

CESAR SUSSUMU IKARIMOTO

**Otimização em linha (RTO) de rede de trocadores de calor de uma refinaria de
petróleo**

São Paulo
2019

CESAR SUSSUMU IKARIMOTO

**Otimização em linha (RTO) de rede de trocadores de calor de uma refinaria de
petróleo**

Dissertação apresentada à Escola Politécnica
da Universidade de São Paulo para obtenção
do título de Mestre em Ciências

São Paulo
2019

CESAR SUSSUMU IKARIMOTO

**Otimização em linha (RTO) de rede de trocadores de calor de uma refinaria de
petróleo**

Dissertação apresentada à Escola Politécnica
da Universidade de São Paulo para obtenção
do título de Mestre em Ciências

Área de concentração: Engenharia Química

Orientador: Prof. Dr. Galo A. Carrillo Le Roux

São Paulo
2019

Autorizo a reprodução e divulgação total ou parcial deste trabalho, por qualquer meio convencional ou eletrônico, para fins de estudo e pesquisa, desde que citada a fonte.

Este exemplar foi revisado e corrigido em relação à versão original, sob responsabilidade única do autor e com a anuência de seu orientador.

São Paulo, _____ de _____ de _____

Assinatura do autor: _____

Assinatura do orientador: _____

Catálogo-na-publicação

Ikarimoto, Cesar Sussumu

Otimização em linha (RTO) de rede de trocadores de calor de uma refinaria de petróleo / C. S. Ikarimoto -- versão corr. -- São Paulo, 2019.
120 p.

Dissertação (Mestrado) - Escola Politécnica da Universidade de São Paulo. Departamento de Engenharia Química.

1. Engenharia Química (otimização) 2. Petróleo 3. Refino I. Universidade de São Paulo. Escola Politécnica. Departamento de Engenharia Química II.t.

AGRADECIMENTOS

Ao professor Galo Antonio Carrillo Le Roux, pela orientação na pesquisa e os ensinamentos compartilhados no período integral do trabalho

Ao dr. Brenno Castrillon Menezes, pelo auxílio no decorrer da pesquisa e ideias relevantes durante sua execução

À Petrobras e meus colegas, especialmente ao engenheiro Filipe Costa Pinto dos Reis Miranda, pelo incentivo em iniciar o mestrado e o auxílio com dicas preciosas

Aos meus pais, Paulo e Hatsue, por todo o carinho e sacrifícios feitos para que eu pudesse estudar

À minha esposa Robélia, por todo amor, carinho, paciência, dedicação, palavras de incentivo e apoio irrestrito...

RESUMO

Uma planta petroquímica, composta por processos e equipamentos com características diversas, caracteriza-se pela complexidade na integração e na operação de forma rentável e segura, atendendo a objetivos econômicos, de desempenho e ambientais. A implementação de ferramentas automatizadas de controle e otimização do processo tem um papel relevante no auxílio ao atendimento a tais objetivos da planta. Nesse contexto, a otimização RTO, abreviação do inglês para *Real-time Optimization*, é um algoritmo computacional que utiliza métodos matemáticos de otimização e os aplica ao processo químico real em que se busca o objetivo econômico de operação, respeitando-se suas características e restrições físicas e termodinâmicas. A otimização RTO é estruturada na forma clássica em: coleta e tratamento de dados, teste dos dados quanto à condição de estado estacionário, reconciliação de dados e estimação de parâmetros, otimização e realimentação de estado ótimo ao processo real. A aplicação da otimização RTO a processos de utilidades, em particular com o objetivo de maximizar a eficiência energética, é amplamente abordada em estudos acadêmicos. Dois estudos em reconciliação de dados e otimização foram realizados, a partir da reprodução de artigos de Narasimham e Jordache (2000) (reconciliação de dados) e Jäschke e Skogestad (2015) (otimização), utilizando-se os *softwares* IMPL® e MATLAB®. Posteriormente, a otimização RTO foi implementada e aplicada em uma rede de trocadores de calor (HEN – *Heat Exchanger Network*) da refinaria Alberto Pasqualini (REFAP - PETROBRAS), localizada na cidade de Canoas-RS. O estudo visou analisar a viabilidade da sua aplicação na otimização da recuperação energética de correntes quentes intermediárias do processo. Foram utilizados os *softwares* MATLAB®, para a etapa de detecção de estado estacionário, e GAMS® nas etapas de reconciliação de dados, estimação de parâmetros e otimização. O teste de detecção de estado estacionário F-modificado de Cao e Rhinerhat mostrou-se aplicável a dados em linha, após a seleção adequada dos dados a serem coletados e sintonia das constantes do método. As etapas de reconciliação de dados e estimação de parâmetros foram realizadas simultaneamente (DRPE – *Data Reconciliation and Parameter Estimation*), sendo estimados os coeficientes globais de transferência de calor e vazões de fluido quente por cada trocador de calor. Finalmente, a otimização foi realizada utilizando-se dois problemas de otimização diferentes: maximizando-se a troca térmica total da HEN, e minimizando-se a diferença das temperaturas de saída do fluido frio de cada ramal de trocadores de calor, tal como seria feito

se fosse aplicado o controle auto otimizado SOC - *Self-Optimizing Control*. A partir dos resultados de ambas as otimizações, o potencial de aumento do aproveitamento energético da rede de trocadores de calor ficou entre 5,1% a 5,7%.

Palavras-chave: Otimização em tempo real. Eficiência energética. Rede de trocadores de calor.

ABSTRACT

A petrochemical plant, composed of a quantity of processes and equipment, is characterized by its complexity of integration and of operation in a profitable and safe form, respecting its economical, performance and environmental targets. The implementation of automatized tools of control and optimization to the process plays an important role in answering such objectives. In this context, *Real-time Optimization* (RTO) is a computational algorithm which uses mathematical methods of optimization, and applies it to real processes, aiming an optimal economic state of operation respecting process physical and thermodynamics restrictions. RTO is structured in classical feature, as follows: data collection and treatment, steady-state condition tests, data reconciliation and parameter estimation, economical optimization and re-feeding the optimal results in the real-process control system. Its application in a refinery utility system, particularly with the objective of maximize energy efficiency, is widely studied. Two data reconciliation and optimization articles were replicate. Studies of Narasimham and Jordache (2000) on data reconciliation, and an optimization article from Jäschke e Skogestad (2015) were modeled in IMPL[®] software. Then, RTO was applied to a case study: A heat exchanger network (HEN) from the Alberto Pasqualini Refinery (REFAP – PETROBRAS), located in the city of Canoas. This study aimed to assay the viability to implement it in optimization of an energy recovery process. For steady-state detection test, MATLAB[®] software was used, while next steps data reconciliation and parameter estimation, and economical optimization, GAMS[®] software was used for modelling, simulating and optimizing the HEN process. The F-modified test method for steady-state detection (Cao and Rhinehart) featured a reliable use in an online application, provided that the frequency of collected data would be adequate and the tuning of the method constants being critically done. Data reconciliation and parameter estimation were simultaneously executed (as DRPE – *Data Reconciliation and Parameter Estimation*) estimating global heat transfer coefficients and hot fluid volume flow of each heat exchanger. Finally, the optimization step were executed in two parts: with objective function maximizing HEN total heat transfer and other objective function minimizing the difference of final temperature of each HEN branch, approaching to a SOC – *Self-Optimizing Control* - type control. According to the results of both optimization strategies, the potential increase of HEN energy recovering would be from 5,1% to 5,7%.

Keywords: Real-time optimization. Energy efficiency. Heat exchanger network.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1: Cadeia hierárquica de modelos de otimização em um processo químico.....	24
Figura 2: Fluxo de informações da otimização RTO	26
Figura 3: Fluxo de blocos de condicionamento de dados	30
Figura 4: Estrutura do algoritmo MA.....	32
Figura 5: Reprodução de Rede de trocadores de calor	41
Figura 6: Reprodução de rede de trocadores de calor.....	53
Figura 7: Rede de trocadores de calor em refinaria de Petróleo	62
Figura 8: Gráfico da massa específica em função da temperatura.....	65
Figura 9: Gráfico da capacidade calorífica em função da temperatura	66
Figura 10: Variáveis Vazão de Petróleo ramal 2 e Temperatura do RAT entrada c_1 e c_2 (amostragem total).....	87
Figura 11: Variáveis Vazão de Petróleo ramal 2 e Temperatura do RAT entrada trocadores de calor c_1 e c_2	88
Figura 12: Sintonia A – Teste F-modificado.....	89
Figura 13: Sintonia B – Teste F-modificado	89
Figura 14: Sintonia C – Teste F-modificado	90
Figura 15: Sintonia D – Teste F-modificado.....	90
Figura 16: Sintonia E – Teste F-modificado	91
Figura 17: Sintonia F – Teste F-modificado	91
Figura 18: Sintonia G – Teste F-modificado.....	92
Figura 19: Sintonia H – Teste F-modificado.....	93
Figura 20: Teste de estado estacionário F-modificado (CAO e RHINEHALD) a 11 variáveis	95
Figura 21: Vazões dos fluidos quentes estimada no ramal 1 (azul: a_1 ; vermelho: b_1 ; amarelo: c_1 ; roxo: d_1 ; verde: e_1).....	100
Figura 22: Vazão dos fluidos quentes estimados no ramal 2 (azul: a_2 ; vermelho: b_2 ; amarelo: c_2 ; roxo: d_2 ; verde: e_2).....	101
Figura 23: Proporção do fluido quente Q para trocador a_1	101
Figura 24: Proporção do fluido quente RAT para trocador c_1	102
Figura 25: Proporção do fluido quente RCS para trocador d_1	102

Figura 26: Coeficientes globais de troca térmica do ramal 1 (azul: a_1 ; vermelho: b_1 ; amarelo: c_1 ; roxo: d_1 ; verde: e_1).....	103
Figura 27: Coeficientes globais de troca térmica do ramal 2 (azul: a_2 ; vermelho: b_2 ; amarelo: c_2 ; roxo: d_2 ; verde: e_2).....	103
Figura 28: Calor total trocado dos ramais 1 e 2 (azul: original; vermelho: otimizado).....	106
Figura 29: Diferença de troca térmica entre resultados otimizados e leituras originais.....	106
Figura 30: Temperatura final do Petróleo (azul: original; vermelho: otimizado)	107
Figura 31: Diferença de temperatura otimizado e original.....	107
Figura 32: Temperatura final do fluido frio em cada ramal (azul: ramal 1; vermelho: ramal 2)	108
Figura 33: Temperaturas fluido frio final com minimização de diferença entre estas (azul: ramal 1; vermelho: ramal 2)	109
Figura 34: Resultado da função objetivo - minimização da diferença das temperaturas dos ramais 1 e 2	109
Figura 35: Temperatura final do Petróleo (azul: otimizado maximização carga térmica; vermelho: otimizado minimização diferença temperaturas ramais 1 e 2).....	110
Figura 36: Diferença entre temperatura final composta - otimizações máxima troca térmica total e mínima diferença temperaturas ramais 1 e 2.....	110
Figura 37: Diferença entre calor total trocado - otimizações máxima troca térmica total e mínima diferença temperaturas ramais 1 e 2.....	111

LISTA DE TABELAS

Tabela 1: Resultados de reconciliação de dados do estudo de NARASIMHAM e JORDACHE (2000).....	43
Tabela 2: Resultados de reconciliação de dados do estudo de NARASIMHAM e JORDACHE (2000).....	44
Tabela 3: Sintonias de constantes do teste F-modificado de CAO e RHINEHART.....	70
Tabela 4: Variáveis de reconciliação e estimação de dados	72
Tabela 5: Cálculo de variação de energia de entalpia das correntes frias e quentes.....	75
Tabela 6: Cálculo de coeficiente global de troca térmica com dados originais	76
Tabela 7: Resultado de reconciliação de dados das vazões das correntes frias e quentes sem tratamento de dados.....	77
Tabela 8: Resultado de reconciliação de dados das temperaturas das correntes frias e quentes sem tratamento de dados	78
Tabela 9: Limites de vazões e temperaturas após análise de dados	79
Tabela 10: Limites de vazões após análise de dados	79
Tabela 11: Resultado de reconciliação de dados das temperaturas das correntes frias e quentes com tratamento de dados.....	80
Tabela 12: Resultado da estimação de do coeficiente global de troca térmica dos trocadores de calor.	81
Tabela 13: Temperatura final do sistema de trocadores de calor	82
Tabela 14: Vazão pelo ramal 1 (com quatro trocadores de calor).....	83
Tabela 15: Vazão pelo ramal 2 (com um trocador de calor).....	83
Tabela 16: Proporção de vazão pelo ramal 1 (com quatro trocadores de calor)	83
Tabela 17: Temperaturas, Delta temperatura e coeficientes de troca térmica em cada trocador de calor	84
Tabela 18: Temperaturas, delta de temperatura e coeficientes de troca térmica em cada trocador de calor	85
Tabela 19: Resultados da função objetivo	86
Tabela 20: Variáveis chave para teste de identificação de estado estacionário	94
Tabela 21: Matriz de pesos da função objetivo da reconciliação de dados.....	97

Tabela 22: Parâmetros estimados	98
Tabela 23: Valores de reconciliação de dados	99
Tabela 24: Valores de otimização econômica	104

LISTA DE ABREVIATURAS

AIC	<i>Akaike Information Criterion</i>
ARX	<i>AutoRegressive eXogeneous</i>
COINMP	<i>Computational Information MP</i>
DL	<i>Diesel Leve</i>
DRPE	<i>Data Reconciliation and Parameter Reconciliation</i>
DP	Diesel Pesado
GA	<i>Genetic Algorithm</i>
GN	Gás Natural
GLPK	<i>GNU Linear Programming Kit</i>
HEN	<i>Heat Exchanger Network</i>
IPOPT	<i>Interior Point OPTmizer</i>
ISOPE	<i>Integrated System Optimization and Parameter Estimation</i>
KKT	<i>Karush-Kuhn-Tucker</i>
LMTD	<i>Logarithmic Mean Temperature Difference</i>
LP	<i>Linear Problem</i>
LPSOLVE	<i>Linear Problem SOLVEr</i>
MA	<i>Modifier Adaptation</i>
MILP	<i>Mixed Integer Linear Problem</i>
MINLP	<i>Mixed Integer NonLinear Problem</i>
MPC	<i>Model Predictive Control</i>
NLP	<i>NonLinear Problem</i>
PCI	Poder Calorífico Inferior
PIT	<i>Polynomial Interpolation Test</i>
Q	Querosene
QP	<i>Quadratic Problem</i>
RAT	Resíduo Atmosférico
RCS	Refluxo Circulante Superior
RTO	<i>Real-Time Optimization</i>
SCFO	<i>Sufficient Condition of Feasibility and Optimality</i>

SECQPE	<i>Sequential Equality Constraint Quadractic Programming Engine</i>
SQC	<i>Statistical Quality Control</i>
SQP	<i>Sequential Quadratic Programming</i>
SORVE	<i>Statistics for Observability, Redundancy and Variance Estimates</i>
SSI	<i>Steady-State Identification</i>
SVD	<i>Singular Value Decomposition</i>

LISTA DE SÍMBOLOS

A	Área [m ²]
a_1, b_1, c_1, d_1 e e_1	Trocadores de calor do ramal 1 (estudo de caso REFAP)
a_2, b_2, c_2, d_2 e e_2	Trocadores de calor do ramal 2 (estudo de caso REFAP)
c_p	capacidade calorífica [kcal/kg/°C]
c	variável de otimização de Jäschke
f	função objetivo
F	vazão mássica [t/h]
g	conjunto de inequações representando restrições do processo
h	conjunto de equações e relações do modelo do processo
J_i	custo operacional unitário
M	quantidade de trocadores de calor em cada ramal (estudo de caso 1)
N	quantidade de ramais na rede de trocadores de calor (estudo de caso 2)
p_i	vetor peso da função objetivo
Q	Calor ou variação de energia [kcal/d]
Q_{Otim1}	Calor da otimização de maximização de troca térmica [kcal/d]
Q_{Otim2}	Calor da otimização de minimização da diferença de temperaturas finais dos ramais 1 e 2 no estudo de caso de refinaria de petróleo [kcal/d]
s.a.	submetido a
T	Temperatura [°C]
T_J	Temperatura de Jäschke [°C]
T^e	Temperatura econômica [°C]
U	Coefficiente global de troca térmica [kcal/°C/m ² /h]
u	variável manipulada
v	vazão volumétrica [m ³ /d]
$\hat{\sigma}^2$	estimativa tradicional de variância
$u_{f,i}^2$	estimativa de variância a partir de filtros
w	vazão calórica [kW/°C]
X_i	série de dados temporais i
X_f	média móvel ponderada da série de dados temporais
$\alpha_{i,j}$	termos da relação da temperatura de Jäschke
$\delta_{f,i}^2$	estimativa de variância a partir de filtros

ε	diferença entre as respostas modelos RTO e real algoritmo MA
λ_i	filtro utilizado na detecção de estado estacionário
λ^T	diferença entre as derivadas de cada modelo no algoritmo MA
$\Delta T_{A,i,j}$	diferença aritmética de temperatura em cada trocador de calor [°C]
ΔT_{LN}	diferença logarítmica de temperatura em cada trocador de calor [°C]
$\Delta T_{Underwood}$	diferença de temperatura em trocador de calor de Underwood [°C]
$\Delta T_{Paterson}$	diferença de temperatura em trocador de calor de Paterson [°C]
ΔT_{Chen}	diferença de temperatura em trocador de calor de Chen [°C]
ρ_f	massa específica do fluido frio [kg/m ³]
ρ_{fq}	massa específica do fluido frio [kg/m ³]
θ	diferença temperatura atual e temperatura de entrada do ramal [°C]

SUMÁRIO

1 - INTRODUÇÃO.....	17
1.1 – Objetivos	19
1.2 – Estrutura Geral.....	19
2 - REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	21
2.1 - Otimização na Indústria Petroquímica: Visão Geral da Otimização RTO	21
2.2 - Integração RTO e Sistema de Controle.....	24
2.3 - Estrutura do Algoritmo da Otimização RTO	25
2.3.1 - Detecção de Estado Estacionário.....	26
2.3.2 – Reconciliação de Dados.....	28
2.3.3 - Estimacão de Parâmetros	30
2.3.4 - Camada de Otimização	31
2.3.5 - Adequação do Modelo.....	32
2.4 – Otimização e RTO Aplicados à Eficiência Energética	33
2.5 - Rede de Trocadores de Calor (HEN – <i>Heat Exchanger Network</i>)	36
3 - MATERIAIS E MÉTODOS	40
3.1 – Estudo em Reconciliação de Dados e Estimacão de Parâmetros.....	40
3.2 - Estudo em Otimização de Processos	45
3.3 - Aplicação da Metodologia da Otimização RTO em uma Rede de Trocadores de Calor de uma Refinaria de Petróleo	62
3.3.1 – Modelo do Processo.....	63
3.3.2 – Detecção de Estado Estacionário do Processo.....	67
3.3.3 – Reconciliação de Dados e Estimacão de Parâmetros.....	71
3.3.4 – Etapa de Otimização Econômica	72
4 - RESULTADOS E DISCUSSÃO	74

4.1 – Reconciliação de Dados de Rede de Trocadores (NARASIMHAM E JORDACHE, 2000)	74
4.2 – Otimização de Rede de Trocadores (JÄSCHKE E SKOGESTAD, 2014)	81
4.3 – Aplicação da Metodologia da Otimização RTO em uma Rede de Trocadores de Calor de uma Refinaria de Petróleo	86
4.3.1 – Detecção de Estado Estacionário: Método F-Modificado	87
4.3.1.1 – Sintonia de Constantes λ	87
4.3.1.2 – Teste de Identificação de Estado Estacionário	93
4.3.2 – Reconciliação de Dados e Estimação de Parâmetros	96
4.3.3 – Otimização Econômica	104
5 - CONCLUSÕES	113
REFERÊNCIAS	115

1 - INTRODUÇÃO

Uma unidade petroquímica é composta por uma grande quantidade de processos e equipamentos, cada qual com características e objetivos diversos, que tornam a sua integração uma tarefa complexa. A operação de forma rentável e segura atendendo objetivos econômicos, de desempenho, ou ambientais, entre outros em escalas de tempo diferentes, pode demandar grande esforço em sua execução (KRISHNAMOORTHY et al., 2018). Na totalidade dos processos de uma unidade, o atendimento a todos os objetivos e restrições que o processo e o ambiente do negócio impõem, simultaneamente, é um desafio. Adicionalmente, em um ambiente de negócios onde fatores econômicos e ambientais possuem papel relevante devido à concorrência de mercado e à legislação ambiental mais rigorosa, o investimento e implementação de soluções inovadoras torna-se interessante (REN, 2009; MENEZES, 2016).

Nesse contexto, o auxílio de algoritmos computacionais com o objetivo de auxiliar na tomada de decisões estratégicas e na seleção de pontos de operação otimizados se torna relevante. A aplicação de algoritmos de otimização em processos químicos tem grande variedade de metodologias de implementação. Essas metodologias dependem dos objetivos da aplicação e, no caso da otimização de operação de um processo em tempo real, de características dos modelos propostos, da disponibilidade de dados em linha e da estrutura e capacidade de processamento computacional disponíveis para a aplicação. Dentre algumas aplicações possíveis e implementadas na indústria usando tais algoritmos tem-se a otimização em tempo real, a partir de modelos rigorosos, fenomenológicos, em estado estacionário, denominada RTO (sigla para *Real-time Optimization*).

A otimização RTO é a aplicação de algoritmo de otimização, geralmente econômica, estruturada em módulos onde:

- a) são coletados dados de interesse do processo químico ao modelo matemático do processo da unidade em estudo e à função objetivo do algoritmo;
- b) é testada a condição de estado estacionário das variáveis em questão, condição essencial à otimização;
- c) são tratados e filtrados esses dados (reconciliação de dados);
- d) são estimados os parâmetros do modelo;

- e) são calculados os valores ótimos das variáveis-chave do modelo (otimização);
- f) e enfim, são realimentados ao processo os resultados otimizados a partir de modelo de controle avançado no processo.

Em particular, a aplicação da otimização RTO em sistemas de utilidades de uma planta química, ou de centrais de geração de energia, busca normalmente a minimização de custos econômicos relacionados a insumos normais de tais aplicações, como Energia Elétrica de terceiros e combustíveis de equipamentos. Dentre os tipos de unidades em que pode ser aplicada a otimização em tempo real tem-se geradores de vapor a partir de caldeiras com queima de combustível, caldeiras recuperadoras de calor de correntes quentes dentro de um processo, ou geradores de Energia Elétrica, como turbinas a gás ou turbinas a vapor, e sistemas de cogeração de energia, onde há a combinação de geração de energia elétrica e vapor.

Dentre os sistemas de interesse, a otimização da operação de uma rede de trocadores de calor (HEN – do inglês *Heat Exchanger Network*), em que há a recuperação energética entre correntes diversas de um processo, quando otimizado leva a ganhos econômicos (JÄSCHKE e SKOGESTAD, 2014), tais como:

- a) economia de combustível em equipamentos como fornos, utilizados na elevação de temperatura e vaporização de corrente fria, a torres de destilação;
- b) recuperação energética em trocadores de calor, em que correntes frias são utilizadas na redução de temperatura de correntes quentes, tais como derivados de petróleo, ou produtos acabados, que sejam necessários seu armazenamento ou utilização a temperaturas menores.

Há ganhos, também, em eficiência energética global do processo, através da conservação de energia dentro do processo com a otimização de troca térmica da rede de trocadores de calor, além de ganhos ambientais pela redução de emissões de gases tóxicos ou de gases de efeito estufa a partir de equipamentos de combustão utilizados no aquecimento de correntes do processo.

A implementação da otimização RTO em redes de trocadores de calor, em uma refinaria de Petróleo, é abordada no presente estudo, com o objetivo de aplicação a uma bateria de trocadores de calor. Serão implementadas as tarefas de reconciliação de dados das variáveis do modelo, estimação de parâmetros a otimização do processo. Para tal, será realizada a modelagem do processo, implementada em *softwares* diversos.

1.1 – Objetivos

O objetivo geral do trabalho é analisar a aplicação da otimização RTO a partir de dados reais em uma rede de trocadores de calor de uma refinaria de Petróleo, avaliando-se sua performance e os seus possíveis ganhos econômicos. Os objetivos específicos são:

- a) estudar métodos de reconciliação de dados a partir de reprodução de exemplo de literatura (NARASIMHAM e JORDACHE, 2000);
- b) estudar o método de otimização de uma rede de trocadores de calor a partir da reprodução do artigo de Jäschke e Skogestad (2014);
- c) aplicação da metodologia da otimização RTO em uma rede de trocadores de calor de uma refinaria de Petróleo. Para tal, será implementada:
 - metodologia de identificação de estado estacionário;
 - reconciliação de dados e estimação de parâmetros;
 - estudo em otimização do modelo;
 - avaliação do ganho econômico da aplicação.

1.2 – Estrutura Geral

No capítulo 2 (Revisão Bibliográfica), são feitos um levantamento e um breve histórico das aplicações de técnicas de modelagem em otimização aplicadas na Engenharia Química e processos químicos. Também, uma revisão dos conceitos básicos de otimização, a aplicação RTO e suas etapas de implementação, e sua inserção na estrutura de camadas hierárquicas de decisão dentro da indústria petroquímica. Por fim, é apresentada a literatura de aplicação da otimização RTO especificamente em processos relacionados à eficiência energética em processos químicos, com um item dedicado a redes de integração energética de trocadores de calor de uma refinaria (HEN).

No capítulo 3 são descritos os materiais e métodos utilizados para os estudos de otimização e reconciliação de dados, a partir da reprodução dos artigos de Jäschke e Skogestad (2014) e do livro de Narasimham e Jordache (2000), e do estudo de implementação da metodologia de otimização RTO em um exemplo de planta de processo real, especificamente a uma rede de trocadores de calor em uma refinaria de Petróleo.

No capítulo 4 são apresentados os resultados e discussões dos trabalhos de literatura e os resultados da otimização econômica da rede de trocadores de calor da refinaria, passando pelas etapas de identificação de estado estacionário, de reconciliação de dados e estimação de parâmetros.

As conclusões do trabalho estão no capítulo 5, onde aspectos como vantagens e desvantagens da metodologia de otimização RTO, aplicada a uma rede de trocadores de calor, foram discutidos.

2 - REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1 - Otimização na Indústria Petroquímica: Visão Geral da Otimização RTO

A otimização, ferramenta matemática que auxilia na tomada de decisões em análise de sistemas e processos, tem significativo impacto em pesquisa em engenharia e na prática operacional (BIEGLER, 2010). Na operação de um processo químico, a otimização consiste em algoritmo que permite calcular as melhores condições e estados de um determinado volume de controle, a partir da minimização ou maximização de uma dada função escalar de /desempenho, atendendo aos modelos que governam este dentro de suas restrições físicas e termodinâmicas.

O algoritmo de otimização consiste, basicamente, nos seguintes elementos:

- a) função objetivo: modelo escalar de desempenho do sistema, que pode ser minimizado ou maximizado. Como exemplo, pode-se utilizar um modelo de custo operacional do sistema, com a otimização buscando a minimização deste;
- b) modelo do processo: Conjunto de modelos e correlações do processo, fenomenológicos, empíricos ou identificados, que predizem o comportamento do processo dadas as variáveis de entrada do modelo; no algoritmo de otimização, estas estão relacionadas com as equações e inequações, que são chamadas restrições do processo;
- c) variáveis: São dados do processo que compõem o modelo do processo, que devem se ajustar às restrições dadas e aos intervalos de viabilidade de cada variável. Dentro da aplicação em RTO, usualmente nomeiam-se variáveis manipuladas aos graus de liberdade do modelo, enquanto que as variáveis controladas são aquelas que se buscam manter dentro de regiões possíveis do processo.

Em FLOUDAS (1995) e BIEGLER (2010) são descritas as classificações de formulações matemáticas dos problemas de otimização. Estes podem ser classificados quanto aos tipos das variáveis, podendo ser do tipo variável contínua ou variável discreta, ou ambas. Formulações de otimização com ambos os tipos de variáveis são chamadas mistas inteiras (*Mixed Integer Optimization Problems*). Além do tipo das variáveis, classificam-se os problemas quanto aos modelos do processo e da função objetivo; se quaisquer das equações

ou inequações componentes destes forem não-lineares, tem-se um problema de otimização não-linear, chamado NLP (*NonLinear Problem*). Caso todas as equações componentes dos modelos do processo sejam lineares, tem-se um problema de otimização do tipo linear LP (*Linear Problem*). Em um problema de otimização, com variáveis contínuas e discretas e modelos não-lineares, a formulação de otimização será do tipo MINLP (*Mixed Integer Nonlinear Problem*). Se o problema de otimização for composto por modelos de processo lineares, trata-se de formulação do tipo MILP (*Mixed Integer Linear Problem*).

A utilização de metodologias de otimização na automação e operação em linha de processos da indústria tem despertado muita atenção nas últimas décadas, em particular em processos da indústria petroquímica. Desde o começo de implementação da otimização em linha, a partir dos anos 1980, o desenvolvimento de maior capacidade de processamento dos microprocessadores digitais possibilitou a utilização de modelos maiores, mais complexos, com maior capacidade de cálculo e convergência numérica mais rápida. Atualmente, modelos com mais de 100.000 equações para otimização, com 30 a 40 variáveis de graus de liberdade, são comuns na indústria.

A otimização em linha de processos, baseada em modelo matemático rigoroso, fenomenológico ou empírico, denomina-se RTO (em inglês, *Real-time Optimization*). A grande maioria das implementações de RTO na indústria, nos últimos 20 anos, utiliza modelos fenomenológicos em estado estacionário, com a otimização de uma função objetivo econômica também chamada de “RTO tradicional”. Calcula-se que 250 a 300 otimizações RTO implementadas seguem a modelagem tradicional disponível comercialmente, baseada em sistemas de equações abertas (DARBY et al, 2011). Esta modelagem é baseada em um conjunto de equações e relações físicas que traduzem um processo orientado ao problema de otimização.

A otimização RTO lida com métodos de maximização de um objetivo econômico específico do problema de otimização, relacionado à operação de um processo contínuo (DE SOUZA et al, 2012). Em processos químicos complexos, modelos rigorosos necessitam de uma grande quantidade de equacionamento: balanços de massa e energia, expressões de relações de equilíbrio líquido-vapor, relações de cinética de reações químicas, entre outras relações. A probabilidade de sucesso na operação de uma unidade depende do alto grau de conhecimento das restrições do processo, do comportamento estacionário dos modelos matemáticos do processo e dos parâmetros, além do comportamento dinâmico dos sistemas

de controle (CUTLER e PERRY, 1983). Em artigo de Forbes et al. (1993) além da discussão da importância da modelagem do processo aos resultados de uma aplicação em RTO, o problema do teste de adequabilidade do modelo em relação aos dados reais foi abordado (*point-wise adequacy check*).

À estrutura do algoritmo da otimização RTO juntam-se etapas de reconciliação de dados e estimação de parâmetros para a atualização dos dados dos modelos de otimização (CUTLER e PERRY, 1983).

Além das etapas acima citadas, há também anteriormente o tratamento de dados e detecção de estado estacionário do processo. Em estudo de Miletic e Marlin (1996) foi apresentada a influência de ruídos de medição e distúrbios ao estado estacionário no resultado otimizado da otimização RTO, com distanciamento do resultado ótimo verdadeiro.

A inadequação de alguma das etapas de implementação da otimização RTO pode resultar em incertezas sobre os ganhos econômicos efetivos desta aplicação. Questões referentes, por exemplo, às diferenças entre o modelo de processo da otimização RTO e o processo real, inadequação na identificação e estimação de parâmetros e à baixa frequência de atualização de set-points implementados no MPC trazem dúvidas quanto aos ganhos envolvidos (GRACIANO, 2016).

A otimização RTO faz parte de uma estrutura de algoritmos computacionais, onde as decisões de um negócio ou planta operacional são calculadas; normalmente essa estrutura segue uma hierarquia *top-down*: Planejamento, Programação, RTO, MPC e Controle regulatório. A estruturação hierárquica é uma solução comum ao gerenciamento de distribuição de diretrizes e objetivos a sistemas complexos, como uma indústria (FINDEISEN et al, 1980). Tal sistema hierárquico encaixa-se no conceito *Multilayer*, onde as decisões de cada camada alimentam os objetivos da camada subsequente, com diferenças entre as camadas tanto no horizonte de tempo dos pontos ótimos de decisão (da camada mais acima, objetivos com duração de meses ou semanas, indo até à ordem de segundos nas camadas de controle regulatório) quanto na complexidade e detalhamento dos modelos, sendo os níveis acima menos detalhados. Cada nível de hierarquia é modelado levando-se em conta restrições de mercado, de produtos, de equipamentos, e assim por diante.

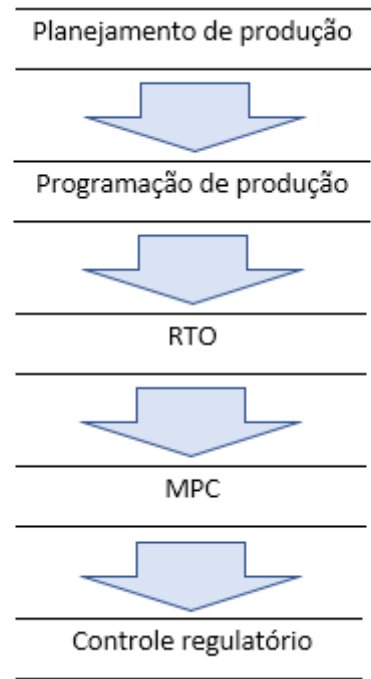


Figura 1: Cadeia hierárquica de modelos de otimização em um processo químico

Fonte: adaptado de DARBY et al. (2011)

A otimização RTO calcula em tempo real um conjunto de set-points, visando aos objetivos da resolução dos modelos superiores (Planejamento e Programação) e respeitando-se as restrições dos modelos inferiores (MPC e controle regulatório). Normalmente, o objetivo do problema de otimização da camada RTO é a maximização de lucro econômico da planta, com dimensão temporal na ordem de uma hora. Um processo completo de RTO com detecção de estado estacionário, estimação de parâmetros, e otimização leva menos de 40 minutos em capacidade de processamento computacional típica.

