1)	1	0	0	0	0	0
y(2)	0	0,92083	6,64E-17	0,079171	0	0
y(3)	0	0	1	0	0	0
y(4)	0	0,079171	1,14E-16	0,92083	0	0
y(5)	3,22E-16	3,2E-19	-2,05E-16	-1,12E-16	2,9684	-1,9684
y(6)	-1,58E-17	-1,03E-16	-3,75E-17	-7,07E-17	-1,9684	2,9684

Tabela 5.15: RGA da estrutura de controle ES5-3.

RGA ES5-3						
	u(1)	u(8)	u(3)	u(9)	u(5)	u(6)
y(1)	1	0	0	0	0	0
y(2)	0	0,99976	3,52E-17	0,000241	0	0
y(3)	0	0	1	0	0	0
y(4)	0	0,000241	5,51E-18	0,99976	0	0
y(5)	1,83E-16	4,19E-16	1,58E-16	4,54E-18	2,9684	-1,9684
y(6)	-7,44E-18	-4,5E-16	-5,5E-17	-2,47E-16	-1,9684	2,9684

Fazendo uma comparação entre as matrizes RGA das estruturas de controle avaliadas, as estruturas da configuração $F_{\text{máx}} = 5$ t/h mostram-se mais próximas de uma matriz identidade, indicando ser o sistema menos acoplado, ou seja, com menor interação entre os canais. Um ponto importante indicado pela matriz RGA de todas as estruturas de controle da configuração $F_{\text{máx}} = 5$ t/h (Tabelas 5.13, 5.14 e 5.15) é que o controle dos poluentes no efluente líquido (saídas $y(5)$ e $y(6)$) devem ser manipulados pelos *splits* das correntes que saem do sistema (entradas $u(5)$ e $u(6)$).

O condicionamento mínimo do sistema das melhores estruturas de controle, segundo o RPN, foram avaliados e representados na Figura 5.12. As curvas do RPN apresentadas na Figura 5.11 foram construídas para indicar a faixa de frequência em que o condicionamento mínimo do sistema deve ser avaliado. Esta faixa corresponde a região em torno do pico do RPN, indicado pela Figura 5.11.

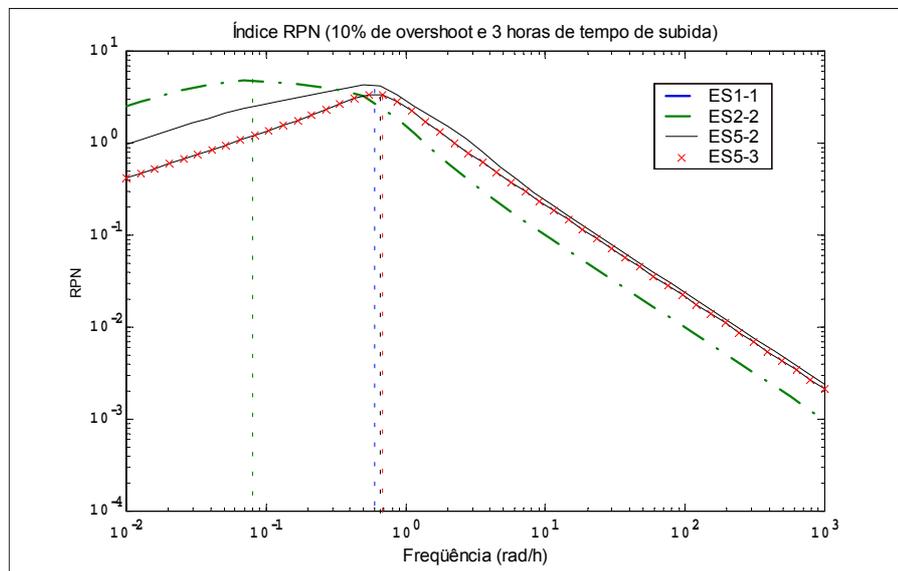


Figura 5.11: Curvas do RPN para as melhores estruturas de controle na primeira análise da operabilidade.

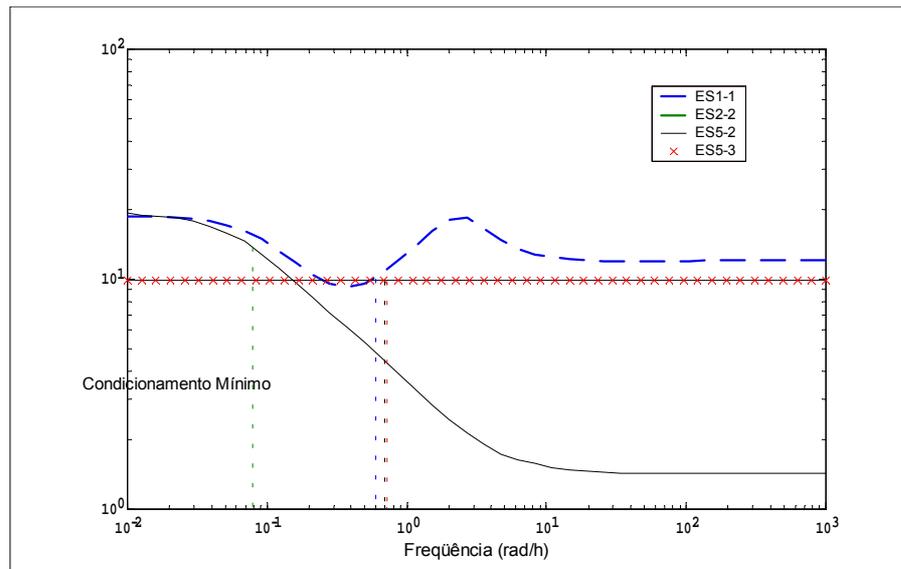


Figura 5.12: Condicionamento mínimo das melhores estruturas de controle na primeira análise da operabilidade.

Analisando as Figuras 5.11 e 5.12, seguindo o critério do condicionamento mínimo, pode-se notar que a configuração $F_{\text{máx}} = 2,2$ t/h apresenta condicionamento próximo ao condicionamento da configuração $F_{\text{máx}} = 5$ t/h, nas respectivas faixas de frequências. Assim mesmo, a configuração $F_{\text{máx}} = 2,2$ t/h é mais difícil de ser operada. Isto deve-se porque o condicionamento do sistema retrata apenas a direcionalidade do sistema, não mostrando a limitação imposta pelos zeros positivos. Um aspecto importante a ser salientado na análise da Figura 5.12, é que as duas melhores estruturas de controle da configuração $F_{\text{máx}} = 5$ t/h apresentam dinâmica independente da frequência. Uma das vantagens de apresentar dinâmica independente da frequência reside no fato que um controlador de baixa ordem, que é mais fácil de ser projetado do que um controlador de alta ordem, é suficiente para controlar o sistema.

Conclusões da primeira análise

Com os resultados obtidos nesta análise, os principais aspectos que se pode concluir quanto à operabilidade de cada uma das configurações, estão listados abaixo:

- A configuração $F_{\text{máx}} = 1,4$ t/h, uma das mais integradas massivamente, foi a que apresentou menor flexibilidade operacional, apenas uma estrutura de controle possível, devido aos poucos graus de liberdade disponíveis neste sistema;
- A configuração $F_{\text{máx}} = 2,2$ t/h foi a que se mostrou mais difícil de ser operada, devido à presença dos RHP-zeros mais próximos à origem e aos altos valores do índice RPN;
- Na configuração $F_{\text{máx}} = 5$ t/h, se um dos *splits* que saem do processo 1 e do processo 2 (entradas $u(5)$ e $u(6)$) não forem manipulados, o sistema torna-se mais difícil de ser operado, devido ao surgimento de zeros positivos. Isto deve-se ao fato de que a manipulação do *split* de uma corrente que é eliminada do sistema faz

com que o poluente não se propague dentro do sistema, sendo mais fácil o controle deste poluente;

- A configuração $F_{\text{máx}} = 5$ t/h, menos integrada massicamente, mostrou-se mais fácil de operar, pois, entre as possíveis estruturas de controle, foi a configuração que apresentou mais estruturas sem zeros positivos, além de apresentar os menores valores para o índice RPN.

5.5.2 Estudo da adição de graus de liberdade no sistema

Com o objetivo de deixar a rede mais flexível em relação a sua operabilidade foi feito um estudo da adição de graus de liberdade nas configurações mais integradas massicamente. O aumento dos graus de liberdade do sistema foi feito de duas formas:

- Adição de um *split* como variável a ser manipulada, antes desconsiderado devido a sua baixa ordem de grandeza;
- Adição de vazões de *makeup*, como variáveis a serem manipuladas, que não existiam ou que foram desconsideradas devido as baixas ordens de grandeza.

Análise da adição do *split*

Na configuração $F_{\text{máx}} = 2,2$ t/h, o *split* da corrente que sai do processo 2 e alimenta o regenerador 1 (linha traço-pontilhada na Figura 5.13) foi adicionado como uma variável a ser manipulada. As estruturas de controle analisadas que apresentam o *split* antes desconsiderado estão mostradas na Tabela 5.16.

Tabela 5.16: Estruturas de controle analisadas com o *split* adicionado como variável manipulada.

Estruturas analisadas	Entradas
ES2-6	$u(1), u(3), u(5), u(6), u(7)$ e $u(9)$
ES2-7	$u(1), u(3), u(5), u(6), u(7)$ e $u(9)$
ES2-8	$u(1), u(3), u(6), u(7), u(8)$ e $u(9)$
ES2-9	$u(1), u(3), u(7), u(8), u(9)$ e $u(10)$
ES2-10	$u(1), u(3), u(5), u(7), u(9)$ e $u(10)$

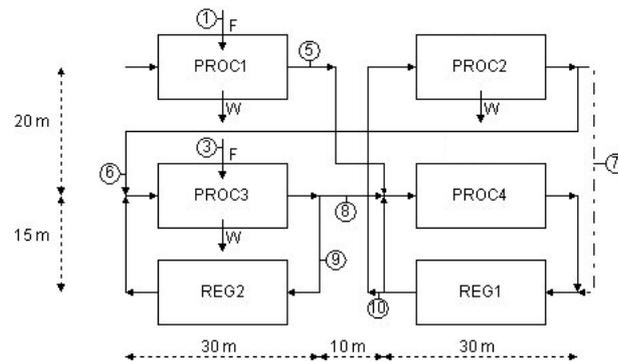


Figura 5.13: Variáveis manipuladas na configuração $F_{\text{máx}} = 2,2 \text{ t/h}$ com a adição do *split*.

Resultados da análise da adição do *split*

Os valores dos RHP-zeros para as estruturas de controle analisadas com a adição do *split* (Tabela 5.17) foram comparados com os zeros positivos das estruturas estudadas na primeira análise, com o intuito de verificar a influência desta variável no sistema.

Tabela 5.17: RHP-zeros das estruturas de controle estudadas na análise da adição do *split*.

Estruturas analisadas	RHP-zeros
ES2-1	0,004503 e $3,66 \cdot 10^9$
ES2-2	0,063508
ES2-3	0,04791
ES2-4	-
ES2-5	0,02055
ES2-6	0,46481
ES2-7	0,26039
ES2-8	0,10296
ES2-9	-
ES2-10	-

Observa-se, pelos resultados obtidos acima, que a adição do *split* foi benéfico ao sistema, pois além de apresentar mais estruturas de controle sem zeros positivos, os zeros são mais afastados da origem. Ou seja, a limitação imposta ao desempenho é menor do que sem a adição do *split*.

Para verificar o que a adição do *split* realmente afeta na operabilidade, o índice RPN foi calculado com o mesmo desempenho das estruturas de controle estudadas na primeira

análise. Os valores do índice RPN para um desempenho com 10% de *overshoot* e 3 horas de tempo de subida para todos os canais estão contidos na Tabela 5.18.

Tabela 5.18: RPN das estruturas de controle estudadas na análise da adição do *split*.

Estruturas analisadas	RPN
ES2-1	29,2673
ES2-2	4,79503
ES2-3	5,2020
ES2-4	8,94558
ES2-5	10,8179
ES2-6	4,11304
ES2-7	3,77348
ES2-8	6,50732
ES2-9	2,32526
ES2-10	2,24442

Segundo os valores obtidos para o índice RPN, as estruturas de controle que contêm o *split* adicionado, comparadas com as estruturas estudadas na primeira análise, mostraram-se mais fáceis de operar, pois apresentaram os menores valores do RPN.

Como na primeira análise, os RGAs das melhores estruturas (Tabelas 5.19 e 5.20), segundo o índice RPN, foram avaliados para indicar o emparelhamento mais adequado.

Tabela 5.19: RGA da estrutura de controle ES2-10.

RGA ES2-10						
	u(1)	u(10)	u(3)	u(5)	u(7)	u(9)
y(1)	1	0	0	0	0	0
y(2)	3,42E-11	0,42423	-0,03065	0,024501	0,41502	0,1669
y(3)	-4,5E-11	0,26602	0,91648	0,095869	-0,0288	-0,24956
y(4)	7,52E-11	0,2396	-0,01519	0,31141	-0,04888	0,51306
y(5)	-1,2E-10	-0,02506	0,53579	0,14302	0,75295	-0,40699
y(6)	2,08E-11	0,095219	-0,40642	0,4252	-0,09029	0,97629

Tabela 5.20: RGA da estrutura de controle ES2-9.

