RICARDO ANDRÉS TUSSO PINZÓN

**OTIMIZAÇÃO ECONÔMICA DE SEQUÊNCIAS DE COLUNAS DE
DESTILAÇÃO CONVENCIONAIS E COLUNA COM PAREDE
DIVIDIDA PARA A MISTURA BENZENO, TOLUENO E P-XILENO**

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 Antonio Carrillo LeRoux

São Paulo

2014

RICARDO ANDRÉS TUSSO PINZÓN

**OTIMIZAÇÃO ECONÔMICA DE SEQUÊNCIAS DE COLUNAS DE
DESTILAÇÃO CONVENCIONAIS E COLUNA COM PAREDE
DIVIDIDA PARA A MISTURA BENZENO, TOLUENO E P-XILENO**

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

São Paulo
2014

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

São Paulo, 25 de março de 2014

Ricardo A. Tusso Pinzón (autor)

Prof. Dr. Galo A. Carrillo Le Roux (orientador)

FICHA CATALOGRÁFICA– EDIÇÃO REVISADA

Tusso Pinzón, Ricardo Andrés

Otimização econômica de sequências de colunas de destilação convencionais e coluna com parede dividida para a mistura benzeno, tolueno e p-xileno / R.A. Tusso Pinzón. -- São Paulo, 2014.

121 p.

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

1.Colunas de destilação 2.Matrizes esparsas 3.Sequência direta 4.Sequência indireta 5.Método de ponto de bolha 6.Custo total anualizado I.Universidade de São Paulo. Escola Politécnica. Departamento de Engenharia Química II.t.

DEDICATORIA

*A mi estrella que nunca
desfalleció y siempre
mantuvo la fé en lós
momentos difíciles. Eres
todo para mi*

AGRADECIMENTO

Agradeço ao Prof. Dr. Galo Antonio Carrillo Le Roux, pela oportunidade de orientar, apoiar o desenvolvimento do trabalho, pelos seus conhecimentos transmitidos. Ao Dr. Diego Mendoza, pela valiosa colaboração e continua ajuda através das sugestões e acompanhamento.

Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e tecnológico (CNPq) pela ajuda financeira para a realização deste trabalho.

Aos colegas do LSCP, pela amizade, apoio, e bons desejos, Aldo; Bruno; Lina; Mayra; David; Alvaro; José Eduardo, José Otávio, Misagh; Marcio. Também ao Prof. Dr. Carlos Arturo Martinez, com os comentários e apoio.

Aos bons amigos no Brasil que me acolheram e compartilharam boas lembranças e bons momentos, Alex; Ruben; Lina; Erica; Arlet; Luis; Lenin; Carolina.

A minha família na Colômbia que me apoiu neste desafio e em especial à Diana, minha irmã, que me acompanhou nos momentos mais difíceis e foi uma grande inspiração para ser uma melhor pessoa cada dia.

A única maneira de fazer um bom trabalho é amando o que você faz. Se você ainda não encontrou, continue procurando. Não se desespere. Assim como no amor, você saberá quando tiver encontrado.

Steve Jobs

RESUMO

A destilação é um processo de separação com uma alta demanda de energia, razão pela qual, através de diferentes épocas tem sido estudadas diferentes configurações. O problema da separação de misturas multicomponente pode envolver sequências de colunas de destilação convencionais. Neste caso, surge um problema combinatório a fim de projetar a sequência mais econômica de separação. Por outro lado, em anos recentes têm sido proposto o uso de equipamentos alternativos, sendo as colunas com paredes divididas uma opção bastante estudada que se caracterizam pela integração de 2 seções de colunas compartilhando um único condensador e um único refeedor. Estes equipamentos propõem diminuir o custo total de processo de separação de misturas multicomponentes. Neste trabalho apresenta-se um estudo econômico da separação de três misturas ternárias de Benzeno, Tolueno, P-xileno, comparando os projetos ótimos de sequências convencionais e de colunas de paredes divididas. Inicialmente, são definidas as variáveis de projeto para cada configuração por meio de uma análise de graus de liberdade. O dimensionamento é realizado inicialmente com o método não rigoroso de valor de fronteira. Finalmente, as sequências diretas e indiretas e as colunas de parede divididas são projetadas usando modelos rigorosos, baseados no método de ponto de bolha, programação matemática para resolver os problemas de otimização do Custo Total Anualizado TAC com variáveis contínuas e enumeração exaustiva para tratar o problema combinatório. São obtidos projetos ótimos para uma alimentação com três composições diferentes. A sequência indireta forneceu o melhor resultado para a alimentação rica no componente mais pesado (-58,35%) e no componente intermediário (-45,98%). Já a sequência direta foi a melhor quando a alimentação é rica em componente leve (-33,36%). A coluna com parede dividida teve o pior desempenho em todos os três casos estudados.

Palavras-chave: Coluna com parede dividida. Custo total anualizado. Sequência direta. Sequência indireta.

ABSTRACT

Distillation is a high-energy demand separation process, for that reason, alternative configurations have been studied through the ages. The separation problem of multicomponent mixtures may involve a sequence of conventional distillation columns. In this case, a combinatorial problem arises in order to design the most economical separation sequence. On the other hand, in recent years the use of alternative devices has been proposed. One of those options is the divided wall column, which is extensively studied, and is characterized by the integration of two column sections sharing a single condenser and a single reboiler. This equipment is sought to decrease the total cost of the separation process for multicomponent mixtures. This work presents an economic study for the separation of three ternary mixtures of benzene, toluene and p-xylene, comparing the optimum design of conventional sequences and divided wall columns. Initially, the design variables are defined for each configuration through a degrees of freedom analysis,. The sizing is initially performed with the boundary value shortcut method. Then, the direct and indirect sequences, and divided wall columns are designed using rigorous models based on the bubble point method. Mathematical programming is used for solving the optimization problems of minimization of the total annualized cost (TAC) with continuous variables and exhaustive enumeration to handle the combinatorial issue. Optimal designs for three feeds with different compositions are obtained. The indirect sequence provided the best result for the feed rich in the heaviest component (-58.35 %) and in the intermediate component (-45.98 %). The direct sequence result was the best when the feed composition is rich in lighter component (-33.36 %). The divided wall column had the worst performance in all three cases studied.

Keywords: Divided wall column distillation. Total annualized cost. Indirect sequence. Direct sequence.

LISTA ILUSTRAÇÕES

Figura 3.1- Sequências de separação para 3 componentes na alimentação.	26
Figura 3.2- Configurações de colunas complexas para destilação ternária.....	28
Figura 4.1- Secções de coluna de destilação apresentada como uma configuração de estágios no equilíbrio.....	32
Figura 4.2- Configuração para cálculo de ponto de bolha, usando multiplas entradas e saídas	38
Figura 4.3- Condensador total, método ponto de bolha	40
Figura 4.4- Balanço estágios internos da coluna	40
Figura 4.5- Balanço no refeedor.....	41
Figura 4.6- Algoritmo para o método ponto de bolha	42
Figura 4.7- Estrutura de uma coluna termicamente acoplada.....	43
Figura 4.8- Estágio interno sem conexões de fluxos laterais	45
Figura 4.9- Conexão superior da coluna principal.....	45
Figura 4.10- Conexão inferior da coluna principal.....	45
Figura 4.11- Conexão superior da fracionadora.....	45
Figura 4.12- Conexão inferior da fracionadora.....	45
Figura 4.13- Matriz esparsa para uma configuração de colunas termicamente acopladas	47
Figura 4.14 Geração de uma combinatoria entre as variaveis inteiras de uma sequência convencional	51
Figura 4.15- Configuração de 3 colunas convencionais. Método de Amminudim.....	53
Figura 4.16- Configuração coluna Petlyuk, método Cerda-Westerberg.....	54
Figura 5.1- Análise de graus de liberdade em uma sequência convencional	58
Figura 5.2- Análise dos graus de liberdade em uma coluna termicamente acoplada.....	60
Figura 5.3- Aplicação das variáveis especificadas para os métodos de destilação usados	62

Figura 5.4- Factibilidade de separação	63
Figura 5.5- Refluxo mínimo método valor de fronteira	63
Figura 5.6- Cargas de calor no condensador em uma sequência de separação convencional indireta.....	65
Figura 5.7- Custo total anualizado em uma sequência de separação convencional indireta avaliada a diferentes razões de refluxo	65
Figura 5.8- Custo total anualizado em uma sequência de separação convencional indireta com diferentes números de estágios.....	65
Figura 5.9- Perfis de concentrações da fase de vapor para mistura ternária Benzeno, Tolueno, <i>p</i> -xileno.....	67
Figura 5.10- Vazões internas de vapor na coluna.....	68
Figura 5.11- Vazões internas de líquido na coluna	68
Figura 5.12- Perfis de composição da fase de vapor para uma sequência indireta resolvida simultaneamente validadas no ASPEN PLUS®.	69
Figura 5.13 Comportamentos dos perfis dentro de uma coluna termicamente acoplada validada no ASPEN Hysys.....	72
Figura 5.14- Resultados da otimização efetuada com valores de razão de refluxo y vazão de destilado diferentes à valor de fronteira.....	74
Figura 5.15- Representação do custo total anualizada em função das cargas de calor	76
Figura 5.16- Resultados do TAC com variação do número de estágios sequência indireta com abundância em <i>p</i> -xileno (80%) na alimentação	78
Figura 5.17- Perfis de concentração da fase líquida a diferentes pontos iniciais de otimização	80

LISTA DE TABELAS

Tabela 3.1- Número de possíveis sequências de separação por destilação convencional.....	26
Tabela 4.1- Valores dos elementos fora da diagonal	47
Tabela 5.1- Características das condições da alimentação	57
Tabela 5.2- Variáveis obtidas para coluna com uma alimentação	58
Tabela 5.3- Graus de liberdade obtidas para sequência convencional com uma alimentação	58
Tabela 5.4- Especificações das variáveis para uma sequência convencional.....	59
Tabela 5.5- Especificação de variáveis em sequências convencionais usando método de valor de fronteira.....	59
Tabela 5.6- Especificação de variáveis em sequências convencionais usando rigoroso de ponto de bolha.....	59
Tabela 5.7- Graus de liberdade para a coluna principal.....	60
Tabela 5.8- Graus de liberdade para a coluna fracionadora	60
Tabela 5.9- Graus de liberdade para uma sequência termicamente acoplada.....	61
Tabela 5.10- Especificação de variáveis	61
Tabela 5.11- Especificação de variáveis de projeto para uma coluna termicamente acoplada	61
Tabela 5.12- Resultados preliminares para sequência direta na análise de sensibilidade.....	65
Tabela 5.13- Resultados preliminares para sequência indireta na análise de sensibilidade.....	66
Tabela 5.14- Tempo computacional para uma solução sequencial e simultânea para uma sequência convencional indireta	69
Tabela 5.15- Informação para validação de uma coluna termicamente acoplada	70
Tabela 5.16 Resultados das cargas de calor para uma configuração termicamente acoplada	72

Tabela 5.17- Resultados das otimizações usando a função objetivo com penalidade, e sem penalidade	73
Tabela 5.18- Comparação dos valores ótimos com os valores obtidos com o método de valor de fronteira para a sequência indireta	75
Tabela 5.19- Comparação dos valores ótimos com os valores obtidos com o método de valor de fronteira para a sequência direta	75
Tabela 5.20- Cargas de calor geradas para os resultados das diferentes sequências.	76
Tabela 5.21- Parâmetros de projeto para sequência indireta com custo mínimo	78
Tabela 5.22- Resultados otimização combintaroria DWC	79
Tabela 5.23- Custo total anualizado para os estágios estabelecidos iniciais para uma alimentação com frações molares de 0,1 mol de Benzeno 0,1 mol de Tolueno e 0,8 mol de P-Xileno	79
Tabela 5.24- Cargas de calor para diferentes condições de alimentação em uma configuração termicamente acoplada.....	81
Tabela 5.25- Custos de capital e de operação para diferentes condições de alimentação em uma configuração termicamente acoplada	81
Tabela 5.26- Comparação econômica dos resultados obtidos nas configurações convencionais e termicamente acoplada para uma alimentação 0,1 mol benzeno/0,1 mol Tolueno /0,8 mol p-xileno	82
Tabela 5.27- Comparação econômica dos resultados obtidos nas configurações convencionais e termicamente acoplada para uma alimentação 0,8 mol benzeno/0,1 mol Tolueno /0,1 mol p-xileno	82
Tabela 5.28- Comparação econômica dos resultados obtidos nas configurações convencionais e termicamente acoplada para uma alimentação 0,1 mol benzeno/0,8 mol Tolueno /0,1 mol p-xileno	82
Tabela A.1- Materiais de construção de colunas de destilacao	93
Tabela A.2- Parâmetro das dimensões dos estágios	93
Tabela A.3- Parâmetro das características dos estágios	94
Tabela A.4- Material de trocador de carcaça e tubo	94

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

<i>M&S</i>	<i>Marshall and swift index</i> (Índice de custos Marshall & Swift)
<i>NHE</i>	<i>Number of heat exchanger</i> (Número de trocadores de calor)
<i>TAC</i>	<i>Total annual cost</i> (Custo total anualizado)
<i>PCS</i>	Poder calorífico superior do combustível de aquecimento do vapor
<i>DWC</i>	Coluna parede dividida

LISTA DE SÍMBOLOS

A_j	Coeficiente matriz tridiagonal, método de ponto de bolha.
A_c	Área da coluna (m^2)
$A_{H,c}$	Área do condensador. (m^2)
$A_{H,r}$	Área do refeedor. (m^2)
B_j	Coeficiente no balanço de matéria modificado
B	Vazão de saída de fundo. ($kmol\ h^{-1}$)
C	Número de componentes da mistura.
C_{cap}	Custo de capital. ($USD\$$)
C_{comb}	Custo do combustível ($USD\$$)
C_f	Correlação de Fair
C_j	Coeficiente matriz tridiagonal, método de ponto de bolha.
C_S	Custos da carcaça cilíndrica. ($USD\$$)
C_{vap}	Custo do vapor
D_j	Coeficiente matriz tridiagonal, método de ponto de bolha.
d	Diâmetro da coluna. (m)
D	Vazão de saída de destilado. ($kmol\ h^{-1}$)
E_j^0	Eficiência dos estágios j. (%)
Fl	Coeficiente de inundação
F_j	Vazão de alimentação no estágio j. ($kmol\ h^{-1}$)
F_S	Parâmetro de correlação ao espaço entre os estágios, determinação de custos
F_m	Parâmetro de correlação para o material, trocadores de calor de carcaça e tubo
$g(X)^2$	Termo de penalidade da função objetivo
H	Altura da coluna (m)
h_j^L	Entalpia do líquido do componente i no estágio j. ($kJ\ kmol^{-1}$)
h_j^V	Entalpia do vapor do componente i no estágio j. ($kJ\ kmol^{-1}$)
$K_{i,j}$	Constante de equilíbrio líquido-vapor do componente i no estágio j
L_j	Vazão de líquido no estágio j. ($kmol\ h^{-1}$)
M_V	Peso molecular da mistura na fase de vapor
N	Número de estágios reais na coluna.
N^T	Número de estágios teóricos na coluna.
P_i^{sat}	Pressão de saturação do componente i. (bar)

$\dot{Q}_B$	Calor adicionado pelo refeedor. ($kJ\ h^{-1}$)
$\dot{Q}_C$	Calor removido pelo condensador. ($kJ\ h^{-1}$)
r	Razão de refluxo do condensador.
s	Razão de refluxo do refeedor.
T_D	Temperatura do destilado (K)
T_{in}^{cw}	Temperatura de entrada do líquido de esfriamento no condensador (K)
T_j	Temperatura no estágio j. (K)
T_{out}^{cw}	Temperatura de saída do líquido de esfriamento no condensador (K)
T_{stm}	Temperatura de entrada do vapor com refeedor. (K)
U_{cond}	Coeficiente de troca de calor no condensador. ($W\ m^{-2}K^{-1}$)
U_j	Vazão de saída lateral de líquido no estágio j ($kmol\ h^{-1}$)
U_{ref}	Coeficiente de troca de calor no refeedor. ($W\ m^{-2}K^{-1}$)
V_j	Vazão da fase de vapor no estágio j. ($kmol\ h^{-1}$)
W_j	Vazão de saída de vapor no estágio j ($kmol\ h^{-1}$)
W_r	Fluxo de fluido de aquecimento refeedor. ($kg\ h^{-1}$)
$x_{i,B}$	Fração molar de líquido do componente i do fundo.
$x_{i,D}$	Fração molar de líquido do componente i do destilado da coluna j.
$x_{i,j}$	Fração molar de líquido do componente i no estágio j.
$y_{i,j}$	Fração molar de vapor do componente i no estágio j.
z_i^F	Fração molar de líquido do componente i na alimentação.

SÍMBOLOS GREGOS

α_{ij}	Volatilidade relativa entre os componentes ij da mistura
τ	Convergência método ponto de bolha (%)
ρ_v	Densidade da fase de vapor da mistura ($kg\ m^{-3}$)
ρ_l	Densidade da fase líquida da mistura ($kg\ m^{-3}$)
ΔH_{stm}	Entalpia de vaporização do médio de aquecimento no refeedor. $kJ\ kmol^{-1}$
σ	Tensão superficial da mistura ($dyn\ cm^{-1}$)
μ	Viscosidade da mistura (cP)
ϕ	Elementos fora da diagonal da matriz esparsa

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	20
1.1	Motivação.....	20
1.2	Justificativa	21
2	OBJETIVOS	22
3	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	23
3.1	Estudo das sequências de separação	23
3.1.1	Generalidades.....	23
3.1.2	Sequências convencionais de separação.....	25
3.1.3	Colunas de destilação complexas.....	26
3.1.3.1.1	Coluna com saída de vapor lateral.....	27
3.1.3.1.2	Coluna com produtos laterais.....	27
3.1.3.1.3	Coluna com pré-fracionador	28
3.1.3.1.4	Coluna termicamente acoplada. Petlyuk.....	28
3.1.3.1.5	Equipamento com paredes divididas.....	29
4	MATERIAIS E MÉTODOS	30
4.1	Caracterização das variáveis do modelo	30
4.1.1	Variáveis independentes.....	31
4.1.2	Restrições do modelo	31
4.1.2.1.1	Equações fundamentais	31
4.1.2.1.2	Restrições operacionais	31
4.2	Métodos aproximados de projeto de colunas de destilação únicas.....	31
4.2.1	Método de valor de fronteira	32
4.2.1.1.1	Balanco de matéria em um estágio de destilação genérico	32
4.2.1.1.2	Equilíbrio vapor líquido	32
4.2.1.1.3	Divisão de uma coluna de destilação com uma alimentação.....	33
4.2.1.1.4	Balancos efetuados na zona de retificação	34
4.2.1.1.5	Zona de esgotamento.....	34
4.2.2	Métodos curtos.....	35
4.3	Métodos rigorosos de simulação para colunas de destilação	37
4.3.1	Método de ponto de bolha para uma coluna convencional.....	37
4.3.1.1.1	Algoritmo de matriz tridiagonal	39

4.3.1.1.2 Balanço de energia.....	41
4.3.2 Método de ponto de bolha para coluna termicamente acoplada	42
4.3.2.1.1 Balanço de matéria global na sequência termicamente acoplada	43
4.3.2.1.2 Balanço dos estágios internos por componente.....	44
4.3.2.1.3 Geração dos coeficientes da matriz esparsa	45
4.3.2.1.4 Coeficientes dos elementos tridiagonais	46
4.3.2.1.5 Elementos fora da diagonal.....	46
4.3.2.1.6 Balanço de energia.....	47
4.4 Métodos rigorosos de dimensionamento de uma coluna	48
4.4.1 Custo total anualizado, função objetivo.	48
4.4.2 Otimização	48
4.4.3 Propósito do uso de restrições com penalidade	49
4.5 Método de projeto de sequências de colunas de destilação ou de projetos não convencionais.....	49
4.5.1 Otimização das sequências convencionais	49
4.5.1.1.1 Problema combinatório.....	50
4.5.2 Otimização de uma sequências termicamente acopladas.....	51
4.5.2.1 Métodos curtos.....	52
4.5.2.1.1 Método Aminnudidim.....	52
4.5.2.1.2 Método Cerda-Westerberg	53
4.5.2.2 Métodos rigorosos.....	55
4.5.2.2.1 Problema combinatório.....	55
5 RESULTADOS E DISCUSSÃO	57
5.1 Caso de estudo.....	57
5.2 Graus de liberdade para sequências convencionais e configuração termicamente acoplada	57
5.2.1 Graus de liberdade de sequências convencionais.....	57
5.2.2 Graus de liberdade para uma coluna termicamente acoplada	59
5.3 Factibilidade da separação	62
5.3.1 Razão de refluxo mínima	63
5.4 Análise de sensibilidade com método de valor de fronteira para as sequências convencionais.....	64
5.4.1 Parâmetros de inicialização	64

5.5	Validação dos métodos rigorosos para uma coluna convencional e para uma sequência termicamente acoplada, DWC.	67
5.5.1	Coluna convencional	67
5.5.2	Solução simultânea de sequências de separação	68
5.5.3	Coluna termicamente acoplada	70
5.6	Otimização das sequências convencionais de separação	73
5.6.1	Influência das penalidades na convergência da função objetivo	73
5.6.2	Incidência do valor inicial	74
5.6.3	Determinação da sequência com mínimo custo total anualizado	75
5.6.4	Numero de estágios	77
5.7	Otimização em sistemas termicamente acoplados.....	79
5.7.1	Incidência dos valores iniciais das vazões nas conexões, saídas de produto e razão de refluxo.....	79
5.7.2	Custo de capital e custo de operação.....	81
5.7.2.1.1	Consumo de energia	81
5.8	Comparação da otimização	81
6	CONCLUSÕES	84
	BIBLIOGRAFIA.....	86
	APÊNDICE A. MODELOS DE DIMENSIONAMENTO DE COLUNAS DE DESTILAÇÃO	90
	APÊNDICE B. PROGRAMAS PARA SEQUÊNCIAS CONVENCIONAIS E COLUNA COM PAREDE DIVIDIDA.....	97
	APÊNDICE C. RESULTADOS PARA UMA OTIMIZAÇÃO COMBINATÓRIA EM UMA CONFIGURAÇÃO DWC.....	116

1 INTRODUÇÃO

1.1 Motivação

O processo de destilação é uma operação unitária usada amplamente para a separação de múltiplos componentes com um alto consumo de energia, e uma baixa eficiência termodinâmica (GUTIERREZ, SEGOVIA, & HERNANDEZ, 2008). Pelo qual existe interesse em desenvolver novas configurações com a capacidade de diminuir e melhorar o uso da energia.