2.2 - Integração RTO e Sistema de Controle

Em aplicações das indústrias petroquímicas típicas, a otimização em linha RTO insere-se na estrutura de tomada de decisões de forma hierárquica, como mostrada na seção 2.1. Sendo o horizonte de tempo da otimização RTO na ordem de grandeza de horas, a integração desta com o processo químico é feita via um modelo linear em estado dinâmico MPC (em Inglês, *Model Predictive Control*) com horizonte de otimização em menor espaço de tempo, na ordem

de minutos. O MPC é a aplicação padrão para controle avançado multivariável na indústria atualmente (DARBY et al., 2009).

O MPC pode ser implementado em uma ou mais unidades, ou grupo de equipamentos em uma planta de processo, com ciclo de ação operacional em dimensão de minutos. Pode possuir função de otimização, dependendo dos objetivos de cada MPC implementado. O MPC, por sua vez, fornece ao sistema de controle regulatório set-points que atendam tanto os objetivos e restrições do MPC quanto da otimização RTO, na escala de tempo de segundos.

A integração da otimização RTO e do MPC é executada a cada ciclo de cálculo de otimização RTO, com o modelo não-linear em estado estacionário, alimentando o modelo dinâmico do MPC com set-points atualizados. Da forma como são configuradas normalmente, as saídas da otimização RTO que suprem o modelo do MPC podem ser entendidas como um ponto de controle e predição (estado estacionário) do MPC.

Dessa maneira, aproveitando-se as características de algoritmo de controle do MPC, baseadas em modelagem dinâmica linear, este mantém as variáveis chave do modelo dentro de faixas ótimas em estado estacionário, fornecidas pela otimização RTO durante e através das rodadas subsequentes de otimização.

A integração da camada de RTO com o modelo de controle dinâmico MPC pode ser prejudicada pela frequência de atualização dos objetivos do algoritmo da otimização RTO, em virtude de distúrbios ou ruídos dos dados do modelo, além de alterações constantes em restrições econômicas do processo, e resultarem em condições deslocadas da ótima real até a próxima rodada de otimização. Tal característica, da otimização RTO clássica, pode ser uma desvantagem em relação a modelos em estado dinâmico, tais como indicados em estudo sobre a otimização RTO integrada ao MPC em uma camada (TVRZSKÁ DE GOUVÊA e ODLOAK, 1998; ZANIN et al., 2002; DE SOUZA et al., 2010), ou a otimização RTO dinâmica D-RTO (KAMESWARAN e BIEGLER, 2006; BIEGLER et al., 2015).

2.3 - Estrutura do Algoritmo da Otimização RTO

Para a implementação da camada RTO, é necessária a implementação de um algoritmo computacional formado pelas seguintes etapas de cálculo, como mostrado na Figura 2:

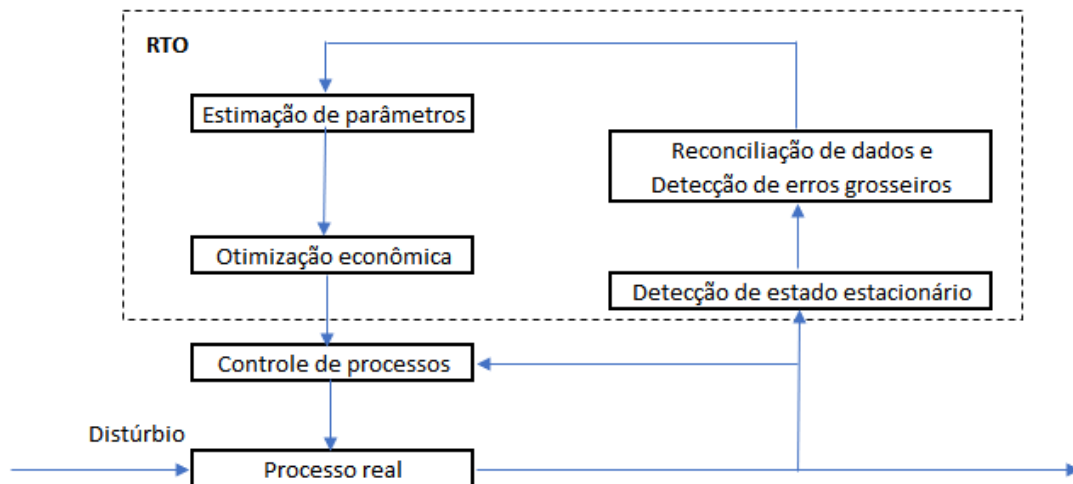


Figura 2: Fluxo de informações da otimização RTO

Fonte: adaptado de MENEZES (2016)

Trata-se, basicamente da detecção de estado estacionário, reconciliação de dados e detecção de desvios por erro de medição, estimação de parâmetros e a otimização econômica, que alimenta as camadas subsequentes na hierarquia de controle. A estrutura do fluxo da otimização RTO é apresentada em vários trabalhos, entre os quais de Naysmith e Douglas (1995) e Menezes (2016), ou de forma aproximada (FORBES et al., 1994, DARBY et al., 2011, KRISHNAMOORTHY et al., 2018).

2.3.1 - Detecção de Estado Estacionário

A detecção e identificação de estado estacionário em um processo ou sistema é uma importante etapa para a implementação da otimização RTO. O modelo de processo da otimização RTO clássica, normalmente em estado estacionário, requer que os dados também estejam em estado estacionário ou quase estacionário, de modo que as etapas de reconciliação de dados e a atualização de parâmetros do modelo sejam adaptadas aos modelos de processo da otimização resultando em melhores soluções (CAO e RHINEHART, 1995; LE ROUX et al., 2008). Para a detecção de estado estacionário do processo em linha, com dados reais estocásticos, normalmente utilizam-se métodos de detecção estatísticos (LE ROUX et al., 2008).

Os métodos de identificação de estado estacionário, conhecidos pela sigla SSI (*Steady-State Identification*), são baseados, principalmente, na seleção de um intervalo amostral dos dados, calculando-se a média ou variância dos dados, e comparando-se aos cálculos de intervalos anteriores a partir de testes estatísticos (BATH e SARAF, 2004).

No teste T aplica-se, dentro de um intervalo pré-estabelecido, regressão linear com os valores dos dados onde são realizados testes do coeficiente angular resultante, comparando-se o quanto que este se distancia de zero. Considera-se em estado estacionário quando o teste indica proximidade a zero. Há dificuldades neste método principalmente devido à seleção mais apropriada do intervalo, sem interferências de persistência de auto correlação dos dados, ou à possibilidade de resultados falsos na regressão durante oscilações (BETHEA e RHINEHART, 1991; CAO e RHINEHART, 1995).

O teste estatístico F propõe a identificação de estado estacionário a partir da definição da variável R, que representa a razão de duas estimativas de variância dos dados calculadas por métodos diferentes, dentro da mesma janela operacional. Utiliza-se a variância em relação à média dos dados; outro método de cálculo de variância a partir da média das diferenças entre os dados sucessivos. Idealmente, esta razão tenderia à unidade nos casos em que o processo esteja em estado estacionário. A utilização deste método em aplicação em linha é dificultada pela necessidade de seleção de intervalo adequado, sem a interferência de ruídos que possam distorcer o cálculo das variâncias, a influência da persistência de auto correlação dos dados, e a grande quantidade de dados a ser utilizada em cada rodada de identificação.

Cao e Rhinehart (1995) estudaram e propuseram uma adaptação ao teste de F, chamando-o de F-teste modificado. As variâncias são calculadas utilizando-se filtros de média-móvel exponencial, tendo como critérios a sintonia de parâmetros λ , constantes nas equações de média móvel, assim como a condição de teste R crítico. A condição em que R crítico tende ao valor unitário, e o teste estatístico indica R próximo a esse valor, aponta o conjunto de dados como em estado estacionário. No equacionamento do método, questões relativas à influência da auto correlação dos dados são dirimidas.

Outras vertentes de estudos em SSI foram realizadas, como no trabalho em que foi utilizado o modelo ARX (RINCÓN et al., 2015), em estrutura de espaço de estados, analisando-se a singularidade da matriz representativa do modelo em questão como teste de validação. O método ARX tem a vantagem de tomar como índice a análise de singularidade do vetor $X^T X$ (composto por dados do processo), calculando-se o vetor de autovalores por métodos, por

exemplo, como o SVD (*Singular Value Decomposition*). O teste compara o valor mínimo de autovalor com um limite estabelecido, e se for verdade que o valor mínimo seja menor que o limite estabelecido, tratam-se os dados como em estado estacionário.

Métodos polinomiais e outros métodos foram aplicados em estudos de SSI, tais como em estudo de Le Roux et al. (1998) que estudaram técnica baseada na interpolação polinomial de Savitzky e Golay (PIT – *Polynomial Interpolation Test*) de um determinado grau p e uma determinada janela móvel de tamanho n (com $p < n$) utilizando-se como índice de comparação a derivada de primeira ordem no ponto central da janela.

Em aplicações industriais, usualmente é utilizada uma comparação simples do desvio padrão de determinadas variáveis dentro de uma janela de dados móvel, a um intervalo de tolerância “ 3σ ” em que, se estiver dentro deste intervalo, considera-se o conjunto de dados em estado estacionário (CAO e RHINEHART, 1995; DARBY et al., 2011).

2.3.2 – Reconciliação de Dados

A grande quantidade de dados utilizados, de várias variáveis componentes do modelo da otimização RTO, exige o seu tratamento estruturado, seja na reconciliação de dados ou na detecção e expurgo de erros grosseiros. Tal etapa de verificação e tratamento dos dados é essencial, haja visto a inevitabilidade de aparecimento de erros, seja na coleta, medição ou transmissão (NARASIMHAN E JORDACHE, 2000). Os erros de medição podem resultar em prejuízos ao desempenho do processo, por exemplo, nos sistemas de controle pelos erros aleatórios ou em modelos de otimização de planejamento ou de operação, no caso de erros grosseiros. Podem ser contribuintes para a operação do processo em estado deficitário economicamente, ou até mesmo, em condições de insegurança.

Os erros medidos de um conjunto de variáveis, que são definidos como a diferença entre o valor medido e o valor real, têm a contribuição dos erros aleatórios e os erros grosseiros.

Os erros aleatórios caracterizam-se pela imprevisibilidade das medições; isso implica que, duas medições com o mesmo instrumento, sob as mesmas condições, podem resultar em respostas diferentes dependendo dos erros aleatórios obtidos. Dessa forma, tais erros são possíveis de serem estimados apenas a partir da distribuição probabilística dos resultados medidos. Suas fontes são, também, de difícil identificação, sendo provavelmente resultantes

de uma série de contribuições dentro de um processo (flutuações na transmissão de dados, filtro de sinais analógicos, mudanças em condições climáticas, etc).

Já os erros grosseiros são identificados a partir de eventos não-aleatórios, podendo ser por mau funcionamento de instrumentos, seja por projeto ou instalação inapropriados, má-calibração de instrumentos, ou outros eventos conhecidos. A característica de não-aleatoriedade desse tipo de erro implica que os erros e suas magnitudes podem ser desconhecidos dada uma amostra qualquer, porém, a repetição de medições com os mesmos instrumentos e condições aproximadamente iguais, levam a um tipo de erro sistemático que caracterizam um tipo de erro grosseiro.

De modo geral, inicialmente os dados são condicionados através da detecção de erros grosseiros, a partir de verificações de validação, como faixas de operações típicas das variáveis, de taxas de mudança em um determinado período, ou outras técnicas. Uma das mais utilizadas e sofisticadas é o SQC (*Statistical quality control*), que pode determinar erros grosseiros significativos, ou outliers (NARASIMHAN E JORDACHE, 2000). A aplicação dessas técnicas também inclui o uso de filtros de dados, que atenuam a variância e ruídos aleatórios. Em um estudo de Arora e Biegler (2001) foram estudados uma série de métodos de identificação de erros grosseiros e outliers, como o critério de Akaike (AIC) na determinação de erros grosseiros, ou o M-estimator, baseado na determinação estatística de estimadores robustos e utilização destes em funções objetivo de problemas DRPE (*Data Reconciliation and Parameter Estimation*), impondo menor peso a grandes resíduos correspondentes aos outliers.

A reconciliação de dados exige que o conjunto de dados já tenha sido condicionado quanto aos erros grosseiros, tanto nas variáveis quanto nos parâmetros do processo; nessa etapa, são utilizados o modelo do processo, informações estatísticas dos dados, e formulação do problema de otimização de modo a minimizar os erros de medição e valores calculados. Normalmente, a reconciliação de dados é baseada em um problema de otimização não-linear com um conjunto de restrições, usualmente modelada como mínimos quadrados; a função objetivo é da forma quadrática nos ajustes das medidas com a somatória ponderada por um vetor de pesos (CROWE, 1996).

Narasimhan e Jordache (2000) estruturaram um fluxo de blocos com atividades necessárias à aplicação de condicionamento de dados para utilização em linha em algoritmos de simulação, otimização ou estimação econômicas, como mostrado na Figura 3.

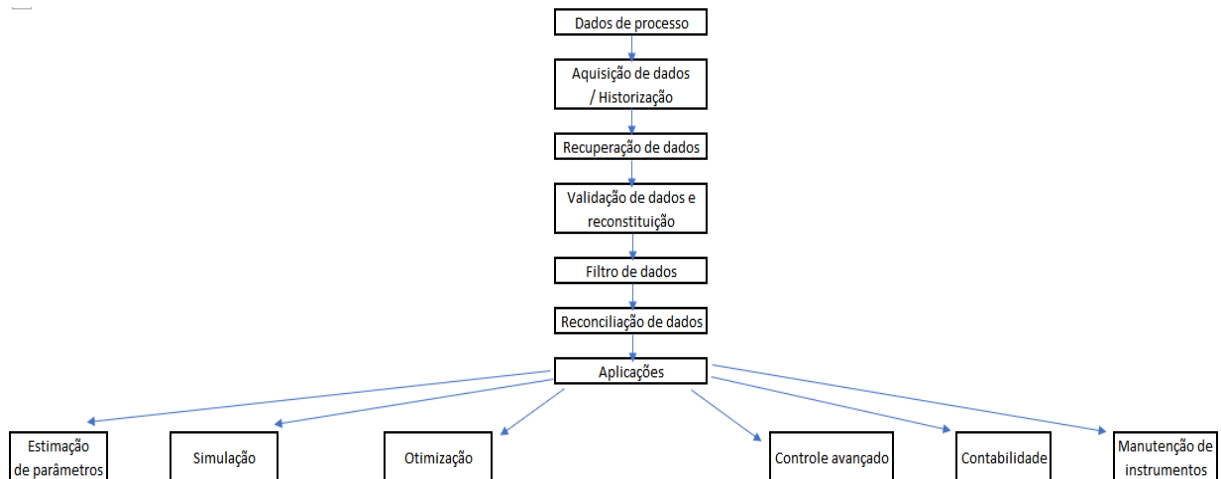


Figura 3: Fluxo de blocos de condicionamento de dados

Fonte: adaptado de NARASIMHAN e JORDACHE (2000)

2.3.3 - Estimação de Parâmetros

O processo subsequente à detecção de estado estacionário é a estimação, ou calibração, de parâmetros do modelo. Esses parâmetros são recalculados a partir de algoritmos de otimização não-lineares, com informações em tempo real do processo químico. Dentre os parâmetros calibrados no modelo tem-se coeficientes de troca térmica em permutadores, eficiências de colunas de separação e desativação de catalisadores, entre outros. Vários métodos de estimação de parâmetros podem ser utilizados, normalmente um problema de minimização das diferenças de medição das variáveis em planta e das respostas do modelo. O tamanho e a alta complexidade do modelo da otimização RTO, associados a ruídos de processos, podem dificultar a estimação de parâmetros, levando a modelos diversos do comportamento real do processo químico.

O problema de estimação de parâmetros é afetado principalmente por matrizes hessianas mal condicionadas ou matrizes superdimensionadas (MCLEAN e MCAULEY, 2012), com predição inadequada de parâmetros e conseqüentemente, a etapa de otimização de processo com resultados não-otimizados (GRACIANO, 2016).

Em estudo de Graciano (2016) foram listados e analisados quatro métodos de estimação de parâmetros (Discriminação Rotacional, Seleção automática e Estimação de parâmetros, Reparametrização via Geometria Diferencial e o Mínimos quadrados não-lineares), avaliando-se três pontos importantes para aplicação de RTO: Predição, Robustez e Velocidade.

A etapa de estimação de dados pode também ser executada acoplada à reconciliação de dados. Uma formulação usual é a reconciliação de dados e estimação de parâmetros simultâneas (DRPE – *Data Reconciliation and Parameter estimation*), utilizando-se mínimos quadrados nas medições sujeitas às restrições de modelo e das variáveis. Sua utilização é baseada no pré-requisito que os erros de medição dos dados atendam à distribuição normal aleatória, no caso em que o problema dos mínimos quadrados se aproxime de um estimador de máxima verossimilhança (ARORA e BIEGLER, 2001).

2.3.4 - Camada de Otimização

A camada de otimização RTO baseia-se na minimização (ou maximização) de uma função objetivo, podendo ser linear (LP) ou não-linear (NLP), com o modelo do processo sujeito ou não a restrições. O conjunto de soluções otimizadas, com as respectivas variáveis-chaves, são alimentados ao sistema de controle dinâmico do processo real. A otimização RTO dentro da estrutura funcional de controle tem como função objetivo a maximização econômica da unidade, mantendo as variáveis do modelo dentro dos limites operacionais, respeitando as restrições diversas (físicas, termodinâmicas, econômicas, ambientais, etc).

A aplicação da otimização RTO clássica apresenta-se adequada, desde que o modelo seja suficientemente flexível para representar a topologia do processo, um método de estimação de parâmetros apropriado para lidar com ruídos de medição, e um método para melhorar a qualidade dos dados oriundos do processo real (CÂMARA et al., 2016). Uma questão que prejudica o método de otimização RTO é a incoerência entre a planta e o modelo (CUTLER e PERRY, 1983; FORBES et al., 1994).

Graciano (2016) fez um estudo comparativo entre algoritmos, da otimização RTO clássica com metodologias mais recentes – MA (*Modifier Adaptation*), ISOPE (*Integrated System Optimization and Parameter Estimation*), e SCFO (*Sufficient Conditions of Feasibility and Optimality*), utilizando o método de Monte Carlo. Tais métodos visam, basicamente, compensar diferenças entre o modelo da otimização RTO e o modelo do processo real. Na Figura 4, por exemplo, tem-se a estrutura do algoritmo no método MA:

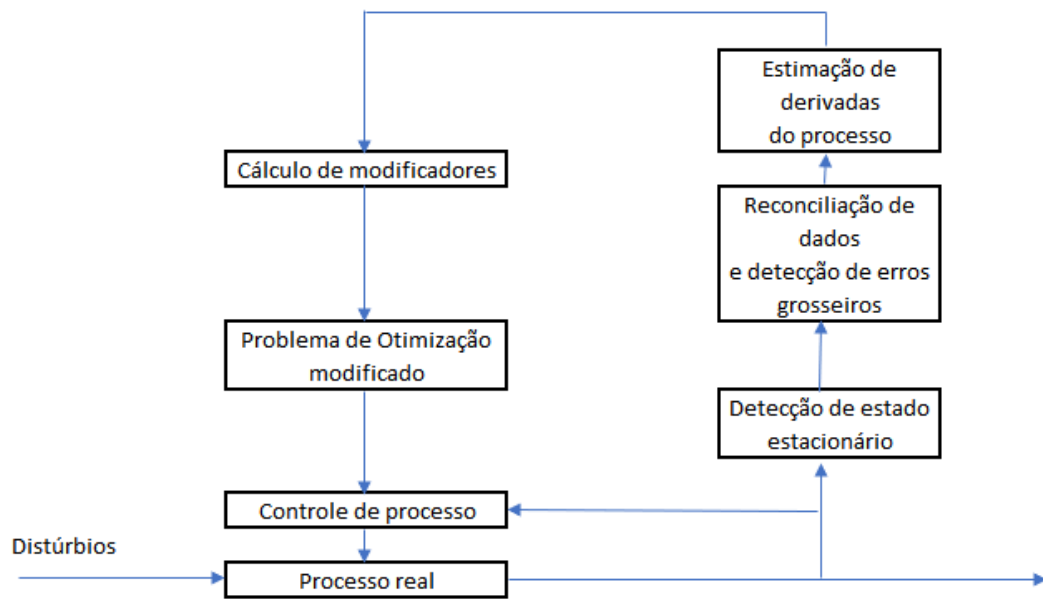


Figura 4: Estrutura do algoritmo MA

Fonte: adaptado de GRACIANO (2016)

Com o problema de otimização seguindo os seguintes termos:

$$\begin{aligned}
 \min \varphi_c(u, \theta) &= \varphi_m(u, \theta) + \lambda_\varphi^T (u - u_k) \\
 \text{s. a. } g_c(u, \theta) &= g_m(u, \theta) + \varepsilon + \lambda_g^T (u - u_k) \leq 0
 \end{aligned} \tag{1}$$

Onde λ^T e ε são chamados de modificadores, e λ^T representa a diferença entre as derivadas do modelo e da planta, e ε representa a diferença entre as respostas dos modelos da otimização RTO e o modelo real do processo.

2.3.5 - Adequação do Modelo

A adequação das soluções ótimas do modelo utilizado na otimização RTO com os dados reais tem relevância na implementação do algoritmo, visto que os dados reais da planta, os ruídos dos dados, assim como a incompatibilidade do modelo podem prejudicar o desempenho do algoritmo da otimização RTO. Há o agravante de que a obtenção de dados do processo é baseada muitas vezes nas mudanças e derivadas da planta real, que são dados difíceis de se obter.

As incertezas dos algoritmos da otimização RTO levam a questionamentos e dúvidas sobre a aplicabilidade na indústria (DARBY et al., 2011). Em trabalho de Biegler e outros autores, em 1985, mostrou-se que a utilização de modelos simplificados do processo, que é o principal objetivo da otimização RTO clássica, pode levar à respostas não condizentes com o processo. Forbes et al. (1994) apresentaram o conceito de adequabilidade de modelo para o método da otimização RTO clássica. Estudaram um procedimento para classificar um modelo como suficientemente flexível para representar um modelo mais complexo, com o conjunto de variáveis ajustáveis coerentes entre os modelos. Investigou-se se as respostas ótimas econômicas entre os modelos iriam na mesma direção. Apesar da resposta da camada de otimização econômica poder ter os mesmos comportamentos, as saídas de ambos os modelos podem ser diferentes, levando à diferenças na estimação de parâmetros, e dessa forma, prejudicando o algoritmo da otimização RTO clássica.

2.4 – Otimização e RTO Aplicados à Eficiência Energética

A aplicação da otimização RTO em sistemas de utilidades de uma planta química, ou de centrais de geração de energia, busca normalmente a minimização de custos relacionados a insumos normais de tais aplicações, como Energia Elétrica de concessionária e combustíveis de equipamentos geradores de vapor em sistemas de cogeração de energia, por exemplo.

Sistemas de utilidades ofertam as necessidades de energia às plantas industriais, especificamente, demandas elétricas, mecânicas e de vapor. As ofertas de energia elétrica podem advir de equipamentos externos e internos ao processo, a partir de compra de terceiros e/ou geração interna ao processo a partir de equipamentos, tais como turbinas a vapor, ou turbinas a gás. As demandas mecânicas provêm de equipamentos como turbinas, compressores ou bombas. Já as demandas por vapor são função das necessidades de calor em equipamentos de troca de calor, ou correntes de processo em sistemas reacionais ou de separação (BRUNO et al., 1998).

Em estudo publicado em 1997, a OCDE (Organização de Desenvolvimento e Cooperação Econômica) listou, a partir de pesquisa e entrevistas com agentes produtivos e econômicos da indústria petroquímica, aspectos sobre a definição de inovação e atividades inovadoras relacionadas a processos em eficiência energética. Seguindo a definição de inovação da pesquisa, como sendo a adoção de tecnologias novas em processos, ou a otimização no uso

dos processos existentes, o uso da otimização RTO torna-se relevante devido a ganhos econômicos e no uso eficiente dos processos. No levantamento de dados e entrevistas, os investimentos em tecnologias inovadoras podem melhorar a eficiência em energia do processo em pelo menos 5% (REN, 2009).

Dentre os estudos de aplicação de otimização com modelos lineares (MILP), Aguilar et al. (2007) apresentaram um estudo de um processo hipotético de utilidades (com cinco níveis de pressão de vapor e quatro geradores de vapor), e o aplicou em estudo de síntese, de projeto e de operação. A aplicação da otimização em operação instalada em particular é citada como possível em modo em linha. Neste estudo, a partir de um caso base, chegou-se a ganhos em custos operacionais de 4,3% (US\$ 3,7 milhões / ano).

Varbanov et al. (2004) também aplicaram métodos de otimização MILP em um processo de utilidades, composto de sistema de cogeração de energia. Esse estudo focou em detalhes na modelagem de turbinas a gás e a vapor, tendo-se a possibilidade de simulação e otimização com carga parcial destes equipamentos. Os ganhos reportados em uma planta real de utilidades (composta por caldeiras, turbinas a contrapressão e condensante e turbinas a gás) foi de aproximadamente 14% de economia, que representa cerca de US\$ 6,3 milhões ao ano. Formulações de otimização em MINLP vêm sendo aplicadas há 30 anos, como mostrado nos trabalhos de Grossmann e Kravanja (1995). No começo dos estudos de otimização em sistemas de utilidades, o foco principal foi baseado em modelos simplificados, para a síntese e projeto ao invés de modelos rigorosos.

Dentre os trabalhos pioneiros da aplicação de modelos MINLP em sistemas de utilidades tem-se o de Bruno et al. (1998). Foi utilizado modelo rigoroso não-linear de uma planta de utilidades, onde a modelagem do processo foi baseada em propriedades físicas das correntes do processo, e o modelo dos geradores de vapor e equipamentos, e suas eficiências, aplicada a estudos de síntese e projeto.

Em Prokopakis e Maroulis (1996), Lee et al. (1998) e Luo et al. (2011) são apresentados também estudos em MINLP de unidades de geração de energia com foco na otimização dos processos, a partir de modelos empíricos e de eficiência em geradores de vapor e turbinas a vapor e a gás, com ganhos econômicos previstos de 5%.

Serralunga et al. (2012) estudaram uma planta real de central de energia, utilizando métodos de modificação de um modelo MINLP, a partir de fatores de correção para as variáveis e gradientes do modelo (MA - *Modifier Adaptation*).

A aplicação na indústria da otimização RTO conjuntamente a um módulo MPC, foi estudada por Kristoffersen et al. (2014). Estudou-se o controle dinâmico do tipo MPC, em sistema de geração de vapor superaquecido interligado a um módulo RTO, do tipo NLP e MINLP em dois cenários de metodologias, otimizando-se o consumo de combustível nas caldeiras (eficiência) de uma rede de vapor de uma planta de processamento e tratamento de Gás Natural na Noruega.

Na indústria de petróleo, tem-se o estudo de síntese e projeto de Chen, Lin e Lee (2013), que fizeram uma modelagem em MINLP do sistema de geração de vapor em uma refinaria. Primeiramente, foi executada a otimização com a estrutura atual da refinaria, para obter-se o potencial de melhoria operacional. Posteriormente, foram estudados os melhoramentos do processo, a partir de flexibilidade de layout e da inserção de equipamentos tais como turbinas a vapor intermediárias, baseados na resolução da otimização também em MINLP, analisando-se diferentes configurações de processo. As estimativas de ganho econômico a partir da minimização do custo no sistema de geração de vapor foram da ordem de US\$ 2,1 milhões anuais.

Heyen e Kalitventzeff (1997) estudaram a otimização MINLP em duas plantas industriais, de cogeração de energia e uma planta de geração de energia de uma indústria farmacêutica. Foram utilizados os métodos de otimização SQP (*Sequential Quadratic Programming*), com estrutura do algoritmo em MINLP e GA (Genetic Algorithm).

2.5 - Rede de Trocadores de Calor (HEN – *Heat Exchanger Network*)

Atualmente, questões ambientais e a competição por mercados requerem das indústrias a utilização de energia disponível nos processos químicos da forma mais eficiente possível. Isto implica na reutilização e recuperação de energia de forma otimizada, seja no estágio de síntese e projetos de uma unidade de produção quanto na operação cotidiana do processo.

Dentre os tipos de energia disponíveis em um processo, uma grande quantidade de energia térmica pode ser recuperada e reutilizada em redes de trocadores de calor, na forma de calor sensível, a partir de troca térmica entre correntes de fluido quente e frio.

A otimização de um processo de rede de bateria de trocadores de calor pode ser obtida, usualmente, a partir de duas abordagens. Na primeira, pode-se utilizar a sistemática de otimização em linha, em que os dados de processos são utilizados para atualização dos parâmetros do modelo de processo, configurado de modo rigoroso, e posteriormente no bloco de otimização são calculados os valores que são alimentados ao processo.

O outro tipo de abordagem é a utilização de um modelo offline, em que a partir de um conjunto de variáveis controladas, que se mantidas constantes em seus set-points, indiretamente levam o processo em estudo ao seu estado ótimo (ou semi-ótimo). Tal método é utilizado na estratégia SOC (*Self-Optimizing Control*), e normalmente as funções objetivo deste tipo de aplicação são lineares, conforme suas aplicações (JÄSCHKE e SKOGESTAD, 2014). Em particular, na indústria de refino de Petróleo, as margens de ganho econômico operacional são majoradas com otimização da eficiência do uso de energia, seja térmica ou de trabalho, resultando em menor consumo de insumos para sua geração, como combustíveis ou Energia Elétrica externa. Uma parte substancial de economia possível no processamento de refino é a minimização da utilização de combustível em fornos atmosféricos, que fornecem energia de combustão e calor sensível, dos gases resultantes, para os processos de separação dos derivados componentes do Petróleo. A configuração de uma rede de equipamentos trocadores de calor, entre as correntes frias do Petróleo e as correntes quentes de derivados finais e intermediários, possibilita essa integração e a redução deste consumo energético.

Em uma unidade típica de Destilação de Petróleo, há a necessidade de se elevar a temperatura da corrente da matéria-prima a cerca de 380°C na entrada da torre de separação atmosférica, para a produção dos derivados típicos desta indústria (LEMOS et al., 2013). Dessa maneira, normalmente tais processos são projetados com a máxima integração possível de energia,

sendo a otimização de sua operação ponto relevante na eficiência energética das indústrias petrolíferas.

O estudo e pesquisa na otimização da eficiência de redes de trocadores de calor tem grande interesse geral, sendo principalmente na síntese e projeto de redes integradas de trocadores de calor e na otimização operacional de instalação estabelecida. Questões relativas à mudança de composição das matérias-primas ou a problemas operacionais comuns à indústria, como vazamentos ou deposição de sujeira em trocadores de calor tornam a estimação de variáveis de processo pontos críticos às unidades operacionais (RODERA et al., 2003).

Em estudos de síntese e projeto, com vários trabalhos desde meados da década de 1980 (GLEMMESTAD et al., 1998), o escopo principal é a seleção da melhor configuração da rede de trocadores, os tipos, dimensões e interconexões dos equipamentos, dados os cenários e flexibilidades esperadas do serviço no estágio de concepção do processo. Busca-se nesse caso, a melhor configuração da rede levando-se em conta o investimento, ou custo fixo, e o custo operacional da rede, nas condições nominais do processo.

Kotjabasakis e Linnhoff (1986) introduziram estudos de flexibilização das HEN, através de análises de sensibilidade dos equipamentos, apontando variáveis da rede que poderiam ser redimensionadas a partir do ponto ótimo operacional dando flexibilidade de operação.

Já na otimização operacional de uma instalação de rede de trocadores de calor, o escopo principal é a obtenção de condições das variáveis do processo que resultem em melhor eficiência atual do aproveitamento energético, e conseqüentemente, maiores ganhos econômicos, a partir da sistematização de rotinas de coleta de dados, tratamento desses dados, simulação e otimização do modelo de interesse. Resume-se esse interesse em estudo de melhor controlabilidade e operacionalidade da rede de trocadores de calor (RODERA et al., 2003).

Este tipo de estudo é importante pois nem sempre as condições de processo reais, com características dinâmicas e não estacionárias, são iguais às condições previstas em projeto, o que implica em pontos de operação ótimos diferentes entre si. Outra contribuição no estudo de otimização de HEN é a detecção de graus de liberdade no sistema e análise destas variáveis quanto à contribuição individual na otimização econômica e na eficiência do sistema implantado ou a implementar.

Uma aplicação de modelos de HEN pode ser na reconciliação de dados assim como na programação da limpeza de trocadores de calor a partir da estimação de coeficientes de troca

térmica dos equipamentos componentes da rede ou pela monitoração de eficiência dos trocadores de calor (LEMOS et al., 2013). Esses autores apresentaram um trabalho em que, a partir de uma modelagem P-NTU dos trocadores de calor e função linear no tempo do comportamento do coeficiente de troca térmica, utilizando-se a otimização econômica em MILP de uma rede de trocadores de calor composta por 35 trocadores de calor de uma refinaria de Petróleo, obtiveram ganhos na ordem de 40% em economia de combustível em fornos e um ganho de 5°C na temperatura final da corrente de Petróleo, a partir da definição de programação ótima de limpeza dos trocadores.

Aguilera e Marchetti (1998) aplicaram a otimização a uma rede de trocadores de calor a partir de integração de duas camadas, uma que corresponde à estrutura de controle de processos, e outra com uma camada de otimização, sendo ajustada conforme a possibilidade de coordenação entre elas. A estratégia de otimização foi a maximização de troca térmica entre os trocadores de calor, ao invés da monitoração de temperaturas intermediárias do sistema, variando-se entre uma otimização NLP ou LP. Foram discutidos também os graus de liberdade da otimização em linha em redes de trocadores de calor.

Glemmestad et al. (1999) analisaram a otimização em linha de uma rede de trocadores de calor a partir de dois passos: obtendo-se as condições ótimas periódicas de um processo químico, usando-se dados em estado estacionário, implementando-se os valores ótimos de controle nos set-points do processo em questão, sendo esse algoritmo a base do método SOC (*Self-Optimizing Control*). Considerou-se nesse estudo a flexibilidade de variação da proporção de vazão aos trocadores de calor, o que implica na inserção de não-linearidade no modelo estacionário do processo.