RGA ES2-9						
	u(1)	u(10)	u(3)	u(8)	u(7)	u(9)
y(1)	1	0	0	0	0	0
y(2)	-1,7E-10	0,37035	-0,02988	0,22014	0,4333	0,006084
y(3)	2,48E-10	0,053166	0,98525	0,8615	-0,01526	-0,88466
y(4)	-2,9E-10	0,35677	-0,01122	0,67181	-0,03753	0,020175
y(5)	5,93E-10	-0,01915	0,50871	-0,19098	0,719	-0,01759
y(6)	-1,2E-10	0,23886	-0,45286	-0,56247	-0,09951	1,876

Analisando as matrizes do RGA, verifica-se que os melhores emparelhamentos para a configuração $F_{\text{máx}} = 2,2$ t/h quando adicionado o *split* contém os pares: $u(1)-y(1)$, $u(10)-y(2)$, $u(3)-y(3)$, $u(7)-y(5)$ e $u(9)-y(6)$. A entrada relacionada com a saída $y(4)$ depende da estrutura de controle escolhida para operar: $u(5)$ para a estrutura ES2-10 e $u(8)$ para a estrutura ES2-9.

Na Figura 5.15, o condicionamento mínimo das melhores estruturas de controle com o *split* adicionado (ES2-9 e ES2-10) foi comparado com a melhor estrutura da configuração $F_{\text{máx}} = 2,2$ t/h sem o *split* (ES2-2). Como na primeira análise, as curvas do RPN apresentadas na Figura 5.14 foram construídas para indicar a faixa de frequência em que o condicionamento mínimo do sistema deve ser avaliado.

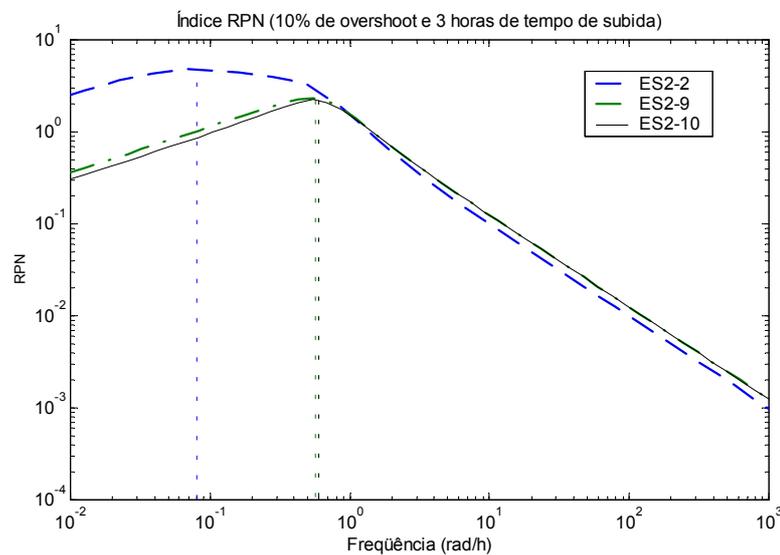


Figura 5.14: Curvas do RPN para as melhores estruturas de controle na análise da adição do *split*.

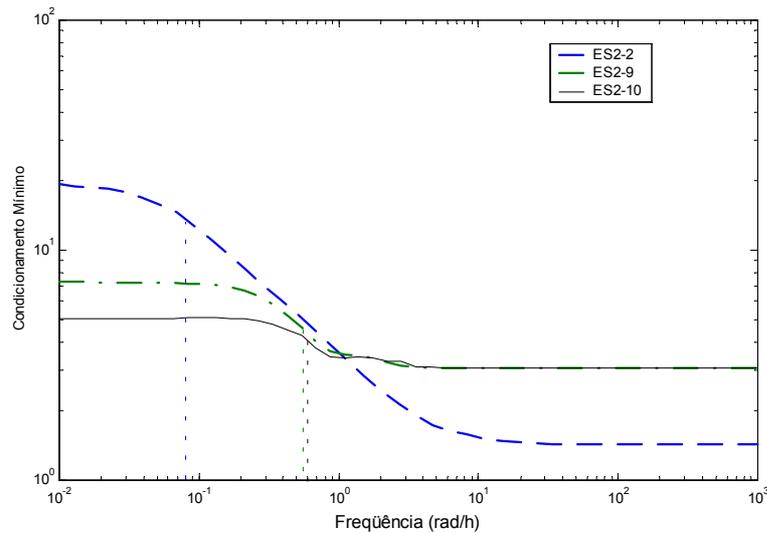


Figura 5.15: Número de condicionamento mínimo das melhores estruturas de controle na análise da adição do *split*.

Analisando as Figuras 5.14 e 5.15, observa-se que a melhor estrutura de controle da configuração $F_{\max} = 2,2$ t/h sem a adição do *split* (ES2-2) apresenta pior condicionamento do que as outras duas estruturas, nas respectivas faixas de frequência.

Conclusões da análise da adição do split

Com os resultados obtidos no estudo da influência da adição do *split* na operabilidade do sistema, os principais aspectos que se pode concluir estão listados abaixo:

- O sistema tornou-se mais flexível operacionalmente pois foi adicionado um grau de liberdade ao sistema, ou seja, um número maior de estruturas de controle podem ser avaliadas;
- Entre as estruturas de controle analisadas, ao adicionar o *split*, os RHP-zeros mostraram-se mais afastados da origem, ou seja a limitação imposta ao desempenho é menor;
- Entre as estruturas de controle analisadas, a adição do *split* tornou os valores do índice RPN mais baixos, ou seja, a configuração $F_{\max} = 2,2$ t/h tornou-se mais fácil de operar.

Um importante questionamento deve ser feito nesta análise: Por que a adição deste *split* melhorou a operabilidade desta configuração? Será que a adição de qualquer outro *split* teria o mesmo efeito? O que se pode perceber é o *split* adicionado é de uma corrente que alimenta um regenerador. Ao passar por um regenerador é feita uma retirada de poluente da corrente, assim o poluente não se propaga no sistema. Portanto, um *split* de uma corrente que vai para um regenerador é mais eficiente no controle de poluentes do que um *split* de uma corrente que alimenta um processo.

Análise da adição de *makeup*

Na configuração $F_{\text{máx}} = 1,4$ t/h, um *makeup* foi adicionado ao sistema como uma variável a ser manipulada. Analisou-se a influência na operabilidade do sistema com a adição do *makeup* do processo 2 (entrada $u(2)$) ou com a adição do *makeup* do processo 4 (entrada $u(4)$), ambos desconsiderados na primeira análise. As Tabelas 5.21 e 5.22 apresentam as estruturas de controle para estes novos casos em estudo e as Figuras 5.16 e 5.17 mostram as suas variáveis manipuladas.

Tabela 5.21: Estruturas de controle analisadas com o *makeup* do processo 2 adicionado como variável manipulada.

Estruturas analisadas	Entradas
ES1-2	$u(1)$, $u(2)$, $u(3)$, $u(5)$, $u(6)$ e $u(7)$
ES1-3	$u(1)$, $u(2)$, $u(3)$, $u(5)$, $u(6)$ e $u(8)$
ES1-4	$u(1)$, $u(2)$, $u(3)$, $u(5)$, $u(7)$ e $u(8)$
ES1-5	$u(1)$, $u(2)$, $u(3)$, $u(6)$, $u(7)$ e $u(8)$

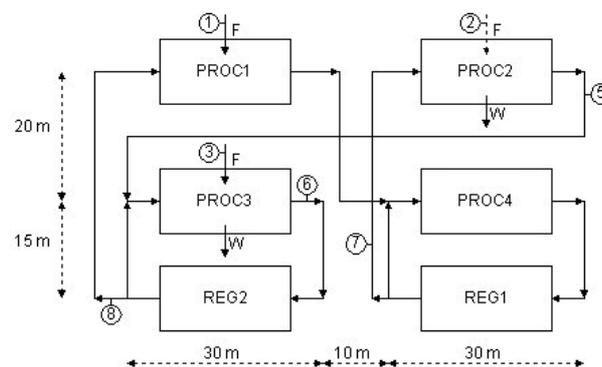


Figura 5.16: Variáveis manipuladas na configuração $F_{\text{máx}} = 1,4$ t/h com a adição do *makeup* do processo 2.

Tabela 5.22: Estruturas de controle analisadas com o *makeup* do processo 4 adicionado como variável manipulada.

Estruturas analisadas	Entradas
ES1-6	$u(1)$, $u(3)$, $u(4)$, $u(5)$, $u(6)$ e $u(7)$
ES1-7	$u(1)$, $u(3)$, $u(4)$, $u(5)$, $u(6)$ e $u(8)$
ES1-8	$u(1)$, $u(3)$, $u(4)$, $u(5)$, $u(7)$ e $u(8)$
ES1-9	$u(1)$, $u(3)$, $u(4)$, $u(6)$, $u(7)$ e $u(8)$

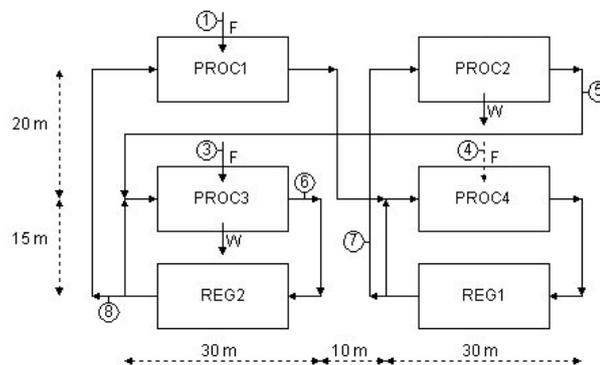


Figura 5.17: Variáveis manipuladas na configuração $F_{\text{máx}} = 1,4$ t/h com a adição do *makeup* do processo 4.

Resultados da análise da adição de *makeup*

Os valores dos RHP-zeros para as estruturas de controle analisadas com a adição dos *makeups* (Tabela 5.23) foram comparados com os zeros positivos das estruturas estudadas na primeira análise, a fim de verificar a influência destas variáveis no sistema.

Tabela 5.23: RHP-zeros das estruturas de controle estudadas na análise da adição dos *makeups*.

Estruturas analisadas	RHP-zeros
ES1-1	0,61947
ES1-2	0,010666
ES1-3	-
ES1-4	-
ES1-5	-
ES1-6	0,01103
ES1-7	3,9118

ES1-8	-
ES1-9	-

Os resultados obtidos para os RHP-zeros indicam que com a adição de um *makeup* ao sistema é possível obter estruturas de controle sem zeros positivos. Ou seja, é possível obter estruturas que não sofrerão a limitação imposta pela presença de RHP-zeros.

Para verificar a influência da adição dos *makeups* na operabilidade do sistema, o índice RPN foi calculado com o mesmo desempenho das estruturas de controle estudadas na primeira análise (desempenho com 10% de *overshoot* e 3 horas de tempo de subida). Os valores do índice RPN estão contidos na Tabela 5.24.

Tabela 5.24: RPN das estruturas de controle estudadas na análise da adição dos *makeups*.

Estruturas analisadas	RPN
ES1-1	4,30779
ES1-2	17,4701
ES1-3	5,21043
ES1-4	3,46195
ES1-5	4,99568
ES1-6	17,7527
ES1-7	3,42724
ES1-8	3,22782
ES1-9	4,79442

Comparando os valores obtidos para o índice RPN das estruturas de controle que contém o *makeup* adicionado com a estrutura estudada na primeira análise (Tabela 5.24), observa-se que não há uma melhora significativa na operabilidade do sistema.

Os RGAs das melhores estruturas (Tabelas 5.25 e 5.26), segundo o índice RPN, foram avaliados para indicar o emparelhamento mais adequado.

Tabela 5.25: RGA da estrutura de controle ES1-7.

RGA ES1-7						
	u(1)	u(6)	u(5)	u(8)	u(3)	u(4)
y(1)	2,1232	0,042636	-0,01359	-0,01932	0,024783	-1,1577

y(2)	0,080319	1,8971	0,056799	-0,66913	-0,36491	-0,00015
y(3)	0,17175	-1,0435	0,93162	2,5023	-1,5622	-2,9E-05
y(4)	-0,71532	-0,06693	0,023173	0,61595	-1,1035	2,2466
y(5)	-0,39497	0,007839	5,798E-06	-0,74241	2,2454	-0,11589
y(6)	-0,26499	0,16285	0,001996	-0,68739	1,7604	0,027172

Tabela 5.26: RGA da estrutura de controle ES1-8.