Um projeto efetivo de sistemas de separação é uma tarefa crítica de projeto de processos. Apesar de que nos últimos anos ter havido importantes avanços em novas tecnologias neste contexto, a destilação continua sendo a técnica de separação mais importante na indústria de processos químicos. A destilação com integração térmica tem sido proposta como uma alternativa promissora à destilação convencional devido à economia importante de energia e de capital de alguns destes projetos em comparação com os convencionais (KAIBEL, 2010).

Dentro da destilação convencional, existem sequências diretas e sequências indiretas, para uma separação de uma mistura multicomponente. Estas sequências se caracterizam por colunas com pares de trocadores de calor, e tem apenas 2 saídas laterais, no topo e no fundo da coluna. No entanto, para diminuir os custos de operação e de capital, a proposta de uma coluna com parede dividida tem sido estudada. Ela consiste em uma coluna que tem uma lâmina metálica que divide os seus diferentes estágios, usando apenas um condensador e um refeedor para a troca de calor dentro da coluna, além de saídas laterais.

Há, atualmente, por volta de 30 processos industriais (CABALLERO, 2004), usam colunas com paredes divididas (DWC, *divided wall columns*). Mais ainda, existe uma grande variedade de possibilidades que podem produzir economias de capital e de energia, especialmente para misturas contendo mais do que três componentes.

Neste contexto, é preciso encontrar uma sequência de destilação que satisfaça um ou mais objetivos desejados, minimizando o consumo de energia e os custos de capital. Principalmente, em misturas com mais do que 3 componentes, deve-se encontrar a melhor configuração, entre varias, para satisfazer os requisitos de

economia energética, sem aumentar a complexidade de operação nem o custo do processo.

No capítulo 3 é apresentada uma revisão do problema da separação de misturas multicomponentes, com uma descrição das tecnologias tradicionais baseadas em sequências de colunas e de sistemas de destilação não convencionais com integração de calor. Também são descritas as metodologias para projeto destas sequências.

No capítulo 4 é efetuada uma descrição dos métodos abordados neste trabalho. Primeiramente são descritos os métodos não rigorosos: o método de valor de fronteira e os métodos curtos. Posteriormente são descritos os métodos rigorosos de projeto de sequências de destilação através da otimização de um objetivo econômico que corresponde ao custo total anualizado.

No capítulo 5 são apresentados os resultados obtidos do trabalho, a factibilidade de separação da mistura ternária da mistura Benzeno, Tolueno, *p*-Xileno, são analisados os graus de liberdade, estabelecendo as variáveis de projeto, e são apresentados os resultados das otimizações combinatórias para as configurações convencionais e a coluna com parede dividida.

No capítulo 6, são apresentadas as conclusões do trabalho, quanto à aplicabilidade dos modelos nas sequências convencionas de separação e para as colunas de parede dividida.

1.2 Justificativa

Por outro lado, neste trabalho descreve-se e desenvolve-se uma alternativa para a determinação do processo de separação de uma mistura ternária, ótimo em termos de custos, para diferentes condições de alimentação em sequências convencionais, direta e indireta, comparando-as com a coluna de destilação com parede dividida.

O problema de projeto é tratado como um problema de otimização não linear, com o custo total anualizado como função objetivo.

2 OBJETIVOS

O objetivo geral deste trabalho é estabelecer uma comparação dos arranjos ótimos para a separação de uma mistura com 3 componentes através de um sistema de destilação sequenciado, e de um sistema de destilação com integração energética.

Para tal será estudada a separação de uma mistura ternária, Benzeno, Tolueno e p-Xileno com três composições diferentes. Inicialmente será realizada uma análise de graus de liberdade para as diferentes configurações estudadas.

O projeto conceitual do processo será realizado, para inicializar o método rigoroso, para ser submetido a uma otimização através de programação matemática do problema de projeto, para no fim estudar a influência das composições da alimentação no custo ótimo de separação das diferentes sequências analisadas.

3 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

3.1 Estudo das sequências de separação

3.1.1 Generalidades

O primeiro sistema conhecido que se refere à integração energética de maneira explícita foi proposto por Wright em 1949, agora conhecido como destilação com paredes divididas, e suas bases teóricas estabelecidas por Petlyuk, Platonov, Slavinskii em 1965, (PETLYUK, 2004). Durante as duas últimas décadas, foram desenvolvidos novos conceitos sobre a operação e controle destas colunas e a capacidade de desenvolver modelos de separação mais complexos.

Logo foram apresentadas alternativas factíveis para a configuração de um sistema de destilação termicamente acoplado, onde o calor é fornecido ao sistema por um só refeedor, e o calor removido através de um só condensador simples (AGRAWAL, 1996), cuja sistematização lógica foi proposta, através de equações lineares para seu uso em um ambiente de programação matemática. (CABALLAERO E GROSSMANN, 2001).

Também, tem sido incluídas modificações e melhoras aos sistemas termicamente acoplados, além de esquemas para integração de calor multiefeito e novas regras para a geração de configurações termodinamicamente equivalentes (AGRAWAL, 1999).

Por outro lado, existem estudos para sistemas estendidos a misturas multicomponentes, cujas considerações mostraram que em sistemas termicamente acoplados, sempre se produz uma vazão mais baixa de vapor, em condições de volatilidades relativas constantes e fluxo molar constante (HALVORSEN I., 2003).

Posteriormente, estabeleceu-se que provavelmente, uma das aproximações mais gerais e flexíveis, é o conceito de *Super-tasks* (SHAH, 2002), que foi desenvolvido e usado com uma grande quantidade de alternativas, múltiplas saídas laterais e múltiplas alimentações (SHAH, 2002).

Por outra parte, foi feita uma combinação da lógica e da programação matemática para gerar todas as configurações termodinamicamente equivalentes, para incluir todas as alternativas que estão nos sistemas convencionais para os sistemas termodinamicamente acoplados, expressões matemáticas para calcular o número de

configurações para uma sequência de separações (CABALLERO, REYES-LABARTA, & GROSSMAN, 2003).

Atualmente, existem processos onde este tipo de destilação é aplicado, principalmente na recuperação de solventes. Além disso, é conhecida a obtenção de 1-octeno, a produção de butadieno, através da destilação extrativa (KAIBEL G. A., 2010).

Para uma separação multicomponente, inicialmente o aspecto mais importante é encontrar a sequência de separação ótima identificando diferentes alternativas para um número de componentes de uma mistura determinada, considerando integração energética entre as colunas e sistemas, que vão de sistemas convencionais a sistemas termicamente acoplados.

A melhor sequência ou configuração será aquela que tem menores custos. Do ponto de vista dos custos, os trocadores de calor representam uma quantidade significativa do conjunto completo dentro do equipamento de separação, portanto é desejável estabelecer um sistema, onde o uso destas unidades seja mínimo, que corresponde a 2 trocadores de calor; sendo um refeedor e um condensador, independentemente da quantidade de componentes da mistura (AGRAWAL, 1996).

Esta configuração oferece uma vantagem sobre o sistema convencional, cuja ineficiência produzida pela irreversibilidade termodinâmica durante a mistura das vazões de alimentação com as que vão dentro do equipamento, topo e fundo, é reduzida nestas configurações integradas (OLUJIC, GADALLA, RIJKE, & JANSSENS, 2008).

A possibilidade de uma integração energética depende da presença ou não de trocadores de calor ou aquecedores em estágios intermédios, neste caso, o condensador está associado com o componente mais volátil, e o refeedor com o componente menos volátil. O número mínimo de colunas N está diretamente relacionado com a quantidade de componentes da mistura que se deseja separar NHE , pela equação (1) (AGRAWAL, 1996):

$$2N - NHE_f - 1 \leq \text{No. de separações} \leq N(N - 1) \quad (1)$$

Para um sistema acoplado a energia mínima investida só é garantida para sistemas de $N(N-1)$ seções de coluna. Do ponto de vista das seções, nas colunas tipo Kaibel, elas são projetadas com um número menor do que a quantidade mínima de seções na expressão anterior, onde a vazão de líquido ou vapor é retirada com o componente de volatilidade intermédia, no caso de 3 componentes. (KAIBEL G. , 1987).

3.1.2 Sequências convencionais de separação

Em um sistema de separação convencional, o número de colunas mantém-se mínimo, e somente aumenta por motivos especiais: Equipamento com comprimento maior, ou colunas multi-efeito. Uma das formas sugeridas para encontrar uma sequência de separação, é através de *State task network* (SEM), que é muito intuitivo e útil para entender as diferentes relações entre os diferentes estágios, com o objetivo de produzir separações fatíveis. Sua maior desvantagem, é que aumenta consideravelmente a programação matemática do sistema na medida em que aumentam a quantidade de componentes. Assim, para uma mistura de 4 componentes, há 15 formas de separação, para 5, 35 e para 6, 70. (YEOMANS, 2000).

Alternativamente para colunas convencionais, considera-se a síntese de todas as possíveis sequências de destilação ordinária uma mistura de alimentação multicomponente, a ser separada nos seus produtos finais, podendo ser puros ou misturas multicomponentes. Segundo o número de componentes existe uma relação de geração de número de sequências de colunas convencionais N , que produz produtos P , pelo qual, a determinação do número de sequências para P produtos é obtida através da equação (2).

$$N_S = \sum_{j=1}^{P-1} N_j N_{P-1} = \frac{[2(Prod - 1)]!}{Prod! [Prod - 1]!} \quad (2)$$

Observa-se do resultado desta relação, que o número de sequências aumenta rapidamente, na medida em que o número de produtos aumenta de acordo com o número de componentes na alimentação como se observa na Tabela 3.1. Para um número de 3 componentes na alimentação, existem 2 sequências de separação. A primeira sequência, na qual o produto leveiro é obtido na primeira coluna, dentre as

configurações conhecidas, é a mais amplamente usado. Por outra parte, encontra-se a sequência indireta, menos desejada pela dificuldade de retirada das impurezas dos componentes mais pesados. Figura 3.1. (SEIDER, 1999).

Tabela 3.1- Número de possíveis sequências de separação por destilação convencional		
Número de produtos	Número de separações na sequência	Número de diferentes sequências N_s
2	1	1
3	2	2
4	3	5
5	4	14
6	5	42
7	6	132
8	7	429
9	8	1430
10	9	4862

A. Sequência direta

B. Sequência indireta

Figura 3.1- Sequências de separação para 3 componentes na alimentação.

3.1.3 Colunas de destilação complexas

Além do amplo uso das colunas convencionais, também deve-se considerar as colunas que envolvem uma maior complexidade. Este tipo de colunas caracterizam-se por ter 1 ou mais alimentações e produtos, visando efetuar uma separação eficiente, além disso, são usadas quando a mistura tiver 3 ou mais componentes.

Na Figura 3.2, são apresentadas as configurações de colunas estabelecidas mais usadas.

3.1.3.1.1 Coluna com saída de vapor lateral

Nas figuras 3.2A e 3.2B são apresentadas as colunas ligadas termicamente, que se caracterizam pela eliminação de um dos trocadores de calor intermediários. As colunas de destilação com saída de vapor lateral na zona de retificação, também são conhecidas como sequência direta de separação ligada termicamente. Nesta sequência um refeedor fornece a carga térmica para atingir a separação dos

componentes. Por outra parte, a sequência de destilação com saída de vapor lateral na zona de esgotamento, é conhecida como sequência indireta ligada termicamente. Nesta sequência, é requerido um só condensador para retirar a carga de calor. Estes tipos de sequências se diferenciam das sequências convencionais na redução dos custos em termos de energia e operação. No entanto, para estas configurações é necessário que a coluna principal mantenha uma pressão maior do que a coluna de esgotamento ou de retificação, para manter um fluxo natural entre as duas colunas.

3.1.3.1.2 Coluna com produtos laterais

Nesta configuração, Figura 3.2D, similar a uma coluna convencional, a saída lateral está localizada acima ou embaixo do estágio de alimentação, favorecendo a separação do componente intermédio. Se esta saída estiver acima do estágio de alimentação, há uma maior contaminação dos componentes mais ligeiros, favorecendo uma separação indireta. Caso contrário, se esta saída estiver embaixo do estágio de alimentação, existirá uma interação entre os componentes intermédios com os pesados, favorecendo uma separação direta. (DOHERTY, 2001).

A. Destilação com saída de vapor lateral na zona de retificação

B. Destilação com saída de vapor lateral na zona de esgotamento

C. Destilação com pre-fracionador

D. Destilação com saída lateral intermédia

E. Sistema térmicamente acoplado.
Coluna Petlyuk

F. Coluna com parede dividida.

Figura 3.2- Configurações de colunas complexas para destilação ternária

3.1.3.1.3 Coluna com pré-fracionador

Esta configuração, figura 3.2C, tem um pré-fracionador e uma coluna principal. No pré-fracionador é realizada a separação dos componentes, leve e pesado, com o componente intermediário distribuído entre eles. Após ter sido efetuada esta separação, na coluna principal são obtidos os produtos, destilado; corrente lateral e fundo. A quantidade de energia utilizada nesta sequência é menor, causada pela distribuição prévia no pré-fracionador, contribuindo para uma maior facilidade de separação dos componentes.

3.1.3.1.4 Coluna termicamente acoplada. Petlyuk

Se forem eliminados os trocadores intermediários da coluna com pré-fracionador, e colocando refluxos no seu lugar, podem-se integrar termicamente, Figura 3.2E. Inicialmente, no pré-fracionador são separados, o produto de topo, que é enviado para a parte superior, enquanto o pesado ao fundo. Por outro lado, os demais componentes distribuem-se através das secções. Estes sub-produtos, gerados no pré-fracionador, são enviados à coluna principal, ingressando em estágios intermediários, cuja separação dos componentes puros, finalmente é efetuada (SEIDER, 1999).

Além do mais, existem avanços na operabilidade e controle destes equipamentos sob mínimo consumo de energia (WOLFF & SKOGESTAD, 1995)

3.1.3.1.5 Equipamento com paredes divididas

Este equipamento possui uma partição vertical com uma lâmina plana, Figura 3.2F, também, é possível isolar o equipamento termicamente, especialmente se forem requeridos produtos com alta qualidade, para evitar o fluxo de líquido indesejado na parede. Usualmente, a colocação da parede está no centro do equipamento, embora seja possível colocar a parede fora do centro deste, nos casos em que a concentração do produto intermediário entre os componentes de maior e menor volatilidade, seja menor (KAIBEL, 2010).

A vantagem das colunas termicamente acopladas, é que podem operar a diferentes pressões, se cada coluna estiver com um condensador e um refeedor.

Na destilação convencional, cada coluna tem um intervalo de pressões, às quais podem trabalhar. No entanto, as colunas de paredes divididas, somente podem trabalhar com uma única pressão de operação. Como consequência, resulta em uma maior diferença de temperatura entre o refeedor e o condensador.

Se não existir um comportamento quase ideal da mistura, é preciso utilizar outro tipo de considerações (STICHLMAIR, 1998).

4 MATERIAIS E MÉTODOS

As equações do modelo, dependendo do grau de detalhe incluído nas considerações do modelo e a complexidade do processo, são em grande quantidade.

Inicialmente é efetuada a caracterização das variáveis do processo para uma separação por meio de colunas de destilação, visando a entender e resolver a especificação do sistema.

Posteriormente, são apresentados os diferentes métodos de resolução de colunas de destilação, uma descrição dos métodos curtos e dos métodos mais rigorosos, como o de ponto de bolha, são desenvolvidas as diferentes equações que descrevem os balanços de matéria e energia, e o equilíbrio, tanto para as sequências convencionais, quanto para a configuração termicamente acoplada e adaptação para esta configuração.

Posteriormente são descritos e estabelecidos os problemas de otimização para as sequências convencionais e a configuração termicamente acoplada, as restrições que estão envolvidas no projeto da separação, e a avaliação de diferentes combinações relacionadas com as variáveis inteiras, alcançando a minimização do custo total anualizado.

4.1 Caracterização das variáveis do modelo

O modelo matemático para desenvolver o processo de uma sequência convencional direta ou indireta, baseia-se nos balanços de energia, massa e de equilíbrio vapor-líquido. Inicialmente, será feito uma análise de graus de liberdade, estabelecendo as variáveis do projeto. Por outra parte, serão calculados os estágios da região da zona de retificação, considerando o estado do destilado, corrente D, bem como, para os estágios pertencentes ao fundo da torre, corrente B.

Para este caso, é necessário achar a distribuição das misturas ternárias dentro da coluna, levando em conta as variações que se apresentam de acordo com os balanços feitos, e conseqüentemente obter os perfis das duas seções assim como a intersecção delas através de diagramas ternários. (DOHERTY, 2001)

Posteriormente, com estes perfis obtidos, serão calculados o número de estágios reais e o estágio ótima de alimentação e seguidamente, os equipamentos de transferência de calor que interagirão dentro deste sistema.

Depois que o dimensionamento de cada um dos equipamentos for realizado, pode-se estimar o custo deles, gerando o custo de instalação e de operação, que serão parte do custo total anualizado, TAC. Esta função será a função objetivo do problema da otimização, para um conjunto de sequências convencionais de separação, indiretas e diretas.

4.1.1 Variáveis independentes

Estas variáveis referem-se às especificações de operação:

- Frações molares da alimentação.
- Temperaturas e pressões

4.1.2 Restrições do modelo

No processo de separação, as restrições apresentadas no modelo, estão classificadas, como restrições matemáticas e operacionais.

4.1.2.1.1 Equações fundamentais

Estas são inerentes ao modelo, para processos de destilação:

- Balanços de equilíbrio.
- Balanços de massa
- Balanços de energia

4.1.2.1.2 Restrições operacionais

Estas restrições estão relacionadas com as características de produção e representam a pureza dos produtos, ou as suas recuperações.

4.2 Métodos aproximados de projeto de colunas de destilação únicas

Apesar de existirem métodos rigorosos de cálculo para problemas de separação por destilação, os métodos aproximados são usados de maneira considerável para vários propósitos, tais como estudos paramétricos para estabelecer condições de projeto, e estudos de processos para sequências ótimas de separação (HENLEY, SEADER, 1981).

Aqui são apresentados os métodos aproximados que são utilizados para projetar a separação de sistemas ternários, o método de valor de fronteira (DOHERTHY, 2001), e o métodos curto de Underwood, Gilliland, Fenske que pode ser aplicados para uma quantidade maior do que 3 componentes..

4.2.1 Método de valor de fronteira

4.2.1.1.1 Balanço de matéria em um estágio de destilação genérico

Segundo o conceito de estagio de equilíbrio, a coluna de destilação é modelada como uma série de estágios em equilíbrio ligados entre si. Dentro de cada estágio assume-se mistura perfeita das fases. As frações molares da espécie i que sai com o fluxo V do estágio n são $y_{i,n}$, e as frações de L são $x_{i,n}$, conforme a Figura 4.1.