Em estudo de Roderer et al. (2003) foram apresentadas metodologias de simulação e otimização, e fluxo de análise e monitoração de uma HEN existente. Especificamente, uma rede de trocadores de calor de uma refinaria de petróleo foi estudada, com a determinação dos coeficientes de troca térmica através da reconciliação de dados dos modelos de processo. Variações de processo, tais como diferentes características físico-químicas do Petróleo componente da carga da unidade, ou questões relativas à deposição de sujeira nos trocadores de calor foram abordadas.

Lersbamrungsuk et al. (2008) aplicaram método de otimização linear MILP em HEN através da otimização da proporção de vazão aos trocadores de calor, mantendo-se um conjunto de variáveis controladas ativas em suas restrições, além da seleção de melhor par de variáveis a

serem controladas em suas restrições, ou *set-points*. Foi utilizada, para esse estudo, simulação dinâmica para averiguação da implementação de estrutura de controle.

Lid e Skogestad (2001) abordaram a seleção de conjunto de variáveis controladas mais apropriadas para implementação da otimização RTO para o caso HEN, para melhoria dos resultados econômicos em um processo com distúrbios, usando o conceito do SOC (*Self-Optimizing Control*).

3 - MATERIAIS E MÉTODOS

Nas duas seções subsequentes descrevem-se os modelos matemáticos dos processos utilizados nos artigos reproduzidos, os métodos empregados de otimização e reconciliação de dados e as ferramentas computacionais utilizadas. A reprodução destes artigos visa corroborar os modelos matemáticos para que os mesmos possam ser aplicados no estudo de caso real.

Na seção 3.3, o estudo de caso de execução de um ciclo RTO em uma rede de trocadores de calor é apresentado, dividido na descrição dos modelos não-lineares de processos, e nos métodos empregados em cada etapa do algoritmo da otimização em linha (detecção de estado estacionário, reconciliação de dados e estimação de parâmetros e otimização).

3.1 – Estudo em Reconciliação de Dados e Estimação de Parâmetros

Para o estudo em reconciliação de dados e estimação de parâmetros, foi reproduzido como estudo de caso o artigo *“Reconciliation of Refinery Crude Preheat Train Data”* do livro *“Data Reconciliation & Gross Error Detection – an intelligent use of Process Data”*, de Narasimham e Jordache (2000). Foi utilizado o *software* IMPL (*Industrial Modeling and Programming Language*), uma plataforma aberta de otimização.

Conforme mostrado na Figura 5, o sistema estudado é de uma rede de trocadores de calor para pré-aquecer a carga de Petróleo de uma unidade de Destilação, em uma refinaria de Petróleo. A rede de trocadores (HEN) consiste em trocadores de calor em série à montante do equipamento de dessalgação do Petróleo, e outra à jusante da dessalgadora, divididos no separador em dois ramais em paralelo que, ao final, juntam-se no misturador em uma corrente.

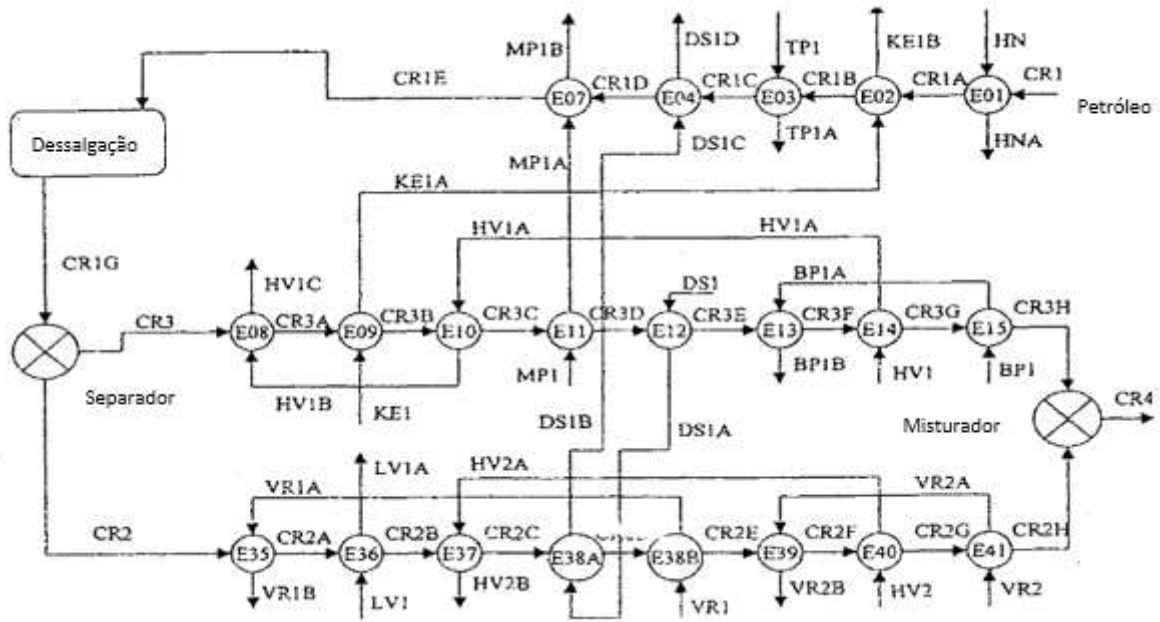


Figura 5: Reprodução de Rede de trocadores de calor

Fonte: reprodução de NARASIMHAN e JORDACHE (2000)

A rede de trocadores de calor em estudo é composta por 21 trocadores de calor, com 11 correntes de fluido quente; as correntes quentes podem participar na troca térmica em mais de um trocador de calor.

Para essa etapa, foi feita a configuração do processo no *software* DIA (versão 0.97.2) e a reconciliação de dados na plataforma IMPL. O *solver* utilizado foi o SECQPE SORVE (*Sequential Equality Constraint Quadractic Programming Engine*) para a reconciliação de dados e SORVE (*Statistics for Observability, Redundancy and Variance Estimates*) para a pós-análise dos resultados.

O problema de otimização utilizado foi o método dos mínimos quadrados, como a seguir:

$$\min f = \sum_{j=1}^n p_j (y_j - x_j)^2 \quad (2)$$

s. a.

$$Q_i = w_{f,i} (T_{fs,i} - T_{fe,i}) \quad (3)$$

$$Q_i = w_{q,i} (T_{qe,i} - T_{qs,i}) \quad (4)$$

$$Q_i = U_i A_i \Delta T_i \quad (5)$$

$$F_{f,E01} = F_{f,E02} = F_{f,E03} = F_{f,E04} = F_{f,E07} \quad (6)$$

$$F_{f,E08} = F_{f,E09} = F_{f,E10} = F_{f,E11} = F_{f,E12} = F_{f,E13} = F_{f,E14} = F_{f,E15} \quad (7)$$

$$F_{f,E35} = F_{f,E36} = F_{f,E37} = F_{f,E38A} = F_{f,E38B} = F_{f,E39} = F_{f,E40} = F_{f,E41} \quad (8)$$

$$F_{f,E01} = F_{f,E08} + F_{f,E35} \quad (9)$$

$$w_{f,i} = F_{f,i} \int_{T_{fe}}^{T_{fs}} cp_{f,i} dT \quad (10)$$

$$cp_{f,i} = a_{f,i} + b_{f,i} T_{f,i} \quad (11)$$

$$F_{q,E02} = F_{q,E09} \quad (12)$$

$$F_{q,E04} = F_{q,E38A} = F_{q,E12} \quad (13)$$

$$F_{q,E07} = F_{q,E11} \quad (14)$$

$$F_{q,E08} = F_{q,E10} = F_{q,E14} \quad (15)$$

$$F_{q,E13} = F_{q,E15} \quad (16)$$

$$F_{q,E35} = F_{q,E38B} \quad (17)$$

$$F_{q,E37} = F_{q,E40} \quad (18)$$

$$F_{q,E39} = F_{q,E41} \quad (19)$$

$$w_{q,i} = F_{q,i} \int_{T_{qs}}^{T_{qe}} cp_{q,i} dT \quad (20)$$

$$cp_{q,i} = a_{q,i} + b_{q,i} T_{q,i} \quad (21)$$

Onde:

f : Função objetivo

p : Vetor peso da função objetivo

j : Índice das variáveis de reconciliação de dados e estimação de parâmetros

x : Variáveis de reconciliação de dados e estimação de parâmetros

y : Variáveis reconciliados e estimados no problema de otimização

Q : Calor trocado [kcal/h]

i : Índice dos trocadores de calor

w_f : Vazão energética da corrente de fluido frio [kcal/h/°C]

T_{fe} : Temperatura da corrente de fluido frio de entrada [°C]

T_{fs} : Temperatura da corrente de fluido frio de saída [°C]

w_q : Vazão energética da corrente de fluido quente [kcal/h/°C]

T_{qe} : Temperatura da corrente de fluido quente de entrada [°C]

T_{qs} : Temperatura da corrente de fluido quente de saída [°C]

U : Coeficiente global de troca térmica [kcal/m²/°C/h]

A : Área de troca térmica do trocador de calor [m²]

F : Vazão mássica [kg/h]

cp_f : Capacidade calorífica do fluido frio [kcal/kg/°C]

cp_q : Capacidade calorífica do fluido quente [kcal/kg/°C]

a_f e b_f : Coeficientes da equação de capacidade calorífica do fluido frio

a_q e b_q : Coeficientes da equação de capacidade calorífica do fluido quente

Na Tabela 1 são apresentados os dados de vazão medidas, reconciliadas antes e após de tratamento de erros grosseiros, do estudo original de Narasimham e Jordache:

Tabela 1: Resultados de reconciliação de dados do estudo de NARASIMHAM e JORDACHE (2000)

Corrente	Vazão medida (t/h)	Vazões reconciliadas (t/h) antes de tratamento de erros grosseiros	Vazões reconciliadas (t/h) depois de tratamento de erros grosseiros
CR1	370.1	399.2	409.6
CR2	151.6	153.1	151.9
CR3	255.8	246.1	257.7
HN	8.4	8.4	8.4
KEI	58.5	58.5	58.7
TP1	268.6	267.0	267.8
DS1	81.8	80.5	81.5
MP1	455.7	454.8	455.1
HV1	54.5	54.6	54.5
BP1	210.0	209.2	209.5
VR1	109.8	106.8	110.0
HV2	106.8	106.6	106.7
VR2	171.3	170.3	171.3
LV1	-	-	-

Fonte: reprodução de NARASIMHAN e JORDACHE (2000)

Tem-se, também, as temperaturas medidas, assim como seus valores reconciliados na Tabela 2:

Tabela 2: Resultados de reconciliação de dados do estudo de NARASIMHAM e JORDACHE (2000)

Corrente	Temperatura medida (°C)	Temperaturas reconciliadas (°C) antes de tratamento de erros grosseiros	Temperaturas reconciliadas (°C) depois de tratamento de erros grosseiros
CR1	43.1	43.0	43.1
CR1A	45.4	45.6	45.7
CR1B	64.3	63.3	63.1
CR1C	90.4	88.9	90.5
CR1D	117.8	122.2	118.5
CR1E	128.6	130.5	129.7
CR1G	127.6	126.3	128.3
CR2	127.6	126.3	128.3
CR2A	177.4	185.0	175.7
CR2B	190.0	192.6	190.5
CR2C	217.6	223.8	217.7
CR2D	217.0	211.7	216.4
CR2E	230.9	235.3	232.7
CR2F	255.2	252.8	252.2
CR2G	276.2	281.2	279.2
CR2H	291.3	292.6	290.8
CR3	127.6	126.3	128.3
CR3A	138.2	136.2	137.1
CR3B	144.1	143.1	143.5
CR3C	152.9	151.9	152.2
CR3D	176.2	176.5	176.7
CR3E	201.7	200.7	200.5
CR3F	217.5	217.6	217.5
CR3G	217.5	217.7	217.7
CR3H	258.1	262.3	261.8
CR4	274.9	274.2	272.7
HN	155.7	155.6	155.7
HNA	45.4	45.4	45.4
KE1	195.0	195.5	195.3
KE1A	168.8	168.5	169.4
KE1B	61.8	61.7	61.7
TP1	144.1	140.4	142.3
TP1A	106.0	107.9	106.9
DS1	295.2	294.1	294.9
DS1A	224.3	224.9	224.6
DS1B	254.9	248.2	227.6
DS1C	94.3	95.0	94.5
MP1	195.5	192.2	193.6
MP1A	181.1	179.4	180.2
MP1B	168.8	172.7	171.0
HV1	302.3	301.1	301.5
HV1A	299.8	301.0	300.8
HV1B	263.8	266.7	265.3
HV1C	229.5	227.4	228.3
BP1	309.5	304.7	306.5
BP1A	253.5	253.1	253.2
BP1B	230.7	233.4	232.5
VR1	283.9	277.3	283.4
VR1A	258.2	242.8	260.8
VR1B	152.6	158.8	198.8
LV1	212.1	206.1	211.8
LV1A	190.3	195.0	190.6
HV2	302.3	295.1	300.2
HV2A	273.6	268.5	275.5
HV2B	233.1	240.6	252.0
VR2	345.9	345.5	347.0
VR2A	345.9	345.5	347.0
VR2B	345.9	345.5	347.0

Fonte: reprodução de NARASIMHAN e JORDACHE (2000)

No estudo de Narasimham e Jordache, usando-se um desvio padrão de 1% em todas as medições, os valores reconciliados foram calculados considerando-se que não havia nenhum erro grosseiro nos dados disponíveis. Usou-se o *software* RAGE. As restrições do modelo foram os balanços materiais, do lado quente e frio, em cada trocador, e o balanço energético. No misturador foi considerado balanço material e energético e no divisor foram considerados balanço material e igualdade de temperatura ao longo do bloco. Não foram utilizadas outras restrições de limites no modelo.

Essa etapa visa o estudo dos métodos e critérios para a etapa de reconciliação de dados e estimação de parâmetros a serem aplicados ao estudo de caso de RTO da rede de trocadores de calor. Em particular, os critérios de limites das variáveis e a estimação dos coeficientes globais de troca térmica dos trocadores de calor.

3.2 - Estudo em Otimização de Processos

Neste trabalho, o estudo em otimização de Jäschke e Skogestad foi modelado em NLP, utilizando-se *solvers* NLP (como IPOPT) e o algoritmo SLPQPE (*Sequential Linear Programming Quadratic Programming Engine*) conectado a *solvers* MILP (GLPK, LPSOLVE e COINMP). Na modelagem fenomenológica do sistema, cinco modelos do diferencial de temperatura entre os fluidos frio e quente diferentes (LMTD, Aritmética, Underwood, Paterson, Chen) foram utilizados. Também foi feita a comparação dos resultados com os resultados obtidos da modelagem do processo da “temperatura de Jäschke”. Foi utilizado o *software* DIA, como flowsheet dos processos.

Jäschke e Skogestad sugeriram a otimização de uma rede de trocadores de troca térmica usando uma equação analítica, na qual a variável de controle “Temperatura de Jäschke” é mantida igual em todos os ramos da rede de trocadores de calor (JÄSCHKE e SKOGESTAD, 2014). Para o caso de uma rede de trocadores de calor com dois ramais, teríamos a variável c , tal que:

$$c = T_{1,j} - T_{2,j} \quad (22)$$

Sendo:

c : variável de diferença entre as “temperaturas de Jäschke” dos ramais 1 e 2

$T_{1,j}$ e $T_{2,j}$:“Temperaturas de Jäschke” dos ramais 1 e 2.

Um ponto chave para essa estratégia de otimização é a definição da “temperatura de Jäschke”, proposta que visa a simplificar a sua implementação devido à necessidade de informações do processo de simples medição. No cálculo da “temperatura de Jäschke”, as temperaturas de entrada e saída dos fluidos quentes e frios componentes de cada trocador de calor da rede de integração energética são utilizadas.

Dadas as condições de otimalidade para uma rede de trocadores de calor, com objetivo de maximização de troca térmica entre as correntes, tem-se os seguintes modelos que governam o sistema estudado com as premissas:

- a) condições de otimalidade de sistemas de trocadores de calor em paralelo: os custos marginais (primeira derivada da função objetivo) têm de ser iguais em todos os ramais do HEN.
- b) a otimização de troca térmica do HEN implica no controle da “temperatura de Jäschke” iguais em todos os ramais.
- c) considera-se que, nas correntes do lado frio e quente, não há mudança de fase;
- d) considera-se que a capacidade calorífica específica c_p dos fluidos é constante;
- e) considera-se, entre as premissas, a aproximação das médias logarítmicas de diferença de temperatura para uma média aritmética, a partir das capacidades caloríficas das correntes frias e quentes sendo da mesma ordem de grandeza;
- f) Considera-se no bloco divisor todas as correntes sendo isotérmicas;
- g) Considera-se todos equipamentos como sistema adiabático.

A partir de um problema geral de otimização:

$$\min_u J(u) \quad (23)$$

Com:

u : conjunto de graus de liberdade do modelo; com $u \in \mathbb{R}^{n_u}$

J : função objetivo do problema de otimização

Para resolução do problema, são necessários um conjunto z de variáveis controladas com quantidade igual ao conjunto u , ou seja, $n_u = n_z$. Considerando-se um sistema com vazão principal de entrada F_0 dividida em N ramais, com um trocador de calor em cada ramal, tem-se o custo operacional total do sistema J como sendo a soma de cada custo operacional unitário J_j em cada ramal j :

$$J = \sum_{j=1}^N J_j(F_j) \quad (24)$$

Sendo o objetivo operacional a minimização de J , portanto. Tem-se, também, que atender ao balanço de massa do sistema, sendo:

$$F_0 - \sum_{j=1}^N F_j = 0 \quad (25)$$

Com:

F : vazão mássica em [t/h]

Tem-se, nesse sistema, $n-1$ graus de liberdade; então o conjunto u é:

$$u = [F_1, F_2, \dots, F_{N-1}]^T \quad (26)$$

Ajustando-se cada termo de fluxo do fluido frio (ou quente, se for o caso) pode-se obter custos operacionais globais J menores, ou maiores, para atendimento do objetivo de otimalidade do problema proposto na Equação (2).

Podemos considerar como variável de controle de otimização c a derivada de primeira ordem de J em relação a u , tal como:

$$c = J_u = \frac{\partial J}{\partial u} = 0 \quad (27)$$

No caso de uma rede de trocadores de calor em paralelo, tem-se em cada ramal esta variável controlada c iguais, tal como em teorema proposto (DOWNS e SKOGESTAD, 2011):

$$\frac{\partial J_1}{\partial F_1} = \frac{\partial J_2}{\partial F_2} = \dots = \frac{\partial J_j}{\partial F_j} = \dots = \frac{\partial J_N}{\partial F_N}$$

Resultando em:

$$c = J_u = \begin{pmatrix} \frac{\partial J_1}{\partial F_1} - \frac{\partial J_N}{\partial F_N} \\ \vdots \\ \frac{\partial J_{N-1}}{\partial F_{N-1}} - \frac{\partial J_N}{\partial F_N} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial J}{\partial F_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial J}{\partial F_N} \end{pmatrix} \quad (28)$$

Pode-se definir a variável J_u como o custo marginal do processo. Tem-se no algoritmo de otimização que, sendo a derivada parcial de primeira ordem da função objetivo (matriz gradiente) igual a zero, como mostrado na Equação (27), a primeira condição de otimalidade do problema é verdadeira. Sendo as derivadas parciais em cada ramal iguais e em zero, resulta-se na relação mostrada na Equação (28).

A premissa de manutenção da variável c nula coincide com a estratégia de controle SOC (*Self-Optimizing Control*), onde determinadas variáveis de controle, que se mantidas constantes em seus *set-points*, indiretamente levam o processo em estudo ao seu estado ótimo (ou semi-ótimo).

Tem-se, dessa forma:

$$\Delta T_{Di,j} = \Delta T_{logi,j} = \frac{(T_{hi,j} - T_{i,j}) - (T_{hi,j}^{out} - T_{i-1,j})}{\log \frac{(T_{hi,j} - T_{i,j})}{(T_{i,j}^{out} - T_{i-1,j})}} \quad (29)$$

O ΔT logarítmico, e a simplificação por média aritmética:

$$\Delta T_{A_{i,j}} = \frac{(T_{h_{i,j}} - T_{i,j}) + (T_{h_{i,j}}^{out} - T_{i-1,j})}{2} \approx \Delta T_{log,i,j} \quad (30)$$

Sendo:

$\Delta T_{A_{i,j}}$: A diferença aritmética de temperatura em cada trocador de calor i , do ramal j .

$T_{h_{i,j}}$: Temperatura de entrada do fluido quente do trocador de calor i , do ramal j ;

$T_{i,j}$: Temperatura de entrada do fluido frio do trocador de calor i , do ramal j ;

$T_{h_{i,j}}^{out}$: Temperatura de saída do fluido quente do trocador de calor i , do ramal j ;

$T_{i-1,j}$: Temperatura de entrada do fluido frio do trocador de calor $i-1$, do ramal j ;

A diferença entre a diferença média logarítmica de temperatura e o delta médio aritmético apresentou um desvio menor que 1% (SKOGESTAD, 2008), quando a diferença dos deltas de temperatura de cada lado do trocador for menor que 40%, atendendo:

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \leq \frac{\Delta T_{i,j}^{(1)}}{\Delta T_{i,j}^{(2)}} \leq \sqrt{2} \quad (31)$$

Sendo:

$\Delta T_{i,j}^{(1)}$: diferença entre as temperaturas de fluido frio e quente do lado 1 do trocador de calor;

$\Delta T_{i,j}^{(2)}$: diferença entre as temperaturas de fluido frio e quente do lado 2 do trocador de calor;

Tem-se como modelos do processo o balanço de energia em cada trocador de calor, como a seguir:

$$Q_{i,j} = w_j(T_{i,j} - T_{i-1,j}) \quad (32)$$

$$Q_{i,j} = w_{hi,j}(T_{hi,j} - T_{i-1,j}^{out}) \quad (33)$$

$$Q_{i,j} = UA_{i,j}\Delta T_{Di,j} \quad (34)$$

Sendo:

$$w_j = F_j c_{p0} \quad (35)$$

$$w_{hi,j} = F_{hi,j} c_{p_{hi,j}} \quad (36)$$

E a partir do modelo de transferência de calor pela parede do trocador i , com a linearização de ΔT logarítmico:

$$Q_{i,j} = UA_{i,j}\Delta T_{Ai,j} \quad (37)$$

Do balanço de massa do divisor, tem-se:

$$w_0 - \sum_{j=1}^N w_j = 0 \quad (38)$$

E o balanço de energia no divisor retorna, combinando-se as Equações (32) e (33) com a Equação (38):

$$T_{0,j} = T_0 \quad (39)$$

No caso em que todas as correntes dos ramais constituintes do sistema de troca térmica em paralelo se juntam compondo uma corrente final no misturador, tem-se a partir do balanço de energia no bloco de mistura:

$$T_{end} = \frac{1}{w_{end}} \sum_{j=1}^N w_j T_{Mj} \quad (40)$$

Sendo T_{end} a temperatura final das correntes dos ramais 1 e 2 misturadas.

A função objetivo, de forma genérica, é definida como:

$$J = -\text{ganhos} + \text{perdas} \quad (41)$$

De forma quantitativa tem-se os gastos e ganhos unitários de cada fluido de trabalho em função da quantidade de troca térmica em cada trocador, como a seguir:

$$J = - \sum_{j=1}^N \sum_{i=1}^{M_j} p_{i,j}^{rev} Q_{i,j} + \sum_{j=1}^N \sum_{i=1}^{M_j} p_{i,j}^{cost} Q_{i,j} = - \sum_{j=1}^N \sum_{i=1}^{M_j} (p_{i,j}^{rev} - p_{i,j}^{cost}) Q_{i,j} \quad (42)$$

Sendo:

$p_{i,j}^{rev}$: custo específico da corrente do lado frio do trocador de calor i , ramal j ;

$p_{i,j}^{cost}$: custo específico da corrente do lado quente do trocador de calor i , ramal j ;

Considerando o custo específico do lado frio fixo, por ser a mesma corrente, implica:

$$p_{i,j}^{rev} = p^{rev} \quad (43)$$

Considerando o custo de troca térmica do lado quente fixo, tem-se:

$$p_{i,j}^{cost} = p^{cost} \quad (44)$$

Resulta a função objetivo:

$$J = - \sum_{j=1}^N \sum_{i=1}^{M_j} p_{i,j} Q_{i,j} \quad (45)$$

E os custos do lado frio também são iguais entre si, o problema de otimização se resume na maximização da transferência global de calor; e no caso de um sistema configurado com as correntes sendo recompostas em uma no final, corresponde à maximização da temperatura de saída T_{end} .

Jäschke e Skogestad sugerem a simplificação das expressões resultantes das condições de otimalidade do problema, para que variáveis como vazão das correntes do trocador de calor, coeficientes globais de troca térmica, ou capacidades caloríficas das correntes sejam retiradas da derivada de primeira ordem, ou da função objetivo.

Sob as premissas expostas anteriormente, considerando-se custos da corrente quente dos trocadores de calor i , incorre-se em um problema de otimização de maximização de troca térmica global, sendo expresso na relação:

$$\frac{\partial J}{\partial w_j} = T_{J,j} \quad (46)$$

Tem-se T_{ij} a “temperatura de Jäschke” no ramal j ; define-se essa temperatura como:

$$T_{J,j} = \sum_{j=1}^{M_j} \alpha_{i,j} \quad (47)$$

Sendo:

$$\alpha_{i,j} = \frac{(\theta_{i,j} - \theta_{i-1,j})(\theta_{i,j} + \theta_{i-1,j} - a_{i-1,j})}{\theta_{q,i,j} - \theta_{i-1,j}} \quad (48)$$

$$\alpha_{0,j} = 0$$

Com a variável θ sendo:

$$\theta = T - T_0 \quad (49)$$

Uma interpretação da “temperatura de Jäschke” pode ser dada pelo cálculo de eficiência dos trocadores de calor como usado no método NTU (Mills, 1995). Em um ramal com um trocador de calor, utilizando-se a eficiência de troca térmica do lado frio ε_c , a temperatura de saída do lado frio pode ser calculada por:

$$T_{i,j} = \varepsilon_c T_{hi,j} + (1 - \varepsilon_c) T_0 \quad (50)$$

E isolando-se ε_c , tem-se:

$$\varepsilon_c = \frac{T_{i,j} - T_0}{T_{hi,j} - T_0} \quad (51)$$

A “temperatura de Jäschke” seria o ΔT do lado do fluido frio multiplicado pela eficiência do trocador de calor i , correspondendo então a:

$$T_{J,j} = \varepsilon_c (T_{1,j} - T_0) = \frac{(T_{1,j} - T_0)^2}{(T_{hi,j} - T_0)} \quad (52)$$

A equação de restrição do modelo por Jäschke e Skogestad foi a diferença das “temperaturas de Jäschke” dos dois ramais chamada como variável c , igualando esse valor a zero.

$$c = T_{J,1} - T_{J,2} = 0 \quad (53)$$

Sendo $T_{J,1}$ e $T_{J,2}$ as “temperaturas de Jäschke” dos dois ramais, 1 e 2. A estratégia adotada é a manutenção da variável c em 0, ou seja, a variável controlada. Dessa forma, tem-se um problema de otimização do tipo SOC (*Self-Optimizing Control*).

No exemplo reproduzido neste trabalho, tem-se a seguinte estrutura HEN:

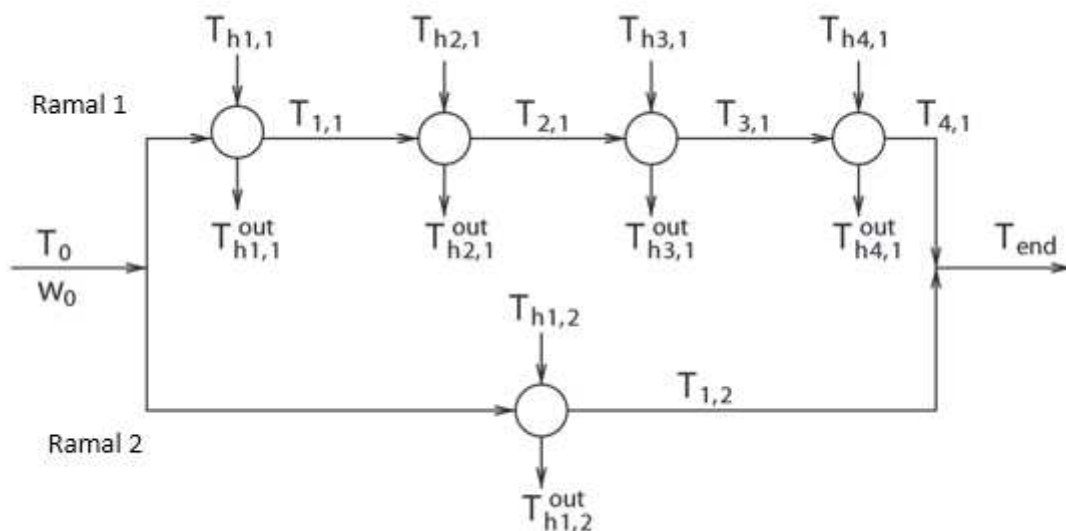


Figura 6: Reprodução de rede de trocadores de calor

Fonte: reprodução de JÄSCHKE e SKOGESTAD (2015)

Sendo:

T_0 : Temperatura de entrada no HEN [°C];

w_0 : Vazão de entrada no HEN [kW/°C];

$T_{i,j}$: Temperatura de saída do fluido frio do trocador de calor i no ramal j [°C];

$T_{hi,j}$: Temperatura de entrada do fluido quente do trocador de calor i no ramal j [°C];

$T_{hi,j}^{out}$: Temperatura de saída do fluido quente do trocador de calor i no ramal j [°C];

T_{end} : Temperatura de saída no HEN [°C];

w_{end} : Vazão energética de saída no HEN [kW/°C];

A modelagem do problema de otimização tem por objetivo minimizar o custo operacional do sistema, que no caso é a minimização da função objetivo de troca térmica ponderada pelos custos unitários dos fluidos frios e quentes.

Como citado anteriormente nas condições de otimalidade para o HEN, o desenvolvimento das considerações resulta em termos a igualdade das “temperaturas de Jäschke” econômicas de cada ramal, especificando a variável de controle c como sendo:

$$c = T_{j,1}^e - T_{j,2}^e = 0 \quad (54)$$

Onde tem-se:

$T_{j,1}^e$: “Temperatura de Jäschke” econômica do ramal 1;

$T_{j,2}^e$: “Temperatura de Jäschke” econômica do ramal 2;

Sendo M a quantidade de trocadores de calor em cada ramal, tem-se:

$$M_1 = 4$$

$$M_2 = 1$$

E da definição geral de “temperatura de Jäschke”:

$$\theta_{0,1} = 0 \quad (55)$$

$$\theta_{0,2} = 0 \quad (56)$$

$$\theta_{1,1} = T_{1,1} - T_0 \quad (57)$$

$$\theta_{2,1} = T_{2,1} - T_0 \quad (58)$$

$$\theta_{3,1} = T_{3,1} - T_0 \quad (59)$$

$$\theta_{4,1} = T_{4,1} - T_0 \quad (60)$$

$$\theta_{1,2} = T_{1,2} - T_0 \quad (61)$$

$$\theta_{h1,1} = T_{h1,1} - T_0 \quad (62)$$

$$\theta_{h2,1} = T_{h2,1} - T_0 \quad (63)$$

$$\theta_{h3,1} = T_{h3,1} - T_0 \quad (64)$$

$$\theta_{h4,1} = T_{h4,1} - T_0 \quad (65)$$

$$\theta_{h1,2} = T_{h1,2} - T_0 \quad (66)$$

$$\alpha_{0,1} = 0 \quad (67)$$

$$\alpha_{0,2} = 0 \quad (68)$$

$$\alpha_{1,1} = \frac{(\theta_{1,1} - \theta_{0,1})(\theta_{1,1} + \theta_{0,1} - \alpha_{0,1})}{\theta_{h1,1} - \theta_{0,1}} = \frac{\theta_{1,1}^2}{\theta_{h1,1}} \quad (69)$$

$$\alpha_{2,1} = \frac{(\theta_{2,1} - \theta_{1,1})(\theta_{2,1} + \theta_{1,1} - \alpha_{1,1})}{\theta_{h2,1} - \theta_{1,1}} = \frac{(\theta_{2,1} - \theta_{1,1})(\theta_{2,1} + \theta_{1,1} - \frac{\theta_{1,1}^2}{\theta_{h1,1}})}{\theta_{h2,1} - \theta_{1,1}} \quad (70)$$

$$\begin{aligned} \alpha_{3,1} &= \frac{(\theta_{3,1} - \theta_{2,1})(\theta_{3,1} + \theta_{2,1} - \alpha_{2,1})}{\theta_{h3,1} - \theta_{2,1}} \\ &= \frac{(\theta_{3,1} - \theta_{2,1})[\theta_{3,1} + \theta_{2,1} - \frac{(\theta_{2,1} - \theta_{1,1})(\theta_{2,1} + \theta_{1,1} - \frac{\theta_{1,1}^2}{\theta_{h1,1}})}{\theta_{h2,1} - \theta_{1,1}}]}{\theta_{h3,1} - \theta_{2,1}} \end{aligned} \quad (71)$$

$$\begin{aligned} \alpha_{4,1} &= \frac{(\theta_{4,1} - \theta_{3,1})(\theta_{4,1} + \theta_{3,1} - \alpha_{3,1})}{\theta_{h4,1} - \theta_{3,1}} \\ &= \frac{(\theta_{4,1} - \theta_{3,1})\{\theta_{4,1} + \theta_{3,1} - \frac{(\theta_{3,1} - \theta_{2,1})[\theta_{3,1} + \theta_{2,1} - \frac{(\theta_{2,1} - \theta_{1,1})(\theta_{2,1} + \theta_{1,1} - \frac{\theta_{1,1}^2}{\theta_{h1,1}})}{\theta_{h2,1} - \theta_{1,1}}]}{\theta_{h3,1} - \theta_{2,1}}\}}{\theta_{h4,1} - \theta_{3,1}} \end{aligned} \quad (72)$$

$$\alpha_{1,2} = \frac{(\theta_{1,2} - \theta_{0,2})(\theta_{1,2} + \theta_{0,2} - \alpha_{0,2})}{\theta_{h1,2} - \theta_{0,2}} = \frac{\theta_{1,2}^2}{\theta_{h1,2}} \quad (73)$$

A “temperatura de Jäschke” econômica em cada ramal é o somatório de cada termo α_{ij} de cada trocador de calor multiplicado por seu respectivo custo unitário; tem-se, dessa forma:

$$T_{J,1}^e = p_{1,1} * \alpha_{1,1} + p_{2,1} * \alpha_{2,1} + p_{3,1} * \alpha_{3,1} + p_{4,1} * \alpha_{4,1} \quad (74)$$

$$T_{J,2}^e = p_{1,2} * \alpha_{1,2} \quad (75)$$

Sendo o valor de p o peso econômico de cada trocador de calor dos ramais 1 e 2.