RGA ES1-8						
	u(1)	u(7)	u(5)	u(8)	u(3)	u(4)
y(1)	2,1081	-0,01558	0,0001415	-0,01674	0,023671	-1,0995
y(2)	0,056232	1,6981	-0,013915	-0,63071	-0,3758	0,26607
y(3)	0,18511	-0,96041	1,0142	2,4589	-1,5502	-0,14765
y(4)	-0,68574	0,14255	-0,002512	0,61164	-1,1014	2,0355
y(5)	-0,39674	-0,00349	1,618E-05	-0,7421	2,2452	-0,10286
y(6)	-0,26692	0,13881	0,0020205	-0,68103	1,7586	0,048507

Analisando as matrizes RGA, verifica-se que os melhores emparelhamentos para as estruturas ES1-7 e ES1-8 contém os pares: u(1)-y(1), u(5)-y(3), u(8)-y(4), u(3)-y(5) e u(4)-y(6). A entrada relacionada com a saída y(2) depende da estrutura de controle que será escolhida para operar: u(6) para a ES1-7 e u(7) para a estrutura ES1-8.

A Figura 5.19 mostra o condicionamento mínimo das melhores estruturas de controle, segundo o RPN, com a adição do *makeup* (ES1-7 e ES1-8) e sem a adição do *makeup* (ES1-1), na região de interesse dada pela frequência onde o pico do RPN se localiza (Figura 5.18).

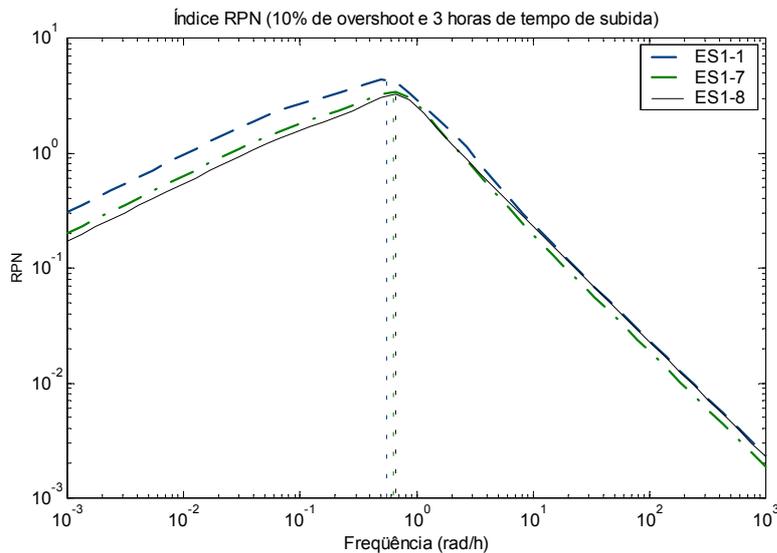


Figura 5.18: Curvas do RPN para as melhores estruturas na análise da adição do *makeup*.

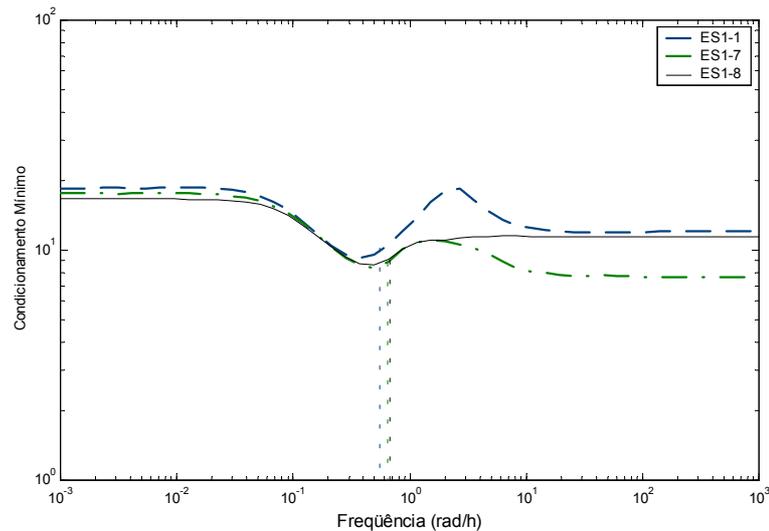


Figura 5.19: Condicionamento mínimo das melhores estruturas na análise da adição do *makeup*.

As Figuras 5.18 e 5.19 mostram que na faixa próxima da frequência de 0,65 rad/h, as três estruturas de controle analisadas apresentam condicionamento próximos. No entanto, a estrutura que não apresenta o *makeup* adicionado (ES1-1) possui uma certa desvantagem em relação as outras, por apresentar uma maior variabilidade do condicionamento nesta faixa.

Conclusões da análise da adição de makeup

Os principais aspectos que se pode concluir, com os resultados obtidos no estudo da influência da adição dos *makeups* na operabilidade do sistema, estão listados abaixo:

- O sistema tornou-se mais flexível operacionalmente pois foi adicionado um grau de liberdade ao sistema, ou seja, um número maior de estruturas de controle podem ser avaliadas;
- Aumentou o desvio em relação ao projeto ótimo. Pois ao se adicionar uma vazão de *makeup* ao sistema, implica em aumentar o consumo de água no sistema, afastando-se do ótimo obtido na síntese do sistema;
- A adição dos *makeups* não melhorou significativamente a operabilidade da configuração $F_{\text{máx}} = 1,4$ t/h.

Análise comparativa das melhores estruturas de controle

Com o intuito de se obter a configuração mais fácil de ser operada, um estudo comparativo foi feito com as melhores estruturas, segundo as análises anteriores, de cada uma das configurações.

De acordo com análises anteriores, nenhuma das melhores estruturas de cada configuração (ES1-8, ES2-10 e ES5-3) apresentam RHP-zeros, ou seja, não há limitação imposta pelos zeros positivos nestas estruturas.

Uma comparação entre os valores do índice RPN para as melhores estruturas estão mostrados na Tabela 5.27.

Tabela 5.27: RPN das melhores estruturas de controle de cada configuração.

Estruturas analisadas	RPN
ES1-8	3,22782
ES2-10	2,24442
ES5-3	3,34194

Segundo os valores do índice RPN, observa-se que a configuração $F_{\text{máx}} = 2,2 \text{ t/h}$ é mais fácil de ser operada em relação as outras duas.

As matrizes RGA com o emparelhamento mais adequado das melhores estruturas de controle já foram apresentadas nas análises anteriores.

A Figura 5.21 mostra o condicionamento mínimo das melhores estruturas de controle de cada uma das configurações na região de interesse dada pela frequência onde o pico do RPN se localiza (Figura 5.20).

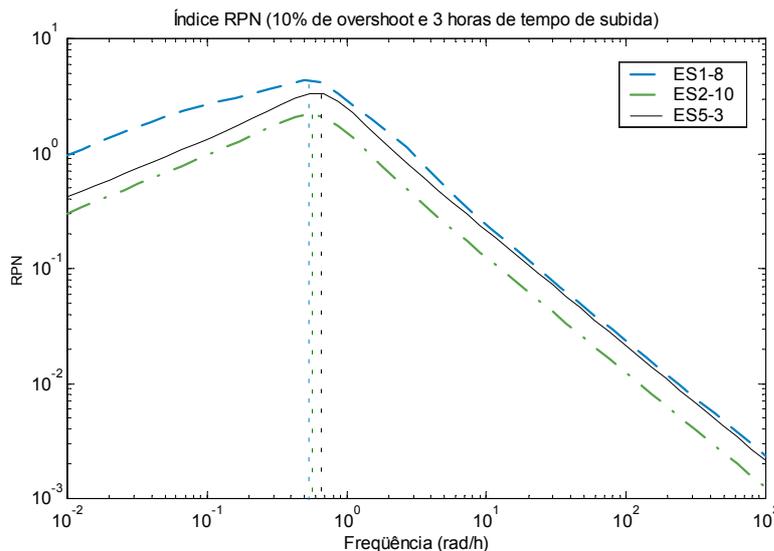


Figura 5.20: Curvas do RPN para as melhores estruturas de cada configuração.

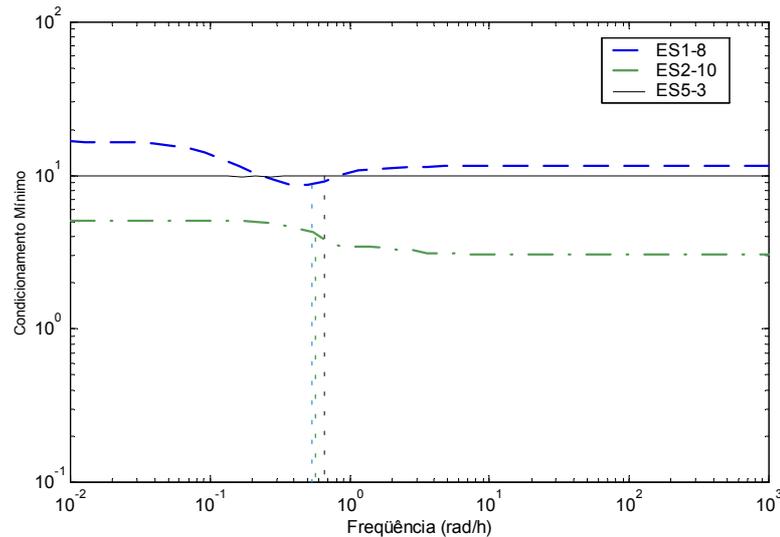


Figura 5.21: Condicionamento mínimo das melhores estruturas de cada configuração.

Analisando as Figuras 5.20 e 5.21, observa-se que a melhor estrutura de controle da configuração $F_{\text{máx}} = 2,2$ t/h apresenta melhor condicionamento do que as outras duas estruturas, nas respectivas faixas de frequência. Entretanto, a melhor estrutura de controle da configuração $F_{\text{máx}} = 5$ t/h apresenta uma certa vantagem, em relação a da configuração $F_{\text{máx}} = 2,2$ t/h, pelo fato de seu condicionamento não variar muito com a frequência.

5.5.3 Conclusões gerais do estudo de operabilidade

As principais conclusões do estudo da operabilidade da rede de integração mássica estão citadas a seguir:

- No sistema proposto, o controle independente dos poluentes (A e B) em cada um dos processos é impraticável devido aos poucos graus de liberdade do sistema. Esta conclusão deve-se a uma análise na qual inseriu-se a concentração de poluente A na entrada do processo 3 como variável a ser controlada. Ao tentar controlar a concentração dos dois poluentes na entrada do processo 3, verificou-se a impossibilidade de controle de ambos os poluentes;
- É importante fazer uma análise antes de desconsiderar uma corrente com baixa vazão, pois esta pode melhorar significativamente a operabilidade do sistema, como no caso do *split* na configuração $F_{\text{máx}} = 2,2$ t/h;

- O aumento dos graus de liberdade do sistema através da adição de *makeups* torna a rede mais flexível operacionalmente. Contudo, deve-se também avaliar o efeito de sua inclusão no desvio das condições ótimas de operação, obtidas na síntese do sistema;
- De alguma maneira, as três configurações analisadas podem ser operadas, desde que se faça uma boa escolha das variáveis manipuladas;
- Uma análise da operabilidade do sistema é essencial para garantir que a rede sintetizada possa ser operada e decidir qual a melhor maneira de operá-la.

Capítulo 6

Conclusões e Sugestões para Trabalhos Futuros

O principal objetivo deste trabalho foi a busca de uma solução mais eficiente, e ambientalmente correta, a um dos principais problemas enfrentados pela indústria química na prevenção de poluentes: a minimização de efluentes e a recuperação de água de processos.

Ao desenvolver um problema padrão com ênfase na recuperação de água de processos, alguns aspectos conferiram originalidade a este trabalho: um problema simples de ser compreendido e complexo por representar um típico cenário industrial, usando técnicas de integração mássica que podem ser utilizadas em sistemas com múltiplos poluentes; além de levar em conta a operabilidade da rede de integração mássica.

Na primeira etapa do trabalho, levando-se em conta que os recursos naturais não são inesgotáveis, técnicas de integração mássica são mostradas como uma medida mais eficiente, em relação ao tratamento de final de tubulação, para prevenir a geração de efluente. Nesta etapa, conclui-se que o uso de técnicas de integração mássica, além de reduzir a quantidade de efluente a ser tratado e descartado, minimizando o impacto ambiental, possibilita uma significativa redução no consumo de água, implicando numa diminuição do custo operacional.

Na etapa seguinte, foi escolhida a forma de sintetizar o sistema estudado através da otimização de superestruturas. Entre as formulações para o problema de otimização propostas, a formulação do tipo MINLP, que leva em conta as distâncias entre as unidades do sistema, mostrou-se mais apropriada. A principal vantagem desta formulação é ser capaz de levar em conta critérios econômicos durante a síntese, sem deixar de lado o objetivo principal da rede: reduzir a demanda de água.

No desenvolvimento do problema padrão proposto para recuperação de água de processos, as diversas configurações obtidas da superestrutura apresentaram características diferenciadas, ao serem impostos diferentes limites no consumo de água de *makeup* do sistema. Quanto menor o consumo de água de *makeup*, mais integrado massicamente se tornou o sistema, devido ao maior número de correntes de reuso e/ ou reciclo. As

configurações mais integradas apresentam a vantagem de reduzir a quantidade de efluente, porém tornam-se mais difíceis de serem operadas devido a grande interação, além de apresentarem os maiores custos para função objetivo - maior distância total entre as conexões. Nesta etapa evidenciou-se a necessidade de uma análise da operabilidade das configurações para garantir que o sistema sintetizado fosse operacionalmente viável.