Figura 4.1- Seções de coluna de destilação apresentada como uma configuração de estágios no equilíbrio

4.2.1.1.2 Equilíbrio vapor líquido

Neste modelo a desenvolver aplica-se no modelo líquido-vapor, atribui o modelo de gás ideal à fase de vapor e o modelo de solução ideal à fase líquida, dado que para os gases o coeficiente de fugacidade é igual à unidade, mesmo assim como para o coeficiente de atividade do líquido. Por tanto a equação de Raoult fica:

$$y_{i,j}P = x_{i,j}P_i^{sat} \quad (3)$$

Em que $y_{i,j}$, corresponde a fração molar de vapor do componente i no estágio j, $x_{i,j}$ é a fração molar de líquido do componente i no estágio j, P_i^{sat} é a pressão de saturação do componente i.

Com esta relação líquido-vapor, se supõe que as vazões que saem do estágio estão em equilíbrio termodinâmico, pelo qual,

$$y_{i,j} = x_{i,j}K_{i,j} \quad (4)$$

Esta relação de equilíbrio calcula-se usando a pressão no estágio Pj, junto com as pressões de saturação do componente i, dadas às condições do estágio.

$$K_{i,j} = \frac{P_i^{sat}}{P} \quad (5)$$

A pressão de vapor pode ser determinar através de coeficientes dados para cada componente, usando-se a equação de Antoine (POLING, PRAUSNITZ, & O'CONNELL, 2001).

$$P_i^{sat}(T_j) = a + \frac{b}{c + T_j(K)} \quad (6)$$

Inicialmente os modelos utilizados para este tipo de configuração baseiam-se nos balanços de massa, energia e equilíbrio.

No desenvolvimento do modelo, os balanços efetuados nos estágios que pertencem à zona de retificação, são feitos levando em conta as vazões parciais no destilado D, enquanto os balanços efetuados na zona de rejeição, são efetuados levando em conta as vazões parciais no fundo, B.

4.2.1.1.3 Divisão de uma coluna de destilação com uma alimentação

Este tipo de coluna pode-se dividir em três secções ou zonas: o estágio de alimentação, a zona de retificação e a zona de esgotamento. A zona de alimentação é aquela onde ingressa a vazão da alimentação, a zona de retificação está localizada acima do estágio de alimentação, e a zona de esgotamento, localizada abaixo de ela.

4.2.1.1.4 Balanços efetuados na zona de retificação

Os balanços de matéria no estágio n efetuados dentro da zona de retificação da coluna estão estabelecidos da seguinte maneira:

Balanço global da seção:

$$V_{j-1} = L_j + D \quad (7)$$

Balanço por componente

$$V_{j-1}y_{j-1} = L_jx_j + Dx_D \quad (8)$$

Como resultado

$$y_{i,j-1} = \frac{r}{1+r} x_{i,j} + \frac{x_{i,D}}{1+r} \quad (9)$$

Em que $y_{i,j-1}$ corresponde à fração molar do componente i dentro da vazão de vapor que entra ao estágio j, $x_{i,j}$ corresponde à fração molar de i que deixa o estágio j, $x_{i,D}$, corresponde às frações molares do componente i no destilado, r corresponde à razão de refluxo molar entre o líquido que sai do estágio L_n , e o fluxo de destilado D.

$$r = \frac{L_j}{D} \quad (10)$$

$$r + 1 = \frac{V_j}{D} \quad (11)$$

As composições das frações de vapor que ingressam à etapa devem satisfazer o princípio de fração molar

$$\sum_{i=1}^n y_i = 1 \quad (12)$$

As demanda de calor no condensador total é determinada a partir do balanço de energia em volta desta unidade, para estabelecer a demanda de energia do condensador em função da razão de refluxo, além da vazão do destilado.

$$V_n h_j^V + \dot{Q}_C = L_{j+1} h_{j+1}^L + D h_D^L \quad (13)$$

$$V_j h_j^V + \dot{Q}_C = h_D^L (L_{j+1} + D) \quad (14)$$

$$\dot{Q}_C = D [h_D^L (r + 1) - h_j^V (r + 1)] \quad (15)$$

$$\dot{Q}_C = D [(r + 1) (h_D^L + h_j^V)] \quad (16)$$

Em que h_D , é a entalpia molar do destilado, h_j^V , entalpia molar que entra ao condensador, $\dot{Q}_C$ representa a energia removida no condensador.

4.2.1.1.5 Zona de esgotamento

O balanço por componente no estágio é efetuado a um balanço similar à zona de retificação

Balanço global da seção:

$$L_{j+1} = V_j + B \quad (17)$$

Balanço por componente

$$L_{j+1}x_{j+1} = V_j y_j + Bx_B \quad (18)$$

Como resultado

$$x_{i,j+1} = \frac{L_{j+1}}{V_j} y_{i,j} + \frac{B}{V_j} x_B \quad (19)$$

Analogamente como na seção de retificação, as composições das frações de líquido que ingressam ao estágio n devem satisfazer o princípio de fração molar.

$$\sum_{i=1}^n x_{i,j+1} = 1 \quad (20)$$

Existe uma relação entre o refluxo no condensador e no refeedor através do balanço de energia, pela condição da alimentação, e a separação desejada.

$$\dot{Q}_B = D h_D^L + B h_B^L - F h_F - \dot{Q}_C \quad (21)$$

O refeedor fornece um fluxo de vapor no fundo da coluna. O produto é muitas vezes removido como líquido. Este fluxo de vapor gerado está relacionado ao fundo e os fluxos internos estão relacionados à razão externa de refluxo s , gerado neste equipamento.

$$s + 1 = \frac{V}{B} \quad (22)$$

Efetuada um balanço de energia no refeedor, é possível determinar s_m , fixando-a como uma função objetivo.

$$\frac{\dot{Q}_B}{B} + \frac{s}{1+s} + h_{j+1}^L - s h_j^V - h_B = 0 \quad (23)$$

Posteriormente mudando o balanço por componente de entrada do líquido em cada estágio, em função da razão de refluxo no refeedor, fica:

$$x_{i,j+1} = \frac{s}{1+s} y_{i,j} + \frac{x_{i,B}}{1+s} \quad (24)$$

4.2.2 Métodos curtos

Os métodos curtos são usados principalmente para uma aproximação do projeto de colunas de destilação (SEADER, 1981). Estes métodos ajudam significativamente na simplificação do cálculo dos diferentes parâmetros da torre. Estes métodos tem o problema de precisão, embora seus resultados sejam bastante adequados. Sua aplicação é uma boa alternativa se não se tiver um método rigoroso disponível ou tempo suficiente para programá-lo.

A equação de Fenske determina o número de estágios necessárias na coluna para alcançar uma determinada separação. Este número de estágios corresponde a uma

razão de refluxo total na coluna. Para usar esta equação, são indicados os componentes chave, leve i e pesado j, além da sua distribuição no primeiro e ultimo estágio da coluna, também a volatilidade relativa entre ambos componentes, constante ao longo da coluna, de acordo com a equação (25).

$$N_{min} = \frac{\log \left[\left(\frac{x_{i,1}}{x_{i,N+1}} \right) \left(\frac{x_{j,1}}{x_{j,N+1}} \right) \right]}{\log \alpha_{i,j}} \quad (25)$$

Em que a volatilidade relativa média na coluna entre os componentes chave leve e chave pesado $\alpha_{i,j}$ é calculada como a média geométrica das volatilidades relativas entre os componentes i e j no primeiro e último estágio da coluna:

$$\alpha_{i,j} = \left[(\alpha_{i,j})_N (\alpha_{i,j})_1 \right]^{1/2} \quad (26)$$

E equação (26), pode-se obter a distribuição dos componentes (i) não chaves no destilado (D) e no fundo (B), como é apresentado nas equações (27) e (28).

$$b_i = \frac{f_i}{1 + \frac{d_{HK}}{b_{HK}} \alpha_{i,HK}^{N_{min}}} \quad (27)$$

$$d_i = \frac{f_i \frac{d_{HK}}{b_{HK}} \alpha_{i,HK}^{N_{min}}}{1 + \frac{d_{HK}}{b_{HK}} \alpha_{i,HK}^{N_{min}}} \quad (28)$$

Na equação de Underwood, equação (29), é determinada a razão de refluxo mínima na coluna, e corresponde a um número de estágios de equilíbrio infinito, Esta condição impossível de realizar, sendo uma referência para determinar o refluxo com o qual é possível operar a coluna. Para obtê-lo, deve-se resolver de maneira simultânea as equações (29) e (30).

$$1 - q = \sum \frac{\alpha_{i,HK} x_{i,F}}{\alpha_{i,HK} - \theta} = \sum f_i \quad (29)$$

$$\frac{V_{min}}{D} = \sum \frac{\alpha_{i,HK} x_{i,D}}{\alpha_{i,HK} - \theta} = 1 + R_{min} \quad (30)$$

A equação de Gilliland é usada para calcular os estágios da coluna obtendo-se uma vazão real, cujo valor é um múltiplo do refluxo mínimo obtido da equação de Underwood. Esta correlação é mostrada na equação (31)

$$\frac{N - N_{min}}{N + 1} = 1 - \exp \left[\left(\frac{1 + 54,4X}{11 + 117,2X} \right) \left(\frac{X - 1}{1X^{0,5}} \right) \right] \quad (31)$$

$$X = \frac{R - R_{min}}{R + 1} \quad (32)$$

Esta correlação é válida se existirem um número de componentes entre 2 e 11, a pressão for de até 40,82 atm, se a condição térmica q, estiver entre um valor de 0,28 e até 1,42, e a volatilidade relativa entre 1,11 e 4,05.

Da equação de Kirkbride, equação (33), é obtido o estágio de alimentação ótimo, supondo a distribuição ideal dos componentes através da coluna.

$$\frac{N_{Ret}}{N_{Esgo}} = \left[\left(\frac{x_{F,HK}}{x_{F,LK}} \right) \left(\frac{x_{B,LK}}{x_{D,HK}} \right) \left(\frac{B}{D} \right) \right]^{0,206} \quad (33)$$

Porém, se a zona inferior possuir mais estágios do que a zona superior, a solução perde precisão, por que a razão de refluxo no reboiler não é considerada importante no projeto da coluna.

4.3 Métodos rigorosos de simulação para colunas de destilação

Estes métodos se caracterizam pela complexidade, na predição de propriedades. São necessários para o projeto final do equipamento, obtendo dados com maior exatidão sobre o processo. Nestes métodos são aplicados os balanços de matéria, energia, e equilíbrio, nos estágios da coluna. Sua complexidade provém principalmente das não linearidades e da sua grande interação. Estes métodos estão incluídos dentro dos programas de simulação de processos.

4.3.1 Método de ponto de bolha para uma coluna convencional

No desenvolvimento do modelo, na vazão de alimentação, são levadas em conta as fases de vapor e liquido. Principalmente, o equacionamento é baseado em balanços de matéria e as restrições nas composições para as vazões de liquido e vapor que saem dos estágios, os balanços de energia, sem considerar queda de pressão nos estágios.

O método de ponto de bolha permite cálculos rigorosos em uma coluna de destilação, tal como a ilustrada na Figura 4.2.

Figura 4.2- Configuração para cálculo de ponto de bolha, usando multiplas entradas e saídas
Balanço global na coluna sem inclusão dos trocadores de calor

$$\sum_{m=1}^j (F_m + W_m - U_m) + (V_{j+1} - W_{j+1}) = L_j \quad (34)$$

Em que são levadas em conta as fases de liquido e vapor, correspondentes às qualidades da alimentação.

$$F_j = L_j + V_j \quad (35)$$

Balanço por componente no estágio j

$$(L_{j-1} - U_{j-1})x_{i,j-1} + (V_{j+1} - W_{j+1})y_{i,j+1} + (L_j - V_j)z_{Fj} = L_j x_{ij} + V_j y_{ij} \quad (36)$$

Restrições às composições

$$\sum_{i=1}^j y_{ij} = 1 \quad (37)$$

$$\sum_{i=1}^j x_{ij} = 1 \quad (38)$$

Equilíbrio de fases

$$y_{ij} = K_{ij} x_{ij} \quad (39)$$

Onde K_{ij} está relacionado através das pressões de vapor para cada componente equação (5).

Balanco de energia no estágio j

$$(L_{j-1} - U_{j-1})h_{i,j-1}^L + (V_{j+1} - W_{j+1})h_{i,j+1}^V + (L_j - V_j)h_{Fj} + \dot{Q}_j = L_j h_{i,j}^L + V_j h_{i,j}^V \quad (40)$$

Queda de pressão no estágio

$$P_j = P_{j-1} + \Delta P_j \quad (41)$$

$$\Delta P_j = 0$$

Posteriormente, as equações de balanço de matéria são modificadas, mudando uma das somatórias de composições equações (7) e (8), e também, determinando as vazões de liquido em função das vazões de vapor e as temperaturas nos estágios, onde posteriormente. As diferentes equações de fração molar na fase liquida, serão linearizadas, usando o algoritmo de Thomas, os balanços no estágio j são estabelecidos da seguinte maneira:

$$L_{J,K} = R * D + \sum_{i=1}^J (F_i + W_i - U_i) + V_{II} \quad (42)$$

$$L_{J-1,K} = R * D + \sum_{i=1}^{J-1} (F_i + W_i - U_i) \quad (43)$$

4.3.1.1.1 Algoritmo de matriz tridiagonal

No método de ponto de bolha é preciso linearizar as equações de balanço por componente, sendo que as frações molares liquidas são levadas em conta, resolvendo-as através do algoritmo de Thomas ou da matriz tridiagonal.

Na metodologia proposta no desenvolvimento, foram obtidos separadamente, os diferentes balanços nos equipamentos, condensador, refeedor, e coluna. As diferentes equações são apresentadas para a construção da matriz tridiagonal.

Os cálculos dos termos A_j, B_j, C_j, D_j nos equipamentos, estão demonstrados a seguir.

Balanço no condensador total (Figura 4.3).

Figura 4.3- Condensador total, método ponto de bolha

$$B_{J,K} = - \left[L_0 + V_{M,l} + V_{l2} + \sum_{i=1}^J (F_i + W_i - U_i) - V_K K_K \right] \quad (44)$$

$$C_{J,K} = V_{J+1K} K_{J+1K} \quad (45)$$

$$D_{J,K} = -F_{lK} z_{iJK} \quad (46)$$

Balanço nos estágios (Figura 4.4).

Figura 4.4- Balanço estágios internos da coluna

$$A_{J,K} = L_0 + V_{M,J-1} + V_{lJ} + \sum_{i=1}^{J-1} (F_i + W_i - U_i) \quad (47)$$

$$B_{J,K} = - \left[L_0 + V_{M,l} + V_{l2} + \sum_{i=1}^J (F_i + W_i - U_i) - V_K K_K \right] \quad (48)$$

$$\dot{Q}_1 = \left[V_{j+1} - W_{j+1} + \sum_{j=1}^{N-1} F_j - \sum_{j=1}^{N-1} U_j - \sum_{j=2}^N W_j \right] h_j^L - F_j h_f - (V_{j+1} - W_{j+1}) h_j^V \quad (54)$$

$$\dot{Q}_N = \sum_{j=1}^N [(L_j + V_j) h_{Fj} - U_j h_j^L - W_j h_j^V] - \sum_{j=1}^{N-1} Q_j - V_{j+1} h_j^V - L_j h_j^L \quad (55)$$

Onde as vazões de vapor internas da coluna são obtidas na equação (56)

$$V_{j+1} = \left(\sum_{j=1}^{N-1} U_j (h_j^L - h_{j-1}^L) + \sum_{j=2}^N W_j (h_j^V + h_j^L) - \sum_{j=1}^N Q_j - \sum_{j=1}^N F_j h_{Fj} \right) / (h_{j+1}^V + h_j^L) \quad (56)$$

Critério de convergência equação (57)

$$\tau = |T_j^{(K)} - T_j^{(K-1)}| \leq 1E - 6 \quad (57)$$

A Figura 4.6 apresenta o algoritmo de resolução do método de ponto de bolha para colunas de destilação.

Figura 4.6- Algoritmo para o método ponto de bolha

4.3.2 Método de ponto de bolha para coluna termicamente acoplada

No desenvolvimento do projeto de uma coluna termicamente acoplada são determinados os diferentes balanços, energia, matéria e componente, sendo

resolvidas as duas colunas de maneira simultânea. Posteriormente são apresentados os balanços efetuados dentro do sistema de separação termicamente integrado. Para estes balanços, é considerada a coluna principal e a fracionadora.

4.3.2.1.1 Balanço de matéria global na sequência termicamente acoplada

O número de estágios $N1$ corresponde ao número de estágios que estão dentro da coluna principal, e $N2$, aos estágios que estão dentro da fracionadora. Segundo os volumes de controle gerados para esta sequência, na Figura 4.7, as vazões de líquido são obtidas em função das vazões de vapor e das vazões de alimentação. No caso da coluna principal a vazão de líquido está em função das saídas e das entradas nas conexões, além da saída lateral do produto intermédio. Por outro lado, na fracionadora, as vazões internas de líquido são dadas em função das entradas e saídas das conexões com a coluna principal e a vazão de alimentação. No entanto, também é possível adicionar diferentes saídas e múltiplas entradas, no caso de mais do que três componentes. Segundo a configuração efetuada na Figura 4.7, as vazões internas de líquido dentro da coluna são obtidas levando em conta a entrada e a saída das diferentes correntes que estão interagindo em cada seção. Nas equações (58)-(65) estão representados estes balanços.

Figura 4.7- Estrutura de uma coluna termicamente acoplada

- *Balanco de matéria global entre o estágio 1₁ e o estágio M₁₋₁*

$$L_{J-1,K} = R * D + \sum_{i=1}^{M_1-2} (F_i + W_i - U_i) \quad (58)$$

$$L_{J,K} = R * D + \sum_{i=1}^{M_1-1} (F_i + W_i - U_i) \quad (59)$$

- *Balanco de matéria global entre o estágio M₁ e o estágio S₁₋₁*

$$L_{J-1,K} = R * D + \sum_{i=1}^{S_1-2} (F_i + W_i - U_i) + V_{11} \quad (60)$$

$$L_{J,K} = R * D + \sum_{i=1}^{M_1} (F_i + W_i - U_i) + V_{11} \quad (61)$$

- *Balanco de matéria global entre o estágio S₁ e o estágio N₁*

$$L_{J-1,K} = R * D + \sum_{i=1}^{S_1-2} (F_i + W_i - U_i) + V_{11} + L_{N2} \quad (62)$$

$$L_{J,K} = R * D + \sum_{i=1}^{M_1} (F_i + W_i - U_i) + V_{11} + L_{N2} \quad (63)$$

- *Balanco de matéria global entre o estágio 1₂ e o estágio N₂*

$$L_{J-1,K} = U_{M1} + \sum_{i=1}^{N_2-1} (F_i + W_i - U_i) + W_{S1} - V_{11} - L_{N2} \quad (64)$$

$$L_{J,K} = U_{M1} + \sum_{i=1}^{M_1} (F_i + W_i - U_i) + W_{S1} - V_{11} - L_{N2} \quad (65)$$

4.3.2.1.2 Balanco dos estágios internos por componente

Na sequência de separação termicamente acoplada, são considerados 2 tipos de estágios, aqueles onde há uma interação apenas das vazões de liquido do estágio superior, e a vazão de vapor do estágio inferior, como é mostrado na Figura 4-8, e a outra, que consiste, além das interações dos estágios superior e inferior da coluna. Desse modo também de uma interação entre os estágios da coluna pela qual está acoplada, pelo qual há uma vazão a mais, correspondente a uma vazão de liquido ou de vapor segundo a localização na sequência. Se estiver na zona de

esgotamento da coluna principal, então esta vazão encontra-se na fase líquida, caso contrário, se estiver localizada na zona de retificação, a vazão lateral extra, corresponde a uma vazão na fase de vapor. Estes estágios são apresentados na Figura 4.9 até a Figura 4.12. Analogamente à determinação dos balanços por componente na coluna convencional, na coluna termicamente acoplada são efetuados os balanços por componente, onde posteriormente são gerados os coeficientes da matriz esparsa.