Portanto tem-se para a variável de controle c, para $M_1 = 4$ e $M_2 = 1$:

$$c = T_{j,1}^e - T_{j,2}^e,$$

sendo:

$$T_{j,1}^e = p_{1,1} * \frac{\theta_{1,1}^2}{\theta_{h1,1}} + p_{2,1} * \frac{(\theta_{2,1} - \theta_{1,1})(\theta_{2,1} + \theta_{1,1} - \frac{\theta_{1,1}^2}{\theta_{h1,1}})}{\theta_{h2,1} - \theta_{1,1}} + p_{3,1} * \frac{(\theta_{3,1} - \theta_{2,1})[\theta_{3,1} + \theta_{2,1} - \frac{(\theta_{2,1} - \theta_{1,1})(\theta_{2,1} + \theta_{1,1} - \frac{\theta_{1,1}^2}{\theta_{h1,1}})}{\theta_{h2,1} - \theta_{1,1}}]}{\theta_{h3,1} - \theta_{2,1}}$$

$$+ p_{4,1} * \frac{(\theta_{4,1} - \theta_{3,1})\{\theta_{4,1} + \theta_{3,1} - \frac{(\theta_{3,1} - \theta_{2,1})[\theta_{3,1} + \theta_{2,1} - \frac{(\theta_{2,1} - \theta_{1,1})(\theta_{2,1} + \theta_{1,1} - \frac{\theta_{1,1}^2}{\theta_{h1,1}})}{\theta_{h2,1} - \theta_{1,1}}]\}}{\theta_{h4,1} - \theta_{3,1}}$$

$$T_{j,2}^e = p_{1,2} * \frac{\theta_{1,2}^2}{\theta_{h1,2}}$$

$$c = p_{1,1} * \frac{\theta_{1,1}^2}{\theta_{h1,1}} + p_{2,1} * \frac{(\theta_{2,1} - \theta_{1,1})(\theta_{2,1} + \theta_{1,1} - \frac{\theta_{1,1}^2}{\theta_{h1,1}})}{\theta_{h2,1} - \theta_{1,1}} + p_{3,1} * \frac{(\theta_{3,1} - \theta_{2,1})[\theta_{3,1} + \theta_{2,1} - \frac{(\theta_{2,1} - \theta_{1,1})(\theta_{2,1} + \theta_{1,1} - \frac{\theta_{1,1}^2}{\theta_{h1,1}})}{\theta_{h2,1} - \theta_{1,1}}]}{\theta_{h3,1} - \theta_{2,1}} + p_{4,1}$$

$$* \frac{(\theta_{4,1} - \theta_{3,1})\{\theta_{4,1} + \theta_{3,1} - \frac{(\theta_{3,1} - \theta_{2,1})[\theta_{3,1} + \theta_{2,1} - \frac{(\theta_{2,1} - \theta_{1,1})(\theta_{2,1} + \theta_{1,1} - \frac{\theta_{1,1}^2}{\theta_{h1,1}})}{\theta_{h2,1} - \theta_{1,1}}]\}}{\theta_{h4,1} - \theta_{3,1}} - p_{1,2} * \frac{\theta_{1,2}^2}{\theta_{h1,2}}$$

Notamos que o problema de otimização se torna, dessa maneira, uma otimização em que o objetivo é maximizar a temperatura final, mantendo-se a variável de controle c igual a 0, de forma a minimizar o custo operacional do HEN.

Dessa forma, o problema de otimização é:

$$Q_{i,j} = w_j(T_{i,j} - T_{i-1,j})$$

$$Q_{i,j} = w_{hi,j}(T_{hi,j} - T_{i-1,j}^{out})$$

$$Q_{i,j} = UA_{i,j}\Delta T_{A_{i,j}}$$

$$\Delta T_{A_{i,j}} = \frac{(T_{hi,j} - T_{i,j}) + (T_{hi,j}^{out} - T_{i-1,j})}{2} \approx \Delta T_{log,i,j}$$

$$c = p_{1,1} * \frac{\theta_{1,1}^2}{\theta_{h1,1}} + p_{2,1} * \frac{(\theta_{2,1} - \theta_{1,1})(\theta_{2,1} + \theta_{1,1} - \frac{\theta_{1,1}^2}{\theta_{h1,1}})}{\theta_{h2,1} - \theta_{1,1}} + p_{3,1} * \frac{(\theta_{3,1} - \theta_{2,1})[\theta_{3,1} + \theta_{2,1} - \frac{(\theta_{2,1} - \theta_{1,1})(\theta_{2,1} + \theta_{1,1} - \frac{\theta_{1,1}^2}{\theta_{h1,1}})}{\theta_{h2,1} - \theta_{1,1}}]}{\theta_{h3,1} - \theta_{2,1}} + p_{4,1}$$

$$* \frac{(\theta_{4,1} - \theta_{3,1})\{\theta_{4,1} + \theta_{3,1} - \frac{(\theta_{3,1} - \theta_{2,1})[\theta_{3,1} + \theta_{2,1} - \frac{(\theta_{2,1} - \theta_{1,1})(\theta_{2,1} + \theta_{1,1} - \frac{\theta_{1,1}^2}{\theta_{h1,1}})}{\theta_{h2,1} - \theta_{1,1}}]}{\theta_{h3,1} - \theta_{2,1}}\}}{\theta_{h4,1} - \theta_{3,1}} - p_{1,2} * \frac{\theta_{1,2}^2}{\theta_{h1,2}} = 0$$

$$w_0 - \sum_{j=1}^N w_j = 0$$

Para avaliação do método pela “temperatura de Jäschke”, foi feita a otimização analisando-se quatro modelagens de diferencial de temperatura dos fluidos frios e quentes, conforme a seguir:

$$\min_u J = - \sum_{j=1}^N \sum_{i=1}^{M_j} p_{i,j} Q_{i,j}$$

$$\text{s. a. } Q_{i,j} = w_j (T_{i,j} - T_{i-1,j})$$

$$Q_{i,j} = w_{hi,j} (T_{hi,j} - T_{i-1,j}^{out})$$

$$Q_{i,j} = UA_{i,j} \Delta T_{Ai,j}$$

$$w_0 - \sum_{j=1}^N w_j = 0$$

(76)

Sendo os diferenciais de temperatura:

ΔT média logarítmica:

$$\Delta T_{LN} = \frac{(T_{hi} - T_{co}) + (T_{ho} - T_{ci})}{\ln \frac{(T_{hi} - T_{co})}{(T_{ho} - T_{ci})}} \quad (77)$$

ΔT média aritmética:

$$\Delta T_{aritmética} = \frac{(T_{hi} - T_{co}) + (T_{ho} - T_{ci})}{2} \quad (78)$$

ΔT de Underwood:

$$\Delta T_{Underwood} = \left[\frac{(T_{hi} - T_{co})^{(1/3)} + (T_{ho} - T_{ci})^{(1/3)}}{2} \right]^3 \quad (79)$$

ΔT de Paterson:

$$\Delta T_{Paterson} = \frac{(2/3) * (T_{hi} - T_{co}) + (1/3) * (T_{ho} - T_{ci})}{2} \quad (80)$$

ΔT de Chen:

$$\Delta T_{Chen} = \left((T_{hi} - T_{co}) * (T_{ho} - T_{ci}) \right)^{(1/3)} * \left(((T_{hi} - T_{co}) + (T_{ho} - T_{ci}))/2 \right)^{(1/3)} \quad (81)$$

Utilizou-se o *software* comercial IMPL com os *solvers* NLP (como IPOPT) e o algoritmo SLPQPE (*Sequential Linear Programming Quadractic Programming Engine*) do IMPL conectado aos *solvers* MILP (GLPK, LPSOLVE e COINMP). Cinco modelos diferentes do diferencial logarítmico de temperatura entre os fluidos frio e quente (LMTD, Aritmética, Underwood, Paterson, Chen).

O *software* IMPL é um *software* baseado na estrutura orientada a objetos; para a configuração da estrutura em fluxograma do problema foi utilizado o *software* DIA (versão 0.97.2). Já como interface do problema, utilizou-se o *software* *Microsoft Excel* 10. A integração entre os *softwares* foi escrita em Python.

O modelamento e métodos de otimização da seção 3.2 foram estudados com a finalidade de reproduzir o artigo de Jäschke para aplicação no estudo de caso da seção 3.3, de implementação em estudo de caso de uma refinaria de petróleo.

3.3 - Aplicação da Metodologia da Otimização RTO em uma Rede de Trocadores de Calor de uma Refinaria de Petróleo

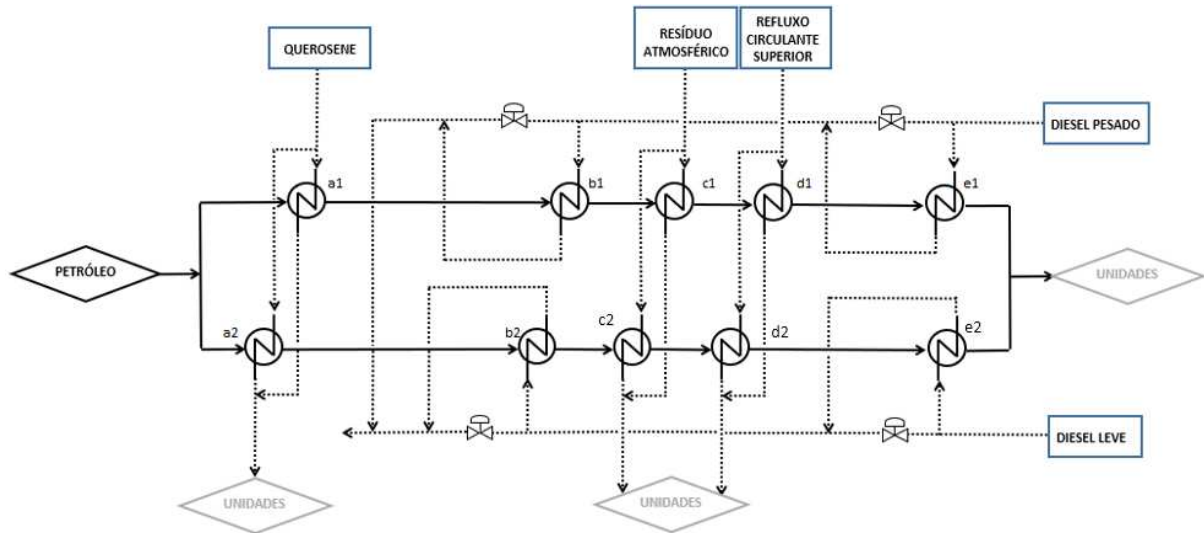


Figura 7: Rede de trocadores de calor em refinaria de Petróleo

A rede de trocadores de calor de uma refinaria de Petróleo da Figura 7 foi estudada para aplicação do método de RTO, visando à máxima eficiência energética em troca térmica do fluido frio, uma corrente de Petróleo, com uma série de correntes quentes para o serviço. A rede de trocadores do estudo foi obtida a partir de configuração e dados coletados da Refinaria Alberto Pasqualini (REFAP), localizada no Estado do Rio Grande do Sul.

Visa-se neste tipo de processo à máxima integração energética das correntes de processos com máxima eficiência de aproveitamento térmico. Busca-se, ao mesmo tempo com o aquecimento da corrente fria de carga de Petróleo, a redução de temperatura das correntes finais de fluidos quentes, que normalmente são estocadas em tanques. Tais benefícios resultam em redução do custo operacional, a partir da economia em insumos energéticos como gás combustível.

São dez trocadores de calor, divididos em cinco nos dois ramais do fluido frio. Cada trocador de calor foi identificado em ordem alfabética enquanto que cada ramal é identificado com índice numérico. As correntes quentes consideradas são:

- a) trocador de calor a_1 : Querosene (Q);
- b) trocador de calor b_1 : Corrente intermediária Diesel Pesado (DP);
- c) trocador de calor c_1 : Corrente de fundo da torre atmosférica (RAT);

- d) trocador e₁: Corrente intermediária Diesel Pesado (DP);
- e) trocador de calor d₁: Corrente de *pump around* (RCS);
- f) trocador de calor a₂: Querosene (Q);
- g) trocador de calor b₂: Corrente intermediária Diesel Leve (DL);
- h) trocador de calor c₂: Corrente de fundo da torre atmosférica (RAT);
- i) trocador de calor d₂: Corrente de *pump around* (RCS);
- j) trocador de calor e₂: Corrente intermediária Diesel Leve (DL).

As correntes intermediárias de Diesel Pesado e Diesel Leve, após a rede de trocadores de calor, são misturadas a uma corrente final de Diesel.

Foram utilizados 60 dados reais de processo, coletados do banco de dados da refinaria Alberto Pasqualini (REFAP) da Petrobras, no período de 03 de novembro de 2018 a 12 de novembro de 2018. O período, neste estudo, foi dividido em 2592 amostragens, com intervalos de 5 minutos.

3.3.1 – Modelo do Processo

Os modelos considerados para representação matemática do processo de rede de trocadores de calor foram balanços de energia e massa, tanto do lado do fluido frio (Petróleo), quanto do lado dos fluidos quentes em cada trocador de calor.

$$Q_{i,j} = v_{f i,j} \int_{T_{f i,j}}^{T_{f i-1,j}} \rho_{f i,j} c p_{f i,j} dT \quad (82)$$

$$Q_{i,j} = v_{q i,j} \int_{T_{q i-1,j}}^{T_{q i,j}} \rho_{q i,j} c p_{q i,j} dT \quad (83)$$

Tem-se que:

Q : Calor trocado entre fluidos frio e quente [kcal/h];

i : Índice dos trocadores de calor;

j : Índice dos ramais da rede de trocadores de calor;

v_f : Vazão volumétrica da corrente do fluido frio [m³/h];

v_q : Vazão volumétrica da corrente do fluido quente [m^3/h];

ρ_f : Massa específica do fluido frio [kg/m^3];

ρ_q : Massa específica do fluido quente [kg/m^3];

cp_f : Capacidade calorífica específica do fluido frio [$\text{kcal}/\text{kg}/^\circ\text{C}$];

cp_q : Capacidade calorífica específica do fluido quente [$\text{kcal}/\text{kg}/^\circ\text{C}$];

T : Temperatura [$^\circ\text{C}$].

Sendo i o índice do trocador de calor em cada ramal:

$$i = \{a, b, c, d, e\}$$

E j , o índice que representa os ramais da rede de trocadores de calor:

$$j = \{1, 2\}$$

O índice q identifica o fluido quente, enquanto que f identifica o fluido frio.

Foram também consideradas equações de troca térmica de parede de cada trocador de calor, tal como a seguir:

$$Q_{i,j} = UA_{i,j}\Delta T_{LN_{i,j}}$$

$$\Delta T_{LN_{i,j}} = \frac{(T_{q\ i-1,j} - T_{f\ i,j}) + (T_{q\ i,j} - T_{f\ i-1,j})}{\ln \left(\frac{(T_{q\ i-1,j} - T_{f\ i,j})}{(T_{q\ i,j} - T_{f\ i-1,j})} \right)}$$

Sendo:

U : Coeficiente global de troca térmica dos trocadores de calor [$\text{kcal}/\text{m}^2/^\circ\text{C}/\text{h}$];

A : Área de troca térmica do trocador de calor [m^2].

As vazões de fluido quente nos trocadores de calor a_1 e a_2 , c_1 e c_2 , e d_1 e d_2 estão disponíveis de forma totalizada das correntes correspondentes, mas não de forma parcial. Já as vazões em b_1 e e_1 , e b_2 e e_2 , também estão disponíveis. Seguem abaixo os balanços volumétricos das correntes de fluido quente:

$$v_{Petroleo} = v_{f,1} + v_{f,2} \quad (84)$$

$$v_Q = v_{q a,1} + v_{q a,2} \quad (85)$$

$$v_{RAT} = v_{q c,1} + v_{q c,2} \quad (86)$$

$$v_{RCS} = v_{q d,1} + v_{q d,2} \quad (87)$$

$$v_{DP} = v_{q b,1} = v_{q e,1} \quad (88)$$

$$v_{DL} = v_{q b,2} = v_{q e,2} \quad (89)$$

As propriedades físico-químicas das correntes, especificamente a massa específica e a capacidade calorífica específica, foram calculadas utilizando-se o simulador de processo Petrosim. A simulação de modelo configurado de uma refinaria de Petróleo, com os cortes típicos da unidade de Destilação, foi executada resultando nas correntes de Diesel Pesado, corrente de fundo da torre atmosférica, Querosene, Nafta Leve, correntes de *pump around* e a carga de Petróleo, onde a massa específica é apresentada na Figura 8 e a capacidade calorífica específica, na Figura 9:

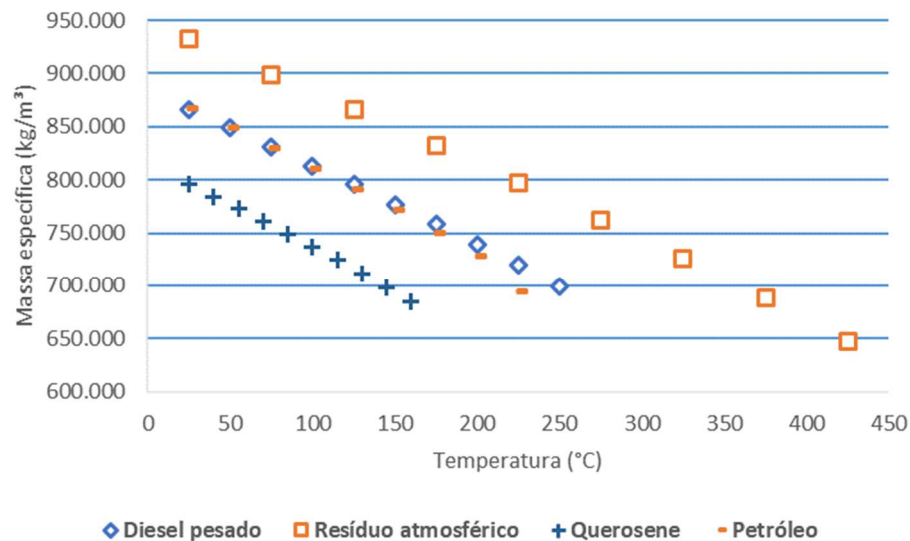


Figura 8: Gráfico da massa específica em função da temperatura

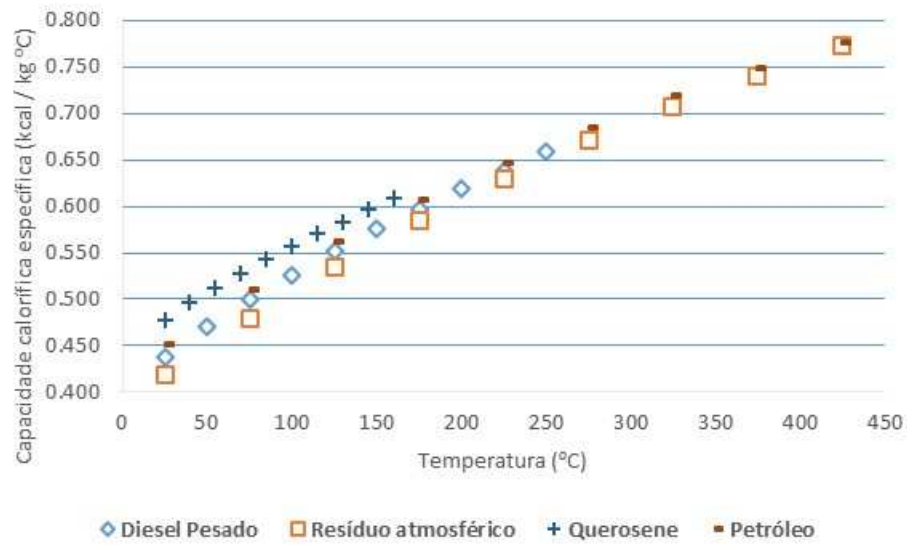


Figura 9: Gráfico da capacidade calorífica em função da temperatura

Para as correntes de *pump around*, dos trocadores d_1 e d_2 , foram utilizadas as características termodinâmicas do Diesel Pesado, enquanto o Diesel Leve, presente nos trocadores b_2 e e_2 , foram utilizados os modelos referentes ao Querosene.

A partir dos pontos resultantes da simulação, funções polinomiais de segundo grau foram estimadas utilizando-se ferramenta nativa do *software Excel*[®]. Tem-se a seguir as equações de massa específica em função da temperatura:

$$\rho_{DP} = -0,0003 * T^2 - 0,6586 * T + 882,37 \text{ (DP e RCS)} \quad (90)$$

$$\rho_{RAT} = -0,0002 * T^2 - 0,6224 * T + 947,1 \text{ (RAT)} \quad (91)$$

$$\rho_Q = -0,0005 * T^2 - 0,7269 * T + 814,1 \text{ (Q e DL)} \quad (92)$$

$$\rho_P = -0,0004 * T^2 - 0,6975 * T + 885,22 \text{ (Petróleo)} \quad (93)$$

E a capacidade calorífica específica em função da temperatura:

$$cp_{DP} = -0,000001 * T^2 + 0,0013 * T + 0,4076 \text{ (DP e RCS)} \quad (94)$$

$$cp_{RAT} = -0,000000009 * T^2 + 0,0013 * T + 0,3387 \text{ (RAT)} \quad (95)$$

$$cp_Q = -0,000001 * T^2 + 0,0012 * T + 0,4497 \text{ (Q e DL)} \quad (96)$$

$$cp_P = -0,000001 * T^2 + 0,0013 * T + 0,4219 \text{ (Petróleo)} \quad (97)$$

3.3.2 – Detecção de Estado Estacionário do Processo

Com o modelo fenomenológico do processo em estado estacionário, o uso dos dados de planta deve ser analisado quanto à condição dinâmica do processo. É necessário que o conjunto de variáveis pertencentes ao modelo utilizado no algoritmo de otimização tenha comportamento estável e/ou em estado estacionário. Uma das etapas da otimização RTO é a identificação de estado estacionário, que visa analisar em um horizonte de tempo determinado as condições dinâmicas de variáveis-chave do processo.

Foi utilizado o método de teste estatístico F modificado, de Cao e Rhinehart (1994), que consiste no procedimento de analisar a razão das variâncias do mesmo conjunto de dados de variáveis-chave calculados por métodos diferentes, dentro de janela de tempo pré-determinada. O método de teste F estatístico tradicional utiliza como métodos de cálculo das variâncias a estimativa a partir dos valores e sua média dentro da janela de observação e também, como outro método, pelo quadrado da diferença entre dados sucessivos e sua média.

O método de Cao-Rhinehart de teste F modificado faz uso da simplificação no cálculo da média móvel da variável, a partir de média móvel exponencialmente ponderada.

$$X_{f,i} = \lambda_1 X_i + (1 - \lambda_1) * X_{f,i-1} \quad (98)$$

Com $0 < \lambda_1 < 1$; e índice f indicando variável filtrada.

A média ponderada resultante usada em substituição à média \bar{X}_N determina o desvio quadrático da média, conforme a seguir.

$$\hat{v}^2 = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (X_i - X_{f,i-1})^2 \quad (99)$$

Que, assumindo a não-correlação de X_i e usando-se o valor anterior de X_f permite-se o cálculo de σ^2 a partir de v^2 . Desenvolvendo, tem-se:

$$\hat{\sigma}_X^2 = \frac{2 - \lambda_1}{2} \hat{v}^2 \quad (100)$$

Da mesma forma que para o cálculo da média móvel da variável, o cálculo de \hat{v}^2 foi simplificado a partir de utilização de filtro tal como anteriormente, de modo a evitar altos custos de processamento computacional.

$$v_{f,i}^2 = \lambda_2 (X_i - X_{f,i-1})^2 + (1 - \lambda_2) v_{f,i-1}^2 \quad (101)$$

Com $0 < \lambda_2 < 1$;

Tem-se, dessa forma, a primeira estimativa da variância como:

$$S_{1,i}^2 = \frac{2 - \lambda_1}{2} v_{f,i}^2 \quad (102)$$

A segunda forma de calcular a estimativa da variância por Cao e Rhinehart é a partir da média do quadrado das diferenças entre dados sucessivos, tendo:

$$\delta^2 = E((X_i - X_{i-1})^2) \quad (103)$$

Sendo δ^2 estimado como:

$$E(s_{2,i}^2) = \frac{1}{2} E((X_i - X_{i-1})^2) \quad (104)$$

Novamente, utilizando-se a média móvel exponencial para a variância δ^2 tem-se:

$$\delta_{f,i}^2 = \lambda_3 (X_i - X_{i-1})^2 + (1 - \lambda_3) \delta_{f,i-1}^2 \quad (105)$$

Resultando na segunda estimativa da variância dos dados:

$$s_{2,i}^2 = \frac{\delta_{f,i}^2}{2} \quad (106)$$

Pode-se, dessa forma, aplicar o método de teste F, a partir do cálculo da razão das estimativas de variâncias:

$$R_i = \frac{s_{1,i}^2}{s_{2,i}^2} = \frac{(2 - \lambda_1)v_{f,i}^2}{\delta_{f,i}^2} \quad (107)$$

Em estado estacionário, essa razão tende a um, consequência da média das variáveis do processo constantes e ruídos da variável não correlacionados. Se há variação na média das variáveis, ou os ruídos de processo sejam auto correlacionados (ou seja, ruídos anteriores persistentes e influenciando medições subsequentes) o valor de R tende a ser maior que um. Quando os dados variam em extremos, o valor de R tende a ser menor que um; porém, segundo Cao e Rhinehart, tal comportamento não é usual em processos químicos, o que indica que bastava testar apenas a condição em que R_i seja maior que um $R_{crítico}$.

Outro ponto importante na aplicação do teste modificado F estatístico de identificação de estado estacionário é a seleção e definição das constantes λ_1 , λ_2 e λ_3 . Os autores indicam que, baixos valores dos fatores atenuam as influências de ruídos na estimativa das variâncias, o que diferenciam de forma mais eficiente estados estacionários de estados não-estacionários, além de atenuar dois tipos de erros denominados tipo I (indica estado não-estacionário quando está em estado estacionário) e o tipo II (não indicar estado não-estacionário quando está em estado não-estacionário). Porém, tal condição torna o teste mais lento e mais suscetível a erros de avaliação em estados transientes.

A seleção dos fatores e razão crítica R_c foi feita com referência ao trabalho de Menezes (2017), com:

$$\lambda_1 = 0,7$$

$$\lambda_2 = 0,05$$

$$\lambda_3 = 0,006$$

$$R_c = 2$$

Inicialmente, foram feitos testes de análise qualitativa variando-se as constantes λ_1 , λ_2 e λ_3 , com duas variáveis-chaves: a vazão do fluido frio Petróleo pelo ramal 2, e a temperatura de entrada do fluido quente RAT, dos trocadores de calor c_1 e c_2 .

Tabela 3: Sintonias de constantes do teste F-modificado de CAO e RHINEHART

sintonia	Rcrit	$\lambda 1$	$\lambda 2$	$\lambda 3$
A	1.2	0.7	0.05	0.006
B	2	0.7	0.05	0.006
C	1.2	0.7	0.005	0.006
D	2	0.7	0.005	0.006
E	1.2	1	0.05	0.006
F	2	1	0.05	0.006
G	1.2	0.5	0.05	0.006
H	2	0.5	0.05	0.006

A partir da escolha da sintonia na etapa anterior, foi executado o teste F de estado estacionário. Foram escolhidas 11 variáveis do sistema de rede de trocadores de calor como variáveis-chave da análise: As variáveis que foram utilizadas nos testes F foram:

- a) $v_{f i,1}$: Vazão do fluido frio Petróleo no ramal 1;
- b) $v_{f i,2}$: Vazão do fluido frio Petróleo no ramal 2;
- c) $T_{qe e,2}$: Temperatura de entrada do fluido quente DL no trocador de calor e_2 ;
- d) $v_{q a,1}$ e $v_{q a,2}$: Vazão do fluido quente Q nos trocadores de calor a_1 e a_2 ;
- e) $v_{q c,1}$ e $v_{q c,2}$: Vazão do fluido quente RAT nos trocadores de calor c_1 e c_2 ;
- f) $v_{q d,1}$ e $v_{q d,2}$: Vazão do fluido quente RCS nos trocadores de calor d_1 e d_2 ;
- g) $v_{q b,1}$ e $v_{q b,2}$: Vazão do fluido quente DP nos trocadores de calor b_1 e e_1 ;
- h) $T_{qe c,1}$ e $T_{qe c,2}$: Temperatura de entrada do fluido quente RAT nos trocadores de calor c_1 e c_2 ;
- i) $T_{qe d,1}$ e $T_{qe d,2}$: Temperatura de entrada do fluido quente RCS nos trocadores de calor d_1 e d_2 ;
- j) $v_{q b,2}$ e $v_{q e,2}$: Vazão do fluido quente DL nos trocadores de calor b_2 e e_2 ;
- k) $T_{qe e,1}$: Temperatura de entrada do fluido quente DP no trocador de calor e_1 .

Para as etapas seguintes, foi selecionado um período onde a partir dos testes F modificados de Cao e Rhinehart se testaram os dados a fim de verificar se o processo deve ser considerado em estado estacionário, procedendo-se então a reconciliação de dados e estimação de parâmetros.

3.3.3 – Reconciliação de Dados e Estimação de Parâmetros

A etapa seguinte da otimização RTO é a reconciliação de dados e estimação de parâmetros. O método utilizado foi a resolução de um problema em otimização, de mínimos quadrados.

$$\min f = \sum_{i=1}^n p_i (y_i - x_i)^2 \quad (108)$$

A matriz peso p_i da função objetivo foi obtida a partir do inverso da variância de dez dados anteriores, conforme a seguir:

$$\min (x - y) p^{-1} (x - y) \quad (109)$$

Onde:

$$p = \text{diag}[\sigma_1^2, \sigma_2^2, \dots, \sigma_n^2] \quad (110)$$

Foi utilizado o método dos mínimos quadrados na função objetivo, conforme Equação (109); os parâmetros da matriz-peso, da função objetivo, foram definidos como componentes da matriz diagonal, sendo cada componente a inversa da variância de cada variável.

Os termos coeficiente global de transferência de calor $U_{i,j}$ e área de troca térmica $A_{i,j}$ foram obtidos por estimação de parâmetros concomitante à etapa de reconciliação de dados, como um parâmetro $U_{i,j}A_{i,j}$.

As vazões mássicas de fluido quente dos trocadores a_1 e a_2 , b_1 e e_1 , c_1 e c_2 , d_1 e d_2 , b_2 e e_2 , e as cargas térmicas em cada trocador ($Q_{i,j}$) foram obtidas também por estimação de parâmetros. Todas as temperaturas dos fluidos frio e quente, de entrada e saída de cada trocador de calor, tiveram seus dados reconciliados.

Tabela 4: Variáveis de reconciliação e estimação de dados

Tipo de tratamento	Variável	Unidade	Equipamento	Total
Estimação	Vazão fluido quente (wq)	m ³ /d	a ₁ , a ₂ , b ₁ , b ₂ , c ₁ , c ₂ , d ₁ , d ₂ , e ₁ e e ₂	30
	Coefficiente global de troca térmica (UA)	kcal/°C.kg	a ₁ , a ₂ , b ₁ , b ₂ , c ₁ , c ₂ , d ₁ , d ₂ , e ₁ e e ₂	
	Calor transferido (Q)	kcal/d	a ₁ , a ₂ , b ₁ , b ₂ , c ₁ , c ₂ , d ₁ , d ₂ , e ₁ e e ₂	
Reconciliação de dados	Vazão fluido frio (wf)	m ³ /d	ramais 1 e 2	42
	Temperaturas fluido frio de entrada (Tfe)	°C	a ₁ , a ₂ , b ₁ , b ₂ , c ₁ , c ₂ , d ₁ , d ₂ , e ₁ e e ₂	
	Temperaturas fluido frio de saída (Tfs)	°C	a ₁ , a ₂ , b ₁ , b ₂ , c ₁ , c ₂ , d ₁ , d ₂ , e ₁ e e ₂	
	Temperaturas fluido quente de entrada (Tqe)	°C	a ₁ , a ₂ , b ₁ , b ₂ , c ₁ , c ₂ , d ₁ , d ₂ , e ₁ e e ₂	
	Temperaturas fluido quente de saída (Tqs)	°C	a ₁ , a ₂ , b ₁ , b ₂ , c ₁ , c ₂ , d ₁ , d ₂ , e ₁ e e ₂	

Feita a reconciliação de dados, a próxima etapa foi de otimização econômica da rede de trocadores de calor.

3.3.4 – Etapa de Otimização Econômica

A otimização econômica da rede de trocadores de calor objetivou a maximização de recuperação energética, ou seja, o somatório dos valores da variável $Q_{i,j}$ ser o máximo.

$$\max f = \sum_{i,j} p_{i,j} Q_{i,j} \quad (111)$$

E repetindo o modelo da subseção 3.3.1, submetido a:

$$Q_{i,j} = v_{f i,j} \int_{T_{f i,j}}^{T_{f i-1,j}} \rho_{f i,j} c p_{f i,j} dT$$

$$Q_{i,j} = v_{q i,j} \int_{T_{q i-1,j}}^{T_{q i,j}} \rho_{q i,j} c p_{q i,j} dT$$

$$Q_{i,j} = UA_{i,j} \Delta T_{LN i,j}$$

$$\Delta T_{LN i,j} = \frac{(T_{q i-1,j} - T_{f i,j}) + (T_{q i,j} - T_{f i-1,j})}{\ln \left(\frac{T_{q i-1,j} - T_{f i,j}}{T_{q i,j} - T_{f i-1,j}} \right)}$$

Considerar o máximo aproveitamento ou recuperação energética resulta em maximizar a temperatura final da mistura das correntes de petróleo dos ramais 1 e 2. A corrente à jusante de Petróleo ($v_{Petroleo}$), com mais energia, demanda menor consumo energético em equipamentos tais como fornos de processo, resultando em economia em insumos.