O algoritmo SBB implementado no GAMS, além de ser um dos poucos *softwares* que contém um algoritmo capaz de resolver problemas de programação matemática do tipo MINLP, mostrou-se eficiente na obtenção dos resultados do problema de otimização da superestrutura.

Uma primeira análise da operabilidade do sistema confirmou um dos resultados já previstos: as configurações menos integradas são mais fáceis e flexíveis de serem operadas. O estudo da adição de graus de liberdade nas configurações mais integradas, levou o sistema a ter uma maior flexibilidade operacional e, em alguns casos, foi verificada uma melhora na sua operabilidade. Uma das principais conclusões desta análise está no fato de que todas as configurações analisadas podem ser operadas, desde que, se faça uma boa escolha das variáveis manipuladas, justificando a necessidade de uma análise de operabilidade.

O RPN *toolbox* mostrou-se uma ótima ferramenta para a análise da operabilidade da rede, devido a facilidade de ser usado e rapidez na geração dos resultados.

Como sugestões para trabalhos futuros, tem-se:

- Na modelagem proposta para os regeneradores, tanto no modelo estacionário otimizado, quanto no modelo dinâmico, algumas melhorias podem ser feitas, como inclusões de parâmetros de eficiência da regeneração, para deixar a modelagem mais representativa;
- Estudar a eficiência de diferentes algoritmos para resolver o problema de otimização;
- Na análise da operabilidade da rede, um estudo da inclusão dos tempos mortos, tempo decorrido por uma corrente ao sair de uma unidade e entrar em outra, ocasionados pelas diferentes distâncias entre as conexões, faz-se necessário para verificar o que implicaria nos resultados da análise;
- Dentro da metodologia proposta para a análise da operabilidade das redes sintetizadas, a criação de um índice que quantifique o ganho na facilidade de operar a rede e o custo vinculado com a adição de mais água no sistema e variações nas condições de operação (desvio do ótimo), ajudaria na escolha da melhor configuração;

- Na análise da operabilidade, testes com as estruturas de controle caracterizadas como mais fáceis de operar podem ser feitos através de simulações, como uma medida de comprovação dos resultados obtidos.

Apêndice A

Nomenclatura

Tabela A.1: Lista de índices da otimização da superestrutura.

Índices	Descrição
i	Unidade i, $i=1,\dots,4$ para os processos e $i=5,6$ para os regeneradores
j	Poluente j, $j=1$ referente ao poluente A e $j=2$ poluente B
k	Idem ao índice i

Tabela A.2: Lista de variáveis da otimização da superestrutura.

Variável	Descrição	Unidade
Dtot	Distância total entre os reciclos/reusos	m
D	Distância entre a saída de uma unidade e a entrada de outra	m
F	Vazão mássica total da água fresca de <i>makeup</i>	t/h
Lmáx	Máxima vazão mássica de reciclo/reuso	t/h
y	Variável decisão (binária)	
F	Vazão mássica de água fresca para <i>makeup</i>	t/h
Fmáx	Máxima vazão mássica de água fresca para <i>makeup</i>	t/h
W	Vazão mássica de efluente líquido (<i>wastewater</i>)	t/h
\dot{M}	Carga mássica de poluente que entra nos processos	g/h
SM	Carga mássica de poluente removida pelos regeneradores	g/h
L	Vazão mássica de reciclo/reuso entre as unidades	t/h
Lin	Vazão mássica operacional de entrada	t/h
Lout	Vazão mássica operacional de saída	t/h
Lsup	Limite máximo da vazão mássica operacional	t/h
XF	Fração mássica de poluente na água fresca	ppm

X_{in}	Fração mássica de poluente na entrada das unidades	ppm
X_{out}	Fração mássica de poluente na saída das unidades	ppm
$C_{in}^{máx}$	Limite máximo de concentração mássica de poluente na entrada dos processos	ppmw
C_{OUTR}	Concentração mássica de poluente na saída dos regeneradores	ppmw

Tabela A.3: Lista de índices do modelo dinâmico da superestrutura.

Índices	Descrição
i	Unidade i , $i=1,\dots,4$ para os processos, $i=5,6$ para os regeneradores e $i=7$ para o efluente líquido que sai do sistema
j	Espécies envolvidas j , $j=1$ referente ao poluente A, $j=2$ ao poluente B e $j=3$ à água

Tabela A.4: Lista de variáveis do modelo dinâmico da superestrutura.

Variável	Descrição	Unidade
M	Capacidade ou acúmulo mássico dos processos	t
$L_{out,bias}$	Valor do <i>bias</i> da vazão mássica de saída das unidades	t/h
M_{set}	Valor do <i>setpoint</i> do acúmulo mássico das unidades	t
K_p	Ganho do controlador proporcional das unidades	h^{-1}
x	Fração mássica das espécies envolvidas nas unidades	ppm
L_{mid}	Vazão mássica operacional intermediária dos regeneradores	t/h
x_{mid}	Fração mássica intermediária das espécies envolvidas nos regeneradores	ppm
τ	Tempo de residência dos regeneradores	h
$L_{in,j}$	Vazão mássica do poluente j na unidade i	g/h

Apêndice B

Glossário

Este apêndice apresenta as definições dos principais termos usados neste trabalho. A construção deste glossário foi baseada no livro de MANN & LIU (1999).

Água fresca para *makeup*: água para reposição, geralmente usada para diminuir a concentração de poluentes em correntes aquosas.

Efluente líquido ou correntes aquosas exaustas (*wastewater*): água que não pode ser diretamente reutilizada devido a prévia contaminação.

Função objetivo: função que deve ser otimizada (minimizada ou maximizada).

Integração de Processos: princípios e práticas de engenharia química para integrar o uso de materiais e energia, e minimizar a geração de resíduos e emissões.

Poluente: alguma substância (como sólidos suspensos, óleos, hidrocarbonetos) ou propriedade (pH, condutividade, DQO, DBO) que restringe a reutilização do efluente líquido.

Programação linear: ramo das técnicas de otimização matemática que otimiza (minimiza ou maximiza) uma função objetivo linear com respeito a suas restrições também lineares.

Programação matemática: um ramo da matemática aplicada para otimizar (minimizar ou maximizar) uma função objetivo com respeito a suas restrições.

Programação não linear: ramo das técnicas de otimização matemática que otimiza (minimiza ou maximiza) um sistema constituído por ao menos por uma função objetivo ou restrição não linear.

Rede de integração mássica de água: o conjunto de unidades que fazem uso de água, podendo incluir reutilização de água, regeneração e reciclo.

Regeneração: remoção de um poluente do efluente líquido.

Regeneração-reciclo: remoção de poluente da corrente aquosa, que compõe o efluente líquido, para reutilizar esta corrente no mesmo processo que originou este efluente.

Regeneração-reuso: remoção de poluente da corrente aquosa, que compõe o efluente líquido, para reutilizar esta corrente em outro processo.

Regenerador: um processo químico, físico ou biológico que remove o poluente da corrente aquosa permitindo que esta corrente possa ser reutilizada novamente.

Restrições: limites impostos ao sistema ou estabelecidos pelas leis naturais que governam o comportamento do sistema, a que estão as variáveis envolvidas no problema de otimização.

Splits: divisões de correntes.

Superestrutura: formulação baseada em programação matemática, contendo todas as configurações possíveis da rede de integração.

Tratamento distribuído de efluente: sistema de tratamento de efluente líquido onde as diferentes correntes do efluente são tratadas individualmente.

Tratamento de final de tubulação (*end-of-pipe*): sistema de tratamento de efluente líquido onde todas as correntes do efluente são misturadas e tratadas posteriormente, por um conjunto de tecnologias em série.

Tecnologia *Pinch* (*Water-Pinch Technology*): um ramo da integração de processos que se preocupa com análise, síntese e modificação de unidades que fazem uso da água.

Unidades que fazem uso de água ou processo: um processo químico, físico ou biológico que requer água operacionalmente e/ou produz efluente líquido.

Apêndice C

Soluções dos Problemas de Otimização

Este apêndice apresenta as soluções dos problemas de otimização da superestrutura (Tabelas C.1 a C.12), empregada no desenvolvimento do problema padrão, apresentado no capítulo 4. Na representação das configurações obtidas, foram desconsideradas as vazões menores que 10^{-5} t/h. As Figuras C.1 a C.6 apresentam as representações esquemáticas da estrutura final das diversas configurações.

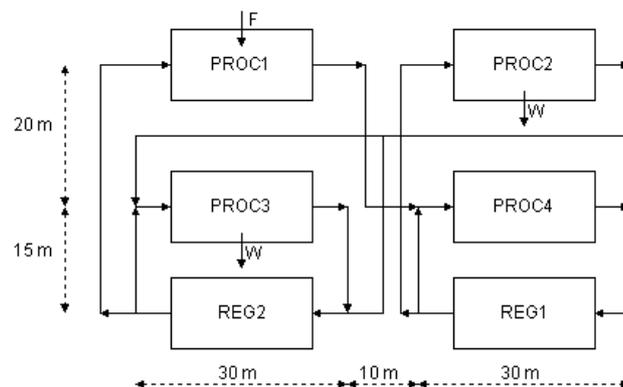


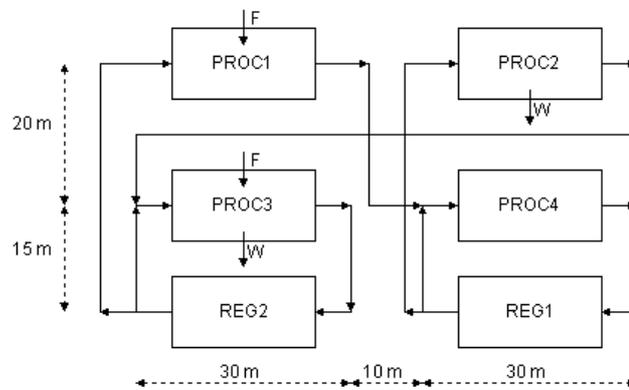
Figura C.1: Configuração para $F_{\text{máx}} = 1$ t/h.

Tabela C.1: Soluções do problema de otimização: $F_{\text{máx}} = 1$ t/h.

Unidade	F [t/h]	W [t/h]	Lout [t/h]	Lin [t/h]	Xin [ppm]		Xout [ppm]		SM [g/h]	
					A	B	A	B	A	B
PROC1	1	0	2	2	21,9999	7,9997	29,4986	12,4995	0	0
PROC2	0	0,00013	2	2	3,9999	19,9995	24,9966	128,9828	0	0
PROC3	0	1	3	3	29,9964	89,9892	39,9956	99,9872	0	0
PROC4	0	0	3	3	20,9992	14,9995	33,3320	19,9991	0	0
Reg1	0	0	3	3	33,3321	19,9989	3,99990	19,9995	88,0006	0
Reg2	0	0	2	2	39,9944	99,9889	39,9979	11,9994	0	175,997
Total	1	1,00013	15	15						

Tabela C.2: Conexões do problema de otimização: $F_{\max} = 1 \text{ t/h}$.

k	i	$L_{i,k} \text{ [t/h]}$					
		PROC1	PROC2	PROC3	PROC4	Reg1	Reg2
PROC1		0	0	0	2,000024	0	0
PROC2		0	0	2	0	0	0,0001
PROC3		0	0	0	0	0	2
PROC4		0	0	0	0	3,00005	0
Reg1		0	2	5E-05	0,999975	0	9E-06
Reg2		1	0	0,9999	0	6,8E-05	0
Total		1	2	3	2,999999	3,00012	2,0001

**Figura C.2:** Configuração para $F_{\max} = 1,4 \text{ t/h}$.**Tabela C.3:** Soluções do problema de otimização: $F_{\max} = 1,4 \text{ t/h}$.