Figura 4.8- Estágio interno sem conexões de fluxos laterais

Figura 4.9- Conexão superior da coluna principal

Figura 4.10- Conexão inferior da coluna principal

Figura 4.11- Conexão superior da fracionadora

Figura 4.12- Conexão inferior da fracionadora

4.3.2.1.3 Geração dos coeficientes da matriz esparsa

Segundo os balanços globais efetuados em cada zona da sequência, junto com os balanços por componente nos estágios das colunas, são obtidos os coeficientes

correspondentes aos balanços por componentes, obtendo-se uma relação linear similar à relação gerada nas sequências convencionais. A partir dessas relações linearizadas, serão resolvidos os perfis de composições na fase líquida como é mostrada na equação (66).

$$A_K x_{i,J-1,K} + B_K x_{i,J,K} + C_K x_{i,J+1,K} = D_K \quad (66)$$

4.3.2.1.4 Coeficientes dos elementos tridiagonais

Do balanço por componente no estágio j , equação (67), é possível visualizar a não linearidade desta equação. Para levá-la ao formato da equação (66), são inseridos os balanços globais em cada zona da sequência, equações (58) até (65), como resultado em cada estágio das colunas. Estas transformações estão representadas nas equações (68) até (71). A distribuição destes coeficientes é exatamente igual à distribuição aplicada a uma coluna convencional, obtendo-se uma diagonal principal com o coeficiente $B_{K,J}$, com uma diagonal superior, representada pelo coeficiente $C_{K,J}$, e uma diagonal adjacente inferior, representada pelo coeficiente $A_{K,J}$

$$F_{J,K} z_{I,J,K} + L_{K-I} x_{i,J-1,K} + V_{J+1,K} y_{i,J-1,K} - L_K x_{i,J,K} - V_K y_{i,J,K} = 0 \quad (67)$$

$$A_{K,J} = L_0 + V_{M,J-1} + V_{I,J} + \sum_{i=1}^{J-1} (F_i + W_i - U_i) \quad (68)$$

$$B_{K,J} = - \left[L_0 + V_{M,I} + V_{I2} + \sum_{i=1}^J (F_i + W_i - U_i) - V_K K_K \right] \quad (69)$$

$$C_{K,J} = V_{J+1,K} K_{J+1,K} \quad (70)$$

$$D_{K,J} = -F_{1K} z_{iJK} \quad (71)$$

4.3.2.1.5 Elementos fora da diagonal

Os coeficientes fora da diagonal estão relacionados com as conexões que entram tanto na pré-fracionadora quanto na coluna principal. Estes valores são os termos que não estão especificados na equação da matriz tridiagonal equação (72). Na

Tabela 3.1 são apresentados estes coeficientes para o caso da fracionadora, no estágio 1₂, no estágio N₂, e assim como para os estágios M₁, S₁ na coluna principal.

$$A_K x_{i,J-1,K} + B_K x_{i,J,K} + C_K x_{i,J+1,K} + \phi = D_K \quad (72)$$

Tabela 4.1- Valores dos elementos fora da diagonal		
Estágio J	Valor de ϕ	Colocação na matriz esparsa
M ₁	$V_{12} K_{i,1,2}$	C(1 ₂ ,M ₁)
1 ₂	U_{M1}	A(M ₁ ,1 ₂)
N ₂	W_{S1}	C(N ₂ ,S ₁)
S ₁	L_{N2}	A(S ₁ , N ₂)

Observa-se que dentro da resolução dos balanços efetuados nestes estágios, são gerados os novos coeficientes, para vapor, no caso do estágio S₁ da coluna principal, com a coordenada correspondente ao estágio N₂ da fracionadora, que é W₁, e a fase líquida corresponde a L_{N2}. Na zona superior da sequência, encontra-se U_{M1} na fase líquida e V₁₁ da fase de vapor entre os estágios M₁ da coluna principal e o estágio 1₁ na fracionadora. Finalmente, estas relações são apresentadas na Figura 4-13, correspondente a uma matriz esparsa para esta sequência. Nesta matriz, pode-se identificar que desde I₁ até N₁, estão localizados os estágios da coluna principal, posteriormente desde I₂ até N₂ estão localizados os estágios do fracionador.

Figura 4.13- Matriz esparsa para uma configuração de colunas termicamente acopladas

4.3.2.1.6 Balanço de energia

Para o balanço de energia nesta configuração, a diferença em relação à coluna de separação convencional, está no balanço do refeedor, devido a que são levados

em conta os balanços de entalpia tanto do fracionador quanto da coluna principal, por meio das conexões existentes entre eles, como é observado na equação (72). Já para o balanço no condensador e a obtenção das novas vazões da fase líquida e da fase de vapor, as equações são similares às equações (54) e (56), respectivamente, determinando os coeficientes α_J , β_J , γ_J , que estão em função das entalpias em cada estágio.

Semelhantemente à equação (55), obtém-se a equação (73).

$$Q_{NI} = \sum_{i=1}^J (F_i h_i^F - U_i h_i^L - W_i h_i^V) - \sum_{i=1}^{NI-1} Q_i - \sum_{i=1}^{NI+I+N2} Q_i - V_{N2} h_{N2}^V - L_N h_N^L \quad (73)$$

Para o critério de convergência para a solução da configuração, é aplicada a mesma tolerância estabelecida para uma coluna convencional, como apresentado na equação (57).

4.4 Métodos rigorosos de dimensionamento de uma coluna

4.4.1 Custo total anualizado, função objetivo.

O custo do processo de destilação está relacionado ao consumo de recursos, como água, vapor, o custo de instalação da coluna, componentes internos, instalação dos trocadores de calor, e equipamentos auxiliares.

Neste problema será usado o modelo do *Total annual cost*, TAC (DOUGLAS, 1988)

$$TAC_{Col i} = [2.43 K_{Cap} + 0.19] C_{Cap} + C_{Op} \quad (74)$$

$$TAC_{Total} = \sum_{i=1}^n TAC_{Col i} \quad (75)$$

Em que C_{Cap} , é o custo de capital, correspondente ao custo dos equipamentos, trocadores de calor e coluna, C_{Op} , é o custo de operação, correspondente ao aquecimento e esfriamento do sistema, K_{Cap} , é o fator de ajuste de valor monetário em valor presente, equivalente a $1/4 \text{ ano}^{-1}$.

Este modelo é propício para uma estimativa inicial, que relacionam ambas variáveis de custo. Por tanto, este modelo de custos, é a função objetivo a minimizar.

O cálculo para cada um dos custos está no Apêndice A, onde são determinados o dimensionamento dos equipamentos e o custo de consumo energético.

4.4.2 Otimização

A ferramenta da otimização utilizada para esta avaliação, é a inclusão da função objetivo com penalidade, relacionado com as restrições de pureza nas saídas dos produtos.

Principalmente, o método de penalidade de uma função objetivo não linear é transformar um problema com restrições em uma sequência de problemas sem restrições.

$$\min f(X)$$

Sujeito a:

$$g(X) \leq 0$$

$$h(X) = 0$$

(76)

Função de penalidade

$$\min P(f, g, h, r)$$

Em que $P(f, g, h, r)$ é a função de penalidade, r é um parâmetro de penalidade positivo. Depois da função de penalidade ser estabelecida, é minimizado para uma série de valores que aumentam os valores de r , levando a uma aproximação do valor ótimo do problema com restrições (EDGAR, 1988).

4.4.3 Propósito do uso de restrições com penalidade

Em contraste com outros métodos de otimização, os métodos que envolvem a função de penalidade, resolvem uma sequência de problemas de otimização sem restrições, cuja solução corresponde à solução do problema original de otimização com restrições (GRIVA Igor, 2009). As vantagens do método de penalidade são que ele não requer que as iterações na busca do mínimo local estejam dentro da região factível. Este método foi escolhido pelas características não lineares das restrições, forçando a região de busca na medida em que os pesos dos parâmetros associados às restrições estejam violando as restrições de pureza dos produtos.

4.5 Método de projeto de sequências de colunas de destilação ou de projetos não convencionais

4.5.1 Otimização das sequências convencionais

O objetivo é obter uma pureza de produto na saída de destilado, no caso de uma sequência direta de 99% (molar) de Benzeno na primeira coluna, e de Tolueno na

segunda. Seguidamente, o mesmo procedimento é efetuado para a sequência indireta, cujos produtos desejados, na primeira coluna, correspondem a Tolueno, e o p-Xileno na segunda. Igualmente, a otimização efetuada para cada sequência e características da alimentação é efetuada mudando o número de estágios e os estágios de alimentação de cada coluna, gerando diversas combinações e avaliando a influência delas para cada configuração.

Portanto, segundo esta definição e sob estas considerações a função objetivo, equação (75) fica:

$$\min \quad TAC_{Total} = \sum_{i=1}^n TAC_{Col\ i} + r \sum_{i \in I} g(X)^2$$

Sujeito a: (77)

$$x_{i, Coluna\ 1} \geq 0.99$$

$$x_{i\ Coluna\ 2} \geq 0.99$$

O termo da penalização, $r \sum_{i \in I} g(X)^2$, permite uma convergência atinge a factibilidade da separação.

As variáveis de otimização a serem avaliadas nesta análise são as vazões de destilado e as razões de refluxo das colunas das sequências direta e indireta.

A linguagem utilizada para estas otimizações é o MATLAB, com a função fmincon, sendo a função objetivo com as restrições expressas através de penalidade.

4.5.1.1.1 Problema combinatório

O problema de otimização para sequências convencionais, esta relacionado com 4 variáveis inteiras para as 2 colunas. Estas variáveis são o número de estágios e os estágios de alimentação para cada uma das colunas.

Cada variável é gerada como um vetor de 3 dimensões. Cada um deles é avaliado com os demais conjuntos de variáveis, obtendo-se um problema combinatório, como observado na Figura 4.14. A configuração será otimizada, calculando-se o custo anualizado mínimo. Levando em conta cada conjunto de dados em cada variável, é gerado um conjunto de 81 otimizações para cada situação onde as características da alimentação são especificadas.

Figura 4-14 Geração de uma combinatoria entre as variáveis inteiras de uma sequência convencional

4.5.2 Otimização de uma sequências termicamente acopladas

Segundo os resultados da análise dos graus de liberdade, foram estabelecidas 5 variáveis de projeto a serem submetidos à rotina de otimização, cuja variação é limitada entre limites para a vazão de destilado, e a razão de refluxo. As outras 3 variáveis, conexões laterais, e saída lateral, estão submetidas a restrições relacionadas através dos balanços entre as colunas. Estas considerações permitirão minimizar o custo mínimo em uma coluna com parede dividida.

Seguindo estas hipóteses, o problema de otimização para este sistema é, equação (78).

$$\min \quad TAC_{Total} \quad (78)$$

Com as seguintes restrições relacionadas com a fração molar do componente i nas saídas da coluna principal, equação (79), que correspondem à localização das saídas de benzeno, tolueno, p-Xileno.

$$x_{i_j} \geq 0.99 \quad (79)$$

Com relação às sequências convencionais, na sequência de uma coluna de destilação termicamente acoplada são geradas mais 3 restrições não lineares que relacionam-se com as vazões nas conexões, líquida e vapor, que saem da coluna principal e alimentam a fracionadora. Estas restrições estão diretamente relacionadas com a vazão de destilado e a razão de refluxo da coluna principal determinadas da seguinte maneira:

1. Para a conexão superior, que corresponde à vazão líquida no estágio M_1 , U_{M1} , a restrição é estabelecida na equação (80), com relação à razão de refluxo, r , e a vazão de destilado D .

$$U_{M1} \leq r * D \quad (80)$$

2. A saída lateral, estágio SL, correspondente à vazão líquida do produto intermédio U_{SL} esta sujeita à vazão que provem da conexão superior U_{M1} através da equação (81)

$$U_{SL} \leq r * D - U_{M1} \quad (81)$$

3. Para a conexão inferior, estágio S_1 vazão de vapor W_{S1} que conecta a coluna principal com a fracionadora, se estabelece uma restrição que igualmente esta relacionada com a razão de refluxo r e a vazão de destilado D , em função da vazão interna de vapor dentro da coluna principal pela equação (82)

$$W_{S1} \leq (r + 1) * D \quad (82)$$

4.5.2.1 Métodos curtos

4.5.2.1.1 Método Aminnudim

Inicialmente, é preciso determinar a viabilidade da separação, usando o método de valor na fronteira (DOHERTY, 2001), e aplicando estágios no equilíbrio, são estimados os parâmetros da torre.

Por outro lado, no desenvolvimento deste método, são assumidas duas simplificações; fluxo molar constante, volatilidades relativas constantes. Além disso, a coluna tipo Petlyuk, é calculada assumindo 3 colunas convencionais acopladas entre si, Figura 4.15.

Figura 4.15- Configuração de 3 colunas convencionais. Método de Amminudin

Na coluna principal, as composições do produto intermediário devem satisfazer às condições de obtenção, levando a que o destilado da parte inferior da coluna seja igual ao fundo da coluna superior, além de satisfazer os balanços de matéria.

No desenvolvimento do método, são estabelecidas as restrições não lineares representadas através dos balanços de massa, energia e equilíbrio, e desenvolvido por meio de uma programação não linear, especificando as condições da alimentação, requerimentos de produto, representado como frações de recuperação, além da condição térmica da alimentação. (AMMINUDIN, SMITH, & TOWLER, 2001).

4.5.2.1.2 Método Cerda-Westerberg

O objetivo deste método é encontrar valores aproximados para os diferentes parâmetros de operação na condição limite de refluxo.

As colunas podem ser consideradas como uma serie de separadores interligados que separam os componentes de volatilidades relativas, próximas, obtendo as diferentes relações de refluxo apropriadas para a dita separação, além disso, das outras fracionadoras em que estiverem ligados.

Nas sequências do tipo Petlyuk, o número de parâmetros independentes estão na mesma quantidade que o número de fracionadoras que interagem no sistema. Nesta sequência, o numero de fracionadoras é 3, e 2 são as variáveis independentes neste sistema, Figura 4.16.

e vapor $(V_1 - L_1)$ e $(V_2 - L_2)$, chamado $X_{V,m}$. Se no sistema existirem as condições limite dos fluxos no pré-fracionador, reduzindo RX_L , são gerados zonas *Pinch* ao redor das alimentações dos outros 2 fracionadoras que compõem a coluna principal. Definindo a variável $X_{V,m}$

$$(r'X_V)_m = (r'X_L)_m \left(\frac{D}{B}\right) + q \left(\frac{F}{B}\right) \frac{(L_2 - V_2)_m}{B} \quad (88)$$

Por causa disso, somente 2 parâmetros do sistema são independentes. (CERDA & WESTERBERG, 1981)

4.5.2.2 Métodos rigorosos

4.5.2.2.1 Problema combinatório

O problema de otimização anteriormente estabelecido, é gerado apenas para um determinado número de estágios dentro de cada coluna, um determinado número de estágios de entradas e saídas para cada uma das vazões que estão interagindo entre elas. Porém nesta otimização, os estágios onde estão localizadas as vazões será alterada, visando encontrar uma configuração com o mínimo custo, mostrando-se que a localização destas vazões influi consideravelmente na determinação deste custo mínimo.

Estas variáveis correspondem concretamente às seguintes condições:

- O estagio da conexão superior de liquido que sai da coluna principal até a fracionadora, estágio M_1 .
- O estágio onde está localizada a saída lateral do produto intermédio SL .
- O estagio da conexão inferior do vapor que sai da coluna principal até o prefracionador, estágio S_1 .
- O estágio de alimentação, localizado na fracionadora N_F .
- O número de estágios da coluna principal N_2 .
- O número de estágios da fracionadora N_1 .
- Na mesma maneira que no desenvolvimento das sequências convencionais, cada variável é gerada como um vetor de dimensão 3 em que cada um deles é avaliado com os demais conjuntos de variáveis, obtendo-se uma análise combinatória, cuja configuração será otimizada. Calcula-se o mínimo custo anualizado, levando em conta cada conjunto de dados em cada variável,

sendo gerado um conjunto de 729 otimizações para cada situação em que as características da alimentação são especificadas.

5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

5.1 Caso de estudo

O sistema químico estudado é uma separação ternária (Benzeno, Tolueno, *P*-xileno), com uma fração de recuperação de 99,9% de cada um dos 3 componentes. São estudados três casos com as seguintes características de alimentação, apresentadas na Tabela 5.1:

Tabela 5.1- Características das condições da alimentação			
Vazão de alimentação (kmol/h)	200		
Pressão (bar)	1,01325		
Condição da alimentação	Líquido saturado		
Composições na alimentação (%mol)	Benzeno	Tolueno	<i>P</i>-Xileno
Caso 1	0,8	0,1	0,1
Caso 2	0,1	0,8	0,1
Caso 3	0,1	0,1	0,8

5.2 Graus de liberdade para sequências convencionais e configuração termicamente acoplada

Para estes tipos de separações, com múltiplos estágios, em que existe equilíbrio de fases e componentes é preciso estabelecer o número de variáveis independentes para desenvolver um projeto ótimo.

5.2.1 Graus de liberdade de sequências convencionais

Foi efetuada uma análise de graus de liberdade em um sistema de destilação de sequência direta, que é estruturalmente análogo ao de uma sequência convencional indireta. Esta análise é efetuada inicialmente para cada um dos equipamentos que compõem o sistema de separação, condensador total; refeedor parcial; divisor; estágio de alimentação, seção de retificação e seção de esgotamento.

Para o desenvolvimento efetivo da análise dos graus de liberdade na coluna de destilação, são identificadas as correntes redundantes, onde estão as interconexões de cada parte do equipamento, vazões entre trocadores de calor e coluna, vazões de entrada e saída do estágio de alimentação, e também, as vazões de conexão entre o refeedor e a coluna, identificados na Figura 5.1.

Figura 5.1- Análise de graus de liberdade em uma sequência convencional

Na análise dos graus de liberdade, é determinado o número de variáveis que são levadas em conta para estabelecer o problema de projeto de separação. Isto é analisado para cada equipamento do sistema, condensador, divisor, coluna, reboador, como mostrado na Tabela 5.2.

Tabela 5.2- Variáveis obtidas para coluna com uma alimentação

Equipamento	Graus de liberdade
Condensador total	$C+4$
Divisor	$C+5$
Estágios internos acima da alimentação	$2M_1+2C+5$
Estágio de alimentação	$3C+8$
Estágios intermédios inferiores ao estágio alim.	$2M_2+2C+5$
Reboador parcial	$C+4$
$M_T=M_1+M_2+3$	$2(M_1+M_2-3)+10+31$
Correntes redundantes	$9(C+2)$
Total	$\Sigma(Nv)= 2M_T+C+7$

Em que M_1 , correspnde aos estágios da coluna que estão acima do estágio de alimentação, M_2 são os estágios que estão abaixo do estágio de alimentação e C é o número de componentes da mistura. Por outra parte, na Tabela 5.3, apresenta-se o número de graus de liberdade da sequência completa, coluna 1 e 2, cujas especificações compõem restrições do modelo de otimização, e descritas no modelo matemático. Tais graus de liberdade permitem calcular as diferentes variáveis, após terem sido estabelecidas as especificações do projeto, Tabela 5.4.

Tabela 5.3- Graus de liberdade obtidas para sequência convencional com uma alimentação

Equipamento	Graus de liberdade
Coluna 1	$2M_T+C+7$
Coluna 2	$2N_T+C+7$
Correntes redundantes	$-(C+3)$
Total	$2M_T+2N_T+C+11$

Tabela 5.4- Especificações das variáveis para uma sequência convencional

Variável	Graus de liberdade
Pressão nos estágios Coluna 1	N_T
Pressão nos estágios coluna 2	M_T
Estágios adiabáticos na coluna 1 e 2, exceto nos trocadores de calor	$M_T + N_T - 4$
Corrente de alimentação	$C+2$
Pressão dos divisores	2
Divisores adiabáticos	2
Fase da corrente conexão entre as colunas 1 e 2	1
Total	$2 M_T + 2 N_T + C + 3$

Os graus de liberdade com especificações para 1 sequência convencional são 8. Para o método de valor de fronteira estas variáveis de entrada estão especificadas da seguinte maneira, Tabela 5.5.

Tabela 5.5- Especificação de variáveis em sequências convencionais usando método de valor de fronteira

Variável	Número de variáveis especificadas
Razões de refluxo nas colunas da sequência	2
Frações de recuperação	4
Frações molares nos produtos	2
Total	8

Como variáveis de resposta, no desenvolvimento do método estão o número de estágios, estágio de alimentação, a vazão de destilado e fundo e razão de refluxo como variáveis de entrada para o método rigoroso. Tabela 5.6.

Tabela 5.6- Especificação de variáveis em sequências convencionais usando rigoroso de ponto de bolha

Variável	Número de variáveis especificadas
Número de estágios	2
Vazões de destilado	2
Razões de refluxo	2
Estágios de alimentação	2
Total	8

Por tanto, estes 2 métodos serão complementares, no sentido em que o método rigoroso e o método de valor de fronteira permitirá, através de um valor inicial, otimizar as colunas por meio do método rigoroso, simultaneamente.

5.2.2 Graus de liberdade para uma coluna termicamente acoplada

No projeto de colunas termicamente acopladas, foi realizada uma análise de graus de liberdade visando comprovar que o número de variáveis a serem especificadas seja consistente, observado na Figura 5.2. Aqui, são somados os graus de liberdade

em cada seção da coluna, onde também são eliminadas as variáveis redundantes. Na Tabela 5.7 estão analisados os graus de liberdade para a coluna principal, que inclui os trocadores de calor, o divisor, e os estágios internos. Na Tabela 5.8, estão determinados para a fracionadora, que contém somente os estágios que a compõem.