Considera-se como peso da função objetivo neste problema a igualdade em todos os trocadores de calor, tendo dessa forma a maximização da temperatura final da corrente de Petróleo combinada.

Foram apresentadas nas subseções 3.3.1, 3.3.2 e 3.3.3 os modelamentos e métodos utilizados na implementação da otimização RTO ao caso real de uma refinaria de petróleo, visando melhoria da eficiência energética. Tal estudo busca oferecer subsídios à análise da aplicação de tais ferramentas de algoritmos computacionais a um processo real, indicando os ganhos e dificuldades em cada etapa de implementação da otimização RTO.

4 - RESULTADOS E DISCUSSÃO

4.1 – Reconciliação de Dados de Rede de Trocadores (NARASIMHAM E JORDACHE, 2000)

Nesta seção, são apresentados os resultados da reprodução do estudo apresentado na seção 3.1. Primeiramente, executou-se a reconciliação de dados sem a análise e tratamento prévio. Foram definidos limites do problema 10% acima e abaixo do valor medido, das vazões, temperaturas e calor trocado em cada equipamento, como valores. Para a definição dos limites de troca térmica, foram calculados, a partir de balanço de entalpia das correntes quentes e frias, definido como a média aritmética dos dois cálculos. A previsão de limites para o problema de otimização mostrou-se relevante, para que os limites termodinâmicos fossem respeitados.

No exemplo não foi fornecido o valor do coeficiente de troca térmica U , após a reconciliação de dados e estimação de parâmetros; da mesma forma que na estimação do calor trocado em cada equipamento, os valores de U base foram calculados a partir do balanço de energia, utilizando-se os dados medidos e informações de dimensão de cada trocador.

Tabela 5: Cálculo de variação de energia de entalpia das correntes frias e quentes

Equipamento	Estimativas de troca térmica (Q [kcal/h])				
	Lado frio	Lado quente	média	-10%	10%
E01	462.5	616.4	539.5	485.5	593.4
E02	3873.9	4247.2	4060.6	3654.5	4466.6
E03	5816.1	7701.2	6758.7	6082.8	7434.6
E04	6616.1	10070.1	8343.1	7508.8	9177.4
E07	2790.1	4462.0	3626.1	3263.4	3988.7
E08	1936.3	1658.6	1797.4	1617.7	1977.2
E09	1104.4	1247.5	1176.0	1058.4	1293.6
E10	1674.3	1872.6	1773.5	1596.1	1950.8
E11	4622.6	5441.1	5031.8	4528.7	5535.0
E12	5389.5	5408.4	5399.0	4859.1	5938.9
E13	3500.5	4311.4	3905.9	3515.3	4296.5
E14	0.0	135.1	67.5	60.8	74.3
E15	9622.7	11452.0	10537.3	9483.6	11591.1
E35	5675.7	9327.5	7501.6	6751.4	8251.7
E36	1567.3	-	1567.3	1410.6	1724.0
E37	3579.8	3896.5	3738.2	3364.3	4112.0
E38A	-82.5	-8937.2	-4509.9	-4058.9	-4960.9
E38B	1887.9	2628.0	2258.0	2032.2	2483.8
E39	3449.1	0.0	1724.6	1552.1	1897.0
E40	3118.1	2960.0	3039.1	2735.2	3343.0
E41	2336.6	0.0	1168.3	1051.5	1285.1

Na Tabela 5 tem-se a variação térmica da corrente fria e a variação térmica da corrente quente, suas respectivas médias aritméticas e os limites máximos e mínimos, utilizados no problema de otimização.

Já na Tabela 6, tem-se os valores calculados de ΔT_1 , sendo a diferença da temperatura de entrada da corrente quente e a temperatura de saída da corrente fria, e em ΔT_2 , a diferença de saída da corrente quente e a temperatura de entrada da corrente fria. O valor de ΔT_{log} representa o cálculo de diferença logarítmica de temperatura em cada equipamento, e UA , o coeficiente de troca térmica global calculado em cada equipamento, todos obtidos a partir dos dados medidos.

Convém ressaltar que não foram fornecidas as unidades de medida tanto da capacidade calorífica quanto do calor trocado, sendo dessa forma omitidas no presente texto.

Tabela 6: Cálculo de coeficiente global de troca térmica com dados originais

Estimativas de coeficientes global de troca térmica (UA)				
Equipamento	ΔT_1 [°C]	ΔT_2 [°C]	ΔT log [°C]	UA [kcal/h/°C]
E01	110.3	2.3	28.0	0.24
E02	104.5	16.3	47.5	0.28
E03	53.7	41.8	47.5	0.38
E04	137.2	3.9	37.4	0.34
E07	52.5	51.1	51.8	0.47
E08	125.6	101.9	113.3	0.11
E09	50.8	30.5	39.8	1.05
E10	146.9	119.7	132.8	0.05
E11	19.3	28.2	23.5	0.46
E12	93.5	48.1	68.3	0.16
E13	36.1	29.0	32.4	0.38
E14	84.8	82.3	83.6	0.00
E15	51.3	36.1	43.3	0.38
E35	80.8	24.9	47.5	0.17
E36	22.1	12.9	17.1	0.44
E37	56.0	43.0	49.2	0.78
E38A	7.3	37.3	18.4	-1.35
E38B	53.0	41.2	46.8	0.27
E39	90.7	115.1	102.4	0.08
E40	26.2	18.4	22.1	0.25
E41	54.6	69.8	61.9	0.06

Tem-se abaixo o resultado das vazões das correntes reconciliadas sem tratamento de dados grosseiros. Nota-se desvios na medição da corrente fria CR1 (ver Tabela 7) de entrada da rede de trocadores de calor, na corrente fria CR3, e na corrente quente VR1, utilizada nos trocadores E38B e E35.

Tabela 7: Resultado de reconciliação de dados das vazões das correntes frias e quentes sem tratamento de dados

Reconciliação de dados - antes de tratamento grosseiro			
Corrente	Medida [t/h]	Reconciliada [t/h]	Desvio
CR1	370.1	399.2	-7.9%
CR2	151.6	153.1	-1.0%
CR3	255.8	246.1	3.8%
HN	8.4	8.4	0.0%
KEI	58.5	58.5	0.0%
TP1	268.6	267.0	0.6%
DS1	81.8	80.5	1.5%
MP1	455.7	454.8	0.2%
HV1	54.5	54.6	-0.2%
BP1	210.0	209.2	0.3%
VR1	109.8	106.8	2.8%
HV2	106.8	106.6	0.1%
VR2	171.3	170.3	0.6%
LV1	100.0	100.0	0.0%

Tabela 8: Resultado de reconciliação de dados das temperaturas das correntes frias e quentes sem tratamento de dados

Reconciliação de dados - Temperatura (°C)							
Corrente	Medida	Reconciliada	Desvio	Corrente	Medida	Reconciliada	Desvio
CR1	43.1	36.7	6.4	KE1A	168.8	173.9	-5.1
CR1A	45.4	45.9	-0.5	KE1B	61.8	58.6	3.1
CR1B	64.3	64.8	-0.5	TP1	144.1	141.9	2.2
CR1C	90.4	83.8	6.6	TP1A	106.0	102.6	3.4
CR1D	117.8	112.3	5.4	DS1	295.2	304.4	-9.2
CR1E	128.6	123.0	5.6	DS1A	224.3	228.6	-4.3
CR1G	127.6	123.0	4.6	DS1B	254.9	259.9	-4.9
CR2	127.6	124.9	2.7	DS1C	94.3	102.3	-8.0
CR2A	177.4	173.6	3.8	MP1	195.5	187.0	8.5
CR2B	190.0	186.9	3.1	MP1A	181.1	176.9	4.2
CR2C	217.6	217.1	0.5	MP1B	168.8	177.6	-8.8
CR2D	217.0	219.0	-2.0	HV1	302.3	300.2	2.1
CR2E	230.9	230.1	0.8	HV1A	299.8	290.6	9.2
CR2F	255.2	257.8	-2.6	HV1B	263.8	258.0	5.8
CR2G	276.2	268.9	7.3	HV1C	229.5	223.5	5.9
CR2H	291.3	310.8	-19.5	BP1	309.5	303.6	5.9
CR3	127.6	123.1	4.6	BP1A	253.5	243.3	10.2
CR3A	138.2	146.0	-7.7	BP1B	230.7	223.5	7.2
CR3B	144.1	136.6	7.6	VR1	283.9	288.7	-4.9
CR3C	152.9	151.4	1.5	VR1A	258.2	254.8	3.4
CR3D	176.2	184.6	-8.4	VR1B	152.6	146.9	5.7
CR3E	201.7	199.9	1.8	LV1	212.1	211.8	0.4
CR3F	217.5	209.9	7.6	LV1A	190.3	194.8	-4.6
CR3G	217.5	211.2	6.3	HV2	302.3	299.7	2.6
CR3H	258.1	248.0	10.1	HV2A	273.6	264.7	9.0
CR4	274.9	297.7	-22.8	HV2B	233.1	229.9	3.2
HN	155.7	157.0	-1.3	VR2	345.9	348.1	-2.2
HNA	45.4	50.6	-5.2	VR2A	345.9	323.0	22.9
KE1	195.0	187.6	7.4	VR2B	345.9	323.0	22.9

Nas temperaturas da Tabela 8, notamos grandes desvios na corrente fria CR4, e na corrente quente VR2, que teve suas três leituras (VR2, VR2A e VR2B) repetidas.

Os resultados acima mostraram, após análises da reconciliação, que um tratamento dos dados seria necessário. Foi verificado que a corrente de entrada CR1 (entrada da carga de fluido frio na rede de trocadores de calor) tem sua vazão minimizada frente ao balanço mássico da rede; reflete-se também nos desvios na leitura de temperatura das correntes CR1A a CR1G, além das temperaturas das correntes nos ramais dos trocadores CR2 a CR2H e dos trocadores CR3 a CR3H.

Tem-se também a necessidade de correção das temperaturas das correntes VR2A e VR2B, correntes quentes de saída dos trocadores E41 e E39, respectivamente. Vemos que as três temperaturas, VR2, VR2A e VR2B, são idênticas, situação incompatível na prática.

Para uma segunda fase de reconciliação dos dados, foram corrigidas as vazões de CR1, a partir da definição de novos limites de vazão desta corrente no problema de otimização, assim como o cálculo de temperaturas das correntes quentes VR2A e VR2B a partir de balanço de entalpia do lado quente, utilizando a variação de energia da corrente fria. Na Tabela 9 a seguir tem-se as correções feitas:

Tabela 9: Limites de vazões e temperaturas após análise de dados

Corrente	Temperatura medida [°C]	Temperatura calculada [°C]	Novo limite mínimo [°C]	Novo limite máximo [°C]
VR2A	345.9	333.0	299.7	366.3
VR2B	345.9	313.4	282.0	344.7
	Vazão medida [t/h]	Vazão calculada [t/h]	Novo limite mínimo [°C]	Novo limite máximo [°C]
CR1	370.1	407.4	366.7	448.1

Após nova reconciliação de dados, obtivemos os seguintes dados de vazão e temperatura:

Tabela 10: Limites de vazões após análise de dados

Reconciliação de dados - depois de tratamento grosseiro			
Corrente	Medida [t/h]	Reconciliada [t/h]	Desvio
CR1	370.1	409.6	-10.7%
CR2	151.6	151.9	-0.2%
CR3	255.8	257.7	-0.7%
HN	8.4	8.4	0.0%
KEI	58.5	58.7	-0.3%
TP1	268.6	267.8	0.3%
DS1	81.8	81.5	0.3%
MP1	455.7	455.1	0.1%
HV1	54.5	54.5	-0.1%
BP1	210.0	209.5	0.2%
VR1	109.8	110.0	-0.2%
HV2	106.8	106.7	0.0%
VR2	171.3	171.3	0.0%
LV1	100.0	100.0	0.0%

Tabela 11: Resultado de reconciliação de dados das temperaturas das correntes frias e quentes com tratamento de dados

Reconciliação das temperaturas - com tratamento erros grosseiros (°C)							
Corrente	Estudo original	Reconciliada	desvio	Corrente	Estudo original	Reconciliada	desvio
CR1	43.1	43.1	0.0	KE1A	168.8	169.4	-0.6
CR1A	45.4	45.7	-0.3	KE1B	61.8	61.7	0.1
CR1B	64.3	63.1	1.2	TP1	144.1	142.3	1.8
CR1C	90.4	90.5	0.0	TP1A	106.0	106.9	-0.9
CR1D	117.8	118.5	-0.7	DS1	295.2	294.9	0.3
CR1E	128.6	129.7	-1.0	DS1A	224.3	224.6	-0.3
CR1G	127.6	128.3	-0.7	DS1B	254.9	227.6	27.3
CR2	127.6	128.3	-0.7	DS1C	94.3	94.5	-0.2
CR2A	177.4	175.7	1.7	MP1	195.5	193.6	1.9
CR2B	190.0	190.5	-0.5	MP1A	181.1	180.2	0.9
CR2C	217.6	217.7	-0.1	MP1B	168.8	171.0	-2.2
CR2D	217.0	216.4	0.6	HV1	302.3	301.5	0.8
CR2E	230.9	232.7	-1.8	HV1A	299.8	300.8	-1.0
CR2F	255.2	252.2	3.0	HV1B	263.8	265.3	-1.5
CR2G	276.2	279.2	-3.1	HV1C	229.5	228.3	1.1
CR2H	291.3	290.8	0.5	BP1	309.5	306.5	3.0
CR3	127.6	128.3	-0.7	BP1A	253.5	253.2	0.4
CR3A	138.2	137.1	1.1	BP1B	230.7	232.5	-1.8
CR3B	144.1	143.5	0.7	VR1	283.9	283.4	0.5
CR3C	152.9	152.2	0.8	VR1A	258.2	260.8	-2.6
CR3D	176.2	176.7	-0.5	VR1B	152.6	198.8	-46.2
CR3E	201.7	200.5	1.2	LV1	212.1	211.8	0.4
CR3F	217.5	217.5	-0.1	LV1A	190.3	190.6	-0.3
CR3G	217.5	217.7	-0.2	HV2	302.3	300.2	2.1
CR3H	258.1	261.8	-3.7	HV2A	273.6	275.5	-1.8
CR4	274.9	272.7	2.1	HV2B	233.1	252.0	-18.9
HN	155.7	155.7	0.0	VR2	345.9	347.0	-1.1
HNA	45.4	45.4	0.0	VR2A	345.9	347.0	-1.1
KE1	195.0	195.3	-0.4	VR2B	345.9	347.0	-1.1

Notamos alteração na vazão de corrente fria CR1 na Tabela 10, com fechamento de balanço de massa do lado da corrente fria em relação às correntes CR2 e CR3. As temperaturas apresentaram desvios semelhantes aos dados medidos, porém tais desvios absolutos podem ser considerados toleráveis. As temperaturas das correntes VR2A e VR2B também tiveram correções de 323 °C na Tabela 8 para 347 °C na Tabela 11, que apresentam os resultados obtidos no estudo original de Narasimham e Jordache e os obtidos no trabalho atual. Na Tabela 12, tem-se os resultados dos coeficientes de troca térmica U, na estimação de dados realizadas nessa etapa:

Tabela 12: Resultado da estimação de do coeficiente global de troca térmica dos trocadores de calor.

Equipamento	Área [m ²]	Passes	U [kcal/°C/m ² /h]	UA [kcal/°C/h]
E01	81.5	1	0.76	62.1
E02	302	1	1.84	554.4
E03	374	1	1.85	692.1
E04	666	2	0.48	642.4
E07	148	1	0.73	108.5
E08	148	1	1.71	253.2
E09	28	1	1.47	41.1
E10	245	1	1.76	430.9
E11	464	2	1.39	1290.2
E12	490	2	1.16	1137.9
E13	320	1	1.08	345.7
E14	269	1	1.99	535.3
E15	648	2	0.23	297.7
E35	954	2	0.95	1811.2
E36	206	1	0.42	86.0
E37	97	1	0.96	93.3
E38A	181	1	1.64	296.6
E38B	181	1	1.21	219.6
E39	199	1	0.19	38.3
E40	556	2	0.29	317.3
E41	310	1	1.40	435.22

Tem-se, dessa forma, nesta etapa de reconciliação de dados a estimação dos coeficientes globais de transferência de calor, exclusivamente a partir de dados de operação.

4.2 – Otimização de Rede de Trocadores (JÄSCHKE E SKOGESTAD, 2014)

Foi executada a otimização da rede de trocadores de calor cuja configuração está descrita na Figura 6, tendo sido obtidos resultados de temperatura na saída da rede. A solução do problema de otimização econômica forneceu a máxima temperatura nesse ponto. Ou seja, a máxima temperatura corresponde à melhor divisão de fluxo entre os ramais, respeitando os limites termodinâmicos e pesos estipulados de cada operação.

Na reprodução do sistema que consta do artigo de Jäschke e Skogestad, o resultado que mais se aproximou à solução com o modelo de “Temperatura de Jäschke” foi aquele obtido utilizando-se a modelagem de média aritmética. Esta aproximação era esperada, pois uma das

premissas do estudo do artigo era a utilização de média aritmética para o ΔT . Dos quatro *solvers* utilizados, apenas o SLPQPE_LPSOLVE não retornou o valor semelhante ao de Jäschke e Skogestad.

Tabela 13: Temperatura final do sistema de trocadores de calor

Modelo Média Temperatura	Temperatura final da corrente composta [°C]
Média logarítmica	213.76
Média aritmética	158.78
Underwood	159.03
Chen	159.03
Paterson	159.03

Os resultados com a modelagem de Underwood, Chen e Paterson foram maiores do que com a utilização da média aritmética. Foram também muito próximos, com os *solvers* IPOPT, SLPQPEGLPK e SLPQPECOINMP. Os três modelos são não-lineares, sendo, portanto, o problema de otimização do tipo NLP.

Os *solvers* IMPL_SLPQPEGLPK e SLPQPE_COINMP executam a resolução de problemas não-lineares, com função objetivo LP ou QP; a sigla para SLPQPE significa, do Inglês, *Successive Linear & Quadratic Programming Engine*, *solver* utilizado na plataforma IMPL. Já as siglas GLPK, COINMP, IPOPT e LPSOLVE representam uma série de outros *solvers* que calculam problemas do tipo LP, QP, MILP e NLP. A seguir, tem-se o fluxo energético em cada ramal do sistema de trocadores de calor.

Tabela 14: Vazão pelo ramal 1 (com quatro trocadores de calor)

Modelo Média Temperatura	Vazão para ramal com 4 trocadores de calor [m ³ /h]
Média logarítmica	47.31
Média aritmética	71.42
Underwood	70.15
Chen	70.14
Paterson	70.15

Tabela 15: Vazão pelo ramal 2 (com um trocador de calor)

Modelo Média Temperatura	Vazão para ramal com 1 trocador de calor [m ³ /h]
Média logarítmica	52.69
Média aritmética	28.58
Underwood	29.85
Chen	29.86
Paterson	29.85

Tabela 16: Proporção de vazão pelo ramal 1 (com quatro trocadores de calor)

Modelo Média Temperatura	Balanço de massa - dois ramais
Média aritmética	0.473
Média logarítmica	0.714
Underwood	0.701
Chen	0.701
Paterson	0.701

Novamente, tem-se a proporção pelo ramal 1 utilizando-se o modelo com média aritmética entre as diferenças de temperatura de cada corrente, de cada lado do trocador, muito próximo do valor do artigo reproduzido. Os resultados em três dos quatro *solvers* tiveram esse comportamento.

As proporções pelo ramal 1 utilizando os modelos não-lineares Logarítmicos, Underwood, Chen e Paterson ficaram cerca de 35% abaixo do artigo, com os *solvers* IPOPT e SLPQPEGLPK.

Tabela 17: Temperaturas, Delta temperatura e coeficientes de troca térmica em cada trocador de calor

Trocador de calor	Corrente	IPOPT software IMPL Temperaturas (°C)				ΔT em cada trocador			
		Média aritmética	Underwood	Chen	Paterson	Média aritmética	Underwood	Chen	Paterson
HEX11	Entrada Frio	124.3	96.8	96.8	96.8	-	-	-	-
HEX11	Saida Frio	128.6	124.9	124.9	124.9	4.3	28.0	28.0	28.0
HEX21	Saida Frio	135.1	138.7	138.7	138.7	6.5	13.9	13.9	13.9
HEX31	Saida Frio	144.1	150.0	150.0	150.0	8.9	11.3	11.3	11.3
HEX41	Saida Frio	156.3	171.2	171.2	171.2	12.3	21.2	21.2	21.2
HEX12	Saida Frio	156.1	174.1	174.1	174.1	-	-	-	-
HEX11	Entrada Quente	190.0	190.0	190.0	190.0	-4.6	-20.1	-20.1	-20.1
HEX11	Saida Quente	185.4	169.9	169.9	169.9				
HEX21	Entrada Quente	203.0	203.0	203.0	203.0	-12.7	-21.2	-21.2	-21.2
HEX21	Saida Quente	190.3	181.8	181.8	181.8				
HEX31	Entrada Quente	220.0	220.0	220.0	220.0	-37.9	-42.4	-42.4	-42.4
HEX31	Saida Quente	182.1	177.6	177.6	177.6				
HEX41	Entrada Quente	235.0	235.0	235.0	235.0	-29.2	-42.1	-42.1	-42.1
HEX41	Saida Quente	205.8	192.9	192.9	192.9				
HEX12	Entrada Quente	225.0	225.0	225.0	225.0	-8.4	-26.9	-26.9	-26.9
HEX12	Saida Quente	216.6	198.1	198.1	198.1				

Para verificação de consistência dos resultados finais da otimização, a Tabela 17 lista as temperaturas de entrada e saída de cada corrente nos trocadores de calor que compõem a rede. Vemos que não há cruzamento de temperatura em nenhum dos modelos considerados (*cross-flow*); as variações de temperaturas em cada trocador, de cada corrente, mostram influência relevante na elevação de temperatura do fluido frio do fluxo de corrente quente, como nos trocadores HEX11 e HEX12, e variação negativa na temperatura do fluido quente principalmente pelo coeficiente de troca térmica global, por exemplo, nos trocadores de calor HEX31 e HEX41.

Para a continuidade da pesquisa de critérios para a escolha do modelo de diferencial de temperatura média em cada trocador de calor, podemos fazer a análise da conformidade do critério da utilização da média aritmética das diferenças de temperatura entre as correntes frias e quentes, em substituição à média logarítmica, como realizado no estudo de Jäschke e Skogestad. Para tanto, é necessário que:

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \leq \frac{\Delta T_{i,j}^{(1)}}{\Delta T_{i,j}^{(2)}} \leq \sqrt{2}$$

Sendo:

$\Delta T_{i,j}^{(1)}$: diferença entre as temperaturas de fluido frio e quente do lado 1 do trocador de calor;

$\Delta T_{i,j}^{(2)}$: diferença entre as temperaturas de fluido frio e quente do lado 2 do trocador de calor;

Ou seja, para consideração de média aritmética como modelo para a diferença entre as correntes frias e quentes de cada trocador de calor, seria necessário que a razão entre as diferenças em cada lado do trocador estejam entre 0,707 e 1,414; tem-se, para cada trocador da rede estudada, HEX11, HEX21, HEX31, HEX41 e HEX51:

Tabela 18: Temperaturas, delta de temperatura e coeficientes de troca térmica em cada trocador de calor

Verificação de critério					
Equipamento	UA [kW/°C]	ΔT_1 [°C]	ΔT_2 [°C]	$\Delta T_1/\Delta T_2$	Atendem critério?
HEX11	5	88.6	61.4	1.44	SIM
HEX21	7	61.6	67.9	0.91	SIM
HEX31	10	46.9	75.9	0.62	NÃO
HEX41	12	38.0	78.7	0.48	NÃO
HEX51	11	119.8	68.9	1.74	SIM

Tem-se em especial que os trocadores de calor HEX31 e HEX41 podem não atender ao modelo simples de média aritmética. Em ambos os trocadores os valores de coeficientes de troca térmica são 10 kW/°C e 12 kW/°C, respectivamente. Tem-se também que a variação de

temperatura em cada lado dos trocadores de calor, principalmente no lado quente, possui uma variação maior do que os outros trocadores, como mostrado na Tabela 17.

A análise dos resultados da função objetivo de cada modelo considerado mostra que a utilização de modelos não-lineares, tais como o de Underwood, Chen e Paterson, retornou um “lucro” maior que o resultado utilizando a média aritmética, como na Tabela 19:

Tabela 19: Resultados da função objetivo

Modelos ΔT médio	Profit
Média Logarítmica	12876.8
Média aritmética	4097.6
Underwood	4075.8
Chen	4075.7
Paterson	4075.8

Tais resultados demandam o estudo dos melhores modelos do processo a serem utilizados, assim como a seleção apropriada do tipo de *solver* e métodos de otimização a serem considerados em um problema de uma rede de trocadores de calor.

4.3 – Aplicação da Metodologia da Otimização RTO em uma Rede de Trocadores de Calor de uma Refinaria de Petróleo

A aplicação da metodologia da otimização RTO a uma rede de trocadores de calor de uma refinaria é estudada nesta seção. O presente estudo consiste em:

- Detecção de estado estacionário nos dados da rede de trocadores de calor;
- Reconciliação e estimação de dados e parâmetros;
- Implementação de otimização econômica;

4.3.1 – Detecção de Estado Estacionário: Método F-Modificado

4.3.1.1 – Sintonia de Constantes λ

Dentre as sessenta variáveis disponíveis no modelo, foram escolhidas a vazão de fluido frio (Petróleo) no ramal 2, e a temperatura de entrada do fluido quente (RAT) dos trocadores de calor c_1 e c_2 , para testes de sensibilidade nas constantes λ_1, λ_2 e λ_3 . Trata-se de duas variáveis chave para a determinação do comportamento quanto à estabilidade do processo. Foi utilizado o *software* MATLAB®.

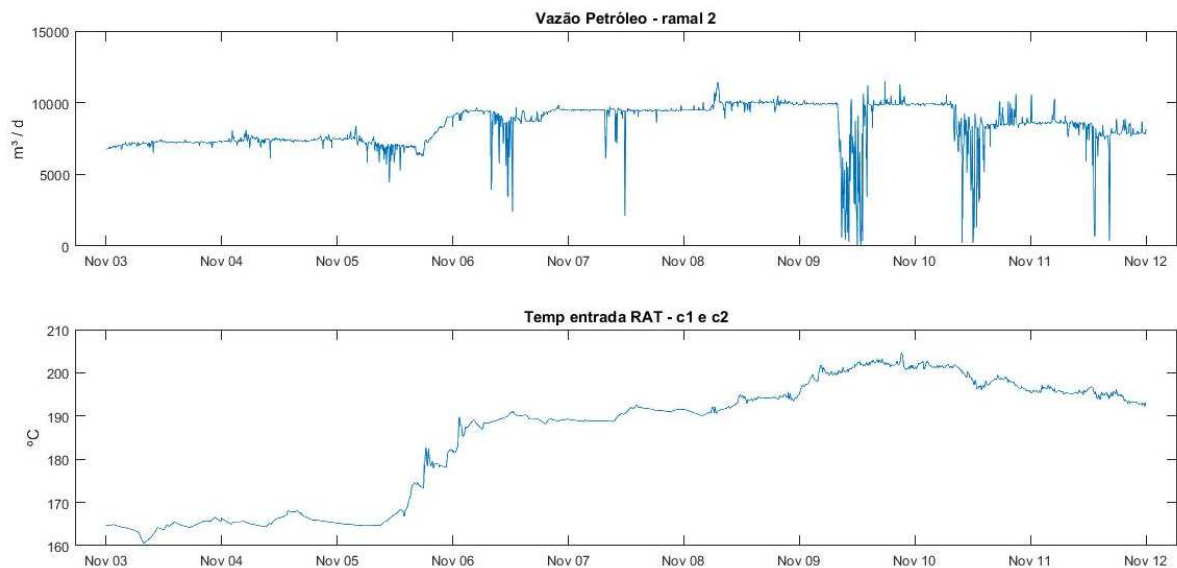


Figura 10: Variáveis Vazão de Petróleo ramal 2 e Temperatura do RAT entrada c_1 e c_2 (amostragem total)

Do período da Figura 10, foi selecionada uma amostragem em 09 de novembro, das 02 h às 23 h, para a calibração dos parâmetros de sintonia λ dos testes F-modificado:

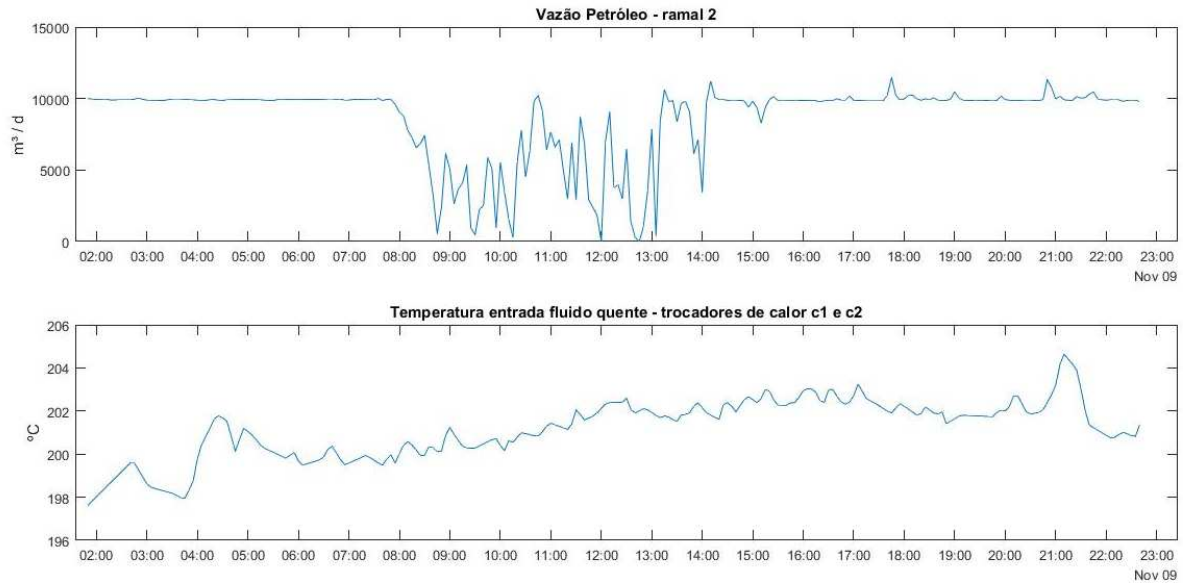


Figura 11: Variáveis Vazão de Petróleo ramal 2 e Temperatura do RAT entrada trocadores de calor c_1 e c_2

Baseado em estudo de Menezes (2017), considerou-se como base a sintonia de:

$$\lambda_1 = 0,7$$

$$\lambda_2 = 0,05$$

$$\lambda_3 = 0,006$$

$$R_c = 2$$

Para a análise, variaram-se as constantes conforme a Tabela 3. Foram oito conjuntos das constantes λ ; avaliou-se na identificação de estado estacionário a atenuação de erros denominados tipo I (indica estado não-estacionário quando está em estado estacionário) e do tipo II (não indicar estado não-estacionário quando está em estado não-estacionário). Como citado na subseção 3.3.2, Cao e Rhinehart indicam que, baixos valores dos fatores atenuam as influências de ruídos na estimativa das variâncias, diferenciando de forma mais efetiva estados estacionários de estados não-estacionários. Porém, tal condição torna o teste mais lento e mais suscetível a erros de avaliação em estados transientes.

As sintonias A e B, a seguir na Figura 12 e na Figura 13, apresentaram resultados diferentes no final do período analisado, devido à utilização de critérios em R_c diferentes. A sintonia A foi configurada com um R_c crítico de 1,2. Já a sintonia B utilizou um valor menos rigoroso ($R_c = 2,0$) e resultou em um período maior de estado estacionário. Ambas as sintonias descartaram

os dados entre 8 horas e 15,5 h, período de instabilidade da variável vazão de Petróleo no ramal 2. A sintonia A, perto da amostragem em 21 h30 m pode apresentar erro do tipo I.