Unidade	F [t/h]	W [t/h]	Lout [t/h]	Lin [t/h]	Xin [ppm]		Xout [ppm]		SM [g/h]	
					A	B	A	B	A	B
PROC1	1,00004	0	2,00002	2	21,9982	7,9995	29,4978	12,4994	0	0
PROC2	0	0,00023	2,00026	2	3,9999	19,9995	24,9967	128,9828	0	0
PROC3	0,00014	1,00010	3,00006	3	29,9952	89,9892	39,9944	99,9872	0	0
PROC4	1,2E-05	0	3,00005	3	20,9987	14,9993	33,3315	19,9989	0	0
Reg1	0	0	2,99996	3,000052	33,3315	19,9989	3,9999	19,9995	87,9965	0
Reg2	0	0	1,99978	1,999958	39,9944	99,9872	39,9979	11,9994	0	175,9740
Total	1,0002	1,00033	15,0001	15,00001						

Tabela C.4: Conexões do problema de otimização: $F_{\text{máx}} = 1,4 \text{ t/h}$.

k	i	$L_{i,k} \text{ [t/h]}$					
		PROC1	PROC2	PROC3	PROC4	Reg1	Reg2
PROC1		0	0	0	2,000024	0	0
PROC2		0	0	2	0	0	0
PROC3		0	0	0	0	0	2
PROC4		0	0	0	0	3,00005	0
Reg1		0	2	0	0,999964	0	0
Reg2		1	0	0,9998	0	0	0
Total		1	2	2,9999	2,999988	3,00005	2

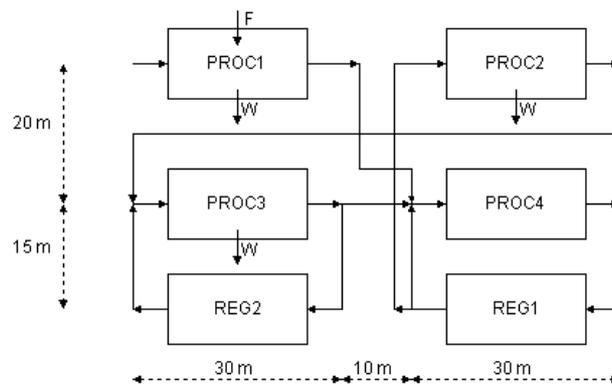


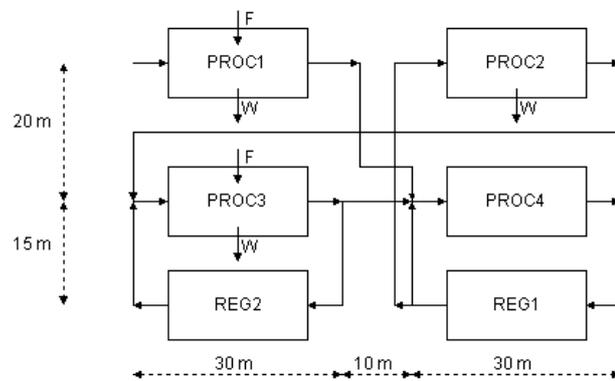
Figura C.3: Configuração para $F_{\text{máx}} = 2 \text{ t/h}$.

Tabela C.5: Soluções do problema de otimização: $F_{\text{máx}} = 2 \text{ t/h}$.

Unidade	F [t/h]	W [t/h]	Lout [t/h]	Lin [t/h]	Xin [ppm]		Xout [ppm]		SM [g/h]	
					A	B	A	B	A	B
PROC1	1,99995	0,08742	2	2	4,0008	4,0001	11,5006	8,5000	0	0
PROC2	0	0,00023	2,0003	2	3,9999	19,9995	24,9967	128,9828	0	0
PROC3	4,5E-05	1,9126	3,0001	3	29,9964	89,9892	39,9956	99,9872	0	0
PROC4	0	0	3	3	9,8310	14,9995	22,1639	19,9991	0	0
Reg1	0	0	3	3	22,1639	19,9992	3,9999	19,9995	54,4932	0
Reg2	0	0	1	1,0001	39,9944	99,9845	39,9979	11,9994	0	87,9916
Total	2	2,00025	14,0004	14,0001						

Tabela C.6: Conexões do problema de otimização: $F_{\text{máx}} = 2 \text{ t/h}$.

k	i	$L_{i,k} \text{ [t/h]}$					
		PROC1	PROC2	PROC3	PROC4	Reg1	Reg2
PROC1		0	0	0	1,9126	0	0
PROC2		0	0	2	0	1,2E-06	0
PROC3		0	0	0	0,087435	0	1
PROC4		0	0	0	0	3,00005	0
Reg1		0	2	0	0,999965	0	3E-05
Reg2		5E-05	0	0,9999	0	0	0
Total		5E-05	2	3	3	3,00005	1,0001

**Figura C.4:** Configuração para $F_{\text{máx}} = 2,2 \text{ t/h}$.**Tabela C.7:** Soluções do problema de otimização: $F_{\text{máx}} = 2,2 \text{ t/h}$.

Unidade	F [t/h]	W [t/h]	Lout [t/h]	Lin [t/h]	Xin [ppm]		Xout [ppm]		SM [g/h]	
					A	B	A	B	A	B
PROC1	2	0,08746	2	2	4,0000	4,0000	11,4998	8,4999	0	0
PROC2	0	0,00023	2,0003	2	3,9999	19,9995	24,9967	128,9828	0	0
PROC3	0,00014	1,91271	3,0001	3	29,9952	89,9892	39,9944	99,9872	0	0
PROC4	0	0	3	3	9,8303	14,9995	22,1633	19,9991	0	0
Reg1	0	0	3	3	22,1633	19,9992	3,9999	19,9995	54,4913	0
Reg2	0	0	0,9998	0,999	39,9944	99,9872	39,9979	11,9994	0	87,9812
Total	2,00014	2,0004	14,0002	13,999						

Tabela C.8: Conexões do problema de otimização: $F_{\text{máx}} = 2,2 \text{ t/h}$.

k	i	$L_{i,k} \text{ [t/h]}$					
		PROC1	PROC2	PROC3	PROC4	Reg1	Reg2
PROC1		0	0	0	1,912567	0	0
PROC2		0	0	2	0	1,2E-06	0
PROC3		0	0	0	0,087434	0	0,9999
PROC4		0	0	0	0	3,00005	0
Reg1		0	2	0	0,999999	0	0
Reg2		0	0	0,9998	0	0	0
Total		0	2	2,9999	3	3,00005	0,9999

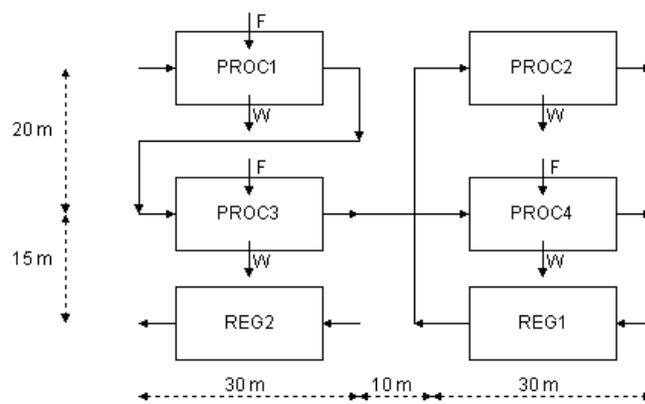


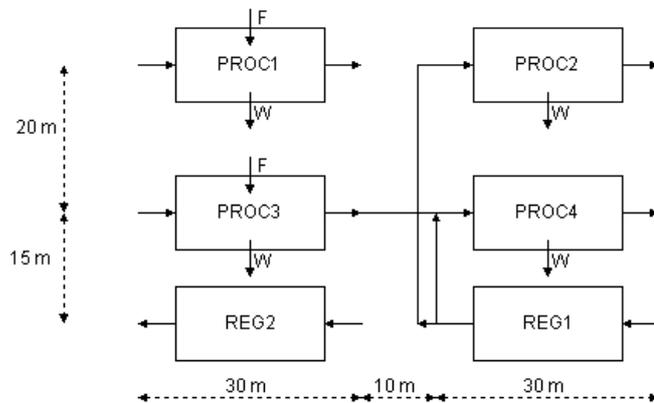
Figura C.5: Configuração para $F_{\text{máx}} = 4 \text{ t/h}$.

Tabela C.9: Soluções do problema de otimização: $F_{\text{máx}} = 4 \text{ t/h}$.

Unidade	F [t/h]	W [t/h]	Lout [t/h]	Lin [t/h]	Xin [ppm]		Xout [ppm]		SM [g/h]	
					A	B	A	B	A	B
PROC1	2	0,79466	2	2	4,0000	4,0000	11,4998	8,4999	0	0
PROC2	0	2,00026	2,0003	2	3,9999	19,9995	24,9967	128,9828	0	0
PROC3	1,79464	0,20542	3,0001	3	29,9952	89,9892	39,9944	99,9872	0	0
PROC4	0,20536	1	3	3	9,8303	14,9995	22,1633	19,9991	0	0
Reg1	0	0	2	2	22,1633	19,9992	3,9999	19,9995	48,9116	0
Reg2	0	0	0	0	39,9944	99,9872	39,9979	11,9994	0	0
Total	4	4,00034	12,0004	12						

Tabela C.10: Conexões do problema de otimização: $F_{\max} = 4$ t/h.

k	i	L_{ik} [t/h]					
		PROC1	PROC2	PROC3	PROC4	Reg1	Reg2
PROC1		0	0	1,2054	0	0	0
PROC2		0	0	0	0	0	0
PROC3		0	0	0	2,794639	0	0
PROC4		0	0	0	0	2,00005	0
Reg1		0	2	0	0	0	0
Reg2		0	0	0	0	0	0
Total		0	2	1,2054	2,794639	2,00005	0

**Figura C.6:** Configuração para $F_{\max} = 5, 6, 7$ e 9 t/h.**Tabela C.11:** Soluções do problema de otimização: $F_{\max} = 5, 6, 7$ e 9 t/h.

Unidade	F [t/h]	W [t/h]	Lout [t/h]	Lin [t/h]	Xin [ppm]		Xout [ppm]		SM [g/h]	
					A	B	A	B	A	B
PROC1	2	2,00002	2	2	4,0000	4,0000	11,4998	8,4999	0	0
PROC2	0	2,00026	2,0003	2	3,9999	19,9995	24,9967	128,9828	0	0
PROC3	3	0,49996	3,0001	3	4,0000	4,0000	13,9997	13,9997	0	0
PROC4	0	0,5001	3	3	12,3334	14,9995	24,6663	19,9991	0	0
Reg1	0	0	2,4999	2,4999	24,6663	19,9991	3,9999	19,9995	51,6651	0
Reg2	0	0	0	0	40,0008		39,9979	11,9994	0	0
Total	5	5,00034	12,5003	12,4999						

Tabela C.12: Conexões do problema de otimização: $F_{\text{máx}} = 5, 6, 7 \text{ e } 9 \text{ t/h}$.

k	i	$L_{i,k} \text{ [t/h]}$					
		PROC1	PROC2	PROC3	PROC4	Reg1	Reg2
PROC1		0	0	0	0	0	0
PROC2		0	0	0	0	0	0
PROC3		0	0	0	2,500103	0	0
PROC4		0	0	0	0	2,49995	0
Reg1		0	2	0	0,499897	0	0
Reg2		0	0	0	0	0	0
Total		0	2	0	3	2,49995	0

Apêndice D

Matrizes da Linearização do Modelo Dinâmico

Este apêndice apresenta as matrizes na forma de espaço de estados, e uma breve descrição, de cada um dos blocos utilizados na linearização do modelo dinâmico da rede de integração mássica, descrito no capítulo 5. A Figura D.1 mostra uma representação do sistema usado na linearização da rede.

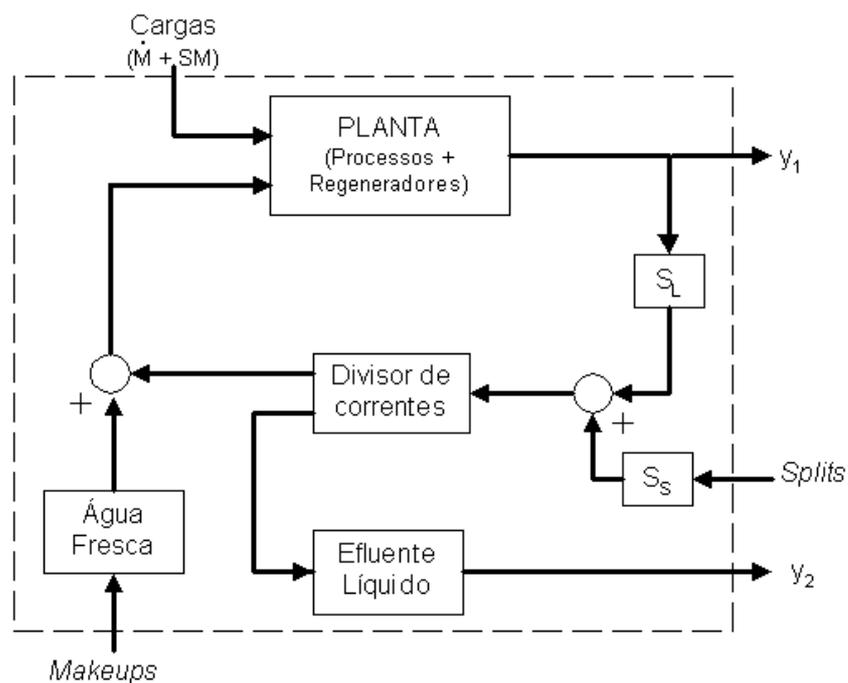


Figura D.1: Esquema do sistema usado na linearização da rede.

Linearização das unidades

O subsistema *Planta* contém a linearização dos processos e regeneradores que compõem a rede. Neste subsistema, as matrizes na forma de espaço de estados das unidades foram dispostas em paralelo na seguinte forma:

$$Planta = \begin{bmatrix} U_1 & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & U_6 \end{bmatrix}, \quad (D.1)$$

onde: U_i = matrizes na forma de espaço de estados que representam a unidade i .