Figura 5.2- Análise dos graus de liberdade em uma coluna termicamente acoplada

Tabela 5.7- Graus de liberdade para a coluna principal

Equipamento	Graus de liberdade
Condensador total	$C+4$
Divisor	$C+5$
Estágios internos M1	$2(M_1)+2C+5$
Estágio S1 (conexão)	$3C+9$
Estágios internos M2	$2(M_2)+2C+5$
Estágio S2 (Saída lateral)	$2C+7$
Estágios internos M3	$2(M_3)+2C+5$
Estágio S3 (conexão)	$3C+9$
Estágios internos M4	$2(M_4)+2C+5$
Refeedor parcial	$C+4$
$M_T = M_1 + M_2 + M_3 + M_4 + 5$	$2(M_T-5)+19C+58$
Correntes redundantes	$-17(C+2)$
Total	$\Sigma(N_D) = 2 M_T + 2C + 14$

Tabela 5.8- Graus de liberdade para a coluna fracionadora

Equipamento	Graus de liberdade
Estágios internos M1	$2(N_1)+2C+5$
Estágio S1 (Alimentação)	$3C+8$
Estágios internos M2	$2(N_2)+2C+5$
Correntes redundantes	$-4(C+2)$
$N_T = N_1 + N_2 + 1$	$2(N_T-1)+3C+10$
Total	$\Sigma(N_D) = 2 N_T + 3C + 8$

Na análise, as correntes redundantes totais são 25, 17 que corresponde à coluna principal, 4 que estão internamente na fracionadora, e as restantes as conexões.

Para obter uma especificação adequada do sistema, são especificadas as variáveis da Tabela 5.10.

Tabela 5.9- Graus de liberdade para uma sequência termicamente acoplada

Equipamento	Graus de liberdade
Coluna principal	$2 M_T + 2C + 14$
Fracionadora	$2 N_T + 3C + 8$
Estágios redundantes	$-4(C+2)$
Total	$\Sigma(N_D) = 2 M_T + 2 N_T + C + 14$

Tabela 5.10- Especificação de variáveis para uma sequência termicamente acoplada

Especificação de variáveis	Número de variáveis
Pressão nos estágios coluna principal	M_T
Pressão nos estágios fracionadora	N_T
Estágios adiabáticos na coluna principal e fracionadora exceto o refeedor e o condensador	$M_T + N_T - 2$
Corrente de alimentação	$C + 2$
Pressão do divisor	1
Divisor adiabático	1
Fase líquida da saída lateral	1
Total graus de liberdade	11

Ainda faltando 11 variáveis para completar os graus de liberdade, na Tabela 5.9, estão especificadas as variáveis de projeto, cujo propósito será minimizar o TAC dentro da rotina proposta de otimização, usando variáveis de processo, contínuas, como no caso das vazões, razão de refluxo, e as variáveis inteiras, no caso do número de estágios nas colunas e a localização das vazões de entrada, conexões e saída lateral, como são apresentadas na Tabela 5.11.

Tabela 5.11- Especificação de variáveis de projeto para uma coluna termicamente acoplada

Especificação de variáveis	Número de variáveis
Vazão de destilado	1
Razão de refluxo	1
Vazão de líquido na conexão superior da coluna principal	1
Vazão de vapor na conexão inferior da coluna principal	1
Vazão de produto intermédio na saída lateral da coluna principal	1
Número de estágios (Coluna principal e fracionadora)	2
Estágio de alimentação	1
Estágios das conexões na coluna principal	2
Estágio de saída de produto intermédio	1

Na maioria das operações de separação, são conhecidas ou são estabelecidas as variáveis relacionadas com as condições da alimentação, transmissão e troca de calor dentro dos estágios, e também as pressões delas. As outras especificações

podem ser substituídas por outras, porém devem ser matematicamente independentes. Por esse motivo as variáveis que estão especificadas na Tabela 5.11 serão conhecidas ou especificadas. Também existem outras variáveis que também podem ser especificadas, tais como a carga de calor no condensador, no refeedor e vazão máxima de vapor na coluna (SEADER & HENLEY, 1981).

Para este problema, não foram especificadas as cargas de calor no refeedor nem no condensador, devido a que no método de ponto de bolha estas variáveis são dependentes do balanço de energia dentro do sistema. A vazão máxima de vapor não foi levada em conta por duas razões: a primeira, que este problema é um problema de projeto, e a coluna não é uma coluna existente, em funcionamento; além disso, esta variável é uma resposta do método iterativo.

Figura 5.3- Aplicação das variáveis especificadas para os métodos de destilação usados

5.3 Factibilidade da separação

Um problema de separação, no caso de um problema de projeto, as condições da alimentação são fornecidas, e também a fração a ser recuperada em termos de fração de recuperação. Pelo qual, existindo uma informação na distribuição dos produtos dentro da coluna. Uma produção factível refere-se a que sempre é possível atingir uma distribuição do produto, com um número de estágios, e uma razão de refluxo apropriado (AMMINUDIN, et. al, 2001). Esta distribuição dos produtos através da coluna é representada como os perfis de concentração dos componentes da mistura, usando os balanços em cada estágio. Se estes perfis de concentrações se interceptarem, Figura 5.4B, então a produção sob estas condições especificadas são

possíveis de realizar, se não, seria uma separação impossível, como resultado apresentado na Figura 5.4A. (DOHERTY, 2001).

Obtiveram-se os diferentes perfis de concentrações da fase líquida, gerados a partir dos diferentes balanços de energia, matéria, e do equilíbrio líquido-vapor da seção de topo até o estágio de alimentação e da seção de fundo de igual maneira, sendo os perfis destas duas zonas integrados. Uma coluna de separação é fatível se os 2 perfis se interceptarem.

5.3.1 Razão de refluxo mínima

No método de valor de fronteira a representação do refluxo mínimo é aquela onde o ponto pinch do perfil de enriquecimento intercepta em algum ponto o perfil de esgotamento, e a separação é factível com um número infinito de estágios, ilustrado pela Figura 5.5.

Figura 5.5- Refluxo mínimo método valor de fronteira

Este parâmetro será um das restrições do problema de otimização, garantindo uma separação factível.

5.4 Análise de sensibilidade com método de valor de fronteira para as sequências convencionais

5.4.1 Parâmetros de inicialização

A seguir são apresentados os resultados de sensibilidade na sequência, usando diferentes relações de refluxo.

Foi feita uma variação da razão de refluxo para avaliar os efeitos nas demais variáveis dependentes, cargas de calor no refeedor e custo total anualizado, por meio de uma análise de sensibilidade, permitindo obter um valor inicial para a rotina de otimização, cujo objetivo é minimizar o custo total anualizado. Entretanto, nesta análise, foram escolhidos os estágios da coluna e a carga de calor visando observar a incidência geral da razão de refluxo. O comportamento o custo total anualizado em relação a estas variáveis é observado.

Nas Figuras 5.6 estão representadas as cargas de calor em função da razão de refluxo para cada composição da alimentação nas sequências indiretas. Através das relações estabelecidas deste dimensionamento, pode ser observado que existe uma alta dependência na mudança da razão de refluxo, devido a que estes parâmetros, altura e área, serem proporcionais ao fluxo interno de vapor dentro da coluna, que também é determinado por esta relação, através de balanços de matéria.

Nas figuras 5.6 e 5.8, estão representadas as cargas de calor dos condensadores e refeedores das colunas da sequência direta, existindo um acréscimo nas cargas de calor causado principalmente pelo aumento razão de refluxo relacionada através dos balanços de energia no topo e no fundo da coluna.

A. Coluna 1

B. Coluna 2

Figura 5.6- Cargas de calor no condensador em uma sequência de separação convencional indireta

A. Coluna 1

B. Coluna 2

Figura 5.7- Custo total anualizado em uma sequência de separação convencional indireta avaliada a diferentes razões de refluxo

A. Coluna 1

B. Coluna 2

Figura 5.8- Custo total anualizado em uma sequência de separação convencional indireta com diferentes números de estágios

A partir da avaliação preliminar, com o método de valor de fronteira e diferentes condições de alimentação. Além disso, também foram avaliados os diferentes casos nas sequências diretas de colunas de destilação, Tabela 5.12, e as sequências indiretas, Tabela 5.13. Estes resultados obtidos de número de estágios, estágio de localização do estágio de alimentação, usando a análise de sensibilidade, avaliação a razão de refluxo para cada sequência para cada configuração. É observado que o custo total anualizado para uma sequência indireta, quanto P-xileno é abundante, é menor. Em uma sequência direta, o custo é menor quando o Bezeno está em maior abundância.

Tabela 5.12- Resultados preliminares para sequência direta na análise de sensibilidade

	0,1/0,8/0,1	0,8/0,1/0,1	0,1/0,1/0,8
$R_{\min}$ Coluna 1	0,73	0,63	0,24
$R_{\min}$ Coluna 2	0,98	1,29	4,59
Razão de refluxo a TAC mínimo coluna 1	11,5	0,75	5,00
Razão de refluxo a TAC mínimo coluna 2	1,5	1,5	6,5
Custo total anualizado (TAC) na sequência (US\$)	$5,23 \times 10^6$	$2,31 \times 10^6$	$2,34 \times 10^6$
Número de estágios coluna 1	43	36	33
Estágio de alimentação coluna 1	20	26	22
Número de estágios coluna 2	40	43	34
Estágio de alimentação coluna 2	21	21	9

Tabela 5.13- Resultados preliminares para sequência indireta na análise de sensibilidade

	0,1/0,8/0,1	0,8/0,1/0,1	0,1/0,1/0,8
$R_{\min}$ Coluna 1	1,28	0,28	0,81
$R_{\min}$ Coluna 2	2,37	0,30	6,69
Razão de refluxo a TAC mínimo coluna 1	2,7	0,5	1,5
Razão de refluxo a TAC mínimo coluna 2	1,45	0,8	8
Custo total anualizado (TAC) na sequência (US\$)	$2,50 \times 10^6$	$2,13 \times 10^6$	$1,85 \times 10^6$
Número de estágios coluna 1	35	31	38
Estágio de alimentação coluna 1	16	13	12
Número de estágios coluna 2	45	39	29
Estágio de alimentação coluna 2	9	8	11

O projeto conceitual preliminar foi efetuado para determinar as distribuições dos diferentes produtos através da coluna. Com o uso dos diferentes balanços, é possível determinar estágio a estágio as diferentes mudanças das frações molares dos componentes do sistema, como foi apresentado na Figura 5.4 e Figura 5.5.

Uma utilidade deste método é a possibilidade de gerar um projeto conceitual a partir das características conhecidas dos produtos (frações molares de saída). A partir dessas condições são determinados os demais parâmetros de operação, tanto o dimensionamento quanto requerimentos energéticos para atingir uma separação factível. Desta forma foram determinadas as condições térmicas e o número de estágios para cada coluna em cada sequência. Este método permite observar no diagrama ternário o comportamento de cada zona da coluna, mas à medida em que aumentam os componentes da mistura, já não é possível observar graficamente estes comportamentos, e sim por meio de valor de fronteira focado em métodos algébricos. (FIDKOWSKI, 1991).

Para a determinação do refluxo mínimo teve que ser avaliado para achar uma intersecção dos perfis de fundo e topo da coluna de separação,

Por outro lado, a localização do estágio de alimentação torna-se uma variável dependente, representada por meio da intersecção dos perfis das zonas da coluna de separação (DOHERTY, 2001).

Nesta parte de desenvolvimento do projeto conceitual do processo, foi levada em conta a consideração de fluxo molar não constante, cuja particularidade está implicitamente relacionada por meio dos balanços efetuados durante a obtenção destes resultados prévios. Posteriormente, esta particularidade será evitada com o uso do método rigoroso para a resolução da coluna, cujos perfis de vazões de líquido e vapor mudaram conforme as condições dos estágios dentro do equipamento.

5.5 Validação dos métodos rigorosos para uma coluna convencional e para uma sequência termicamente acoplada, DWC.

5.5.1 Coluna convencional

O modelo de ponto de bolha implementado no MATLAB® foi avaliado e testado. Este teste foi feito por comparação com o ASPEN PLUS®, visando garantir uma consistência do modelo. Na Figura 5.9A e B e na Figura 5.10 estão representados os diferentes perfis de frações molares da fase de vapor casos da mistura ternária para a primeira coluna, onde posteriormente, este método será integrado com a rotina de otimização com os parâmetros de entrada do método do valor de fronteira, conforme a Figura 5.3.

A. Perfil de concentrações da fase de vapor obtido no ASPEN PLUS®.

B. Perfil de concentrações da fase de vapor obtido no MATLAB®

Figura 5.9- Perfis de concentrações da fase de vapor para mistura ternária Benzeno, Tolueno, *P*-xileno

Enquanto a isso, foram também avaliados os perfis dos fluxos da fase de vapor, Figura 5.10 A, B, e as vazões de líquido, Figuras 5.11 A e B, cujo resultado será utilizado para efetuar o dimensionamento real dos equipamentos garantindo uma maior exatidão na solução de integração energética, e ponto para o projeto da coluna com parede dividida, fundamentalmente, baseado nestes métodos de colunas de destilação.

A. Perfil de fluxos internos de vapor obtido no ASPEN PLUS®.

B. Perfil de fluxos internos de vapor obtido no MATLAB

Figura 5.10- Vazões internas de vapor na coluna

No método de ponto de bolha, as vazões de líquido e vapor não são constantes, oferecendo uma maior exatidão ao método.

A. Perfil de fluxos internos de líquido obtidos no ASPEN PLUS®. B. Perfil de fluxos internos de líquido obtidos no MATLAB

Figura 5.11- Vazões internas de líquido na coluna

5.5.2 Solução simultânea de sequências de separação

Dentro do problema de colunas de destilação, é levada em conta a resolução global das sequências e obtenção dos perfis internos. Por tal motivo, foi levada em conta uma solução simultânea da sequência termicamente acoplada, para uma diminuição do tempo computacional e poder dessa maneira, efetuar uma otimização com diferentes combinações.

Para chegar neste ponto foi adaptada uma solução simultânea de uma sequência indireta. Necessariamente, foi construída uma matriz esparsa que contém os coeficientes tridiagonais de cada estágio das colunas, sendo o ponto fora da diagonal, correspondente ao fluxo que conecta às 2 colunas, conforme a Figura 4.13. Posteriormente este modelo desenvolvido no software MATLAB® foi validado no software ASPEN PLUS®, e foi visualizada a diferença no tempo de resolução comparado com uma resolução efetuada de maneira sequencial e apresentado na Tabela 5.14. Os resultados dos perfis são apresentados na Figura 5.12.

Apesar de ter sido resolvida as otimizações das sequências convencionais, esta visualização permite entender a maneira de como as sequências mais complexas podem ser resolvidas de uma maneira mais rápida e consistente, medidas no tempo computacional empregado para esta solução, reduziram em 57%, quando comparada com uma solução sequencial das colunas, Tabela 5.14.

A. Coluna 1 da sequência indireta desenvolvida no MATLAB®

B. Coluna 1 da sequência indireta desenvolvida no ASPEN PLUS®.

C. Coluna 2 da sequência indireta desenvolvida no MATLAB

D. Coluna 2 da sequência indireta desenvolvida no ASPEN PLUS®.

Figura 5.12- Perfis de composição da fase de vapor para uma sequência indireta resolvida simultaneamente e validadas no ASPEN PLUS®.

Tabela 5.14- Tempo computacional para uma solução sequencial e simultânea para uma sequência convencional indireta

Tempo computacional solução sequencial (seg)	Tempo computacional solução simultânea (seg)
52.57	22.10

Uma configuração de colunas termicamente acopladas para uma separação ternária, torna-se complexa por causa das conexões das quatro correntes que conectam as diferentes colunas. Usando um método de resolução simultânea, estas limitações são eliminadas, permitindo uma grande flexibilidade. Isto possibilita que nas conexões não sejam especificadas composições nessas vazões (HUTCHINSON et. al., 1974). Por outro lado, uma solução sequencial não é possível, pela dependência das composições gerada através dos balanços por componente, pelo qual a fracionadora não pode ser comparada como um absorvedor e ser simulada antes ou depois de resolver a coluna principal. TOMICH (1970) descreve um modelo de matriz tridiagonal onde a vazão de líquido superior que ingressa à coluna e o

vapor que ingressa pela parte inferior são tratados como correntes de alimentação. São nessas correntes, que se gera essa dependência de composição na coluna principal, pois nelas unicamente são especificadas unicamente as vazões mas não as composições.

5.5.3 Coluna termicamente acoplada

Nos resultados obtidos consideraram-se fluxos molares não constantes a cada iteração. Na Figura 5.13 os diferentes perfis de vazões de líquido e vapor e perfil de concentrações na fase líquida, gerados no MATLAB®, são apresentados, e comparados aos de um modelo de uma coluna de parede dividida no simulador HYSYS®. Os dados de entrada para esta separação estão na Tabela 5-15.

Tabela 5.15- Informação para validação de uma coluna termicamente acoplada	
Parâmetro	Valor
Número de estágios coluna principal	70
Número de estágios da fracionadora	18
Estágio de alimentação na fracionadora	10
Estágio da saída lateral na coluna principal	36
Pressão de operação (bar)	10.5 bar
Composição da alimentação	Benzeno= 0.33
	Tolueno=0.33
	P-Xileno=0.34
Vazão de destilado (kmol/h)	32.19
Razão de refluxo	4.05
Vazão da saída lateral (kmol/h)	32.36
Vazão de líquido lateral no estágio (U_{M1})(kmol/h)	66.44
Vazão de vapor lateral no estágio (W_{S1}) (kmol/h)	115.7

Com estes dados de entrada são gerados os perfis dentro da coluna principal e na fracionadora. Na Figura 5.13 E, F e I e J, é gerado o perfil das vazões de líquido interno tanto na coluna principal quanto na fracionadora.

Dentro da resolução da matriz esparsa mostrada na figura 4.13 é possível resolver simultaneamente as duas colunas, obtendo os perfis de frações líquidas como é mostrado na Figura 5.13 A-D. As das cargas de calor obtidas para o refeedor e o condensador são apresentadas na Tabela 5.16.

A. Perfil de concentrações da fase líquida na fracionadora obtidas no Matlab

B. Perfil de concentrações da fase líquida na fracionadora obtidas no Aspen Hysys

C. Perfil de concentrações da fase líquida na coluna principal obtidas no Matlab

D. Perfil de concentrações da fase líquida na coluna principal obtidas no Aspen Hysys

E. Perfil de vazões internas da fase líquida na fracionadora obtidas no Matlab

F. Perfil de vazões internas da fase líquida na fracionadora obtidas no Aspen Hysys

G. Perfil de vazões internas da fase vapor na coluna principal obtidas no Matlab

H. Perfil de vazões internas da fase vapor na coluna principal obtidas no Aspen Hysys

I. Perfil de vazões internas da fase líquida na coluna principal obtidas no Matlab

J. Perfil de vazões internas da fase líquida na coluna principal obtidas no Aspen Hysys

K. Perfil de vazões internas da fase vapor na fracionadora obtidas no Matlab

L. Perfil de vazões internas da fase vapor na fracionadora obtidas no Aspen Hysys

Figura 5.13 Comportamentos dos perfis dentro de uma coluna termicamente acoplada validada no ASPEN Hysys e MATLAB

Tabela 5.16 Resultados das cargas de calor para uma configuração termicamente acoplada

Equipamento	Carga de calor
Refrervedor KJ/h	4.926×10^7
Condensador KJ/h	4.155×10^7

5.6 Otimização das sequências convencionais de separação

A partir do modelo de cálculo rigoroso da coluna de destilação, método de ponto de bolha, foram incluídas as funções de custos e as propriedades associadas a este algoritmo para a minimização do custo total anualizado (TAC). Foi testada a incidência da rotina de otimização no tempo computacional, o estabelecimento dos valores iniciais das relações de refluxo e vazões de destilado das diferentes sequências de separação.

5.6.1 Influência das penalidades na convergência da função objetivo

Para realizar a otimização das diferentes sequências de separação para diferentes condições de alimentação, estas foram avaliadas mudando o número dos estágios das colunas do sistema e também os estágios de alimentação gerando diferentes combinações. Inicialmente para cada sequência geraram-se 81 combinações que foram tratadas, através de uma otimização com função objetivo com penalidade.

Durante o desenvolvimento da otimização, a função objetivo não estava representadas através de uma função de penalidade, e sim através de restrições para as purezas estabelecidas. A resposta a esta rotina conseguiu atingir um valor mínimo na função objetivo, porém o tempo computacional utilizado para esta convergência foi muito elevado. Por tal motivo foi efetuada uma modificação a partir da inclusão das penalidades à função objetivo, melhorando assim o tempo do cálculo. Na Tabela 5.17 são apresentadas as convergências dos 2 métodos testados para a resolução do problema de otimização.

Tabela 5.17- Resultados das otimizações usando a função objetivo com penalidade, e sem penalidade

Sequência	Frações molares da alimentação	Otimização com penalidade na função objetivo		Otimização sem penalidade na função objetivo	
		TAC $\times 10^6$ (US\$/ano)	Tempo computacional (s)	TAC $\times 10^6$ (US\$/ano)	Tempo computacional (s)
Indireta	0,8/0,1/0,1	2,44	315,06	2,36	3851,96
Indireta	0,1/0,1/0,8	1,88	1698,87	1,82	6391,09
Direta	0,1/0,8/0,1	2,571	1097,46	2,22	2088,97
Direta	0,1/0,1/0,8	2,64	1572,53	2,66	11676,99

Dentro dos resultados obtidos sem a inclusão da penalidade, não foram calculados os gradientes das restrições, motivo pelo qual a rotina de busca do valor ótimo,

utilizou as diferenças finitas. Esta é uma razão possível pela qual não se obteve um bom resultado ao se usar restrições no lugar de penalidades.