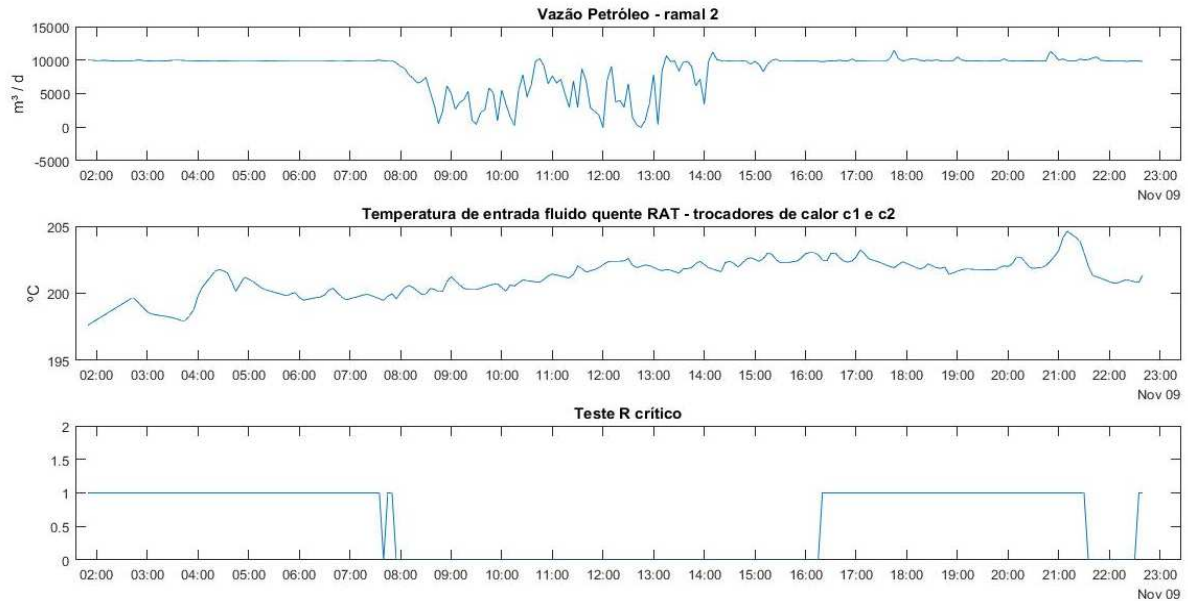


Figura 12: Sintonia A – Teste F-modificado

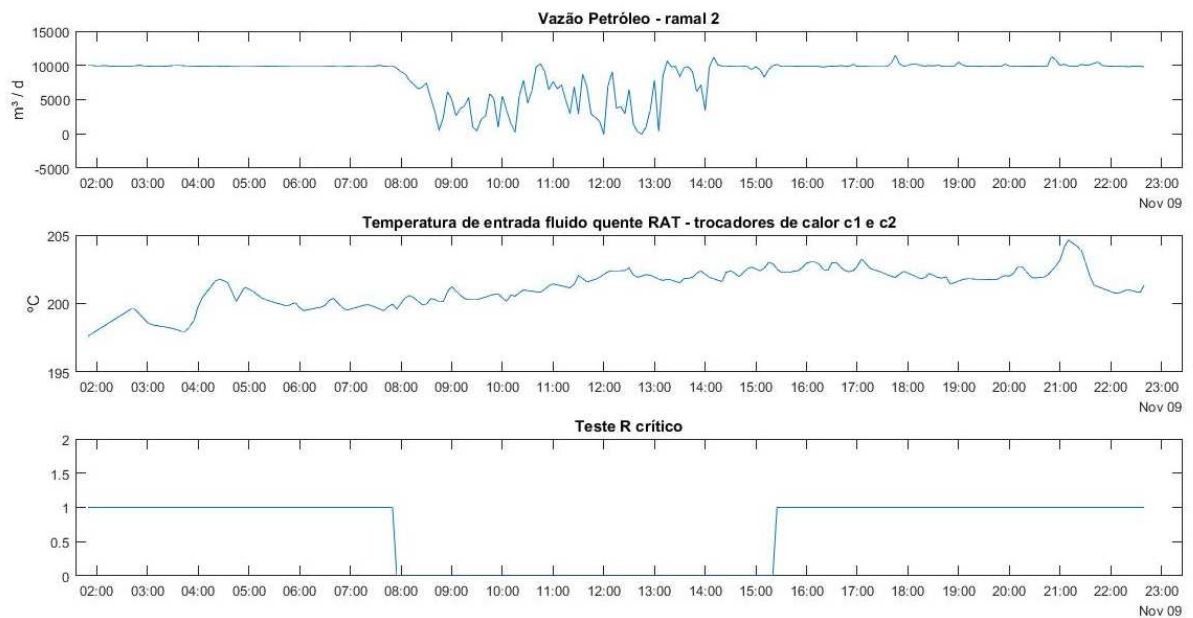


Figura 13: Sintonia B – Teste F-modificado

A seguir, tem-se as sintonias C e D (Figura 14 e Figura 15), que tiveram como característica a redução da constante λ_2 a 0,005. A redução das constantes atenua a influência de ruídos de processo, que podem ser positivos para a diferenciação dos estados estacionários dos não-

estacionários, mas podem ser inadequados em estados transientes, como mostrado a seguir. Os critérios de R_c em C e D, 1,2 e 2,0 respectivamente, mostram que mesmo em sintonias mais conservadoras como em C, o descarte de períodos como não-estacionários se mostra reduzido. Na sintonia em D todo o período foi considerado em estado estacionário. Ambas as sintonias têm características de decisão com erro do tipo II (não indicar estado não-estacionário quando está em estado não-estacionário).

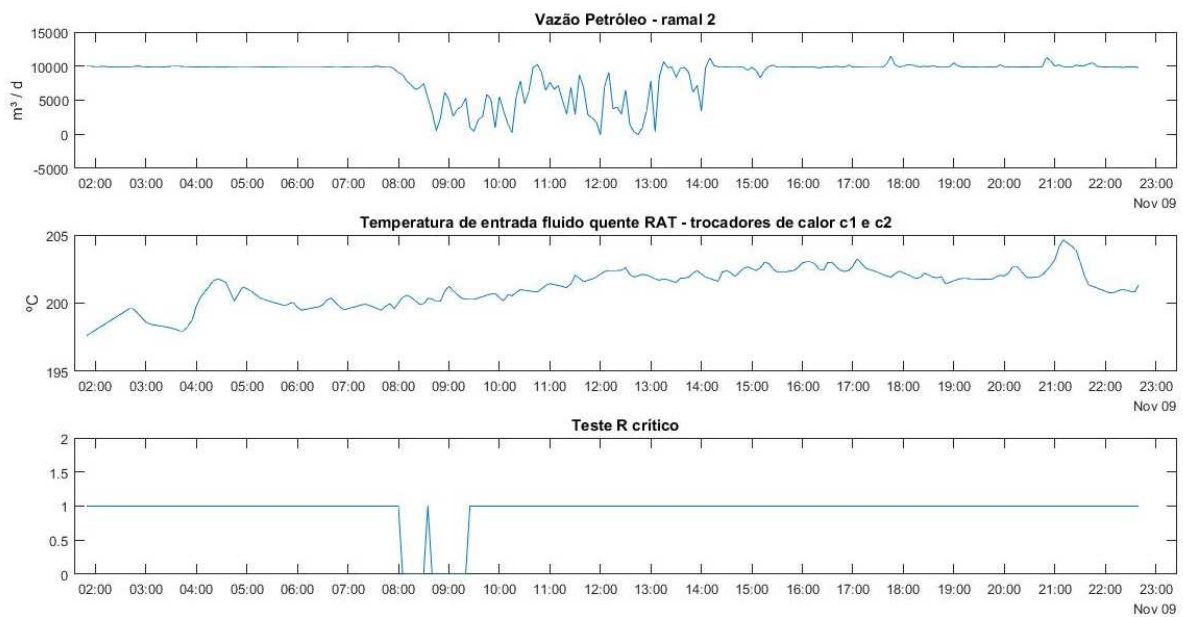


Figura 14: Sintonia C – Teste F-modificado

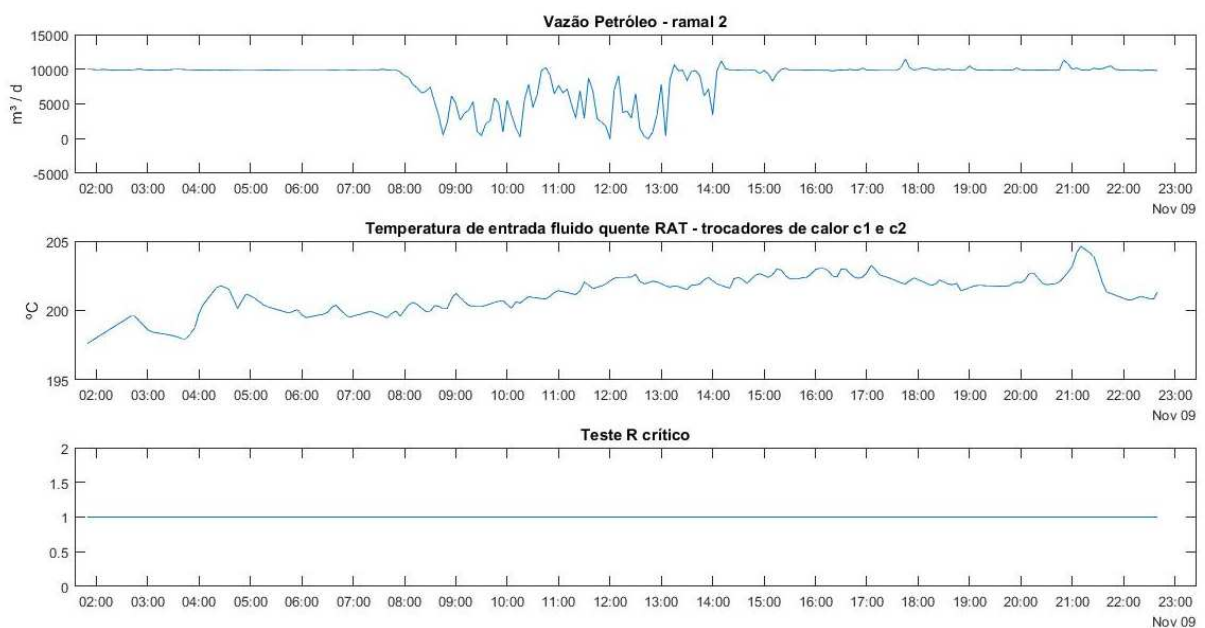


Figura 15: Sintonia D – Teste F-modificado

Para as sintonias na Figura 16 e na Figura 17, E e F, a constante λ_2 retornou a 0,050. Porém, avaliou-se o aumento de λ_1 em 1,0. Os critérios de R_c em E e F foram 1,2 e 2,0, respectivamente. Neste caso, as duas sintonias mostraram decisões semelhantes aos dos cenários A e B; porém, o cenário E, com R_c mais conservador, no período final entre as amostragens entre 15 horas e 16 horas classificou como estado estacionário, ao contrário da sintonia A.

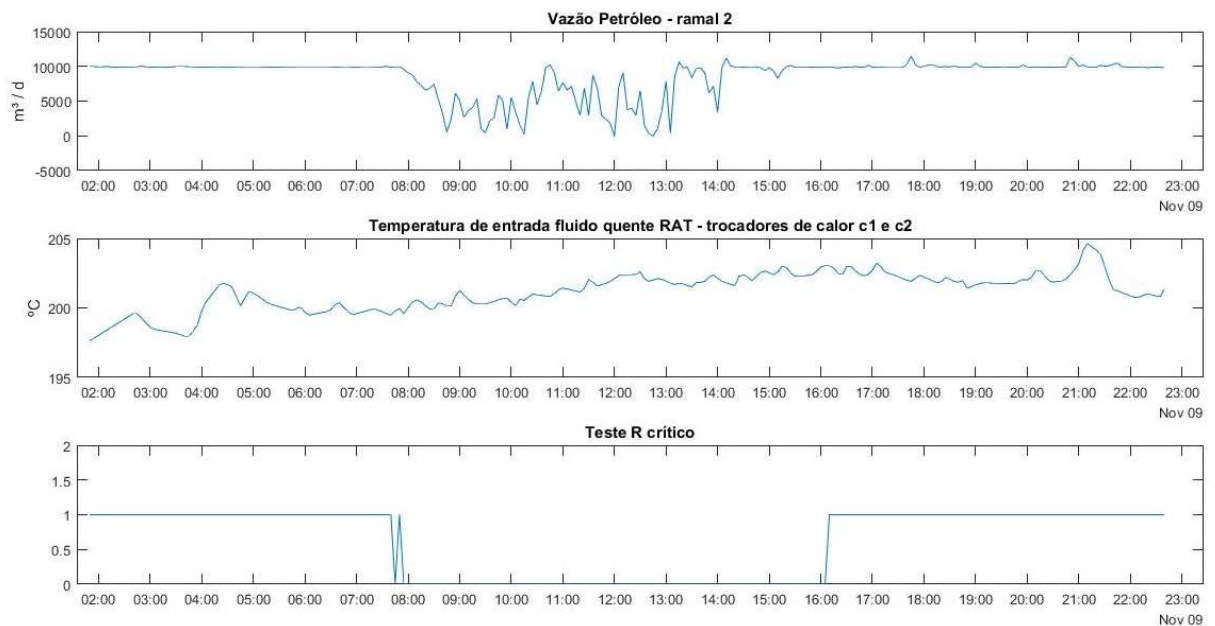


Figura 16: Sintonia E – Teste F-modificado

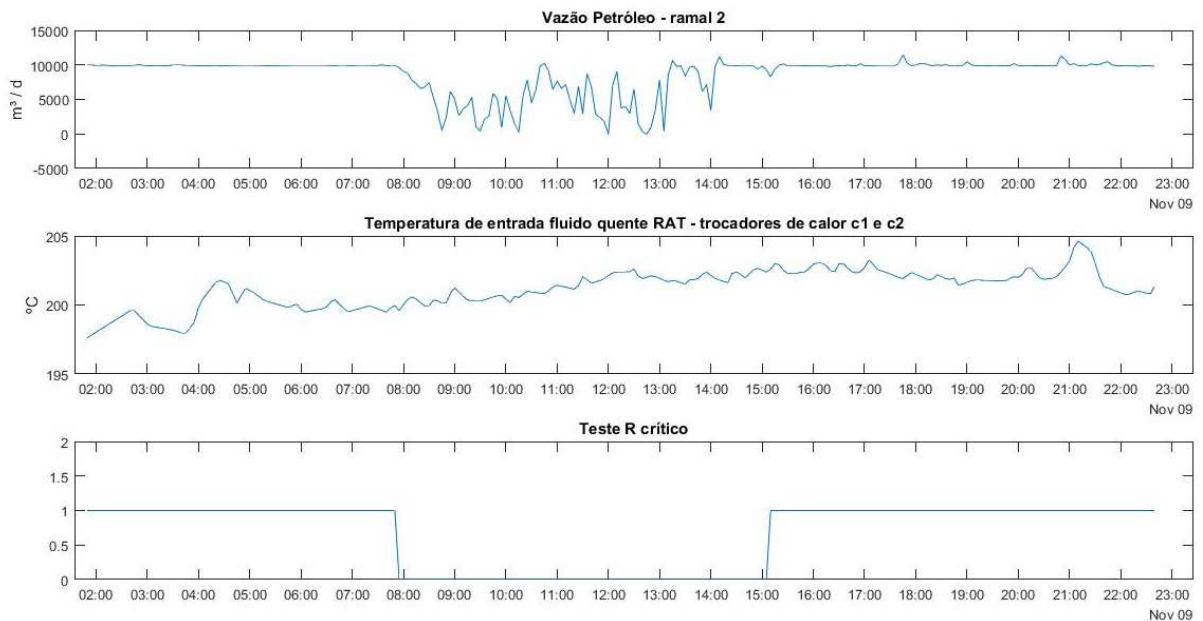


Figura 17: Sintonia F – Teste F-modificado

No caso das sintonias G (Figura 18) e H (Figura 19), avaliou-se a redução de λ_1 em 0,5. Da mesma forma que nos cenários anteriores, a diferença entre as duas sintonias é o critério de comparação da razão de variâncias, R_c (1,2 para sintonia G e 2,0 para H); neste caso, a sintonia G apresentou períodos maiores de não-estacionariedade. Já a sintonia H, com critério R_c mais flexível, classificou maiores períodos em estado estacionário.

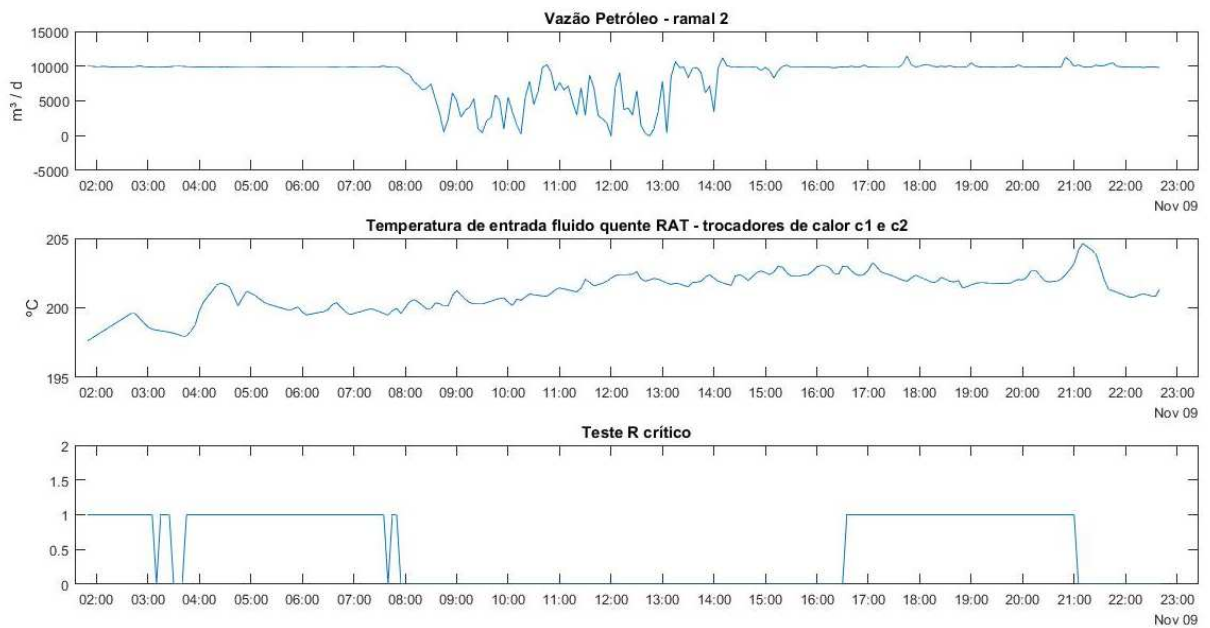


Figura 18: Sintonia G – Teste F-modificado

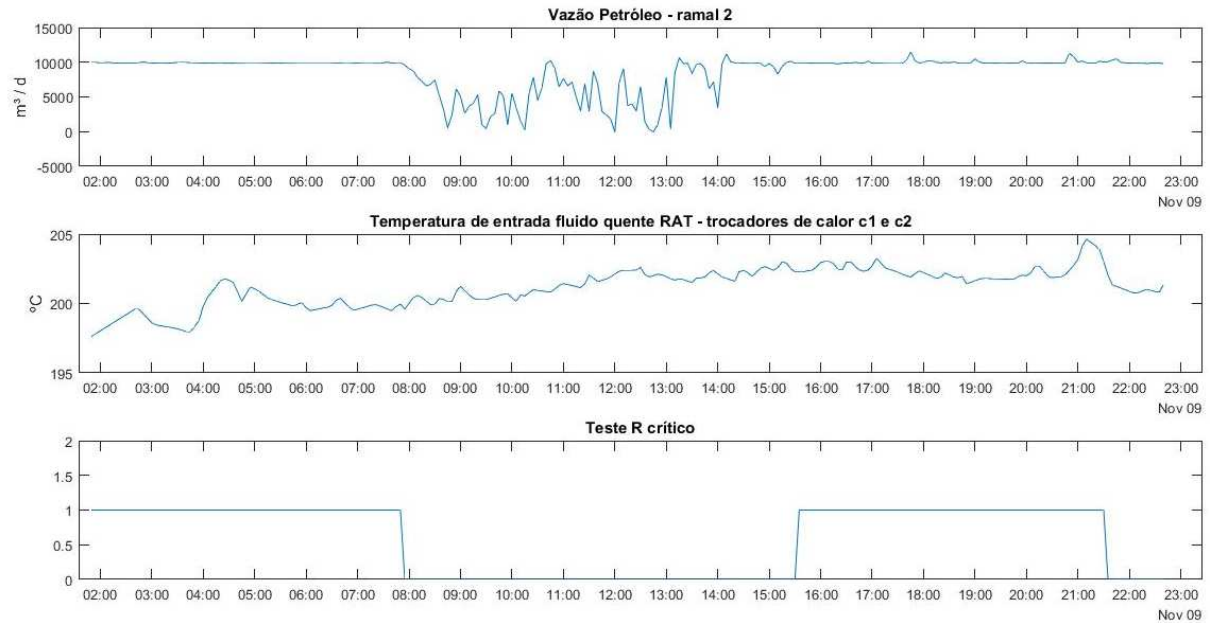


Figura 19: Sintonia H – Teste F-modificado

A partir dos dados dos testes de sintonia realizados, os valores das constantes B foram selecionados devido às decisões resultantes dos critérios não apresentarem erros dos tipos I ou II, e apresentar dinâmica de resposta intermediária entre sintonias mais conservadoras ou flexíveis.

4.3.1.2 – Teste de Identificação de Estado Estacionário

A partir da seleção da sintonia dos parâmetros λ , foi feito teste de identificação de estado estacionário a partir do método de Cao e Rhinehart, conhecido como F-modificado para todo o período entre 03 de novembro e 12 de Novembro. A seleção dos dados chave, dentre as sessenta variáveis do modelo, considerou como critério a influência que estes têm na estabilidade do processo. Foram consideradas 11 variáveis a seguir, na Tabela 20:

Tabela 20: Variáveis chave para teste de identificação de estado estacionário

Variáveis chave - Identificação de Estado Estacionário		
Tipo	Corrente	Equipamento
Temperatura entrada	DL	e2
Temperatura entrada	RAT	c1 e c2
Temperatura entrada	RCS	d1 e d2
Temperatura entrada	DP	e1
Vazão	Petróleo	ramal 1
Vazão	Petróleo	ramal 2
Vazão	Q	a1 e a2
Vazão	RAT	c1 e c2
Vazão	RCS	d1 e d2
Vazão	DP	b1 e e1
Vazão	DL	b2 e e2

Com as constantes obtidas da sintonia do item anterior, o teste F-modificado foi executado em MATLAB®; os resultados são apresentados na Figura 20:

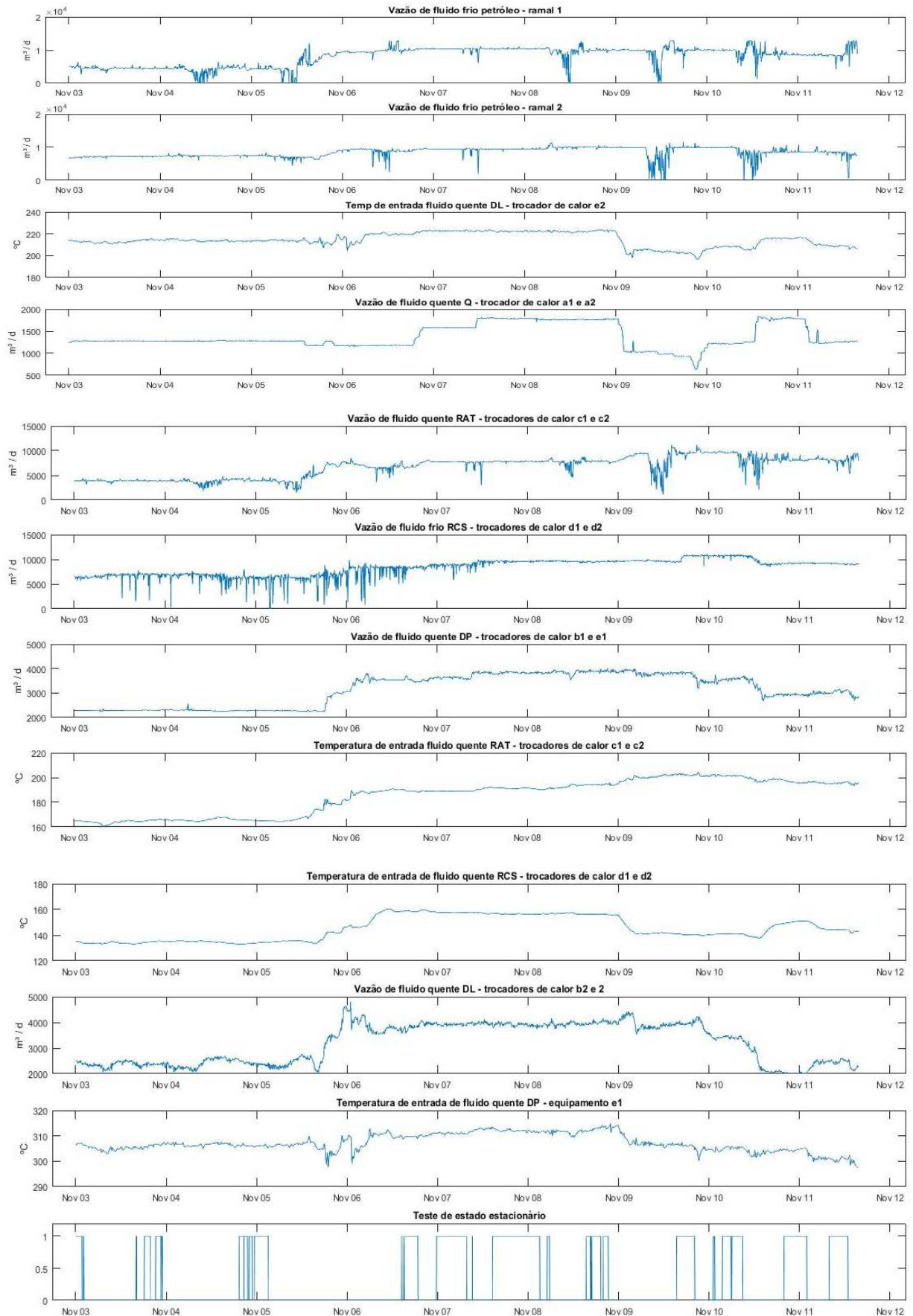


Figura 20: Teste de estado estacionário F-modificado (CAO e RHINEHALD) a 11 variáveis

A indicação de estado estacionário, no último gráfico, apresenta períodos espaçados devido à variação dos valores das variáveis chave, como mostrado nos outros gráficos.

Entre as amostras dos dias 03 de novembro até metade do dia de 06 de novembro notam-se poucos períodos que atendem aos critérios do teste F-modificado, principalmente devido à instabilidade da vazão de fluido quente RCS dos trocadores de calor d_1 e d_2 . A partir da amostragem em 05/11 10 h, houve também estados transientes nas vazões dos fluidos quentes RAT (em c_1 e c_2), na vazão de DP nos trocadores b_1 e e_1 , e DL em b_2 e e_2 .

Entre as amostragens 06/11 10:00 e 08/11 05 h há maiores períodos de estado estacionário, interrompidos apenas por aumento da vazão do fluido quente Q durante o estado transiente da mudança.

No período de 08/11 05:00 e 9/11 23 h, inicialmente a instabilidade vazão de Petróleo no ramal 1, e posteriormente as mudanças de vazão nos fluidos quentes RCS, DP e Q ocasionaram que a decisão no teste de identificação de estado estacionário foi negativa. De 10 de Novembro até do dia 11 de novembro aumentou o período em estado estacionário, porém com interrupções devido aos mesmos motivos do período anterior.

A detecção de estado estacionário é essencial aos estudos de reconciliação de dados e otimização de processo. Os períodos em que os testes de identificação de estado estacionário indicaram positivos estão adequados às próximas etapas do método RTO.

Nas seções subsequentes, foi selecionada uma amostra em 07/11 às 20 h 40 m para um estudo detalhado de reconciliação de dados, estimação de parâmetros e otimização, e posteriormente as mesmas etapas da otimização RTO foram implementadas em todos os períodos em estado estacionário, de modo a avaliar a aplicação em linha a uma série de dados.

4.3.2 – Reconciliação de Dados e Estimação de Parâmetros

Para a determinação da matriz inversa das variâncias dos dados a serem reconciliados, foi utilizado o *software* MATLAB®, como mostrado na Tabela 21. Essa matriz foi utilizada na função objetivo, permitindo obter pesos para as variáveis conforme a variância dos dados, em uma amostragem de 10 pontos.

Tabela 21: Matriz de pesos da função objetivo da reconciliação de dados

Variável	Corrente	$1/\sigma^2$
Temp. entr. Frio a1	Petróleo	2072.3
Temp. saída Frio a1	Petróleo	2139.0
Temp. saída Frio b1	Petróleo	9263.1
Temp. saída Frio c1	Petróleo	476.7
Temp. saída Frio d1	Petróleo	17224.9
Temp. saída Frio e1	Petróleo	104.1
Temp. entr. Frio a2	Petróleo	2088.1
Temp. saída Frio a2	Petróleo	31645.6
Temp. saída Frio b2	Petróleo	134.7
Temp. saída Frio c2	Petróleo	140.5
Temp. saída Frio d2	Petróleo	1537.0
Temp. saída Frio e2	Petróleo	56.0
Temp. entr. Quente a1	Querosene	6.3
Temp. saída Quente a1	Querosene	13.1
Temp. entr. Quente b1	Diesel Pesado	18.3
Temp. saída Quente b1	Diesel Pesado	366.2
Temp. entr. Quente c1	Resíduo Atmosférico	598.7
Temp. saída Quente c1	Resíduo Atmosférico	41.9
Temp. entr. Quente d1	Refluxo circulante superior	182.0
Temp. saída Quente d1	Refluxo circulante superior	1212.5
Temp. entr. Quente e1	Diesel Pesado	143.9
Temp. saída Quente a2	Querosene	13.1
Temp. saída Quente c2	Resíduo Atmosférico	536.9
Temp. saída Quente d2	Refluxo circulante superior	23659.3
Temp. entr. Quente a2	Querosene	21.9
Temp. saída Quente a2	Querosene	23.7
Temp. entr. Quente e2	Diesel Leve	23.9
Vazão volumétrica frio ramal 1	Petróleo	500.0
Vazão volumétrica frio ramal 2	Petróleo	500.0
Temp. saída Quente e1	Diesel Leve	21.9

A estimação dos valores de vazão do fluido quente foi aplicada aos coeficientes globais de troca térmica e à variação de energia em cada trocador de calor, executada concomitantemente à reconciliação de dados das temperaturas e vazão do fluido frio (em método DRPE).

Para a reconciliação de dados e estimação de parâmetros, foi utilizado o *software* GAMS® e o *solver* CONOPT. Os resultados são mostrados a seguir:

Tabela 22: Parâmetros estimados

Tipo de tratamento	Variável	Corrente	Unidade	Equipamento	Valor
	Vazão fluido quente	Q	m ³ /d	a1	902.4
	Vazão fluido quente	Q	m ³ /d	a2	883.9
	Vazão fluido quente	RAT	m ³ /d	c1	3118.8
	Vazão fluido quente	RAT	m ³ /d	c2	4652.3
	Vazão fluido quente	RCS	m ³ /d	d1	4937.3
	Vazão fluido quente	RCS	m ³ /d	d2	4676.9
	Vazão fluido quente	DP	m ³ /d	b1	3826.5
	Vazão fluido quente	DL	m ³ /d	b2	3820.5
	Vazão fluido quente	DP	m ³ /d	e1	3826.5
	Vazão fluido quente	DL	m ³ /d	e2	3820.5
Estimação de parâmetros	Coeficiente global de troca térmica (UA)	-	kcal/°C/d	a1	42.5
	Coeficiente global de troca térmica (UA)	-	kcal/°C/d	a2	42.7
	Coeficiente global de troca térmica (UA)	-	kcal/°C/d	b1	42.5
	Coeficiente global de troca térmica (UA)	-	kcal/°C/d	b2	52.9
	Coeficiente global de troca térmica (UA)	-	kcal/°C/d	c1	48.5
	Coeficiente global de troca térmica (UA)	-	kcal/°C/d	c2	54.4
	Coeficiente global de troca térmica (UA)	-	kcal/°C/d	d1	49.2
	Coeficiente global de troca térmica (UA)	-	kcal/°C/d	d2	55.2
	Coeficiente global de troca térmica (UA)	-	kcal/°C/d	e1	103.7
	Coeficiente global de troca térmica (UA)	-	kcal/°C/d	e2	108.1
	Calor transferido (Q)	-	kcal/d	a1	1649
	Calor transferido (Q)	-	kcal/d	a2	1616.3
	Calor transferido (Q)	-	kcal/d	b1	3527.5
	Calor transferido (Q)	-	kcal/d	b2	3311.1
	Calor transferido (Q)	-	kcal/d	c1	3676.1
	Calor transferido (Q)	-	kcal/d	c2	4358.2
	Calor transferido (Q)	-	kcal/d	d1	2456.3
	Calor transferido (Q)	-	kcal/d	d2	2262.7
	Calor transferido (Q)	-	kcal/d	e1	7548.1
	Calor transferido (Q)	-	kcal/d	e2	4457.6

Tabela 23: Valores de reconciliação de dados

Tipo de tratamento	Variável	Corrente	Unidade	Equipamento	Matriz peso (função objetivo)	Valor original	Reconciliado	Desvio
Reconciliação de dados	Vazão fluido frio	Petróleo	m ³ /d	ramal 1	0.002	10354.8	10354.8	0.0%
	Vazão fluido frio	Petróleo	m ³ /d	ramal 2	0.002	9454.2	9454.2	0.0%
	Temp. fluido frio de entrada	Petróleo	°C	a1	2072.3	26.8	26.6	0.2
	Temp. fluido frio de entrada	Petróleo	°C	a2	2088.1	26.5	26.4	0.1
	Temp. fluido frio de entrada	Petróleo	°C	b1	2139.0	36.9	37.0	-0.1
	Temp. fluido frio de entrada	Petróleo	°C	b2	31645.6	37.5	37.5	0.0
	Temp. fluido frio de entrada	Petróleo	°C	c1	9263.1	59.5	59.5	0.0
	Temp. fluido frio de entrada	Petróleo	°C	c2	134.7	60.3	60.6	-0.3
	Temp. fluido frio de entrada	Petróleo	°C	d1	476.7	83.0	83.0	0.0
	Temp. fluido frio de entrada	Petróleo	°C	d2	140.5	92.0	91.5	0.5
	Temp. fluido frio de entrada	Petróleo	°C	e1	17224.9	98.6	98.5	0.1
	Temp. fluido frio de entrada	Petróleo	°C	e2	1537.0	107.9	107.1	0.8
	Temp. fluido frio de saída	Petróleo	°C	a1	2139.0	36.9	37.0	-0.1
	Temp. fluido frio de saída	Petróleo	°C	a2	31645.6	37.5	37.5	0.0
	Temp. fluido frio de saída	Petróleo	°C	b1	9263.1	59.5	59.5	0.0
	Temp. fluido frio de saída	Petróleo	°C	b2	134.7	60.3	60.6	-0.3
	Temp. fluido frio de saída	Petróleo	°C	c1	476.7	83.0	83.0	0.0
	Temp. fluido frio de saída	Petróleo	°C	c2	140.5	92.0	91.5	0.5
	Temp. fluido frio de saída	Petróleo	°C	d1	17224.9	98.6	98.5	0.1
	Temp. fluido frio de saída	Petróleo	°C	d2	1537.0	107.9	107.1	0.8
	Temp. fluido frio de saída	Petróleo	°C	e1	104.1	147.3	148.8	-1.5
	Temp. fluido frio de saída	Petróleo	°C	e2	56.0	138.0	138.7	-0.7
	Temp. fluido quente de entrada	Q	°C	a1	6.3	159.6	156.2	3.4
	Temp. fluido quente de entrada	Q	°C	a2	6.3	147.7	156.3	-8.6
	Temp. fluido quente de entrada	DP	°C	b1	18.3	166.8	166.7	0.1
	Temp. fluido quente de entrada	DL	°C	b2	21.9	147.7	147.4	0.3
	Temp. fluido quente de entrada	RAT	°C	c1	598.7	191.0	191.7	-0.7
	Temp. fluido quente de entrada	RAT	°C	c2	598.7	191.0	192.4	-1.4
	Temp. fluido quente de entrada	RCS	°C	d1	182.0	156.5	160.3	-3.8
	Temp. fluido quente de entrada	RCS	°C	d2	182.0	156.5	160.2	-3.7
	Temp. fluido quente de entrada	DP	°C	e1	143.9	295.4	287.9	7.5
	Temp. fluido quente de entrada	DL	°C	e2	23.9	222.3	221.8	0.5
	Temp. fluido quente de saída	Q	°C	a1	13.1	40.7	42.2	-1.5
	Temp. fluido quente de saída	Q	°C	a2	13.1	40.7	42.2	-1.5
	Temp. fluido quente de saída	DP	°C	b1	366.2	110.0	108.5	1.5
	Temp. fluido quente de saída	DL	°C	b2	23.7	92.3	91.9	0.4
	Temp. fluido quente de saída	RAT	°C	c1	41.9	132.4	121.2	11.2
	Temp. fluido quente de saída	RAT	°C	c2	536.9	137.0	135.5	1.5
	Temp. fluido quente de saída	RCS	°C	d1	1212.5	128.9	128.3	0.6
	Temp. fluido quente de saída	RCS	°C	d2	23659.3	129.1	129.0	0.1
Temp. fluido quente de saída	DP	°C	e1	143.9	166.8	166.7	0.1	
Temp. fluido quente de saída	DL	°C	e2	21.9	147.7	147.4	0.3	

A reconciliação de dados ajustou principalmente dados das temperaturas do fluido quente, com pesos menores; as temperaturas do fluido frio tiveram poucas correções, devido à variância de baixa magnitude. O maior desvio verificado foi na temperatura de saída do fluido quente do trocador c_1 , em -9,6%.