A seguir, a linearização algébrica dos processos e regeneradores que compõem o subsistema *Planta*.

Linearização dos processos

A linearização dos processos foi feita a partir das equações do modelo dinâmico:

$$\frac{dM_i}{dt} = Lin_i - Lout_{,bias_i} + Kp_i \cdot (Mset_i - M_i) + \sum_{j=1}^2 \dot{M}_{i,j} \cdot 10^{-6}, \text{ para } i=1,\dots,4 \quad (D.2)$$

$$Lout_i = Lout_{,bias_i} - Kp_i \cdot (Mset_i - M_i), \text{ para } i=1,\dots,4 \quad (D.3)$$

$$\frac{dx_{i,j}}{dt} = \frac{1}{M_i} \left(Lin_{i,j} - Lin_i \cdot x_{i,j} + \dot{M}_{i,j} - x_{i,j} \cdot \sum_{j=1}^2 \dot{M}_{i,j} \cdot 10^{-6} \right), \text{ para } i=1,\dots,4 \text{ e } j=1,\dots,3 \quad (D.4)$$

$$Lout_{i,j} = Lout_i \cdot x_{i,j}, \text{ para } i=1,\dots,4 \text{ e } j=1,\dots,3 \quad (D.5)$$

$$Lin_i = \sum_{j=1}^3 Lin_{i,j} \cdot 10^{-6}, \text{ para } i=1,\dots,4. \quad (D.6)$$

Conhecendo-se o vetor dos estados (x), o vetor das entradas (u) e o vetor das saídas (y):

$$x = \begin{bmatrix} \Delta M_i \\ \Delta x_{i,1} \\ \Delta x_{i,2} \\ \Delta x_{i,3} \end{bmatrix}, \quad u = \begin{bmatrix} \Delta Lin_{i,1} \\ \Delta Lin_{i,2} \\ \Delta Lin_{i,3} \\ \Delta \dot{M}_{i,1} \\ \Delta \dot{M}_{i,2} \end{bmatrix}, \quad y = \begin{bmatrix} \Delta Lout_{i,1} \\ \Delta Lout_{i,2} \\ \Delta Lout_{i,3} \\ \Delta Cin_{i,1} \\ \Delta Cin_{i,2} \\ \Delta Cin_{i,3} \end{bmatrix}, \quad (D.7)$$

sendo: $Cin_{i,j} = \frac{Lin_{i,j}}{Lin_i}$, para $j=1,\dots,3$,

é possível obter as matrizes na forma de espaço de estados que representam os processos.

$$A = \begin{bmatrix} \frac{-Kp_i}{\left(\frac{Lin_{i,1_0} - Lin_{i_0} \cdot x_{i,1_0} + \dot{M}_{i,1} + \sum_{j=1}^2 \dot{M}_{i,j}}{M_{i_0}^2} \right)} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{-\left(Lin_{i,2_0} - Lin_{i_0} \cdot x_{i,2_0} + \dot{M}_{i,2} + \sum_{j=1}^2 \dot{M}_{i,j} \right)}{M_{i_0}^2} & \frac{-\left(Lin_{i_0} + \sum_{j=1}^2 \dot{M}_{i,j} \right)}{M_{i_0}} & 0 & 0 \\ \frac{-\left(Lin_{i,3_0} - Lin_{i_0} \cdot x_{i,3_0} + \dot{M}_{i,3} + \sum_{j=1}^2 \dot{M}_{i,j} \right)}{M_{i_0}^2} & 0 & \frac{-\left(Lin_{i_0} + \sum_{j=1}^2 \dot{M}_{i,j} \right)}{M_{i_0}} & 0 \\ \frac{-\left(Lin_{i,3_0} - Lin_{i_0} \cdot x_{i,3_0} + \dot{M}_{i,3} + \sum_{j=1}^2 \dot{M}_{i,j} \right)}{M_{i_0}^2} & 0 & 0 & \frac{-\left(Lin_{i_0} + \sum_{j=1}^2 \dot{M}_{i,j} \right)}{M_{i_0}} \end{bmatrix}, \quad (D.8)$$

válida para $i=1,\dots,4$.

$$B = \begin{bmatrix} \frac{1}{10^6 - x_{i,1_0}} & \frac{1}{x_{i,1_0}} & \frac{1}{x_{i,1_0}} & \frac{1}{10^6 - x_{i,1_0}} & \frac{1}{x_{i,1_0}} \\ \frac{x_{i,2_0}}{M_{i_0}} & \frac{10^6 - x_{i,2_0}}{M_{i_0}} & \frac{x_{i,2_0}}{M_{i_0}} & \frac{x_{i,2_0}}{M_{i_0}} & \frac{10^6 - x_{i,2_0}}{M_{i_0}} \\ \frac{x_{i,3_0}}{M_{i_0}} & \frac{x_{i,3_0}}{M_{i_0}} & \frac{10^6 - x_{i,3_0}}{M_{i_0}} & \frac{x_{i,3_0}}{M_{i_0}} & \frac{x_{i,3_0}}{M_{i_0}} \end{bmatrix} \cdot 10^{-6}, \quad \text{para } i=1,\dots,4 \quad (D.9)$$

$$C = \begin{bmatrix} Kp_i \cdot x_{i,1_0} & Lout_{i_0} & 0 & 0 \\ Kp_i \cdot x_{i,2_0} & 0 & Lout_{i_0} & 0 \\ Kp_i \cdot x_{i,3_0} & 0 & 0 & Lout_{i_0} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \text{para } i=1,\dots,4 \quad (D.10)$$

$$D = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{0}{Lin_{i,2_0} + Lin_{i,3_0}} & \frac{0}{-Lin_{i,1_0}} & \frac{0}{-Lin_{i,1_0}} & 0 & 0 \\ \frac{Lin_{i_0}^2}{-Lin_{i,2_0}} & \frac{Lin_{i_0}^2}{Lin_{i,1_0} + Lin_{i,3_0}} & \frac{Lin_{i_0}^2}{-Lin_{i,2_0}} & 0 & 0 \\ \frac{Lin_{i_0}^2}{-Lin_{i,3_0}} & \frac{Lin_{i_0}^2}{-Lin_{i,3_0}} & \frac{Lin_{i_0}^2}{Lin_{i,1_0} + Lin_{i,2_0}} & 0 & 0 \\ \frac{Lin_{i_0}^2}{Lin_{i_0}^2} & \frac{Lin_{i_0}^2}{Lin_{i_0}^2} & \frac{Lin_{i_0}^2}{Lin_{i_0}^2} & 0 & 0 \end{bmatrix} \cdot 10^{-6}, \quad \text{para } i=1,\dots,4 \quad (D.11)$$

Cabe salientar, nas matrizes na forma de espaço de estados, que os elementos que apresentam subíndice zero indicam ser avaliados no estado estacionário.

Linearização dos regeneradores

A linearização dos regeneradores foi feita a partir das equações do modelo dinâmico:

$$\frac{dM_i}{dt} = Lin_i - Lmid_{,bias_i} - Kp_i \cdot (Mset_i - M_i), \text{ para } i=5,6 \quad (D.12)$$

$$\frac{dLmid_i}{dt} = \frac{1}{\tau_i} (Lin_i - Lmid_i), \text{ para } i=5,6 \quad (D.13)$$

$$Lout_i = Lmid_i - \sum_{j=1}^2 SM_{i,j} \cdot 10^{-6}, \text{ para } i=5,6 \quad (D.14)$$

$$\frac{dx_{mid_{i,j}}}{dt} = \frac{1}{M_i} (Lin_{i,j} - Lin_i \cdot x_{mid_{i,j}}), \text{ para } i=5,6 \text{ e } j=1,\dots,3 \quad (D.15)$$

$$Lout_i \cdot x_{i,j} = Lmid_i \cdot x_{mid_{i,j}} - SM_{i,j}, \text{ para } i=5,6 \text{ e } j=1,\dots,3 \quad (D.16)$$

$$Lin_i = \sum_{j=1}^3 Lin_{i,j} \cdot 10^{-6}, \text{ para } i=5,6 \quad (D.17)$$

Conhecendo-se o vetor dos estados (x), o vetor das entradas (u) e o vetor das saídas (y):

$$x = \begin{bmatrix} \Delta M_i \\ \Delta x_{mid_{i,1}} \\ \Delta x_{mid_{i,2}} \\ \Delta x_{mid_{i,3}} \end{bmatrix}, \quad u = \begin{bmatrix} \Delta Lin_{i,1} \\ \Delta Lin_{i,2} \\ \Delta Lin_{i,3} \\ \Delta SM_{i,1} \\ \Delta SM_{i,2} \end{bmatrix}, \quad y = \begin{bmatrix} \Delta Lout_{i,1} \\ \Delta Lout_{i,2} \\ \Delta Lout_{i,3} \end{bmatrix} \quad (D.18)$$

é possível obter as matrizes na forma de espaço de estado que representam os regeneradores.

$$A = \begin{bmatrix} \frac{-Kp_i}{\left(\text{Lin}_{i,1_0} - \text{Lin}_{i_0} \cdot \text{xmid}_{i,1_0}\right)} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{M_{i_0}^2}{\left(\text{Lin}_{i,2_0} - \text{Lin}_{i_0} \cdot \text{xmid}_{i,2_0}\right)} & \frac{-\left(\text{Lin}_{i_0}\right)}{M_{i_0}} & 0 & 0 \\ \frac{M_{i_0}^2}{\left(\text{Lin}_{i,3_0} - \text{Lin}_{i_0} \cdot \text{xmid}_{i,3_0}\right)} & 0 & \frac{-\left(\text{Lin}_{i_0}\right)}{M_{i_0}} & 0 \\ \frac{M_{i_0}^2}{M_{i_0}^2} & 0 & 0 & \frac{-\left(\text{Lin}_{i_0}\right)}{M_{i_0}} \end{bmatrix}, \text{ para } i=5,6 \quad (\text{D.19})$$

$$B = \begin{bmatrix} \frac{1}{10^6 - \text{xmid}_{i,1_0}} & \frac{1}{\text{xmid}_{i,1_0}} & \frac{1}{\text{xmid}_{i,1_0}} & 0 & 0 \\ \frac{M_{i_0}}{\text{xmid}_{i,2_0}} & \frac{10^6 - \text{xmid}_{i,2_0}}{M_{i_0}} & \frac{\text{xmid}_{i,2_0}}{M_{i_0}} & 0 & 0 \\ \frac{M_{i_0}}{\text{xmid}_{i,3_0}} & \frac{\text{xmid}_{i,3_0}}{M_{i_0}} & \frac{10^6 - \text{xmid}_{i,3_0}}{M_{i_0}} & 0 & 0 \end{bmatrix} \cdot 10^{-6}, \text{ para } i=5,6 \quad (\text{D.20})$$

$$C = \begin{bmatrix} \frac{\text{xmid}_{i,1_0}}{\tau_i} & \text{Lmid}_{i_0} & 0 & 0 \\ \frac{\text{xmid}_{i,2_0}}{\tau_i} & 0 & \text{Lmid}_{i_0} & 0 \\ \frac{\text{xmid}_{i,3_0}}{\tau_i} & 0 & 0 & \text{Lmid}_{i_0} \end{bmatrix}, \text{ para } i=5,6 \quad (\text{D.21})$$

$$D = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \text{ para } i=5,6 \quad (\text{D.22})$$

Linearização da conexão entre as unidades, água fresca de *makeup* e efluente líquido eliminado pelo sistema

A linearização das conexões entre as unidades da rede de integração mássica, obtida no modelo dinâmico através do produto entre as matrizes s e L , foi feita da seguinte forma:

$$s \cdot L = s \cdot \Delta L + \Delta s \cdot L \quad (\text{D.23})$$

O primeiro termo do lado direito da igualdade, $s \cdot \Delta L$, foi inserido na linearização da rede de integração mássica no subsistema S_L (Figura D.1). A matriz que representa este subsistema deriva da matriz de *splits* usada no modelo dinâmico, sendo a matriz de *splits* estendida para todas as vazões das espécies envolvidas no sistema, sem a coluna equivalente à água fresca de *makeup*. A matriz que representa este subsistema apresenta a seguinte forma:

$$S_L = \begin{bmatrix} I \cdot s_{1,1} & \cdots & I \cdot s_{1,6} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ I \cdot s_{7,1} & \cdots & I \cdot s_{7,6} \end{bmatrix}, \quad (\text{D.24})$$

$$\text{onde: } I = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Importante salientar que somente as saídas correspondentes as vazões no subsistema *Planta* foram selecionadas como entradas para o subsistema *Ss*.