5.6.2 Incidência do valor inicial

Estudou-se inicialmente a sensibilidade para diferentes valores iniciais para a rotina de otimização. Foram levados em conta os resultados obtidos durante o desenvolvimento do método de valor de fronteira. Posteriormente, o valor inicial de Razão de refluxo foi introduzido dentro da rotina, esperando-se que atingisse as restrições estabelecidas para a pureza de saída dos produtos nas vazões de saída.

Para este caso inicial, nestas condições, não foi possível atingir as restrições da pureza na saída dos produtos, porque não foi encontrado um ótimo dentro da região viável. Por tal motivo, mudou-se o valor inicial desta variável, de maneira a assegurar que a otimização efetuada estivesse dentro da região viável e que fosse encontrado um custo total mínimo para uma razão de refluxo localizada dentro dos limites estabelecidos. Esta estratégia foi aplicada para as outras sequências avaliadas. Na Tabela 5.18 e Tabela 5.19, são apresentados os diferentes resultados para cada condição da alimentação nas sequências, comparando o valor inicial da otimização com o valor no ponto ótimo atingido, para várias relações de refluxo e vazões de destilado.

Tabela 5.18- Valores dos valores ótimos e os valores obtidos com o método de valor de fronteira para a sequência indireta

Resultado método valor de fronteira						Resultados otimizações combinatória				
Frac. molar alim.	Rel. reflux Col 1	Vaz. Dest. Col 1 (kmol/h)	Rel. reflux Col 2	Vaz. Dest. Col 2 (kmol/h)	TAC X10 ⁶ (US\$/ano)	Rel. reflux Col 1	Vaz. Dest. Col 1 (kmol/h)	Rel. reflux Col 2	Vaz. Dest. Col 2 (kmol/h)	TAC X10 ⁶ (US\$/ano)
0,8/0,1/0,1	2	179,81	9	159,63	4,76	0,41	184,98	0,53	156,38	2,44
0,1/0,1/0,8	2,7	38,54	1,45	20,18	2,50	3,13	38,47	2,25	19,23	1,88
0,1/0,8/0,1	1,5	179,81	8	20,18	4,69	1,20	189,98	9,10	20,68	3,22

Tabela 5.19- Comparação dos valores ótimos com os valores obtidos com o método de valor de fronteira para a sequência direta

Resultado método valor de fronteira						Resultados otimizações combinatória				
Frac. molar alim.	Rel. reflux Col 1	Vaz. Dest. Col 1 (kmol/h)	Rel. reflux Col 2	Vaz. Dest. Col 2 (kmol/h)	TAC X10 ⁶ (US\$/ano)	Rel. reflux Col 1	Vaz. Dest. Col 1 (kmol/h)	Rel. reflux Col 2	Vaz. Dest. Col 2 (kmol/h)	TAC X10 ⁶ (US\$/ano)
0,8/0,1/0,1	0,7	161,45	10,5	18,36	1,29	0,79	155,31	8,19	18,58	2,85
0,1/0,1/0,8	5	20,18	6,5	18,36	2,32	3,08	19,28	13,40	18,89	2,64
0,1/0,8/0,1	11,5	20,18	10,5	159,63	2,32	5,34	19,55	1,36	159,69	2,99

Para separações multicomponentes, foi aplicado um procedimento de obtenção de parâmetros preliminares para uma configuração de colunas termicamente acopladas, tipo Petlyuk, tais como número de estágios, valores de limite inferior e superior para relações de refluxo, para serem inseridos dentro de uma otimização com um algoritmo de cálculo da coluna mais rigoroso, com especificações de pureza menores do que 99%. No entanto, no método anterior, em que são feitas as hipóteses de fluxo molar constante ou de volatilidades relativas constantes, o tempo computacional para a convergência numérica do sistema de separação é muito importante, e a consistência da solução pode levar a um resultado não factível ou a um resultado não ótimo. (AMMINUDIN, SMITH, & TOWLER, 2001).

5.6.3 Determinação da sequência com mínimo custo total anualizado

No caso da sequência direta com abundância de benzeno, o aumento nos custos é devido ao aumento do custo de capital que corresponde ao número de estágios necessários para uma separação ótima, apesar da diminuição da carga de calor gerada, conforme pode ser observado na Tabela 5.20

Tabela 5.20- Cargas de calor geradas para os resultados das diferentes sequências.

Sequência direta			
Fração molar alimentação	Carga de calor dos Refrervedores da sequência kj/h	Carga de calor dos Condensadores da sequência kj/h	TAC (US\$/ano)
0,1/0,8/0,1	1,56E+07	1,39 E+07	2,99E+06
0,8/0,1/0,1	1,50E+07	1,42 E+07	2,85E+06
0,1/0,1/0,8	1,41E+07	1,14 E+07	2,64E+06
Sequência indireta			
0,1/0,8/0,1	2,97E+07	2,78 E+07	3,22E+06
0,8/0,1/0,1	1,64E+07	1,56 E+07	2,44E+06
0,1/0,1/0,8	9,86E+06	7,21 E+06	1,88E+06

Figura 5.14- Representação do custo total anualizada em função das cargas de calor

O efeito das cargas de calor no custo total anualizado está relacionado às vazões internas de vapor, que fazem com que o diâmetro das colunas aumente, apesar de

possibilitarem uma maior capacidade de separação, tanto na sequência direta quanto na sequência indireta. Onde está presente uma maior proporção de componente intermédio, este aumento é causado pela separação deste que deve ser efetuada nas 2 colunas para separar este componente do pesado ou do leve.

Alguns exemplos práticos estão relacionados com a condição térmica da alimentação, que depende em grande medida do consumo de energia do refeedor. Outra mudança de processo está altamente relacionada com a razão de refluxo da coluna, onde um aumento na razão de refluxo há uma demanda maior de energia tanto no refeedor quanto no condensador. Como resultado, o fluxo de vapor na seção de fundo da coluna deve aumentar mesmo com as demandas energéticas do condensador. Esta situação, reduz a temperatura de fundo, e portanto existem pequenas possibilidades de uma redução energética. Além disso, o fluxo de vapor na seção de fundo aumenta, pela possibilidade de uma maior temperatura do produto de fundo. (GADALLA, 2005).

5.6.4 Numero de estágios

Desde o ponto de vista do número de estágios, estão apresentados na Figura 5-16, os diferentes comportamentos do custo total anualizado no número de estágios incluídos nas colunas.

Na Figura 5.15 são apresentados os resultados para a sequência indireta com abundancia de P-xileno, segundo as restrições das purezas de cada coluna no fundo. Os parâmetros referentes ao custo total anualizado é menor, são apresentados na Tabela 5.21. Nestes resultados, a convergência de cada um das otimizações efetuadas mudando o número de estágios e o estágio de alimentação, depende de uma maneira muito significativa nos valores das variáveis de projeto, Existe uma mudança, no caso da razão de refluxo e outras fixas como são as condições da alimentação, e no caso do número de estágios para cada caso particular, também, o valor inicial da convergência da otimização efetuada em cada combinação, e a condição numérica, no caso da determinação das derivadas, em cada otimização para cada caso avaliado. (LIMA, 2006).

Figura 5.15- Resultados de TAC com variação do número de estágios na coluna 1, com sequência indireta e abundância em P-xileno (80%) na alimentação (NF, estágio de alimentação e NC, número de estágios)

Tabela 5.21- Parâmetros de projeto para sequência indireta com custo mínimo

Parâmetro	Coluna 1	Coluna 2
Número de estágios	38	30
Estágio alimentação	13	12
Vazão Destilado (kmol/h)	38,47	19,23
Razão de refluxo	3,13	2,25
Altura (m)	30,50	21,99
Carga calor Condensador (kJ/h)	-5,24E+06	-1,96E+06
Carga calor Refervedor (kJ/h)	7,94E+06	1,91E+06
Área Coluna (m ²)	3,05	0,65
Área Refervedor (m ²)	69,70	10,09
Área Condensador (m ²)	36,31	16,72
Custo Capital (US\$/ano)	160,14E+04	51,11E+04
Custo Operação (US\$/ano)	17,90E+04	4,30E+04
Fração molar nas vazões de fundo (restrições)	P-Xileno 0,9900	Tolueno 0,9945
TAC (US\$/ano)	1,88E+06	

5.7 Otimização em sistemas termicamente acoplados

A seguir são apresentados os resultados das diferentes otimizações combinatórias da configuração termicamente acoplada, coluna com parede dividida, apresentados na Tabela 5-22.

Tabela 5.22- Resultados otimização combintaroria DWC

Frações molares da alimentação	Num estágios prefac	Estágio alimentação	Num estágios col principal	Estágio Conexão superior	Estágio Saída lateral	Estágio Conexão inferior	Vazão Destilado (kmol/h)	Razão de refluxo	Vazão de líquido conexão superior (kmol/h)	Vazão saída lateral (kmol/h)	Vazão de vapor conexão inferior (kmol/h)	Fração molar benzeno	Fração molar tolueno	Fração molar P-xileno	TAC X10 ⁶ (US\$/ano)
0,1/0,1/0,8	19	9	43	7	24	36	15	23,37	89,07	15,44	100,86	1,00	0,98	0,99	4,53
0,8/0,1/0,1	31	11	40	11	24	31	154,23	7,97	150,78	20,83	250,71	1,00	0,95	0,99	5,45
0,1/0,8/0,1	38	11	50	19	26	39	19,00	20,20	234,37	144,40	241,61	1,00	0,99	0,99	5,85

Para a obtenção destes resultados as variáveis que estão relacionadas com os estágios, no caso do número de estágios nas colunas, estágio de alimentação, estágio de saída lateral, e os estágios das conexões, são variadas sequencialmente. Isto implica em um problema combinatório, devido a que os valores estabelecidos inicialmente na sequência não correspondem ao valor ótimo, como é mostrado na Tabela 5.23.

Tabela 5.23- Custo total anualizado para os estágios estabelecidos iniciais para uma alimentação com frações molares de 0,1 mol de Benzeno 0,1 mol de Tolueno e 0,8 mol de P-Xileno

Variável	Valores especificados	Valores ótimos
Número de estágios prefacionadora	20	19
Estágio alimentação	10	9
Número de estágios coluna principal	42	43
Estágio de Conexão superior	6	7
Estágio de Saída lateral	25	24
Estágio de Conexão inferior	37	36
TAC X10 ⁶ (US\$/ano)	6,94	4,53

5.7.1 Incidência dos valores iniciais das vazões nas conexões, saídas de produto e razão de refluxo.

Durante o desenvolvimento da rotina de otimização da coluna termicamente acoplada, os valores iniciais das variáveis contínuas, foram especificadas levando em conta as restrições das frações molares nas saídas do sistema, visando facilitar uma convergência dentro da região viável especificadas segundo as restrições. Para as vazões das conexões de líquido e vapor da configuração, existe uma forte sensibilidade com estes valores iniciais. O qual, o valor inicial não pode ser especificado arbitrariamente, devido principalmente às restrições de vazão internas tanto de vapor quando de líquido como foi estabelecida nas restrições de desigualdade, e que são dependentes da vazão de destilado e da razão de refluxo. Por outro lado, existe a possibilidade de não atingir as restrições operacionais de produção, frações molares nas saídas da coluna. Como é apresentado na Figura 5.17 para uma especificação na alimentação com frações molares de 0.1 mol de benzeno, 0.1 mol de Tolueno e 0,8 mol de P-xileno, para esta situação, o valor inicial da Figura 5.16A, é 15,43 kmol/h para a conexão superior e na conexão inferior é 200,86 kmol/h. Pode-se ver como este valor inicial não respeita as restrições de fração molar nos estágios onde estão localizadas as saídas de produto. No entanto, na Figura 5.16B, estes valores no caso da conexão superior é 89,06 kmol/h, e da conexão inferior é 100,86 kmol/h. A incidência do valor inicial das conexões arbitrariamente, não garante obter um custo mínimo.

A. Perfil de concentrações na coluna principal fora das restrições de recuperação nas saídas de produto,

B. Perfil de concentrações na coluna principal dentro das restrições de recuperação nas saídas de produto

Figura 5.16- Perfis de concentração da fase líquida na coluna principal, a diferentes pontos iniciais de otimização

De acordo com esta base, um valor inicial arbitrário destas correntes de conexão gera uma distorção nos perfis de concentrações nas duas colunas. Este comportamento também foi investigado em sistemas onde existem quedas de pressão internas. Foi visto que os valores das vazões nas conexões incidem diretamente nos perfis de concentrações e nesse caso, de pressão interna, em sistemas termicamente acoplados resolvidos mediante métodos rigorosos. (SANGAL, et. al., 2012).

Além disso, as restrições relacionadas com as vazões internas tornam-se sempre ativas, para este sistema, garantindo que não existam vazões internas negativas, o que pode ocasionar uma não convergência na resolução da matriz esparsa em cada avaliação da função objetivo.

5.7.2 Custo de capital e custo de operação

5.7.2.1.1 Consumo de energia

Na Tabela 5.24 são apresentadas as cargas de calor no refeedor e no condensador para uma coluna com parede dividida para os diferentes casos de composições da alimentação.

Tabela 5.24- Cargas de calor para diferentes condições de alimentação em uma configuração termicamente acoplada

Frações molares da alimentação	Carga de calor refeedor kj/h	Carga de calor condensador kj/h
0,1/0,1/0,8	1,12E+07	1,12E+07
0,8/0,1/0,1	1,18E+07	1,24E+07
0,1/0,8/0,1	4,25E+07	4,26E+07

No caso deste problema de separação, a carga de energia foi maior na configuração da coluna DWC do que nos casos de sistemas convencionais, como é apresentado na Tabela 5.20, levando para resultados ótimos maiores nas diferentes frações de alimentação, comparado com a sequência indireta, onde existe uma maior abundância de P-Xileno, Tabela 5.25.

Tabela 5.25- Custos de capital e de operação para diferentes condições de alimentação em uma configuração termicamente acoplada

Frações molares da alimentação	Custo de capital (US\$/ano)	Custo de operação (US\$/ano)
0,1/0,1/0,8	3,34E+06	1,97E+06
0,8/0,1/0,1	4,61E+06	1,77E+06
0,1/0,8/0,1	4,83E+06	2,00E+06

Por outro lado, no cálculo do custo de capital para esta configuração, foi necessário levar em conta esta sequência como é apresentada na Figura 5.2, cujos equipamentos correspondem a 2 equipamentos de troca de calor, representados no estágio 1_1 e N_1 , para que este modelo de custos usado seja adequado para este sistema.

5.8 Comparação da otimização

Os resultados obtidos para cada uma das sequências otimizadas de maneira com diferentes combinações de número de estágios e estágios de alimentação, para o caso de sequências convencionais além do estágio de saída lateral com as conexões, como é a coluna com parede dividida.

Encontrou-se uma diminuição do custo total anualizado de 58,36% quando na alimentação está presente uma maior abundância de componente pesado, p-Xileno, quando separada com uma configuração de colunas de separação de maneira indireta, como é apresentado na Tabela 5-26.

Tabela 5.26- Comparação econômica dos resultados obtidos nas configurações convencionais e termicamente acoplada para uma alimentação 0,1 mol benzeno/0,1 mol Tolueno /0,8 mol p-xileno

Configuração	Núm estágios col. 1	Núm estágios col. 2	Estágio alimentação col 1	Estágio alimentação col. 2	Estágio de saída lateral	Estágio Conexão superior	Estágio Conexão inferior	TAC X10 ⁶ (US\$/ano)	Redução do TAC (%)
Indireta	38	30	13	12	N/A	N/A	N/A	1,88	58,36
Direta	34	33	21	33	N/A	N/A	N/A	2,64	41,71
DWC	19	50	9	N/A	7	24	36	4,53	-

Igualmente, agrupando os resultados das otimizações combinatórias no caso de abundância de benzeno, componente leve, existe uma redução do custo total anualizado de 45,96% quando usado a sequência indireta de colunas de separação, como observado na Tabela 5.27.

Tabela 5.27- Comparação econômica dos resultados obtidos nas configurações convencionais e termicamente acoplada para uma alimentação 0,8 mol benzeno/0,1 mol Tolueno /0,1 mol p-xileno

Configuração	Núm estágios col. 1	Núm estágios col. 2	Estágio alimentação col 1	Estágio alimentação col. 2	Estágio de saída lateral	Estágio Conexão superior	Estágio Conexão inferior	TAC X10 ⁶ (US\$/ano)	Redução do TAC (%)
Indireta	31	40	12	7	N/A	N/A	N/A	2,44	45,96
Direta	50	42	25	20	N/A	N/A	N/A	2,85	36,95
DWC	31	40	11	N/A	24	11	31	5,44	-

Por outro lado, na Tabela 5.28, são obtidos os resultados com o custo total anualizado menor no caso de uma sequência direta quando existe uma grande quantidade do componente intermédio, Tolueno, com uma redução de 33,96%.

Tabela 5.28- Comparação econômica dos resultados obtidos nas configurações convencionais e termicamente acoplada para uma alimentação 0,1 mol benzeno/0,8 mol Tolueno /0,1 mol p-xileno

Configuração	Núm estágios col. 1	Núm estágios col. 2	Estágio alimentação col 1	Estágio alimentação col. 2	Estágio de saída lateral	Estágio Conexão superior	Estágio Conexão inferior	TAC X10 ⁶ (US\$/ano)	Redução do TAC (%)
Indireta	31	40	12	7	N/A	N/A	N/A	3,02	33,33
Direta	43	40	20	21	N/A	N/A	N/A	2,99	33,96
DWC	38	50	11	N/A	26	19	39	5,85	-

Apesar de ter obtido um custo total anualizado maior para as colunas com parede dividida, depois de serem otimizadas as diferentes sequências para diferentes composições da alimentação, existe ainda a possibilidade de que esta configuração leve a um custo menor para determinadas composições da alimentação, ou usando um componente mais abundante em menor proporção dos que foram avaliados neste estudo, mas mais estudos devem ser empreendidos.

6 CONCLUSÕES

Neste estudo verificou-se que para o projeto de separação de uma mistura ternária há 8 graus de liberdade para as sequências convencionais e 11 para uma configuração com parede dividida. Estas variáveis são caracterizadas entre variáveis contínuas; vazões e razão de refluxo, e variáveis inteiras, relacionadas com o número de estágios e a localização de estágios de entrada e saída do processo.

Foi desenvolvido o projeto conceitual das sequências convencionais, resolvido através do método de valor de fronteira, em que foram obtidas as informações de número de estágios e localização dos estágios de entrada e saída destas sequências. Esta informação foi utilizada para inicializar o método de ponto de bolha.

O método de ponto de bolha foi adaptado para o projeto das diferentes configurações, resolvendo os balanços iterativamente, por meio da obtenção da matriz tridiagonal para sequências convencionais, e para uma configuração com parede dividida foi construída uma matriz esparsa, gerando-se elementos fora da diagonal correspondentes às conexões entre as colunas do sistema.

Foram otimizadas configurações, convencionais e com parede dividida, minimizando o custo total anualizado, usando esta função objetivo com restrições de penalidade, permitindo uma convergência a um ponto de mínimo local em um tempo computacional menor do que uma função objetivo sem penalidade, permitindo que sejam efetuadas múltiplas otimizações porque para este projeto estão relacionadas com as diferentes combinações em cada configuração.

Foi observada uma diminuição de 58,36% quando usada uma sequência indireta otimizada combinatoriamente, comparada com os demais resultados das outras configurações estudadas, no caso de uma composição da alimentação do sistema de 0,1 mol benzeno, 0,1 mol Tolueno, 0,8 mol p-xileno. Igualmente para uma composição da alimentação com frações molares de 0,8 mol benzeno, 0,1 mol Tolueno, 0,1 mol p-xileno, a sequência indireta reduz em 45,96% o custo total anualizado mínimo. Para o caso 0,1 mol benzeno, 0,8 mol Tolueno, 0,1 mol p-xileno, a sequência direta reduz o custo total anualizado em 33,96%.

CONTINUIDADE DO TRABALHO

Seria interessante no futuro realizar casos de estudo para misturas não ideais, usando diferentes composições na alimentação, e também com diferentes purezas na saída dos produtos, observando os diferentes comportamentos relacionados com a diminuição de custos e consumo de energia para uma determinada separação.

Uma contribuição interessante seria também analisar outros sistemas de configurações de destilação, analisando as possíveis vantagens que estas configurações puderem oferecer, do ponto de vista econômico.