As temperaturas do fluido frio, no fim dos ramais da rede de trocadores de calor, apresentaram após reconciliação de dados valores de 148,8 °C e 138,7 °C (desvio de 1,0% e 0,5%), com temperatura combinada da mistura dos ramais em 144,4 °C.

As estimativas das vazões dos fluidos quentes em cada trocador de calor obedeceram à totalidade das vazões das correntes utilizadas na rede de trocadores (Q, RAT e RCS); a soma das vazões em a_1 e a_2 foi de 1786,3 m³/d, dos trocadores c_1 e c_2 foi de 7771,1 m³/d, e dos trocadores de calor d_1 e d_2 totalizou 9614,2 m³/d. As vazões de DP e DL, em b_1 e e_1 , e b_2 e e_2 , respectivamente, foram de 3826,5 m³/d e 3820,5 m³/d, condizentes com o valor medido.

A estimação das vazões de fluido quente apresentou, em todo o período em estado estacionário, os valores apresentados nas Figura 21 e Figura 22. Eles têm a mesma ordem de grandeza dos resultados obtidos no cenário calculado acima.

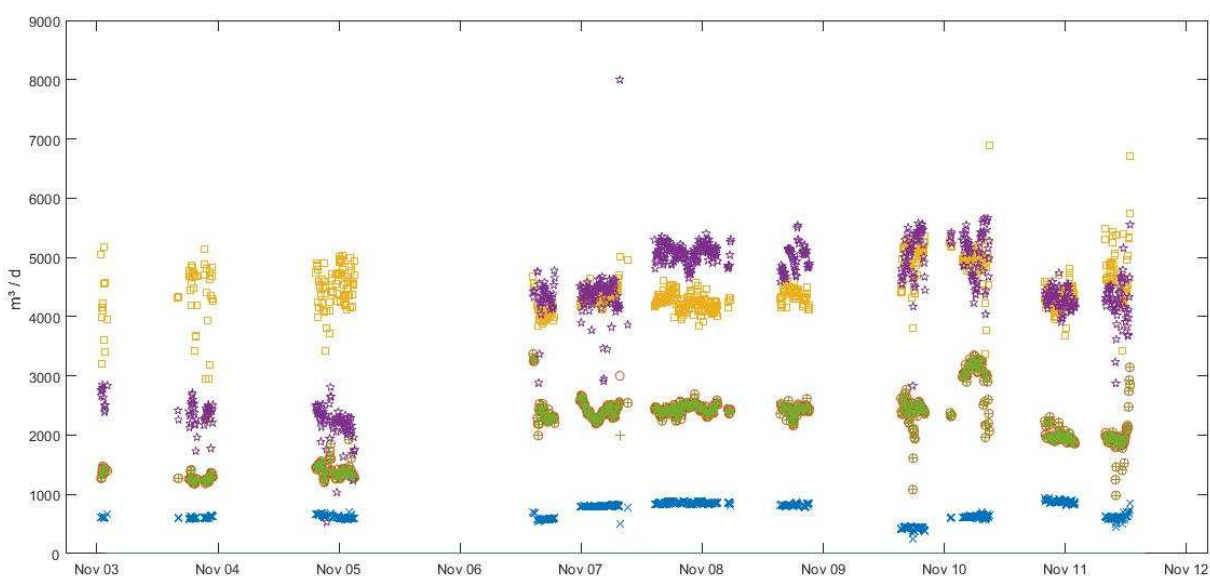


Figura 21: Vazões dos fluidos quentes estimada no ramal 1 (azul: a_1 ; vermelho: b_1 ; amarelo: c_1 ; roxo: d_1 ; verde: e_1)

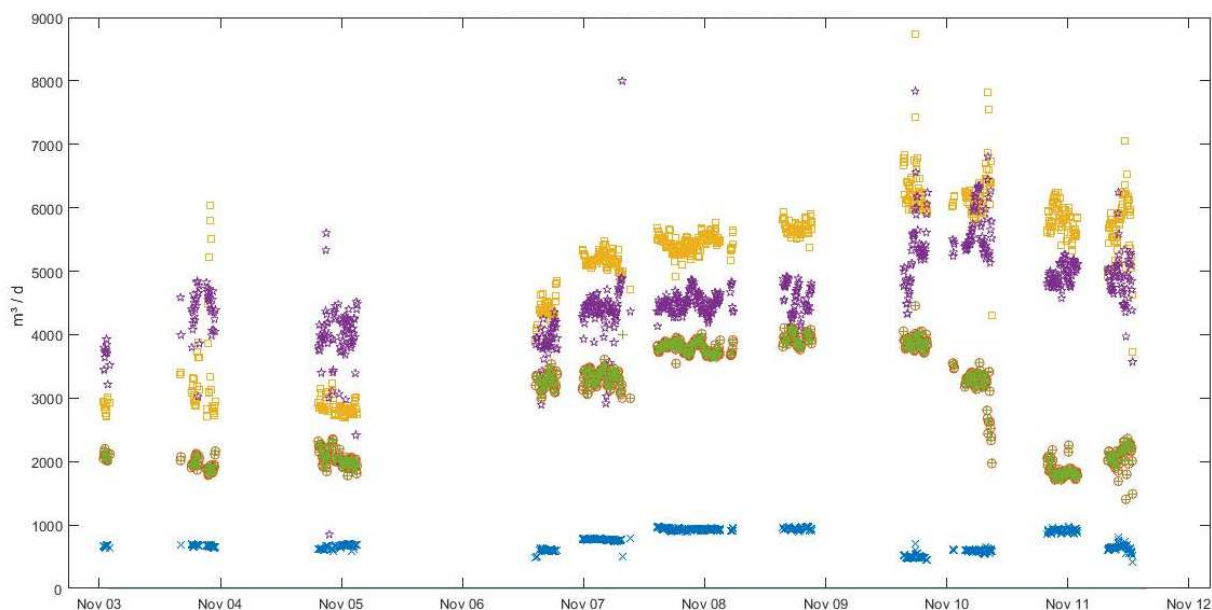


Figura 22: Vazão dos fluidos quentes estimados no ramal 2 (azul: a_2 ; vermelho: b_2 ; amarelo: c_2 ; roxo: d_2 ; verde: e_2)

Observa-se aumento nas vazões de fluido quente em todos os trocadores, proporcional ao aumento de processamento de Petróleo observado durante o período a partir de 06 de novembro. As proporções entre as vazões de fluido quente dos trocadores a_1 e a_2 , c_1 e c_2 , e d_1 e d_2 variaram durante o período; no presente estudo, a variação de vazão não participou do problema de otimização. Nas Figura 23, Figura 24 e Figura 25 tem-se apresentado as proporções de fluido quente nos trocadores do ramal 1 ($v_{q a,1}$, $v_{q c,1}$ e $v_{q d,1}$, em relação a v_Q , v_{RAT} e v_{RCS} , respectivamente):

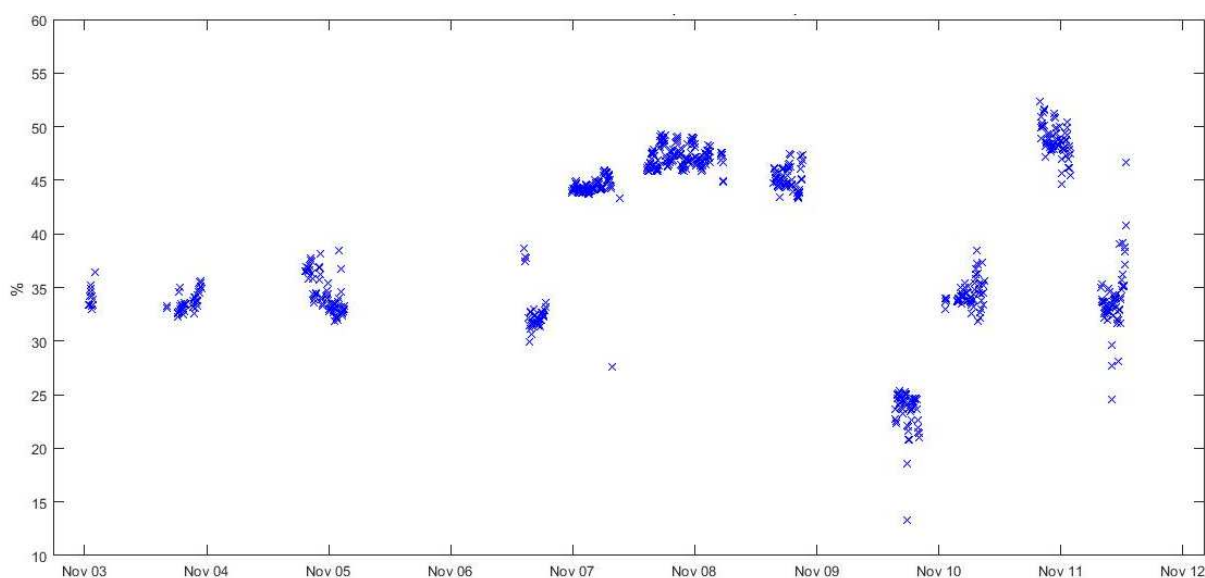
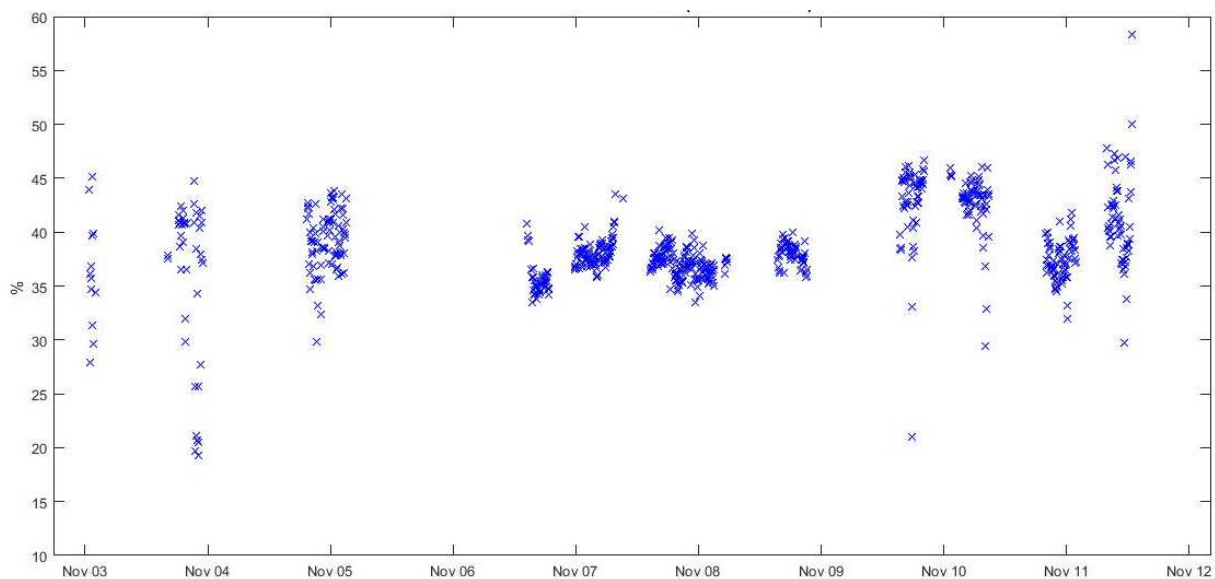
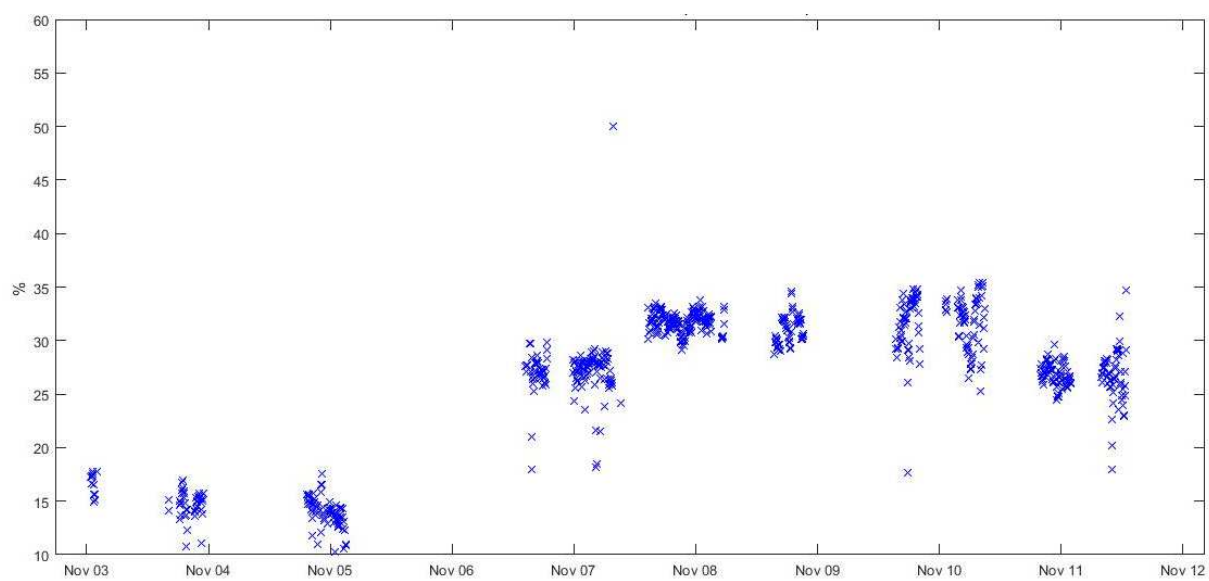


Figura 23: Proporção do fluido quente Q para trocador a_1

Figura 24: Proporção do fluido quente RAT para trocador c_1 Figura 25: Proporção do fluido quente RCS para trocador d_1

Nesta amostragem, os trocadores de calor e_1 e e_2 , de DP e DL, apresentaram os maiores valores de coeficiente global de troca térmica, assim como na estimativa do calor trocado em cada trocador de calor, como apresentados nas Figura 26 e Figura 27.

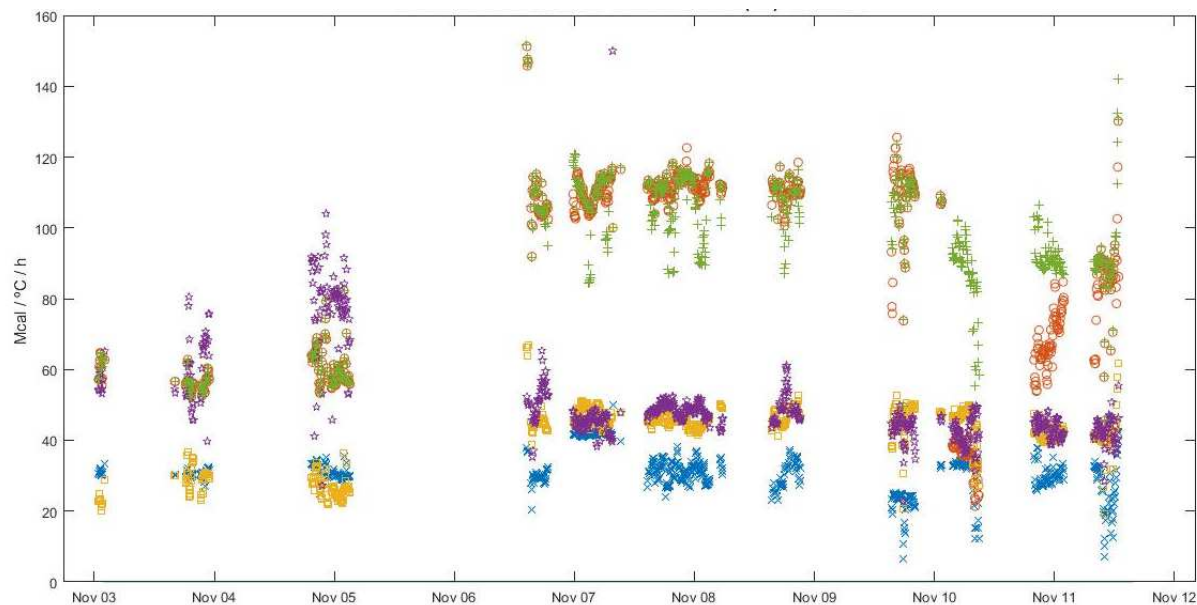


Figura 26: Coeficientes globais de troca térmica do ramal 1 (azul: a_1 ; vermelho: b_1 ; amarelo: c_1 ; roxo: d_1 ; verde: e_1)

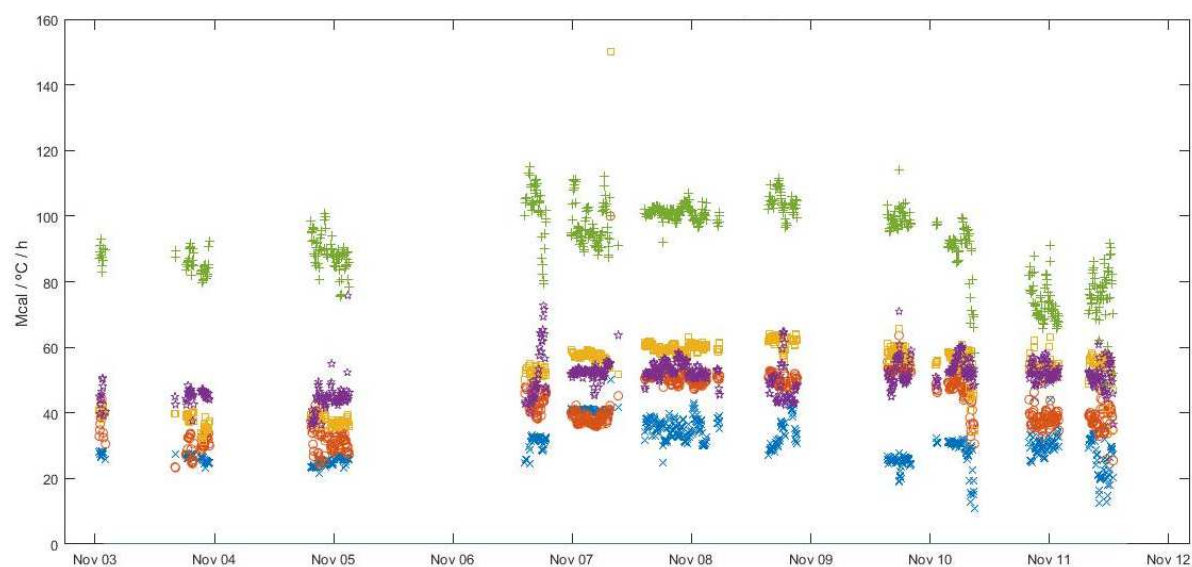


Figura 27: Coeficientes globais de troca térmica do ramal 2 (azul: a_2 ; vermelho: b_2 ; amarelo: c_2 ; roxo: d_2 ; verde: e_2)

Os dados de coeficiente global de troca térmica, de vazão de fluido quente nos trocadores, e as temperaturas de entrada do fluido quente obtidos nessa etapa serão utilizadas na próxima etapa de otimização como parâmetros do modelo.

4.3.3 – Otimização Econômica

Com os resultados obtidos anteriormente na reconciliação de dados e estimação de parâmetros, a próxima etapa da metodologia RTO é a otimização econômica. O objetivo da otimização é a maximização do aproveitamento térmico das correntes de processo, a partir da recuperação energética dos fluidos quentes presentes na refinaria (neste caso, as correntes de Diesel Leve, Querosene, Resíduo Atmosférico (fundo da coluna de destilação atmosférica) e a corrente de *pump around* Refluxo Circulante Superior). Tais correntes devem ser resfriadas para a expedição ao armazenamento em tanques. A matriz de peso da função objetivo foi considerada unitária, resultando dessa forma na máxima troca térmica possível na rede de trocadores.

$$\max f = \sum_{i=a,b,c,d,e} \sum_{j=1,2} Q_{i,j} \quad (112)$$

O problema de otimização configurado dessa forma resulta na máxima temperatura à jusante dos dois ramais, tendendo à igualdade. Inicialmente, os resultados de otimização da amostra em 07/11 20:40 foram obtidos, conforme a seguir:

Tabela 24: Valores de otimização econômica

Tipo de tratamento	Variável	Corrente	Unidade	Equipamento	Matriz peso (função objetivo)	Reconciliado	Otimizado	Diferença
	Vazão fluido frio	Petróleo	m³/d	ramal 1	1	10354.8	11296.4	9.1%
	Vazão fluido frio	Petróleo	m³/d	ramal 2	1	9454.2	8512.7	-10.0%
	Temp. fluido frio de saída	Petróleo	o C	e1	1	148.8	149.7	-0.9
	Temp. fluido frio de saída	Petróleo	o C	e2	1	138.7	149.7	-11
	Temp. fluido frio composto	Petróleo	o C	total	1	144.4	149.7	-5.3
	Calor transferido (Q)	-	kcal/d	a1	1	1649	1915.1	16.1%
	Calor transferido (Q)	-	kcal/d	a2	1	1616.3	1847.9	14.3%
Otimização Econômica	Calor transferido (Q)	-	kcal/d	b1	1	3527.5	3791.6	7.5%
	Calor transferido (Q)	-	kcal/d	b2	1	3311.1	3520.8	6.3%
	Calor transferido (Q)	-	kcal/d	c1	1	3676.1	3751.7	2.1%
	Calor transferido (Q)	-	kcal/d	c2	1	4358.2	4022.3	-7.7%
	Calor transferido (Q)	-	kcal/d	d1	1	2456.3	2524.8	2.8%
	Calor transferido (Q)	-	kcal/d	d2	1	2262.7	1938.3	-14.3%
	Calor transferido (Q)	-	kcal/d	e1	1	7548.1	8414.9	11.5%
	Calor transferido (Q)	-	kcal/d	e2	1	4457.6	4214.6	-5.5%
	Soma do Calor transferido		kcal/d	total	1	34862.9	35942	3.1%

Observa-se que a otimização alterou as vazões de fluido frio nos ramais 1 e 2, aumentando em 9,1% a vazão pelo ramal 1 e diminuindo, conseqüentemente, a vazão pelo ramal 2. Com a diminuição de vazão do fluido frio pelo ramal 2, houve um aumento na temperatura final deste ramal, de 138,7 °C para 149,7 °C, um acréscimo de 11,0 °C. Tem-se, também, a temperatura final no ramal 1 em 149,7 °C, igual à temperatura do ramal 2. A temperatura final composta, do fluido frio, teve um acréscimo de 5,3 °C.

O perfil de troca térmica dos trocadores de calor dos dois ramais apresentou mudanças em relação à situação anterior. Houve um aumento nas cargas térmicas dos trocadores a_1 e a_2 da corrente de fluido quente Q , em 16,1% e 14,3% respectivamente. Os trocadores de calor b_1 e b_2 , da mesma forma, tiveram um acréscimo de carga térmica devido ao aumento das temperaturas de entrada do fluido quente proveniente dos trocadores e_1 (com a corrente de DP) e e_2 (corrente de DL).

Os três últimos trocadores de calor do ramal 2 (c_2 , d_2 e e_2) tiveram uma redução em suas cargas térmicas, impactadas pela redução de vazão do lado frio. Apesar da redução de carga térmica após a otimização, houve um aumento de temperatura nas saídas destes trocadores do fluido frio. Os trocadores do ramal 1 (c_1 , d_1 e e_1) obtiveram um acréscimo no calor trocado entre os fluidos, com as temperaturas de saída do fluido frio mais estáveis em relação à situação anterior. Esse aumento foi devido ao aumento da vazão do lado frio, no ramal 1.

O resultado de calor total transferido na rede de trocadores de calor, comparando-se os dados reconciliados pré-otimização com os resultados obtidos, mostra um aumento na troca térmica de 3,1%.

Essa diferença de carga térmica recuperada representa 1079,1 Mcal/h. Usualmente, a corrente de Petróleo que é pré-aquecida em redes de trocadores de calor, é posteriormente aquecida e vaporizada em equipamentos como fornos de processo, com queima de insumos combustíveis, como Gás Natural ou Gás de refinaria (gás rico em compostos combustíveis gerados no processo químico) ou óleo combustível. Tal recuperação energética impacta na redução em necessidade de combustão de gases ou líquidos combustíveis em fornos convencionais, presentes na indústria. Neste caso, representa algo em torno de 2,3 toneladas de Gás Natural por dia economizado em fornos (considerando-se o PCI do Gás Natural igual a 11290 kcal/kg).

A seguir, foi feita uma análise nos resultados de todo o período em que a implementação da otimização RTO foi possível, ou seja, nos períodos de estado estacionário. Inicialmente, o problema de otimização configurado foi a maximização de calor trocado nos trocadores de calor, tal qual na simulação realizada na amostra de 07/11 às 20:40.

Houve um aumento no calor total trocado, da situação original para os resultados otimizados, em todo o período.

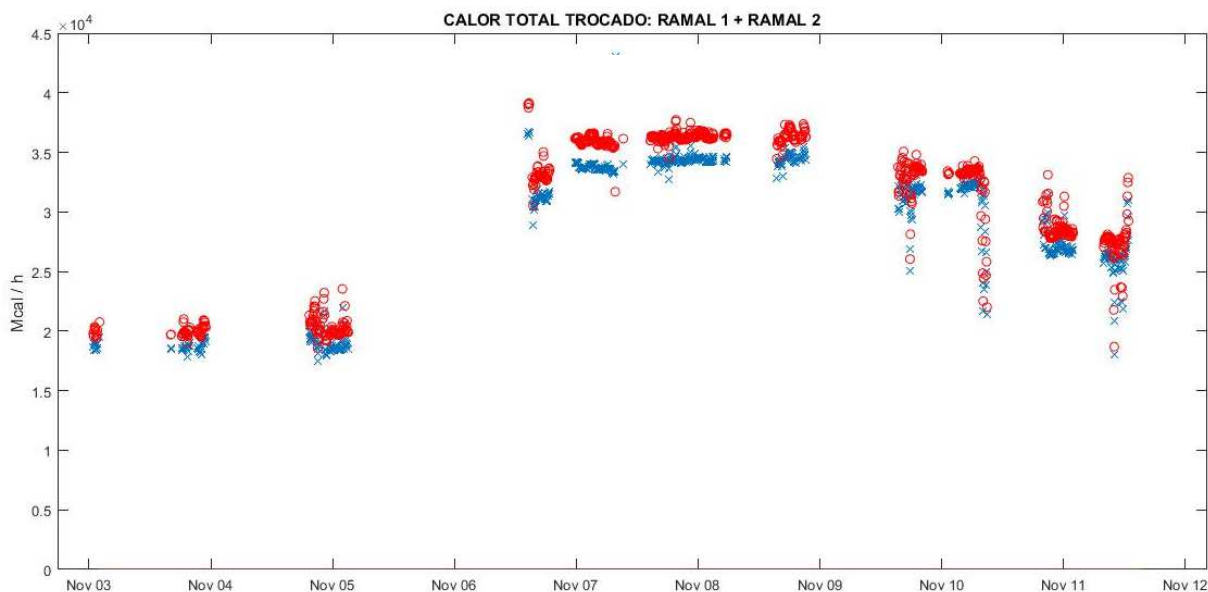


Figura 28: Calor total trocado dos ramais 1 e 2 (azul: original; vermelho: otimizado)

O lucro em carga térmica da otimização oscilou conforme a Figura 29. Verificam-se maiores ganhos nos períodos de maiores vazões das correntes do processo, a partir de 07 de Novembro, quando a vazão de Petróleo média foi de aproximadamente $19.750 \text{ m}^3/\text{d}$.

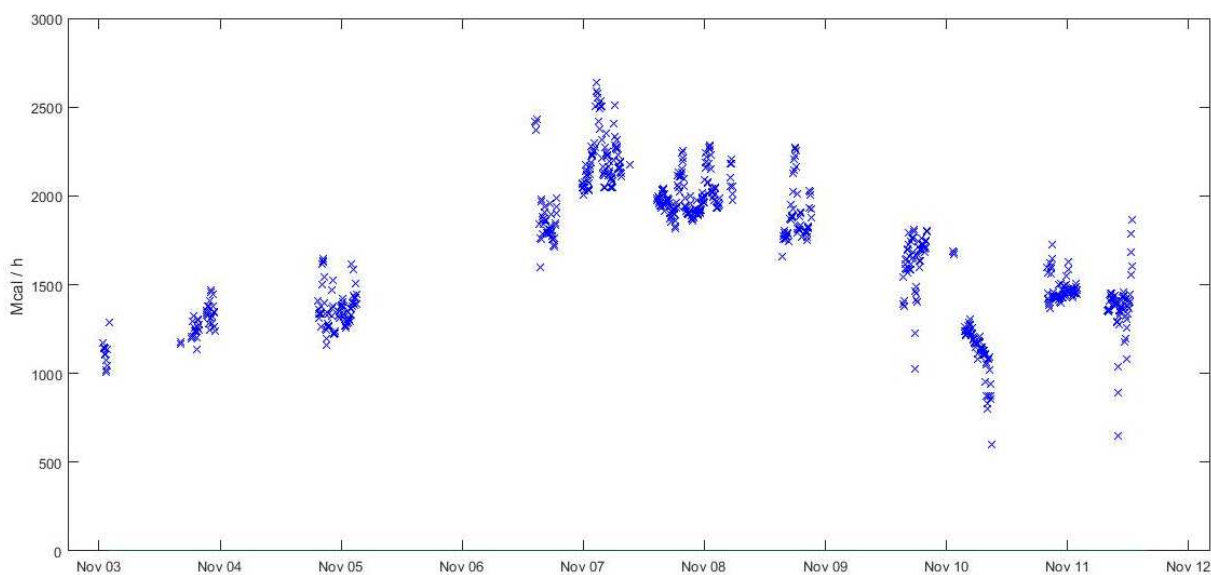


Figura 29: Diferença de troca térmica entre resultados otimizados e leituras originais

A média da diferença entre o calor total trocado no cenário de otimização Q_{Otim1} e o valor realizado Q foi de 1666,9 Mcal/h, que equivale a 3,5 toneladas de Gás Natural por dia. A temperatura composta final do Petróleo apresenta variações que podem chegar acima de 10°C , conforme mostrado nas Figura 30 e Figura 31:

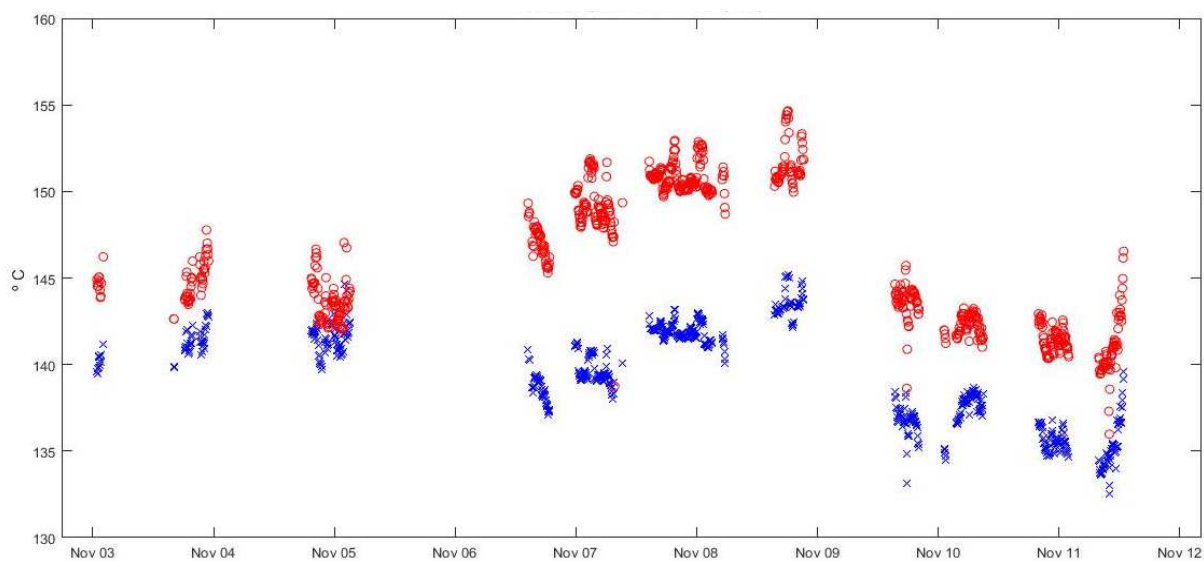


Figura 30: Temperatura final do Petróleo (azul: original; vermelho: otimizado)

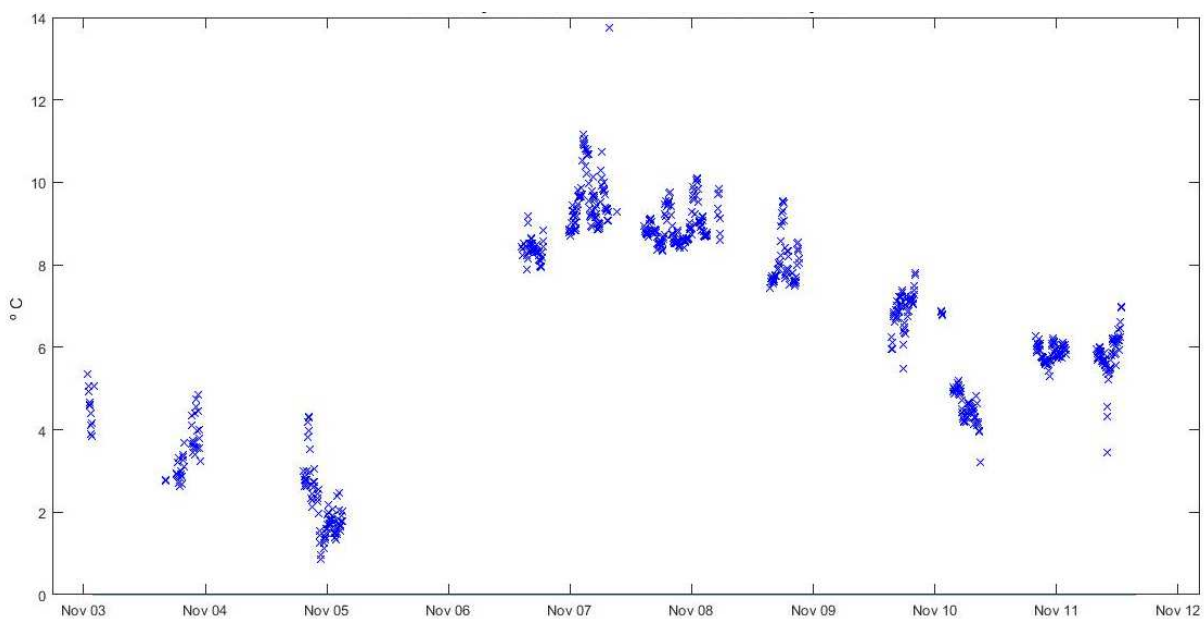


Figura 31: Diferença de temperatura otimizado e original

Na Figura 32, tem-se as temperaturas de saída dos ramais 1 e 2. Nota-se que as temperaturas não se aproximam ou se igualam, condição indicativa de máximo aproveitamento térmico da rede de trocadores. No entanto, o resultado da otimização pode ser em mínimo local.