O segundo termo, $\Delta s \cdot L$, foi inserido na linearização da rede de integração mássica no subsistema *Ss* (Figura D.1). A matriz que representa este subsistema deriva das matriz de reciclo/reuso e de *splits*. Com o intuito de facilitar a descrição da obtenção da matriz que representa este subsistema foi considerado um sistema menor: 3x3. Partindo da matriz de *splits* do sistema considerado, sem a coluna equivalente à água fresca de *makeup*:

$$s = \begin{bmatrix} s_{1,1} & s_{1,2} & s_{1,3} \\ s_{2,1} & s_{2,2} & s_{2,3} \\ s_{3,1} & s_{3,2} & s_{3,3} \end{bmatrix}, \quad (\text{D.25})$$

cuja a soma de seus elementos, ao longo das colunas, apresenta valor unitário. Uma variação de $\Delta s_{1,1}$ em $s_{1,1}$ deve ser distribuída igualmente e negativamente nos outros *splits* que saem da mesma unidade, da seguinte forma:

$$s^* = \begin{bmatrix} s_{1,1} + \Delta s_{1,1} & s_{1,2} & s_{1,3} \\ s_{2,1} - \frac{\Delta s_{1,1}}{2} & s_{2,2} & s_{2,3} \\ s_{3,1} - \frac{\Delta s_{1,1}}{2} & s_{3,2} & s_{3,3} \end{bmatrix}. \quad (\text{D.26})$$

Cabe salientar que o procedimento descrito anteriormente somente é válido para os *splits* que podem ser manipulados, segundo o critério apresentado no capítulo 5. As alterações nas vazões devido às variações feitas nos *splits*:

$$S_S = \begin{bmatrix} L_I^* \cdot \frac{s_{2,1} + s_{3,1}}{s_{2,1} + s_{3,1}} & 0 & 0 \\ -L_I^* \cdot \frac{s_{2,1}}{s_{2,1} + s_{3,1}} & 0 & 0 \\ -L_I^* \cdot \frac{s_{3,1}}{s_{2,1} + s_{3,1}} & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad (\text{D.27})$$

onde: $L_1^* = \begin{bmatrix} L_1 \cdot X_{out_{1,1}} \\ L_1 \cdot X_{out_{1,2}} \\ L_1 \cdot (10^6 - (X_{out_{1,1}} + X_{out_{1,2}})) \end{bmatrix}$, sendo L_1 a vazão mássica total que sai da

unidade 1. O fator 10^6 está presente na expressão para conversão de unidades.

Subsistema Divisor de Correntes

Na linearização da rede de integração para o subsistema *Divisor de Correntes*, a matriz que representa este subsistema apresenta a forma de uma matriz identidade com dimensão 21, ou seja: uma linha para cada um dos três componentes (poluente A, poluente B e água) das 6 unidades e da corrente de efluente líquido e uma coluna para cada um dos três componentes das 6 unidades e da corrente de *makeup*.

Subsistema Água Fresca

Na linearização da rede de integração para o subsistema *Água Fresca*, a matriz que representa este subsistema apresenta 4 colunas, que representam os 4 processos que podem receber água fresca de *makeup* e 18 linhas, representando a concentração de poluente A, de poluente B e de água, respectivamente, nas 6 unidades. A matriz que representa o subsistema *Água Fresca* apresenta a seguinte forma:

$$\text{Água Fresca} = \begin{bmatrix} XF_{ini} & 0^* & 0^* & 0^* \\ 0^* & XF_{ini} & 0^* & 0^* \\ 0^* & 0^* & XF_{ini} & 0^* \\ 0^* & 0^* & 0^* & XF_{ini} \\ 0^* & 0^* & 0^* & 0^* \\ 0^* & 0^* & 0^* & 0^* \end{bmatrix}, \quad (\text{D.28})$$

$$\text{onde: } XF_{ini} = \begin{bmatrix} XF_1 \\ XF_2 \\ 10^6 - (XF_1 + XF_2) \end{bmatrix} \text{ e } 0^* = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Subsistema Efluente Líquido

O subsistema *Efluente Líquido* foi criado para obter como saída do sistema: as vazões de poluente A, de poluente B e de água no efluente líquido e suas respectivas concentrações. A matriz da linearização que representa o subsistema *Efluente Líquido* apresenta a seguinte forma:

$$\text{Efluente Líquido} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ \frac{1 - x_{7,1_0} \cdot 10^{-6}}{\text{Lout}_{7_0}} & \frac{-x_{7,1_0} \cdot 10^{-6}}{\text{Lout}_{7_0}} & \frac{-x_{7,1_0} \cdot 10^{-6}}{\text{Lout}_{7_0}} \\ -x_{7,2_0} \cdot 10^{-6} & 1 - x_{7,2_0} \cdot 10^{-6} & -x_{7,2_0} \cdot 10^{-6} \\ \frac{\text{Lout}_{7_0}}{\text{Lout}_{7_0}} & \frac{\text{Lout}_{7_0}}{\text{Lout}_{7_0}} & \frac{\text{Lout}_{7_0}}{\text{Lout}_{7_0}} \\ -x_{7,3_0} \cdot 10^{-6} & -x_{7,3_0} \cdot 10^{-6} & 1 - x_{7,3_0} \cdot 10^{-6} \\ \frac{\text{Lout}_{7_0}}{\text{Lout}_{7_0}} & \frac{\text{Lout}_{7_0}}{\text{Lout}_{7_0}} & \frac{\text{Lout}_{7_0}}{\text{Lout}_{7_0}} \end{bmatrix} \quad (\text{D.29})$$

Apêndice E

Matrizes RGA

Este apêndice apresenta as matrizes RGA das estruturas estudadas na análise da operabilidade da rede de integração, descritas no capítulo 5.

Resultados da primeira análise

Tabela E.1: RGA da estrutura de controle ES1-1.

RGA ES1-1						
	u(1)	u(3)	u(5)	u(6)	u(7)	u(8)
y(1)	1,8218	0,00265	0,25972	-0,80595	-0,3101	0,031887
y(2)	0,080306	-0,36491	0,056761	1,896	0,000922	-0,66911
y(3)	0,17175	-1,5622	0,9316	-1,0437	0,000189	2,5023
y(4)	-0,40061	-1,0814	-0,25014	0,64522	1,5168	0,57007
y(5)	-0,41072	2,2432	9,81E-05	-0,061885	-0,03104	-0,73966
y(6)	-0,26253	1,7626	0,001965	0,37025	-0,17678	-0,69549

Tabela E.2: RGA da estrutura de controle ES2-1.

RGA ES2 -1						
	u(1)	u(3)	u(5)	u(6)	u(8)	u(9)
y(1)	1	0	0	0	0	0
y(2)	-9,3E-09	2,8343	-3,6895	-2,4066	93,1666	-88,9048
y(3)	9,08E-10	-6,3309	0,37163	7,2433	-9,197	8,913
y(4)	4,48E-08	-3,0839	10,2486	-4,2512	-59,36	57,4466
y(5)	-4E-08	59,4358	11,6022	7,6768	45,7529	-123,468
y(6)	7,78E-09	-51,8553	-17,533	-7,2623	-69,3625	147,0131

Tabela E.3: RGA da estrutura de controle ES2-2.

RGA ES2 -2						
	u(1)	u(3)	u(5)	u(6)	u(8)	u(10)
y(1)	1	0	0	0	0	0
y(2)	7,68E-11	0,070517	0,40475	-0,09905	-0,95538	1,5792
y(3)	-3E-12	-0,06287	-0,03505	1,1028	0,15352	-0,15836
y(4)	-4E-10	-0,08223	-0,72246	-0,11589	1,1966	0,724
y(5)	8,08E-10	3,6508	-2,1154	0,47936	-1,1143	0,099522
y(6)	-1,3E-10	-2,5762	3,4682	-0,36718	1,7195	-1,2443

Tabela E.4: RGA da estrutura de controle ES2-3.

RGA ES2 -3						
	u(1)	u(3)	u(5)	u(6)	u(9)	u(10)
y(1)	1	0	0	0	0	0
y(2)	-4,5E-10	0,098571	0,36319	-0,12247	-0,90243	1,5631
y(3)	3,32E-11	-0,16578	-0,02837	1,2036	0,14634	-0,15576
y(4)	2,87E-09	-0,14154	-0,50568	-0,1976	1,1351	0,7097
y(5)	-4,6E-09	4,977	-1,7893	0,65048	-2,9354	0,097156
y(6)	7,88E-10	-3,7683	2,9601	-0,53398	3,5564	-1,2142

Tabela E.5: RGA da estrutura de controle ES2-4.

RGA ES2 -4						
	u(1)	u(3)	u(5)	u(8)	u(9)	u(10)
y(1)	1	0	0	0	0	0
y(2)	-5,1E-10	-0,04812	0,58049	-4,9956	3,8162	1,647
y(3)	4,95E-10	1,0628	-0,10808	1,8328	-1,6007	-0,1868
y(4)	8,93E-11	0,001892	-1,0299	2,8936	-1,6099	0,74429
y(5)	-1,4E-10	-0,06419	-3,029	-4,2357	8,2232	0,10615
y(6)	2,34E-11	0,048059	4,5865	5,5049	-7,8289	-1,3106

Tabela E.6: RGA da estrutura de controle ES2-5.

RGA ES2 -5						
	u(1)	u(3)	u(6)	u(8)	u(9)	u(10)
y(1)	1	0	0	0	0	0
y(2)	-1,7E-09	0,34374	-0,32717	8,3494	-8,789	1,4231
y(3)	1,32E-10	-0,60304	1,6319	-0,65229	0,76811	-0,14471
y(4)	6,2E-09	-0,27989	-0,38821	-2,7912	3,7829	0,67633
y(5)	-1,2E-08	12,2534	1,5893	6,1131	-19,04	0,084175
y(6)	2,45E-09	-10,7142	-1,5058	-10,019	24,2779	-1,0388

Tabela E.7: RGA da estrutura de controle ES5-1.

RGA ES5 -1						
	u(1)	u(3)	u(5)	u(6)	u(7)	u(8)
y(1)	1	0	0	0	0	0
y(2)	0	6,913E-17	0	0	-2,1E-05	1
y(3)	0	1	0	0	0	0
y(4)	0	-6,35E-17	0	0	1	-2,1E-05
y(5)	2,51E-16	4,517E-17	2,9684	-1,9684	4,48E-16	-2E-16
y(6)	-9E-19	-7,34E-17	-1,9684	2,9684	3,06E-16	1,58E-16

Tabela E.8: RGA da estrutura de controle ES5-2.

RGA ES5 -2						
	u(1)	u(3)	u(5)	u(6)	u(7)	u(9)
y(1)	1	0	0	0	0	0
y(2)	0	6,636E-17	0	0	0,079171	0,92083
y(3)	0	1	0	0	0	0
y(4)	0	1,141E-16	0	0	0,92083	0,079171
y(5)	3,22E-16	-2,05E-16	2,9684	-1,9684	-1,1E-16	3,2E-19
y(6)	-1,6E-17	-3,75E-17	-1,9684	2,9684	-7,1E-17	-1E-16

Tabela E.9: RGA da estrutura de controle ES5-3.

RGA ES5 -3						
	u(1)	u(3)	u(5)	u(6)	u(8)	u(9)
y(1)	1	0	0	0	0	0
y(2)	0	3,515E-17	0	0	0,99976	0,000241
y(3)	0	1	0	0	0	0
y(4)	0	5,513E-18	0	0	0,000241	0,99976
y(5)	1,83E-16	1,575E-16	2,9684	-1,9684	4,19E-16	4,54E-18
y(6)	-7,4E-18	-5,5E-17	-1,9684	2,9684	-4,5E-16	-2,5E-16

Tabela E.10: RGA da estrutura de controle ES5-4.

RGA ES5 -4						
	u(1)	u(3)	u(5)	u(7)	u(8)	u(9)
y(1)	1	0	0	0	0	0
y(2)	0	-8,23E-17	0	0,003737	0,95256	0,043699
y(3)	0	1	0	0	0	0
y(4)	0	-2,92E-16	0	-1,8154	0,000717	2,8147
y(5)	7,78E-17	9,5E-16	0,54893	1,5227	-1,1235	0,051867
y(6)	-3,9E-17	4,186E-17	0,45107	1,289	1,1702	-1,9102

Tabela E.11: RGA da estrutura de controle ES5-5.

RGA ES 5-5						
	u(1)	u(3)	u(6)	u(7)	u(8)	u(9)
y(1)	1	0	0	0	0	0
y(2)	0	-1,81E-17	0	-0,03372	1,4256	-0,39189
y(3)	0	1	0	0	0	0
y(4)	0	-3,65E-16	0	-1,8831	0,000734	2,8824
y(5)	4,34E-16	8,684E-16	0,44659	1,8682	-1,3784	0,063634
y(6)	-2,8E-17	-5,9E-17	0,55341	1,0487	0,95204	-1,5541

Resultados da análise da adição do *split*

Tabela E.12: RGA da estrutura de controle ES2-6.

RGA ES2-6						
	u(1)	u(3)	u(5)	u(6)	u(7)	u(8)
y(1)	1	0	0	0	0	0
y(2)	-5,5E-11	-0,06038	-0,12432	0,030129	0,56601	0,58857
y(3)	9,4E-12	0,23399	0,017506	0,759	-0,01064	0,000136
y(4)	2,44E-10	0,059935	0,69526	0,11561	-0,07404	0,20323
y(5)	1,88E-10	1,0087	-0,34276	0,076439	0,60306	-0,34546
y(6)	-1E-11	-0,24227	0,75431	0,018815	-0,08439	0,55353

Tabela E.13: RGA da estrutura de controle ES2-7.