Outros algoritmos rigorosos de resolução de sistemas de destilação de maneira simultânea, visando reduzir o tempo computacional poderiam ser adaptados facilitando possíveis otimizações e oferecendo uma maior versatilidade frente a outras configurações mais complexas.

Dentro das especificações de sistemas de destilação multicomponente, seria possível estabelecer como variável de projeto, uma diferença de pressão entre as colunas das sequências, estudando a influência que esta variável tem dentro do contexto global das sequências de separação, como uma restrição do problema.

Por fim, seria interessante também considerar outras condições de alimentação, em outras misturas, avaliando a capacidade de encontrar a separação ótima do ponto de vista econômico para uma configuração termicamente acoplada

BIBLIOGRAFIA

- AGRAWAL, R. (1996). Synthesis of Distillation Column Configurations for a Multicomponent Separation. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 1059–1071.
- AMMINUDIN, K. A., SMITH, R. & TOWLER, G. P. (2001). Design and optimization of fully thermally coupled distillation columns. Part 1: Preliminary Design and Optimization Methodology. *Trans IChemE*, 701-715.
- BYRD, H. N. (2007). Steering exact penalty methods for nonlinear programming. *Optimization technology center*, 1-24.
- CABALLERO, J. A., & GROSSMANN, I. (2001). Generalized Disjunctive Programming Model for the Optimal Synthesis of Thermally Linked Distillation Columns. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 2260–2274.
- CABALLERO, J. A., REYES-LABARTA, J., & GROSSMAN, I. (2003). Synthesis of integrated distillation systems. *Computer Aided Chemical Engineering*, 59–64.
- CABALLERO, J. G. (2004). Design of distillation sequences: from conventional to fully thermally coupled distillation systems. *Computers & Chemical Engineering*, 2307–2329.
- CERDA, J., & WESTERBERG, A. W. (1981). Shortcut methods for complex distillation columns. *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.*, 546–557.
- DOHERTY, M. F. (2001). *Conceptual desing of distillation system*. New York: McGraw-Hill chemical engineering series.
- DOUGLAS, J. M. (1988). *Conceptual design of chemical processes*. New York: McGraw-Hill.
- EDGAR, T. F. (1988). *Optimization of chemical processes*. New York: McGraw-Hill.
- EMTIR, M., & ETOUMI, A. (2009). Enhancement of conventional distillation configurations for ternary mixtures separation. *Clean Techn Environ Policy*, 123–131.

Energy, U. D. (2003). *How To Calculate The True Cost of Steam*. Washington D.C.: OIT.

FIDKOWSKI, Z. M. (1991). Nonideal multicomponent distillation: Use of bifurcation theory for design. *American institute of Chemical engineering*, 37, 1791.

FLOQUET, P., PIBOLEAU, L., & DOMENECH, S. (1988). Mathematical programming tools for chemical engineering process design synthesis. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, 99-113.

GADALLA, M. O. (2005). Reducing CO₂ emissions and energy consumption of heat-integrated distillation systems. *Enviromental science and technology*, 6860-6870.

GLINOS, K. N., & MALONE, M. F. (1985). Design of sidestream distillation columns. *Ind. Eng. Chem. Process. Des. Dev.*, 822-828.

GRIVA Igor, N. t. (2009). *Linear and nonlinear optimization*. Philadelphia: SIAM. Society for industrial an applied mathematics.

GUTIERREZ, R., SEGOVIA, J., & HERNANDEZ, S. (2008). Reducing energy consumption and CO₂ emissions in. *Chemical Engineering Research and Design*, 145-152.

HALVORSEN I., S. S. (2003). Minimum Energy Consumption in Multicomponent Distillation. 3. *Ind. Eng. Chem. Res*, 616-629.

HENLEY, E., & SEADER, J. D. (2000). *Equilibrium-stage separatiom operations in chemical engineering*. New York: John Wilwy and sons Inc.

HUTCHISON H.; SHEWCHUK C. A computational method for multiple distillation towers. 52 (1974). 325-336.

KAIBEL, G. (1987). Distillation columns with vertical partitions. *Chem Eng Technol* , 92-98.

KAIBEL, G. A. (2010). Dividing wall columns: Fundamentals and recent advances. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, 139–146.

KING, C. J. (1982). *Separation processes*. New Delhi: McGraw-Hill.

KISS, A. R. (2011). Energy efficient control of BTX dividing wall column. *Computers and chemical engineering*, 2896– 2904.

LIMA, R. S. (2006). Efficient reactive distillation optimization using stochastic optimizers. *Chemical engineering science*, 1718-1739.

LONING, S., C. HORST, C., & HOFFMANN, U. (2000). Theoretical Investigations on the Quaternary System n-Butanol, Butyl Acetate, Acetic Acid and Water. *Chemical Engineering & Technology*, 789-794.

Marshall Swifts Valuation Service. (Abril de 2011). *Chemical engineering*. Fonte: <http://accessintelligence.imirus.com/Mpowered/book/vchem11/i1/p1>

NIKOLAIDES, I. P., & MALONE, M. F. (1988). Approximate Design and Optimization of a Thermally Coupled Distillation with Prefractionator. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 811-818

OLUJIC, Z., GADALLA, M., RIJKE, A., & JANSENS, P. (2008). Enhancing Thermodynamic Efficiency of Energy Intensive Distillation Columns. *Chem. Biochem. Eng. Q.*, 383–392.

PETERS, M., & TIMMERHAUSS, K. (1991). *Plant Design and Economics for Chemical Engineering*. Singapore: McGraw-Hill.

PETLYUK, F. (2004). *Distillation theory and its application to optimal design of separation units*. Cambridge: Cambridge series in chemical engineering.

POLING, B. E., PRAUSNITZ, J. M., & O'CONNELL, J. P. (2001). *The properties of gases and liquids*. New York: McGraw-Hill.

S., H., & HERNANDEZ, G. (2004). Comparison of Energy Consumptions and Total Annual Costs Between Heat Integrated and Thermally Linked Distillation Sequences. *Chem. Biochem. Eng. Q.*, 137-143.

SANDER, S., FLISCH, C., GEISLER, E., SCHOENMAKERS, H., RYLL, O., & HASSE, H. (2007). Methyl acetate hydrolysis in a reactive distillation column. *Chemical Engineering Research and Design*, 149-154.

SCHULTZ, M., STEWART, D., HARRIS, J. M., ROSENBLUM, S. P., SHAKUR, M. S., & O'BRIEN, D. E. (2002). Reduce Costs with dividing-wall columns. *Cep Magazine*, 64-71.

SEIDER, W. D. (1999). *Product and process design principles*. New York: John Wiley and sons Inc.

SHAH, P. B. (2002). New synthesis framework for the optimization of complex distillation systems. *AIChE Journal*, 527-550.

STICHLMAIR, J. (1998). *Distillation: principles and practices*. New York: John Wiley and sons Inc.

TEJA, A. S., & RICE, P. (1981). Generalized Corresponding States Method for the Viscosities of Liquid Mixtures. *Ind. Eng. Chem. Fundam*, 77-81.

TOMICH, J. (1974). A new simulation method for equilibrium stage processes. *AIChE Journal*, 229-232.

U.S. Energy information administration. (2012). *Monthly Energy Review*. Washington D.C.: EIA.

WOLFF, E. A., & SKOGENSTAD, S. (1995). Operation of Integrated Three-Product (Petlyuk) Distillation. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 2094-2103.

YEOMANS, H. G. (2000). Disjunctive Programming Models for the Optimal Design. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 39 (6), 1637-1648.

APÊNDICE A. MODELOS DE DIMENSIONAMENTO DE COLUNAS DE DESTILAÇÃO

Altura

No cálculo da altura, foi usado a descrição empírica de O'Connell, onde estão relacionados, o número de estágios achados no modelo de valor de fronteira N , e o espaçamento entre elas H_t . Esta descrição é levada em conta a eficiência dos estágios,

$$\frac{E_o - a}{1 - a} - \exp\left(-\sqrt{\alpha \frac{\mu}{\mu_0}}\right) = 0$$

$$N - \frac{N^T}{E_j^0} = 0$$

$$H_t = [0.3 - 0.6]$$

$$H_{min} - 3H_t = 0$$

$$H - H_{min} + H_t N = 0$$

Onde a e μ_0 são parâmetros que não têm um significado físico, são valores numéricos para a eficiência. E_o , é a eficiência dos estágios, α , corresponde à volatilidade relativa relacionado com o componente mais pesado, μ é a viscosidade em cP. Na determinação da viscosidade da mistura foi utilizado métodos de contribuição de grupos de componentes, onde estes valores de viscosidade estão em função da temperatura (TEJA & RICE, 1981).

Diâmetro

Para a determinação do diâmetro da coluna, D foi levado em conta no modelo do vapor ao interior, as propriedades da mistura, as condições de operação, através de correlações.

Foi determinada a velocidade de inundação nos estágios, em função das propriedades da mistura, M_V , peso molecular da fase de vapor; ρ_l , ρ_v que são as densidades do líquido e do vapor, respectivamente, além da tensão superficial σ , cujos valores estão em função da temperatura.

$$C_f = \frac{C_0}{1 - C_1 f^{C_2}}$$

$$C_0 = 252 \text{ m/s}$$

$$C_1 = 2,0$$

$$C_2 = 1,0$$

$$Fl = C_f \left(\frac{A_n}{A_m} \right) \left(\frac{\sigma}{\sigma_0} \right)^{0,2} \sqrt{\rho_l - \rho_v}$$

$$A_c = \frac{M_v}{Fl \sqrt{\rho_v}} = 0$$

$$D_c = \sqrt{\frac{4A_c}{\pi}}$$

Onde Fl é o fator de inundação, $\frac{A_n}{A}$, relação entre as áreas, onde é recomendado usar o valor de 0,8 (DOUGLAS, 1988), A_c é a área da coluna.

Modelos de dimensionamento dos trocadores de calor

O tamanho dos trocadores de calor depende principalmente das cargas de calor requeridos para esfriamento e aquecimento, além do coeficiente de transferência de calor. Para o cálculo da área dos trocadores de calor, são calculadas as temperaturas medias logarítmicas:.

$$\Delta T_{avC} = \frac{(T_D - T_{out}^{cw}) - (T_D - T_{in}^{cw})}{\ln \left[\frac{(T_D - T_{out}^{cw})}{(T_D - T_{in}^{cw})} \right]} = 0$$

$$\Delta T_{avR} - T_{stm} - T_B = 0$$

Área do refeedor

$$A_{H,r} - \frac{\dot{Q}_B}{U_{ref} \Delta T_{avR}} = 0$$

Área do condensador

$$A_{H,c} - \frac{\dot{Q}_C}{U_{cond} \Delta T_{avC}} = 0$$

Onde T_D é a temperatura de saída do destilado, T_B temperatura de saída do fundo dos produtos do processo, T_{in}^{cw} , T_{out}^{cw} , são as temperaturas de entrada e saída da água de esfriamento, T_{stm} , é a temperatura de entrada do vapor no refeedor ΔT_{avC} , ΔT_{avR} , são as temperaturas medias logarítmicas do condensador e refeedor, respectivamente, $A_{H,r}$, $A_{H,c}$, são as áreas dos trocadores de calor, refeedor e condensador, respectivamente.

Custos de capital da coluna

Este modelo de custos providencia, a partir de estes fatores, uma correlação para a determinação do custo da carcaça mesmo como o seu interior, para obter o custo total da coluna:

$$C_{col} = C_s + C_t$$

O modelo é sensível a diferentes fatores tais como o diâmetro, a altura, espessura das paredes. A coluna dentro destes modelos é um recipiente a pressão. O custo de instalação inclui material de suporte e aberturas de acesso. (DOUGLAS, 1988).

$$C_s - C_{0,s} \left(\frac{D_c}{D_0} \right) \left(\frac{H}{H_0} \right)^{a_s} = 0$$

$$a_s = 0.82$$

Onde C_s , corresponde aos custos da carcaça cilíndrica, H é a altura da coluna, d é o diâmetro, d_0 parâmetro de correlação de custos referente ao diâmetro da coluna com valor de 1 m, H_0 , parâmetro de correlação de custos referente à altura com valor de 5 m. (DOUGLAS, 1988).

O fator $C_{0,s}$, esta relacionado com as características do material F_p , também com as condições de pressão da coluna, F_m , o fator de custo direto F_D e também do fator de custo indireto, F_l .

O índice $M\&S$, corresponde ao quarto trimestre de 2011 (Marshall Swifts Valuation Service, 2011), $M\&S_{base}$, corresponde ao ano de 1970 (DOHERTY, 2001).

$$C_{0,s} - \left(\frac{M\&S}{M\&S_{base}} \right) [F_m F_p - 1 + F_l F_D] c_{0,s_{base}} = 0$$

$$C_{0,t_{base}} = US\$5000$$

$$F_p = 1$$

$$M\&S_{base} = 301$$

$$M\&S_{2011} = 1536,5$$

$$F_l = 1.38$$

$$F_D = 3.00$$

$$F_m = 1.00$$

Tabela A.1- Materiais de construção de colunas de destilacao

F_m (Material da carcaça)		
Revestido	Sólido	Material
1	1	Aço Carbono
2.30	3.50	Inox. 304
2.60	4.25	Inox. 316
4.50	9.75	Monel
4.89	10.76	Titânio

De igual maneira, o custo interno da coluna está relacionado com o custo dos estágios.

$$C_t - C_{0,t} \left(\frac{D}{D_0} \right)^{a_t} \left(\frac{H}{H_0} \right) = 0$$

$$C_{0,t} - \left(\frac{M\&S}{M\&S_{base}} \right) [F_s + F_t + F_m] c_{0,t_{base}} = 0$$

$$a_t = 1.8$$

$$C_{0,t_{base}} = US\$500$$

$$M\&S_{base} \$301$$

$$F_s = 1 \text{ Tabela 4-2}$$

$$F_t = 0 \text{ Tabela 4-3}$$

Onde, F_T , Tipo de etapa, F_s , Espaço entre as estágios

Tabela A.2- Parâmetro das dimensões dos estágios

F_s	Espaçamento
1	0.6 m
1.3	0.45m
2.0	0.30m

Tabela A.3- Parâmetro das características dos estágios

F_t	Configuração
0.0	Rede
0.0	Prato
0.0	Crivo
0.3	Válvula
1.6	Tampa de bolha
3.2	Koch
F_m (Material dos pratos)	
0.0	Aço Carbono
1.5	Inox.
8.5	Monel

Custo dos trocadores de calor

Os trocadores de calor mais comuns são de carcaça e tubos para sistemas de vapor-líquido, cuja fabricação pode ser de diferentes configurações. Para determinação do custo dos trocadores, de calor em função da área de transferência de calor. Devido às diferentes configurações, materiais de construção, custos de instalação, pressão de operação, são levados em conta através de fatores neste trocador de calor.

$$C_H - C_{0,H} \left(\frac{A_H}{A_0} \right)^{a_H} = 0$$

$$C_{0,H} - \left(\frac{M\&S}{M\&S_{base}} \right) [(F_d + F_p)F_m - 1 + F_l F_D] C_{0,H_{base}} = 0$$

$$a_H = 0.65$$

$$C_{0,H_{base}} = \$8700$$

$$F_p = 0$$

$$M\&S_{base} = 301$$

$$F_D = 2.30$$

$$F_l = 2.30$$

Tabela A.4- Material de trocador de carcaça e tubo

F_m	Material
1.0	Aço Carbono / Aço Carbono
1.2	Aço Carbono
1.8	Molibdênio / Molibdênio
1.6	Aço Carbono / Molibdênio
3.0	Aço inox / Aço inox
2.2	Aço Carbono/ Aço inox
3.9	Monel / Monel
2.7	Aço Carbono/ Monel
12.0	Titânio / Titânio
7.0	Aço Carbono / Titânio

Custos de operação

Os custos de operação para sistemas de destilação estão associados diretamente com as demandas de vapor e fluido de esfriamento nos trocadores de calor, este custo esta relacionado com a vazão de vapor requerido segundo as demandas de calor no refeedor para uma determinada separação. Por outra parte, o custo da água de esfriamento, esta relacionada com a vazão de água requerida na carga de calor no condensador:

$$\frac{\dot{Q}_B}{\Delta H_{stm}} - \dot{W}_r = 0$$

$$\frac{\dot{Q}_C}{C_{plq}(T_{out}^H - T_{in}^C)} - \dot{W}_C = 0$$

Onde $\dot{W}_r$, e $\dot{W}_C$ são as vazões de vapor de aquecimento e água de esfriamento, respectivamente, C_{plq} é a capacidade calorífica em função da temperatura da água de esfriamento. ΔH_{stm} , entalpia de vaporização do fluxo de vapor no refeedor, T_{out}^H , T_{in}^C , temperaturas de entrada e saída da água no condensador.

Para a determinação da vazão de vapor, no caso do refeedor, foram estabelecidas as seguintes condições:

- A pressão de vapor de aquecimento é 10 vezes a pressão de operação da coluna.
- O combustível utilizado é fuel oil. Para este combustível, foi levado em conta o índice de preço de combustíveis fósseis, P_{Comb} (US\$/MMBTU) (U.S. Energy information administration, 2012). Para a determinação deste custo, se relaciona a entalpia de vaporização do vapor, a vazão de vapor no refeedor.

$$C_{Comb} = \frac{W_r * \Delta H_{stm}}{PCS * \eta} *$$

Onde PCS é o poder calorífico superior do combustível, e η , é a eficiência da caldeira, segundo o PCS .

- O custo da geração de vapor está associado ao custo de combustível por meio da seguinte relação:

$$C_{vap} = C_{Comb}(1 + 0,30)$$

Onde C_{vap} , é o custo do vapor no sistema, C_{comb} , é o custo do combustível. Esta relação contempla os custos inerentes emissões, manutenção, reagentes para o tratamento da água no refulvedor, e custos de pessoal. (Energy, 2003).

APÊNDICE B. PROGRAMAS PARA SEQUÊNCIAS CONVENCIONAIS E COLUNA COM PAREDE DIVIDIDA

Rotina de otimização combinatória para uma coluna com parede dividida

```

close all
clear all
clc

global NTc11 NFc11 NTc22 NCS1 NCSL1 NCI1 F Tf P x0 C R S Dist_ben Sal_Tol Sal_P_xil %Combinatoria
%% Informacao de entrada
D=20; %Vazao de destilado na coluna principal (kmol/h)
F=200; %Vazao de alimentacao (kmol/h)
P=1.01325; %Pressao do sistema (bar)
x0=[0.1 0.1 0.8]; %Fracoes molares da alimentacao no prefraccionador
[Tburb,xj,yj]=principalflash(P,x0,0); %Temperatura da alimentacao como liquido saturado
Tf=Tburb;
R=20; %Razao de refluxo na coluna principal
%% Matriz de vazoes de DWC
% S(1) Vazao da conexao superior de liquido que sai da coluna principal
% S(2) Vazao da saida lateral na coluna principal superio de liquido
% S(3) Vazao da conexao inferior de vapor que sai da coluna principal
S=[90 20 100];

C=length(x0); %Vetor de componentes do sistema

%% Vetor de Variaveis a serem otimizadas (y)
% (1)->flujo de destilado
% (2)->Rel de refluxo
% (3)->Salida lateral liquido prefraccionador
% (4)->Salida lateral liquido do producto intermedio
% (5)->Salida lateral vapor prefraccionador
y0=[D,R,S]; %Valores iniciais

% Limites da regioa viavel
% Limite inferior
Lb1=15; %Vaz de destilado
Lb2=10; %Rela. ref.
Lb3=89; %Salida de liquido superior col prin.
Lb4=15; %Salida de pto intemedio.
Lb5=99; %Salida de vapor inferior col prin.

%Limite superior
ub1=25;
ub2=40;
ub3=91;
ub4=25;
ub5=101;

lb=[Lb1;Lb2;Lb3;Lb4;Lb5];
ub=[ub1;ub2;ub3;ub4;ub5];

%Vetores da configuracao dos estagios
NTc1=[19 ]; %Numero de estagios prefrac
NFc1=[9 10 ]; %Estagio alim prefrac
NTc2=[41 42 43]; %Numero de estagios col prin
NCS=[5 6 7]; %Conex superior col prin
NCSL=[24 25 26]; %Salida lateral en la col prin
NCI=[36 37 38]; %Conex inferior col prin

%% Modelo DWC
tic
optimizacion=0;
xop=zeros(2000,5);
fop=zeros(2000,1);
offset=1;
for cont1=1:length(NTc1)
    NTc11= NTc1(cont1);
    for cont2=1: length(NFc1)
        NFc11= NFc1(cont2);
        for cont3=1:length(NTc2)
            NTc22 = NTc2(cont3);
            for cont5=1:length(NCS)
                NCS1= NCS(cont5);
                for cont6=1:length(NCSL)
                    NCSL1=NCSL(cont6);
                    for cont7=1:length(NCI)
                        NCI1= NCI(cont7);
                    end
                end
            end
        end
    end
    % funcao de otimizacao
    options =
optimset('display','iter','algorithm','sqp','MaxFunEvals',inf,'TolFun',1e-10,'TolCon',1e-10,'TolX',1e-10,'gradConstr','on');