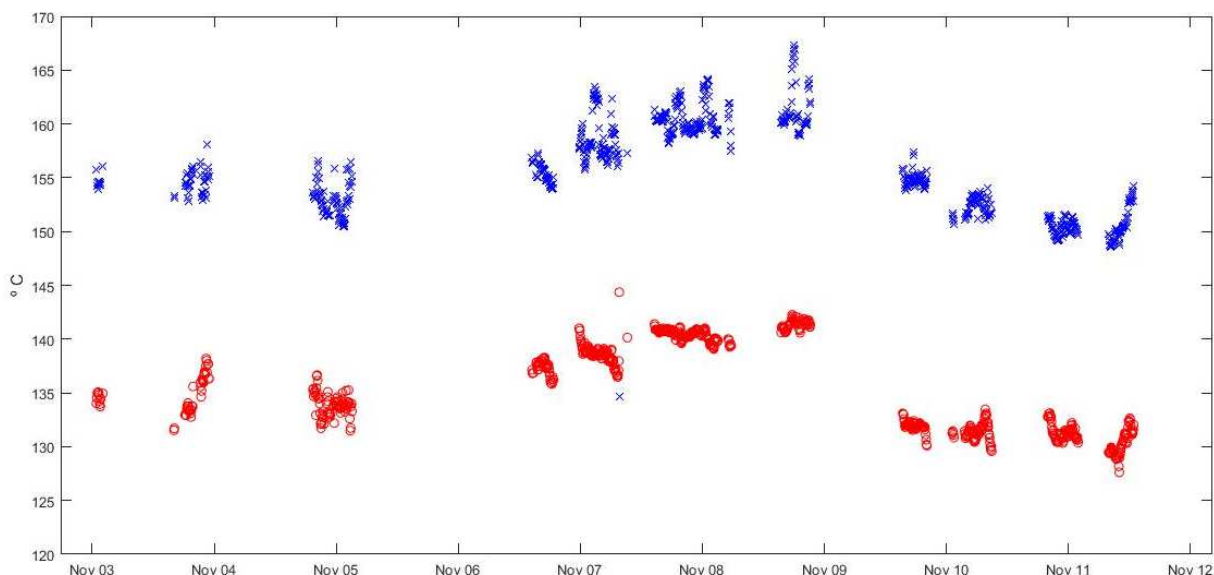


Figura 32: Temperatura final do fluido frio em cada ramal (azul: ramal 1; vermelho: ramal 2)

Para se analisar a premissa de aproximação das temperaturas finais do fluido frio dos ramais 1 e 2 foi realizada a otimização com a função objetivo na minimização do quadrado da diferença entre essas temperaturas, aproximando-se a uma estratégia de controle do tipo SOC.

$$\min(Tfs_{e1} - Tfs_{e2})^2 \quad (113)$$

Notou-se maior aproximação entre essas temperaturas, apresentada na Figura 33. A partir dos dados de 06 de novembro as temperaturas apresentaram resultados próximos, com esperada indicação de máxima troca térmica total da rede de trocadores de calor. A Figura 34 apresenta o resultado da função objetivo.

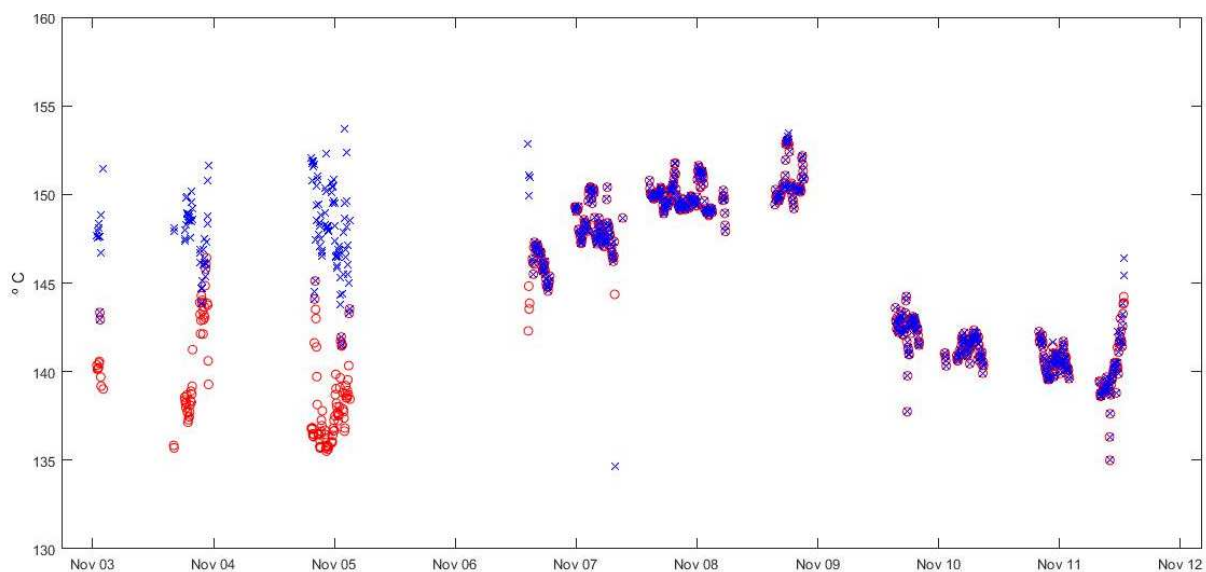


Figura 33: Temperaturas fluido frio final com minimização de diferença entre estas (azul: ramal 1; vermelho: ramal 2)

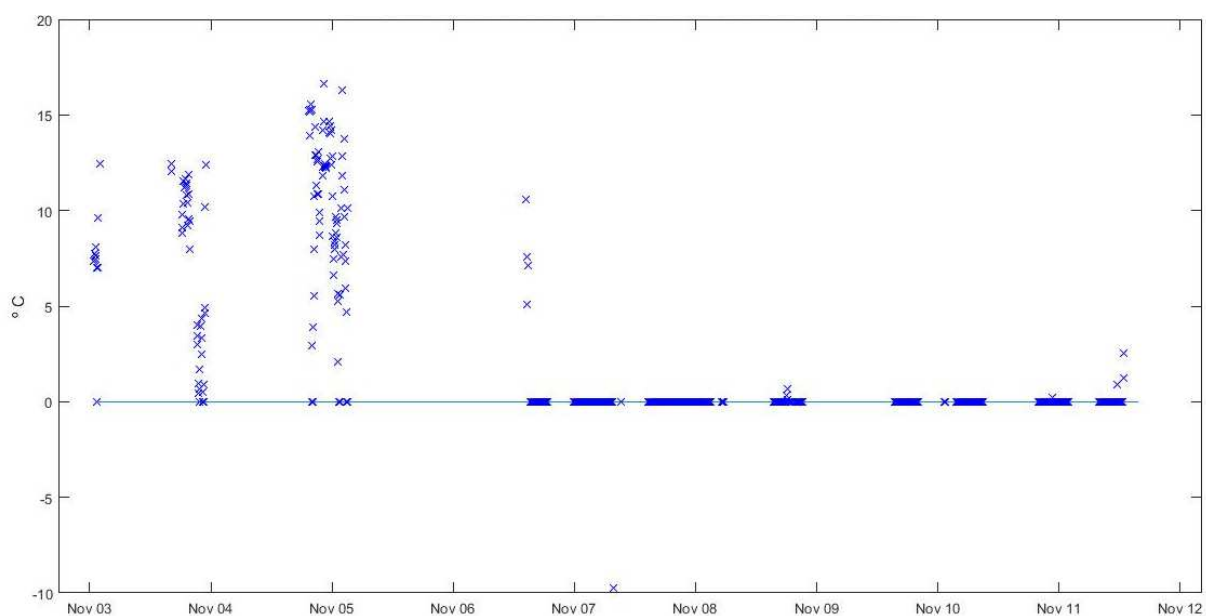


Figura 34: Resultado da função objetivo - minimização da diferença das temperaturas dos ramais 1 e 2

Observa-se que os dados de 03 de novembro a 05 de novembro, período com as vazões da unidade em patamar menor, o resultado da otimização com a minimização da diferença das temperaturas finais dos ramais 1 e 2 apresentaram resultados semelhantes à otimização com função objetivo de maximização da troca térmica total. A Figura 35 apresenta a temperatura final composta dos ramais 1 e 2 nos dois casos de otimização. Nota-se que a partir dos dados do período após o dia 07 de novembro, com vazões maiores na unidade, a otimização com a

minimização de diferença das temperaturas finais em cada ramal forneceram resultados em que as temperaturas finais composta do Petróleo foram ligeiramente menores.

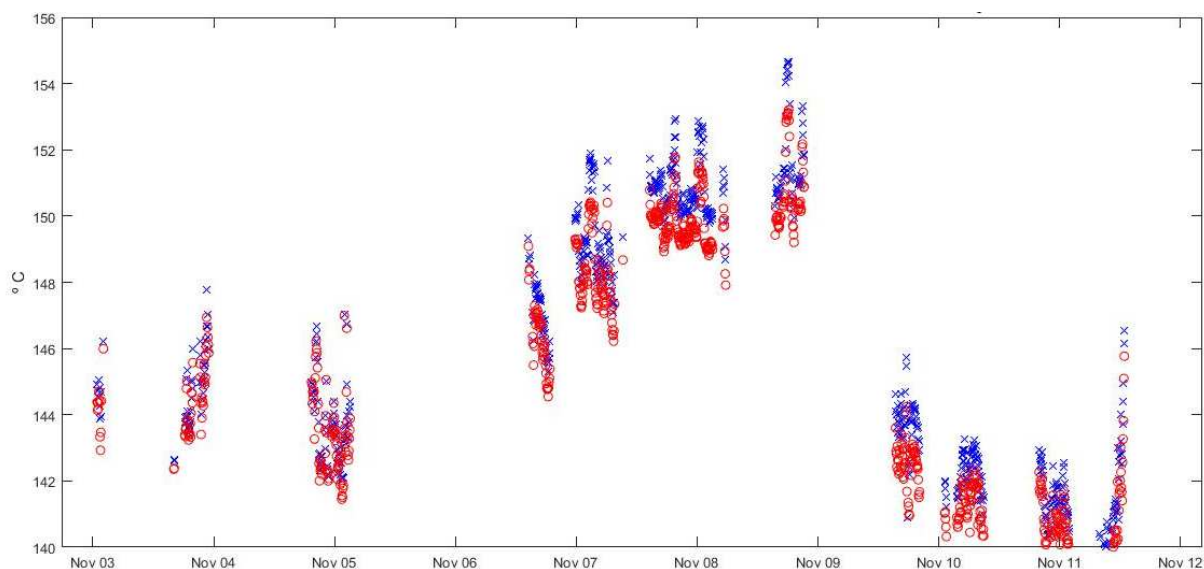


Figura 35: Temperatura final do Petróleo (azul: otimizado maximização carga térmica; vermelho: otimizado minimização diferença temperaturas ramais 1 e 2)

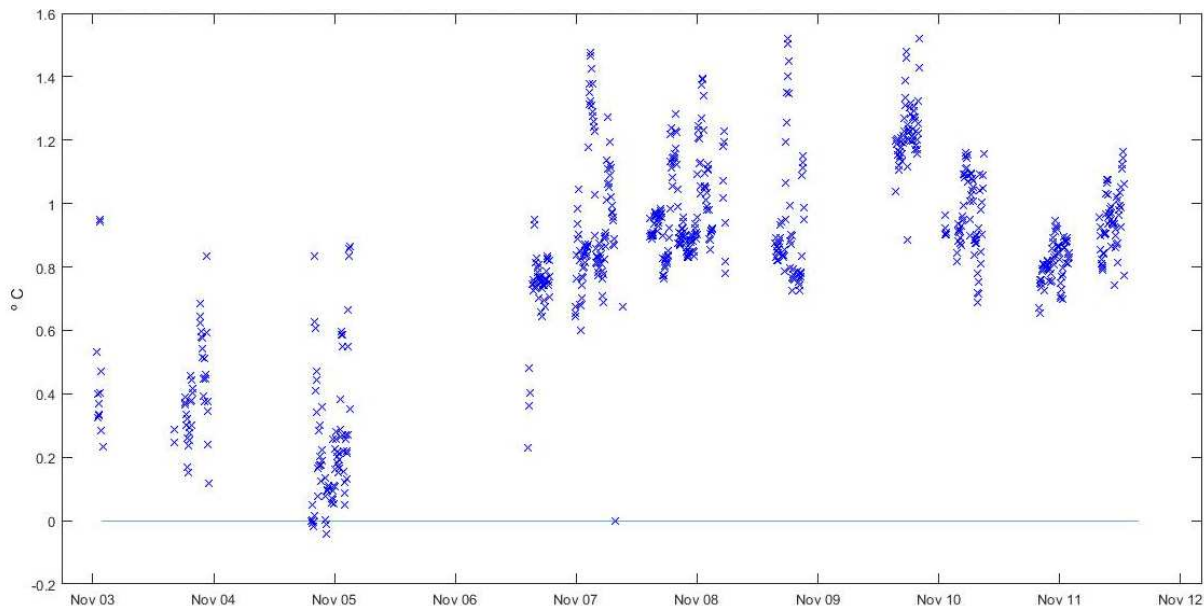


Figura 36: Diferença entre temperatura final composta - otimizações máxima troca térmica total e mínima diferença temperaturas ramais 1 e 2

Na Figura 36 é apresentada a diferença de temperatura final entre os dois cenários de otimização; há no caso de maximização de troca térmica total dos trocadores de calor uma maior temperatura final composta de Petróleo em relação a minimização da diferença de

temperatura dos ramais 1 e 2. A diferença de troca térmica total entre os dois cenários de otimização Q_{Optim1} e Q_{Optim2} apresentaram média de 182,4 Mcal/h.

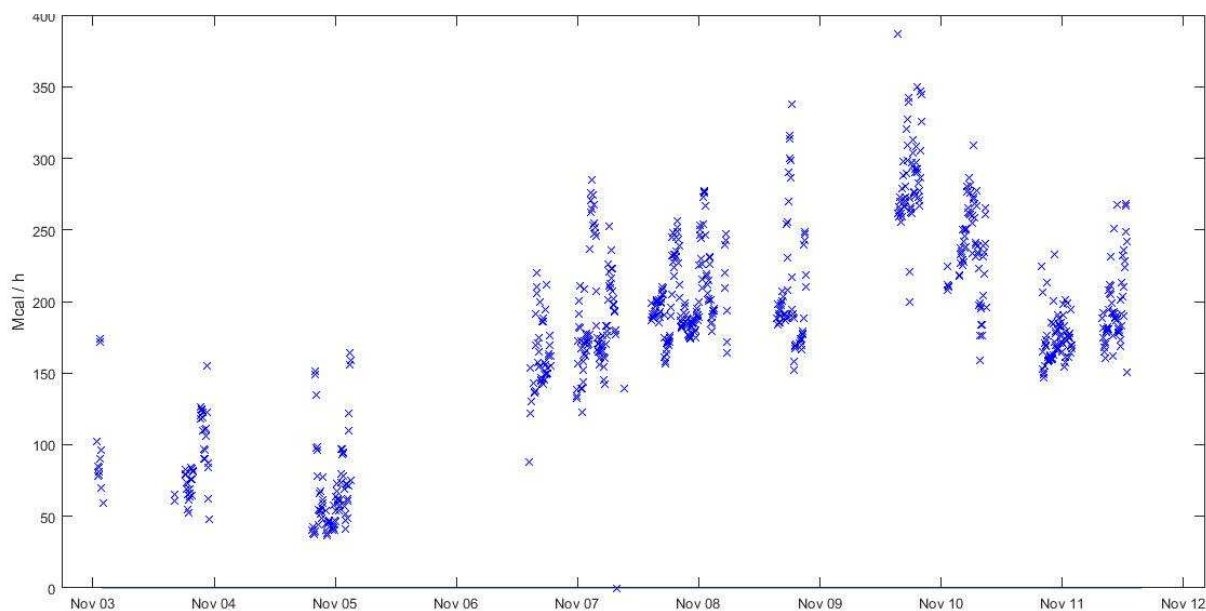


Figura 37: Diferença entre calor total trocado - otimizações máxima troca térmica total e mínima diferença temperaturas ramais 1 e 2

O acréscimo de calor total trocado na otimização com a função objetivo de minimização da diferença de temperaturas finais do fluido frio, nos ramais 1 e 2, foi em média 1484,6 Mcal/h, como mostrado na Figura 37. O equivalente térmico em relação à combustão de Gás Natural, calculado a partir da Equação (73):

$$F_{GN} = (PCI_{GN}/1000) * (Q_{Optim1} - Q_{Optim2}) \quad (114)$$

Com:

F_{GN} : Vazão mássica em Gás Natural [t/h]

PCI_{GN} : Poder calorífico inferior do Gás Natural [kcal/kg];

Q_{Optim1} : Calor de otimização de maximização de troca térmica [Mcal/h];

Q_{Optim2} : Calor de otimização de minimização da diferença das temperaturas finais dos ramais 1 e 2 [Mcal/h];

Considerando-se o PCI_{GN} de 11290 kcal/kg, a vazão mássica de Gás Natural é de aproximadamente 3,15 toneladas por hora, necessários para compensação de energia a ser fornecido a corrente de petróleo.

Os resultados apresentados mostram que a aplicação da otimização RTO em um processo real traz um melhor aproveitamento térmico entre as correntes do processo. Há um impacto no potencial de economia de insumos energéticos, como a otimização RTO apresentou.

5 - CONCLUSÕES

No presente estudo, a aplicação da otimização RTO utilizando dados reais em uma rede de trocadores de calor de uma refinaria de Petróleo apresentou resultados em que houve um melhor aproveitamento térmico entre as correntes do processo, maximizando as trocas térmicas nos equipamentos e a temperatura composta de saída das correntes dos ramais 1 e 2.

Inicialmente, a reprodução dos artigos de Narasimham e Jordache (reconciliação de dados) e de Jäschke e Skogestad (otimização) contribuíram para a aplicação de conceitos no estudo destes casos. Todas as abordagens foram implementadas no *software* IMPL e apresentaram similaridades aos modelos e métodos utilizados no estudo de caso de uma rede de trocadores de calor de uma refinaria de Petróleo. Na reconciliação de dados, foi utilizado um problema de otimização em mínimos quadrados, com e sem o tratamento de dados. Os desvios apresentados devido à presença de erros grosseiros e à importância da definição dos limites de cada variável estavam presentes. Assim como no estudo de caso, nesse exercício o coeficiente global de transferência de calor foi obtido a partir da estimação de parâmetros concomitante à reconciliação de dados.

A reprodução do artigo de Jäschke e Skogestad, em que é utilizado um modelo de processo alternativo baseado na variável “Temperatura de Jäschke” para um estudo de caso na rede de trocadores de calor, a igualdade das temperaturas finais em cada ramal coincidiu com o tipo de controle sugerido em aplicações SOC.

Para o estudo de caso de aplicação da metodologia de otimização em linha (RTO) da rede de trocadores de calor de refinaria a partir dos dados reais, foram executadas as etapas de detecção de estado estacionário, reconciliação de dados concomitante à estimação de parâmetros, e a otimização do processo. Na detecção de estado estacionário, o método F-modificado de Cao e Rhinehart mostrou-se apropriado para a aplicação em linha, assim como sugerido em literatura. A disponibilidade de dados em frequência em que os cálculos de suas variâncias sejam possíveis e coerentes é necessária, para não distorcer o teste de estado estacionário. Nota-se a importância no equilíbrio entre a seleção da quantidade de dados para os cálculos que satisfaçam ao método e o desempenho computacional em tempo real disponível. No presente estudo, 11 variáveis com período de amostragem de 5 minutos foram

suficientes. Anteriormente, a seleção de variáveis-chave à rede de trocadores, para a realização dos testes, assim como a calibração das variáveis λ do método mostraram-se relevantes e essenciais ao método, para se minimizar erros do tipo I e II do teste F-modificado. A reconciliação de dados e estimação de parâmetros, na próxima etapa, foram realizadas concomitantemente. A estimação dos valores de coeficientes globais de troca térmica, das vazões e temperaturas de saída de fluido quente em cada trocador de calor apresentaram valores dentro da ordem de grandeza dos valores.

Por fim, a etapa de otimização apresentou resultados onde as duas considerações na função objetivo, de maximização de troca térmica total da rede de trocadores de calor, e a igualdade das temperaturas finais dos dois ramais do sistema, no caso com a minimização da diferença das duas temperaturas, maximizaram a recuperação energética a partir do aproveitamento térmico de correntes mais quentes do processo em uma rede de trocadores de calor. No segundo estudo de otimização, a estratégia usa os resultados do SOC, e o objetivo é manter sob controle fixo a diferença de temperaturas dos ramais 1 e 2 em aproximadamente zero. A recuperação energética, que impactou em redução aproximada do consumo de um insumo como o Gás Natural entre 3,15 e 3,50 toneladas diárias, aponta oportunidade relevante de aplicação de otimização em linha.

A diferença entre as duas otimizações com este objetivo foi pequena, podendo ser utilizadas ambas quando o único grau de liberdade do sistema é a razão da vazão de fluido frio para os dois ramais, como no presente estudo. Pode-se estender tal análise a partir da flexibilidade da variação das vazões e temperaturas dos fluidos quentes, com as devidas restrições destas variáveis em outros sistemas, ou a razão de vazão dos fluidos quentes em trocadores que utilizam a mesma corrente, onde haja possibilidade operacional para tal manipulação.

A aplicação da otimização RTO pode ser estendida a outros sistemas onde haja a possibilidade de ganhos econômicos, tais como em sistemas de geração de vapor e energia elétrica (cogeração) e equipamentos de recuperação energética (turbinas a gás, trocadores de calor, caldeiras, etc.). Há ainda perspectivas da integração de sistemas de utilidades e geração de energia à otimização RTO da unidade de processo, visando o objetivo econômico não só na minimização de custos energéticos, como na maximização de margem de lucro na produção de produtos derivados.

REFERÊNCIAS

AGUILAR, O. et. al. Design and optimization of flexible utility system subject to variable conditions part 1: modelling framework. **Chemical Engineering Research and Design**, v. 85, n. 8, p. 1136-1148, 2007.

AGUILAR, O. et. al. Design and optimization of flexible utility system subject to variable conditions part 2: methodology and application. **Chemical Engineering Research and Design**, v. 85, n. 8, p. 1149-1168, 2007.

AGUILERA, N.; MARCHETTI, J. L. Supervisor control of heat exchanger networks, **IFAC Proceedings Volumes**, v. 28, n. 19, p. 69-74, set. 1995.

ARORA, N.; BIEGLER, L. T. Redescending estimators for data reconciliation and parameter estimation. **Computers & Chemical Engineering**, v. 25, n. 11-12, p. 1585-1599, nov. 2001.

BATH, A. S.; SARAF, D. N. Steady-state identification, gross error detection, and data reconciliation for industrial process units. **Industrial & Engineering Chemistry**, v. 43, p. 4323-4336, 2004.

BETHEA, R. M.; RHINEHART, R. R. **Applied Engineering Statistics**. Marcel Dekker, Nova Iorque, 1991.

BIEGLER, L. T. **Nonlinear programming – concepts, algorithms, and applications to chemical processes**. Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, 2010.

BIEGLER, L. T.; YANG, X.; FISCHER, G. A. G. Advances in sensitivity-based nonlinear model predictive control and dynamic real-time optimization. **Journal of Process Control**, v. 30, p. 104-116, jun. 2015.

BRUNO et. al. A rigorous MINLP Model for the optimal synthesis and operation of utility plants. **Trans IChemE**, v. 76, n. 3, p. 246-258, mar. 1998.

CÂMARA, M. M.; QUELHAS, A. D.; PINTO, J. C. Performance evaluation of real industrial RTO systems. **Processes**, v. 4, n. 44, p. 1-20, 2016.

CAO, S.; RHINEHART, R. R. An efficient method for on-line identification of steady state. **Journal of Process Control**, v. 5, n. 6, p. 363-37, dez. 1995.

CHEN, C. L.; LIN, C. Y.; LEE, Y. Retrofit of steam power plant in a petroleum refinery. **Applied Thermal Engineering**, v. 61, n. 1, p. 7-16, out. 2013.

CROWE, C. M. Data reconciliation – progress and challenges. **Journal of Process Control**, v. 6, n. 2-3, p. 89-98, 1996.

CUTLER, C. R.; PERRY, R. T. Real time optimization with multivariable control is required to maximize profits. **Computers & Chemical Engineering**, v. 7, n. 5, p. 663-667, fev. 1983.

DARBY, M. L.; HARMSE, M.; NIKOLAOU, M. MPC: Current practice and challenges. **IFAC Proceeding Volumes**, v. 42, n. 11, p. 86-98, 2009.

DARBY, M. L.; NIKOLAOU, M.; JONES, J.; NICHOLSON, D. RTO: An overview and assessment of current practice. **Journal of Process Control**, v. 21, n. 6, p. 874-884, jul. 2011.

DE SOUZA, G.; ODLOAK, D.; ZANIN, A. C. Real time optimization (RTO) with model predictive control (MPC). **Computers & Chemical Engineering**, v. 34, n. 12, p. 1999-2006, jul. 2010.

DOWNS, J. J.; SKOGESTAD, S. An industrial and academic perspective on plantwide control. **Annual Reviews in Control**, v. 35, n. 1, p. 99-110, abr. 2011.

FINDEISEN, et. al. **Control and coordination in hierarchical systems**. J. Wiley, Hoboken, New Jersey, 1980.

FLOUDAS, C. A. **Nonlinear and mixed-integer optimization – Fundamentals and applications (Topic in Chemical Engineering)**. Oxford University Press, Oxford, 1995.

FORBES, J. F.; MARLIN, T. E.; MACGREGOR, J. F. Model adequacy requirements for optimizing plant operations. **Computers & Chemical Engineering**, v. 18, n. 6, p. 497-510, nov. 1993.

GLEMESTAD, B.; SKOGESTAD, S.; GUNDERSEN, T. Optimal operation of heat exchanger networks. **Computers & Chemical Engineering**, v. 23, n. 4-5, p. 509-522, mai. 1999.

GRACIANO, J. E. A. **Real time optimization in chemical processes: evaluation strategies, improvements and industrial application**. Tese (Doutorado) – Escola Politécnica, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2016.

GROSSMANN, I. E.; KRAVANJA, Z. Mixed-integer nonlinear programming. **Computers & Chemical Engineering**, v. 19, n. 1, p. 189-204, jun. 1995.

HEYEN, J.; KALITVENTZEFF, B. Methodology for optimization of operation to reduce site-scale energy use in production plants. **Applied Thermal Engineering**, v. 17, n. 8-10, p. 1005-1014, out. 1997.

JÄSCHKE, J.; SKOGESTAD, S. Optimal operation of heat exchanger networks with stream split: Only temperature measurements are required. **Computers & Chemical Engineering**, v. 70, p. 35-49, nov. 2014.

KAMESWARAN, S.; BIEGLER, L. T. Simultaneous dynamic optimization strategies: recent advances and challenges. **Computers & Chemical Engineering**, v.30, n. 10-12, p. 1560-1575, set. 2006.

KOTJABASAKIS, E.; LINNHOF, B. An optimal overdesign strategy for fouling. **Process Optimisation**, p. 211-236, 1987.

KRISHNAMOORTHY, D.; FOSS, B.; SKOGESTAD, S. Steady-state real-time optimization using transient measurements. **Computers & Chemical Engineering**, v. 115, p. 34-45, jul. 2018.

KRISTOFFERSEN, T. T. et. al. Optimal and robust production of high pressure steam. In: European Control Conference, 2014, Strasburgo, IEEE.

LE ROUX et. al. Improving steady-state identification. **Computer Aided Chemical Engineering**, v. 25, p. 459-464, 2008.

LEE, M. H. et. al. Hierarchical on-line data reconciliation and optimization for an industrial utility plant. **Computers & Chemical Engineering**, v. 22, n. 1, p. s247-s254, mar. 1998.

LEMOS et. al. Optimal Allocation of cleanings in heat exchanger networks. **Applied Thermal Engineering**, v. 58, n. 1-2, p. 605-614, set. 2013.

LERSBAMRUNGSUK, V. et. al. Control structure design for optimal operation of heat exchanger networks. **AIChE Journal**, v. 54, n. 1, p. 150-162, jan. 2008.

LID, T.; SKOGESTAD, S. Implementation issues for real-time optimization of a crude unit heat exchanger network. **Computer Aided Chemical Engineering**, v. 9, p. 1041-1046, 2001.

LUO, X.; ZHANG, B.; MO, S. Modelling and optimization of a utility system containing multiple extractions steam turbines. **Energy**, v. 36, n. 5, p. 3501-3512, mai. 2011.

MCLEAN, K. A. P.; MCAULEY, K. B. Mathematical modelling of chemical processes - obtaining the best model predictions and parameter estimates using identifiability and estimability procedures. **The Canadian Journal of Chemical Engineering**, v. 90, n. 2, p. 355-366, abr. 2012.

MENEZES, D. R. C. **Aplicação e avaliação de desempenho de um sistema de otimização em tempo real em uma unidade de produção de propeno**. 2016. 80 p. Dissertação (Mestrado) – Escola Politécnica, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2016.

MILETIC, I.; MARLIN, T. Results analysis for real-time optimization (RTO): deciding when to change the plant operation. **Computers & Chemical Engineering**, v. 20, n. 2, p. 1077-1082, 1996.

NARASIMHAN, S.; JORDACHE, C. **Data Reconciliation & Gross Error Detection: an intelligent use of process data**. Gulf Publishing Company, Houston, Texas, 2000.

NAYSMITH, M. R.; DOUGLAS, P. L. Review of real time optimization in the chemical process industries. **Developments in Chemical Engineering and Mineral Processing**, p. 67-87, 1995.

PROKOPAKIS, G. J.; MAROULIS, Z. K. Real-time management and optimization of industrial utilities systems. **Computers & Chemical Engineering**, v. 20, n. 1, p. 623-628, 1996.

REN, T. Barriers and drivers for process innovation in the petrochemical industry: A case study. **Journal of Engineering and Technology Management**, v. 26, n. 4, p. 285-304, dez. 2009.

RINCÓN, F. D.; LE ROUX, G. A. C.; LIMA, F. V. A novel ARX-Based Approach for the steady-state identification analysis of industrial depropanizer column datasets. **Processes**, v. 3, n. 2, p. 257-285, 2015.

RODERA, H.; WESTPHALEN, D. L.; SHETHNA, K. A methodology for improving heat exchanger network operation. **Applied Thermal Engineering**, v. 23, n. 14, p. 1729-1741, out. 2003.

SERRALUNGA, F.; MUSSATI, M. C.; AGUIRRE, A. An alternative real-time optimization algorithm with modifier adaptation: application to heat and power systems. **Computer Aided Chemical Engineering**, v. 30, p. 367-371, 2012.

TVRZSKÁ DE GOUVÊA, M.; ODLOAK, D. One-layer real time optimization of LPG production in the FCC unit: procedure, advantages and disadvantages. **Computers & Chemical Engineering**, v. 22, n. 1, mar. 1998.

VARBANOV, P. S.; DOYLE, S.; SMITH, R. Modelling and optimization of utility system. **Chemical Engineering Research and Design**, v. 82, n. 5, p. 561-578, mai. 2004.

ZANIN, A. C.; TVRZSKÁ DE GOUVÊA, M.; ODLOAK, D. Integrating real-time optimization into the model predictive controller of the FCC system. **Control Engineering Practice**, v. 10, n. 8, ago. 2002.