RGA ES2-7						
	u(1)	u(3)	u(5)	u(6)	u(7)	u(9)
y(1)	1	0	0	0	0	0
y(2)	-2,8E-11	-0,07878	-0,10166	0,04562	0,56961	0,56521
y(3)	3,6E-12	0,23389	0,017511	0,7591	-0,01064	0,000132
y(4)	7,66E-11	0,049208	0,72786	0,10071	-0,07379	0,19601
y(5)	1,03E-10	1,4466	-0,25324	0,1334	0,59854	-0,92526
y(6)	-1E-11	-0,65089	0,60953	-0,03883	-0,08372	1,1639

Tabela E.14: RGA da estrutura de controle ES2-8.

RGA ES2-8						
	u(1)	u(3)	u(6)	u(7)	u(8)	u(9)
y(1)	1	0	0	0	0	0
y(2)	-2,7E-10	-0,16132	0,1151	0,58574	-2,6398	3,1003
y(3)	4,03E-11	0,55851	0,43847	-0,01116	0,45478	-0,4406
y(4)	2,11E-09	0,28873	0,43342	-0,07943	4,538	-4,1808
y(5)	8,98E-10	2,6853	0,29453	0,58575	0,97731	-3,5429
y(6)	-1,8E-10	-2,3712	-0,28151	-0,08091	-2,3303	6,064

Tabela E.15: RGA da estrutura de controle ES2-9.

RGA ES2 -9						
	u(1)	u(3)	u(7)	u(8)	u(9)	u(10)
y(1)	1	0	0	0	0	0
y(2)	-1,7E-10	-0,02988	0,4333	0,22014	0,006084	0,37035
y(3)	2,48E-10	0,98525	-0,01526	0,8615	-0,88466	0,053166
y(4)	-2,9E-10	-0,01122	-0,03753	0,67181	0,020175	0,35677
y(5)	5,93E-10	0,50871	0,719	-0,19098	-0,01759	-0,01915
y(6)	-1,2E-10	-0,45286	-0,09951	-0,56247	1,876	0,23886

Tabela E.16: RGA da estrutura de controle ES2-10.

RGA ES2-10						
	u(1)	u(3)	u(5)	u(7)	u(9)	u(10)
y(1)	1	0	0	0	0	0
y(2)	3,42E-11	-0,03065	0,024501	0,41502	0,1669	0,42423
y(3)	-4,5E-11	0,91648	0,095869	-0,0288	-0,24956	0,26602
y(4)	7,52E-11	-0,01519	0,31141	-0,04888	0,51306	0,2396
y(5)	-1,2E-10	0,53579	0,14302	0,75295	-0,40699	-0,02506
y(6)	2,08E-11	-0,40642	0,4252	-0,09029	0,97629	0,095219

Resultados da análise da adição de *makeup*

Tabela E.17: RGA da estrutura de controle ES1-2.

RGA ES1-2						
	u(1)	u(2)	u(3)	u(5)	u(6)	u(7)
y(1)	2,0095	-0,54675	0,016432	0,089501	-0,27745	-0,29124
y(2)	-0,33924	31,3263	-0,55457	-1,1749	-31,147	2,8894
y(3)	0,94283	-58,5527	-0,87432	5,7021	59,1966	-5,4145
y(4)	3,5098	-10,9087	-0,80637	-3,6462	9,4941	3,3574
y(5)	-4,6493	23,6502	1,6471	0,024951	-18,8261	-0,84687
y(6)	-0,47365	16,0317	1,5717	0,0046447	-17,4402	1,3057

Tabela E.18: RGA da estrutura de controle ES1-3.

RGA ES1-3						
	u(1)	u(2)	u(3)	u(5)	u(6)	u(8)
y(1)	4,9081	-8,9895	0,22925	-2,5389	7,8835	-0,49239
y(2)	0,08044	-0,01	-0,36485	0,057154	1,9066	-0,66932
y(3)	0,17178	-0,00204	-1,5621	0,93177	-1,0416	2,5022
y(4)	-3,6231	8,9898	-1,308	2,5485	-6,647	1,0399
y(5)	-0,24945	-0,89986	2,2659	-0,000847	0,65207	-0,7678
y(6)	-0,2877	1,9117	1,7398	0,0022844	-1,7535	-0,61256

Tabela E.19: RGA da estrutura de controle ES1-4.

RGA ES1-4						
	u(1)	u(2)	u(3)	u(5)	u(7)	u(8)
y(1)	2,1081	-0,83379	0,023667	0,0001415	-0,28134	-0,01674
y(2)	0,056232	1,7975	-0,3758	-0,013915	0,16667	-0,63071
y(3)	0,18511	-1,0144	-1,5503	1,0142	-0,09362	2,4589
y(4)	-0,68574	0,79541	-1,1014	-0,002512	1,3826	0,61164
y(5)	-0,39674	-0,078	2,2452	1,6179E-	-0,02835	-0,7421
y(6)	-0,26692	0,33328	1,7586	0,0020205	-0,14596	-0,68103

Tabela E.20: RGA da estrutura controle ES1-5.

RGA ES1-5						
	u(1)	u(2)	u(3)	u(6)	u(7)	u(8)
y(1)	2,1082	-0,83424	0,023679	0,0004395	-0,28132	-0,01677
y(2)	0,060972	1,4436	-0,37365	0,37329	0,13403	-0,63827
y(3)	0,02117	11,4345	-1,6965	-12,8077	1,0576	2,991
y(4)	-0,68863	0,80348	-1,1016	-0,006545	1,3812	0,61206
y(5)	-0,39398	-0,0934	2,2456	0,012216	-0,02782	-0,74258
y(6)	-0,10774	-11,754	1,9025	13,4283	-1,2637	-1,2054

Tabela E.21: RGA da estrutura de controle ES1-6.

RGA ES1-6						
	u(1)	u(3)	u(4)	u(5)	u(6)	u(7)
y(1)	2,0095	0,016434	-0,72099	0,089509	-0,27748	-0,11698
y(2)	-0,33922	-0,55459	4,6367	-1,1749	-31,1454	29,5774
y(3)	0,94279	-0,87423	-8,5217	5,7018	59,1937	-55,4424
y(4)	3,5096	-0,80634	-27,9142	-3,6461	9,4936	20,3633
y(5)	-4,6491	1,647	31,187	0,024949	-18,8252	-8,3846
y(6)	-0,47364	1,5717	2,3332	0,0046446	-17,4393	15,0034

Tabela E.22: RGA da estrutura de controle ES1-7.

RGA ES1-7						
	u(1)	u(3)	u(4)	u(5)	u(6)	u(8)
y(1)	2,1232	0,024783	-1,1577	-0,01359	0,042636	-0,01932
y(2)	0,080319	-0,36491	-0,00015	0,056799	1,8971	-0,66913
y(3)	0,17175	-1,5622	-2,9E-05	0,93162	-1,0435	2,5023
y(4)	-0,71532	-1,1035	2,2466	0,023173	-0,06693	0,61595
y(5)	-0,39497	2,2454	-0,11589	5,798E-06	0,007839	-0,74241
y(6)	-0,26499	1,7604	0,027172	0,001996	0,16285	-0,68739

Tabela E.23: RGA da estrutura de controle ES1-8.

RGA ES1-8						
	u(1)	u(3)	u(4)	u(5)	u(7)	u(8)
y(1)	2,1081	0,023671	-1,0995	0,0001415	-0,01558	-0,01674
y(2)	0,056232	-0,3758	0,26607	-0,013915	1,6981	-0,63071
y(3)	0,18511	-1,5502	-0,14765	1,0142	-0,96041	2,4589
y(4)	-0,68574	-1,1014	2,0355	-0,002512	0,14255	0,61164
y(5)	-0,39674	2,2452	-0,10286	1,6179E-	-0,00349	-0,7421
y(6)	-0,26692	1,7586	0,048507	0,0020205	0,13881	-0,68103

Tabela E.24: RGA da estrutura de controle ES1-9.

RGA ES1-9						
	u(1)	u(3)	u(4)	u(6)	u(7)	u(8)
y(1)	2,1082	0,023683	-1,1001	0,0004395	-0,01542	-0,01677
y(2)	0,060972	-0,37366	0,21369	0,37329	1,364	-0,63827
y(3)	0,021169	-1,6965	1,6642	-12,8077	10,8278	2,991
y(4)	-0,68863	-1,1016	2,0561	-0,006545	0,12861	0,61206
y(5)	-0,39398	2,2456	-0,12316	0,012216	0,001949	-0,74258
y(6)	-0,10774	1,9025	-1,7107	13,4283	-11,307	-1,2054

Referências Bibliográficas

- ALLEN, D. T. & ROSSELOT, K. S. (1994). "Pollution prevention at the macro scale: Flows of wastes, industrial ecology and life cycle analyses", *Waste Manage.*, **14**, 317-328.
- BAGAJEWICZ, M. J. (2000). "A review of recent design procedures for water networks in refineries and process plants", *Computers and Chemical Engineering* **24**, 2093-2113.
- BAGAJEWICZ, M. J. & MANOUSIOUTHAKIS, V. (1992). "Mass-heat exchange network representation of destilation networks. *AICHE J.*, **38**, 1769-1800.
- BRISTOL, E. H. (1966). "On a New Measure of Iteractions for Multivariable Process Control", *IEE Trans. Aut. Control*, **AC-39**, 1000-1002.
- DOUGLAS, J. M. (1992). "Process synthesis for waste minimization". *Ind. Eng. Chem. Res.*, **31**, 238-243.
- DUNN, R. F. & BUSH, G. E. (2001). "Using process integration technology for CLEANER production", *Jornal of Cleaner Production*, **9**, 1-23.
- DURAIKI, R. G. (2001). "Controle preditivo não linear utilizando linearizações ao longo da trajetória", Dissertação de Mestrado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, Brasil.
- EL-HALWAGI, A. M. & EL-HALWAGI, M. M. (1992). "Waste minimization via computer aided chemical process synthesis – A new philosophy", *TESCE J.*, **18**, 155-182.
- EL-HALWAGI, M. M. (1997). "Pollution Prevention through Process Integration: Systematic Design Tools", *Academic Press*, San Diego.
- FARINA, L. A. (2000). "RPN-Toolbox: uma ferramenta para o desenvolvimento de estruturas de controle", Dissertação de Mestrado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, Brasil.

- FLOUDAS, C. A., CIRIC A. R. & GROSSMANN, I. E. (1986). "Automatic synthesis of optimum heat exchange network configurations". *AICHE J.*, **32**, 276-290.
- FRIEDLER, F., VARGA, J. B. & FAN, L. T. (1995). "Algorithmic Approach to the integration of total flowsheet synthesis and waste minimization". *AICHE Symp. Ser.*, **90**, 86-97.
- MANN, J. G. & LIU, Y. A. (1999). "Industrial Water Reuse and Wastewater Minimization", *McGraw-Hill*, New York.
- NISHIDA, N., STEPHANOPOULOS, G. & WESTERBERG, A. (1981). "A review of process synthesis", *AICHE J.*, **27**, 321-351.
- PEREIRA, E. C. (1999). "Algoritmo Numérico para a Solução da Programação Mista Não Linear e Inteira", Dissertação de Mestrado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, Brasil.
- MARCON, S. M. (2001). "Controle Global de uma Unidade de Extração de Butadieno", Dissertação de Mestrado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, Brasil.
- SALVELSKI, M. J. & BAGAJEWICZ, M. J. (2000). "On the optimality of water utilization systems in process plants with single contaminants", *Chemical Engineering Science*, **55**, 5035-5048.
- SECCHI, A. R. (2001). "Otimização de Processos", Notas de aula, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, Brasil.
- SKOGESTAD, S. & POSTLEWAITE, I. (1996). "Multivariable feedback control – Analysis and Design", *John Wiley & Sons*.
- SMITH, R. (1995). "Chemical Process Design", *McGraw-Hill*, New York.
- SMITH, R. (2000). "State of the art in process integration", *Applied Thermal Engineering*, **20**, 1337-1345.
- STEFANIS, S. K. (1996). "A Process Systems Metodology For Environmental Impact Minimization", Thesis of Doctor, University of London.
- STEPHANOPOULOS, G. & THOWNSEND, D. (1986). "Synthesis in process development", *Chem. Eng. Res. Des.*, **64**, 160 –174.
- TRIERWEILER, J. O. (1997). "A Systematic Approach to Control Structure Design", Thesis of Doctor, University of Dortmund, Germany.

WANG, Y. & SMITH, R. (1994). "Wastewater minimization", Chem. Eng. Sci., **49**, 981.

YANG, Y. H., LOU, H. H. & HUANG, Y.L. (2000). "Synthesis of an optimal wastewater reuse network", Waste Management, **20**, 311-319.

ZIEGLER, J. G. & NICHOLS, N. B. (1943). "Process Lags in Automatic-Control Circuits", Relatórios da A.S.M.E., **65**, 433-444.