```


Custo total anualizado para uma coluna com parede dividida

```
function[Liq_nov,Vap_nov,Qj,TAC]=Total_annual_DWC(Ns,Et_alim1,Num_et,x,Sal_Lat2,F,Tf,P,x0,Num_et_tot,C)
D=x(1);
R=x(2);
S(1)=x(3);
S(2)=x(4);
S(3)=x(5);
%% Determinacao innicial dos perfis de fluxo e temperatura
[Alim_coll,Alim_col2,Vap1,Vap2,U1,W1,U2,W2,Lj1,Lj2]=Inicializac_vap_liq_040613(Ns,Et_alim1,D,Sal_Lat2,F,Tf,
R,S,P,x0,Num_et,Num_et_tot,C);
Vap=[Vap2;Vap1];
% pause
%% Métdod ponto de bolha
MaxIterac=100;
Tmud=zeros(1,MaxIterac);
for cont=1:MaxIterac

[Liq_nov,Vap_nov,Qj]=Tridiagonal_DWC_260813(Lj1,Lj2,Alim_coll,Alim_col2,Vap1,Vap2,W1,U1,W2,U2,Num_et,Num_et
_tot,Et_alim1,Ns,Sal_Lat2,S,P,R,C,D);
DT=(Vap_nov(:,2)-Vap(:,2));
Tmud(cont)=abs(max(DT));
Vap(:,1)=Vap_nov(:,1);
Vap(:,2)=Vap_nov(:,2);
Vap1(:,1)=Vap_nov(Num_et(2)+1:end,1);
Vap2(:,1)=Vap_nov(1:Num_et(2),1);
Vap1(:,2)=Vap_nov(Num_et(2)+1:end,2);
Vap2(:,2)=Vap_nov(1:Num_et(2),2);
Lj1(:,1)=Liq_nov(Num_et(2)+1:end,1);
Lj2(:,1)=Liq_nov(1:Num_et(2),1);
if Tmud(cont)<=1e-1
    break
end
end
%% Custos da coluna

h1_principal=altura(P,Tf,x0',Ns(1));
h2_principal=altura(P,Tf,x0',Sal_Lat2-Ns(1));
h3_principal=altura(P,Tf,x0',Ns(2)-Sal_Lat2);
h4_principal=altura(P,Tf,x0',Num_et(2)-Ns(2));
h1_frac=altura(P,Tf,x0',Num_et(2)+Et_alim1-Num_et(2)+1);
h2_frac=altura(P,Tf,x0',Num_et(2)+Num_et(1)-Num_et(2)+Et_alim1+1);
[Area_coluna_prin1]=area_equip(Vap_nov(2:Ns(1),:),Liq_nov(2:Ns(1),:));
[Area_coluna_prin2]=area_equip(Vap_nov(Ns(1)+1:Sal_Lat2,:),Liq_nov(Ns(1)+1:Sal_Lat2,:));
[Area_coluna_prin3]=area_equip(Vap_nov(Sal_Lat2+1:Ns(2),:),Liq_nov(Sal_Lat2+1:Ns(2),:));
[Area_coluna_prin4]=area_equip(Vap_nov(Ns(2)+1:Num_et(2),:),Liq_nov(Ns(2)+1:Num_et(2),:));
[Area_coluna_frac1]=area_equip(Vap_nov(Num_et(2)+1:Num_et(2)+Et_alim1,:),Liq_nov(Num_et(2)+1:Num_et(2)+Et_a
lim1,:));
[Area_coluna_frac2]=area_equip(Vap_nov(Num_et(2)+Et_alim1:end,:),Liq_nov(Num_et(2)+Et_alim1:end,:));
Area_max_prin1=max(Area_coluna_prin1);
Area_max_prin2=max(Area_coluna_prin2);
Area_max_prin3=max(Area_coluna_prin3);
Area_max_prin4=max(Area_coluna_prin4);
Area_max_frac1=max(Area_coluna_frac1);
Area_max_frac2=max(Area_coluna_frac2);

Cust_Coluna1=Cust_coluna(Area_max_prin1,h1_principal);
Cust_Coluna2=Cust_coluna(Area_max_prin2,h2_principal);
Cust_Coluna3=Cust_coluna(Area_max_prin3,h3_principal);
Cust_Coluna4=Cust_coluna(Area_max_prin4,h4_principal);
Cust_Coluna5=Cust_coluna(Area_max_frac1,h1_frac);
Cust_Coluna6=Cust_coluna(Area_max_frac2,h2_frac);

Cust_Col_tot=Cust_Coluna1+Cust_Coluna2+Cust_Coluna3+Cust_Coluna4+Cust_Coluna5+Cust_Coluna6;
    %Custos de capital
    %Custo dos trocadores de calor
P_referv=10*P;
A_refe=area_refervedor(-Qj(Num_et(2),1),Liq_nov(Num_et(2),2),P_referv);
A_cond=area_condensador(Liq_nov,Qj(1,1));
[Cust_ref,Cust_cond]=custo_trocadores(A_refe,A_cond);

Cust_capital=Cust_Col_tot+Cust_ref+Cust_cond;
    %Custos de operacao
    %Custo de vapor no refervedor
[Tvap,H,F_vap,Cust_vapor]=cust_vapor_refervedor(-Qj(Num_et(2),1),P_referv);
    %Custo da água no condensador
[cust_Agua_cond,Wc]=cust_agua_cond(Liq_nov,Qj(1,1),-Qj(Num_et(2),1),P_referv);
Cust_operac=((Cust_vapor*F_vap)+(cust_Agua_cond*Wc))*8760; %Wc vazao de agua de esfriamento em kg/h
    %Total annual cost
K_cap=1/4;
TAC=((2.43*K_cap+0.19)*Cust_capital)+Cust_operac;
```

Inicialização de vazões internos e temperatura para uma coluna com parede dividida

```
% Início do programa determinacoes de vapor e liquido na configuracao DWC
Function[Alim_coll,Alim_col2,Vap1,Vap2,U1,W1,U2,W2,Lj1,Lj2]=Inicializac_vap_liq_040613(Ns,Et_alim1,D,Sal_Lat2,F,Tf,R,S,P,x0,N
um_et,Num_et_tot,C)
Vap1=zeros(Num_et(1),2);
Vap2=zeros(Num_et(2),2);
%% Inicializacao da coluna
U1=zeros(Num_et(1),C+8);
W1=zeros(Num_et(1),C+6);
U2=zeros(Num_et(2),C+8);
W2=zeros(Num_et(2),C+6);
Alim_coll=zeros(Num_et(1),C+8);
Alim_col2=zeros(Num_et(2),C+8);
V_alim1=zeros(Num_et(1),C+4);
L_alim1=zeros(Num_et(1),C+4);
V_alim2=zeros(Num_et(2),C+4);
%% Caracterizacao da alimentacao
x01=x0./sum(x0);
Alim_coll(Et_alim1,1)=F;
Alim_coll(Et_alim1,2)=Tf;
Alim_coll(Et_alim1,3)=P;
Alim_coll(Et_alim1,4:C+3)=x01;
%% Determinacao da entalpia da alimentacion
[L_alim1(Et_alim1,1),V_alim1(Et_alim1,1),Alim_coll(Et_alim1,C+4)]=flashalim2(F,x0',Tf,P);
%% Determinacao das temperaturas iniciais
Ti=ebulhicao();
Tj1=linspace(Ti(1),Ti(3),Num_et(1))'; %Perfil de temperaturas da DWC, col prin+prefac
Tj2=linspace(Ti(1),Ti(3),Num_et(2))'; %Perfil de temperaturas da DWC, col prin
%% Saidas dos liquidos y vapores laterais
U_ben=D;
U2(1,1)=U_ben; %Destilado
U2(Ns(1),1)=S(1);
U2(Sal_Lat2,1)=S(2); % Saida lateral do produto intermedio
W2(Ns(2),1)=S(3);
%% Determinacao inicial de vazões de vapor e temperaturas internos do prefrac
for b=1:Num_et(1)
    Vap1(b,1)=S(3)+sum(V_alim1(1:b,1)-W1(1:b,1));
    Vap1(b,2)=Tj1(b,1);
end
% Determinacao inicial de vazões de vapor e temperaturas internos da col principal
for b=1:Num_et(2)
    if b==1
        Vap2(b,1)=0;
        Vap2(b,2)=Tj2(b,1);
    elseif b>=2 && b<=Ns(1)-1
        Vap2(b,1)=D*(1+R)-sum(V_alim2(1:b,1)-W2(1:b,1));
        Vap2(b,2)=Tj2(b,1);
    elseif b==Ns(1)
        Vap2(b,1)=D*(1+R)-sum(V_alim2(1:b,1)-W2(1:b,1))-Vap1(1,1);
        Vap2(b,2)=Tj2(b,1);
    elseif b>=Ns(1)+1 && b<=Ns(2)-1
        Vap2(b,1)=D*(1+R)-sum(V_alim2(1:b,1)-W2(1:b,1))-Vap1(1,1);
        Vap2(b,2)=Tj2(b,1);
    elseif b==Ns(2)
        Vap2(b,1)=D*(1+R)-sum(V_alim2(1:b,1)-W2(1:b,1))-Vap1(1,1)+S(3);
        Vap2(b,2)=Tj2(b,1);
    elseif b>=Ns(2)+1 && b<=Num_et(2)
        Vap2(b,1)=D*(1+R)-sum(V_alim2(1:b,1)-W2(1:b,1))-Vap1(1,1)+S(3);
        Vap2(b,2)=Tj2(b,1);
    end
end
Lj1=zeros(Num_et(1),1);
Lj2=zeros(Num_et(2),1);
for i=1:Num_et(1)
    if i==1
        Lj1(i,1)=Vap1(i+1,1)+sum(Alim_coll(1:i,1)-W1(1:i,1)-U1(1:i,1))-Vap1(1,1)+U2(Ns(1),1);
    elseif i>=2 && i<=Num_et(1)-1
        Lj1(i,1)=Vap1(i+1,1)+sum(Alim_coll(1:i,1)-W1(1:i,1)-U1(1:i,1))-Vap1(1,1)+U2(Ns(1),1);
    elseif i==Num_et(1)
        Lj1(i,1)=W2(Ns(2),1)+sum(Alim_coll(1:i,1)-W1(1:i,1)-U1(1:i,1))-Vap1(1,1)+U2(Ns(1),1);
    end
end
for i=1:Num_et(2)
    if i==1
        Lj2(i,1)=D*R;
    elseif i>=2 && i<=Ns(1)-1
        Lj2(i,1)=D*R;
    elseif i>=Ns(1) && i<=Sal_Lat2-1
        Lj2(i,1)=D*R-U2(Ns(1),1);
    elseif i>=Sal_Lat2 && i<=Ns(2)-1
        Lj2(i,1)=D*R-U2(Ns(1),1)-U2(Sal_Lat2,1);
    elseif i>=Ns(2) && i<=Num_et(2)
```

```

        Lj2(i,1)=D*R-U2(Ns(1),1)-U2(Sal_Lat2,1)+Lj1(Num_et(1),1);
    end
end

```

Modelo da coluna com parede dividida e geração da matriz esparsa

```

function[Liq_nov,Vap_nov,Qj]=Tridiagonal_DWC_260813(Lj1,Lj2,Alim_col1,Alim_col2,Vap1,Vap2,W1,U1,W2,U2,Num_e
t,Num_et_tot,Et_alim1,Ns,Sal_Lat2,S,P,R,C,D)
K1=zeros(Num_et(1),C);
K2=zeros(Num_et(2),C);
for j=1:Num_et(1)
    K1(j,:)=Kid(Vap1(j,2),P)';
end
for j=1:Num_et(2)
    K2(j,:)=Kid(Vap2(j,2),P)';
end
K=[K2;K1];
Vap=[Vap2;Vap1];
Alim_col=[Alim_col2;Alim_col1];
W=[W2;W1];
U=[U2;U1];
Aj=zeros(Num_et_tot,C);
Bj=zeros(Num_et_tot,C);
Cj=zeros(Num_et_tot,C);
Dj=zeros(Num_et_tot,C);
Liq_nov=zeros(Num_et_tot,C+8);
Vap_nov=zeros(Num_et_tot,C+6);
Vap_nov1=zeros(Num_et(1),C+6);
Vap_nov2=zeros(Num_et(2),C+6);
Liq_nov2=zeros(Num_et(2),C+8);
Liq_nov1=zeros(Num_et(1),C+8);
%Vap(Num_et(2)+1,1)-> Flujo de vapor q sai do primeiro estagio do fracionador
%S(1)->Conexao superior da vazao liquida que sai da coluna principal
%S(3)->Conexao inferior da vazao de vapor que sai da coluna principal
Lj=[Lj2;Lj1];
%% Prefracionador
for h=1:Num_et_tot
    if h==1
        Bj(h,:)=-(Lj(h,1)+U(h,1))+((Vap(h,1)+W(h,1)).*K(h,:));
        Cj(h,:)=Vap(h+1,1).*K(h+1,:);
        Dj(h,:)=Alim_col(h,1).*Alim_col(h,4:C+3);
    elseif h>=2 && h<=Num_et(2)-1
        Aj(h,:)=Lj(h-1,1);
        Bj(h,:)=-(Lj(h,1)+U(h,1))+((Vap(h,1)+W(h,1)).*K(h,:));
        Cj(h,:)=Vap(h+1,1).*K(h+1,:);
        Dj(h,:)=Alim_col(h,1).*Alim_col(h,4:C+3);
    elseif h==Num_et(2)
        Aj(h,:)=Lj(h-1,1);
        Bj(h,:)=-(Lj(h,1)+U(h,1))+((Vap(h,1)+W(h,1)).*K(h,:));
        Dj(h,:)=Alim_col(h,1).*Alim_col(h,4:C+3);
    elseif h==Num_et(2)+1
        Bj(h,:)=-(Lj(h,1)+U(h,1))+((Vap(h,1)+W(h,1)).*K(h,:));
        Cj(h,:)=Vap(h+1,1).*K(h+1,:);
        Dj(h,:)=Alim_col(h,1).*Alim_col(h,4:C+3);
    elseif h>=Num_et(2)+2 && h<=Num_et_tot-1
        Aj(h,:)=Lj(h-1,1);
        Bj(h,:)=-(Lj(h,1)+U(h,1))+((Vap(h,1)+W(h,1)).*K(h,:));
        Cj(h,:)=Vap(h+1,1).*K(h+1,:);
        Dj(h,:)=Alim_col(h,1).*Alim_col(h,4:C+3);
    elseif h==Num_et_tot
        Aj(h,:)=Lj(h-1,1);
        Bj(h,:)=-(Lj(h,1)+U(h,1))+((Vap(h,1)+W(h,1)).*K(h,:));
        Dj(h,:)=Alim_col(h,1).*Alim_col(h,4:C+3);
    end
end
% pause
xij=zeros(Num_et_tot,C);
%% Elementos fora da diagonal
E1=zeros(Num_et_tot,Num_et_tot);
E2=zeros(Num_et_tot,Num_et_tot);
E3=zeros(Num_et_tot,Num_et_tot);
Z1=zeros(Num_et_tot,Num_et_tot);
Z2=zeros(Num_et_tot,Num_et_tot);
Z3=zeros(Num_et_tot,Num_et_tot);
%% Conex superior
%% Liquidos que entram ao estagio
E1(Ns(1),Num_et(2)+1)=U(Ns(1),1);
E2(Ns(1),Num_et(2)+1)=U(Ns(1),1);
E3(Ns(1),Num_et(2)+1)=U(Ns(1),1);
%% Vapor que entra ao estagio
Z1(Num_et(2)+1,Ns(1))=Vap(Num_et(2)+1,1)*K(Num_et(2)+1,1);
Z2(Num_et(2)+1,Ns(1))=Vap(Num_et(2)+1,1)*K(Num_et(2)+1,2);
Z3(Num_et(2)+1,Ns(1))=Vap(Num_et(2)+1,1)*K(Num_et(2)+1,3);
%% Conex inferior
%% Liquidos que entram a col_pr

```



```

E1(Ns(2),Num_et_tot)=Lj(Num_et_tot,1);
E2(Ns(2),Num_et_tot)=Lj(Num_et_tot,1);
E3(Ns(2),Num_et_tot)=Lj(Num_et_tot,1);
% % Vapor que entra ao estagio prefra
Z1(Num_et_tot,Ns(2))=W(Ns(2),1)*K(Ns(2),1);
Z2(Num_et_tot,Ns(2))=W(Ns(2),1)*K(Ns(2),2);
Z3(Num_et_tot,Ns(2))=W(Ns(2),1)*K(Ns(2),3);
%% Geracao matriz
At1=(diag(Aj(2:end,1),-1)+E1);
At2=(diag(Aj(2:end,2),-1)+E2);
At3=(diag(Aj(2:end,3),-1)+E3);
Bt1=(diag(Bj(1:end,1)));
Bt2=(diag(Bj(1:end,2)));
Bt3=(diag(Bj(1:end,3)));
Ct1=(diag(Cj(1:end-1,1),1)+Z1);
Ct2=(diag(Cj(1:end-1,2),1)+Z2);
Ct3=(diag(Cj(1:end-1,3),1)+Z3);
Mat_comp1=(At1+Ct1+Bt1);
Mat_comp2=(At2+Ct2+Bt2);
Mat_comp3=(At3+Ct3+Bt3);
xij(:,1)=Mat_comp1\Dj(:,1);
xij(:,2)=Mat_comp2\Dj(:,2);
xij(:,3)=Mat_comp3\Dj(:,3);
xij_norm=zeros(Num_et_tot,C);
for i=1:Num_et_tot
    xij_norm(i,:)=xij(i,:)/sum(xij(i,:));
    Liq_nov(i,4:C+3)=xij_norm(i,:);
end
for k=1:Num_et_tot
    [Tburb,~,yj]=principalflash(P,Liq_nov(k,4:C+3)',0);
    Liq_nov(k,2)=Tburb;
    Liq_nov(k,3)=P;
    [hlj,hvj]=specificheat(Tburb);
    Liq_nov(k,C+4)=Liq_nov(k,4:C+3)*hlj;
    Liq_nov(k,C+5)=viscosidade(Liq_nov(k,2),Liq_nov(i,4:C+3)') ; %Viscosidade do liquido
    Liq_nov(k,C+6)=superf_tens(P,Liq_nov(k,2),Liq_nov(k,4:C+3)') ;
    Liq_nov(k,C+7)=densidade_liq(Liq_nov(i,4:C+3)',Liq_nov(k,2)) ; %Densidade liquido
    Liq_nov(k,C+8)=moleculaw(Liq_nov(i,4:C+3)') ;
    Vap_nov(k,2)=Tburb;
    Vap_nov(k,3)=Liq_nov(k,3);
    Vap_nov(k,4:C+3)=yj';
    Vap_nov(k,C+4)=Vap_nov(k,4:C+3)*hvj;
    Vap_nov(k,C+5)=densidade_vap(Vap_nov(k,4:C+3)',Vap_nov(k,2),Liq_nov(k,3));
    Vap_nov(k,C+6)=moleculaw(Vap_nov(k,4:C+3)') ;
end
Liq_nov2(:,:)=Liq_nov(1:Num_et(2),:);
Liq_nov1(:,:)=Liq_nov(Num_et(2)+1:Num_et_tot,:);
Vap_nov2(:,:)=Vap_nov(1:Num_et(2),:);
Vap_nov1(:,:)=Vap_nov(Num_et(2)+1:Num_et_tot,:);
%% Balanco de energia
Qj=zeros(Num_et_tot,1);
% Condensador
Qj(1,1)=Alim_col2(1,1)*Alim_col2(1,C+4)+Vap2(2,1)*Vap_nov2(2,C+4)-(Lj2(1,1)+U2(1,1))*Liq_nov2(1,C+4);
% Reboiler
Qj(Num_et(2),1)=(Alim_col1(Et_alim1,1).*Alim_col1(Et_alim1,C+4))-Lj2(Num_et(2),1)*Liq_nov2(Num_et(2),C+4)-
sum(Qj(1:Num_et(2)-1,1))...
-(U2(1,1).*Liq_nov2(1,C+4))-(U2(Sal_Lat2,1).*Liq_nov2(Sal_Lat2,C+4));
alfa2=zeros(Num_et(2),1);
beta2=zeros(Num_et(2),1);
gama2=zeros(Num_et(2),1);
Vap_nov2(1,1)=0;
Vap_nov2(2,1)=Vap2(2,1);
%Balanco de energia en cada estagio da frac, para determinacao das vazoes
%de vapor
for u=1:Num_et(1)
    if u==Num_et(1)
        Vap_nov1(u,1)=(Alim_col1(u,1)*Alim_col1(u,C+4)+W(Ns(2),1)*Vap_nov2(Ns(2),C+4)-
Lj1(u,1)*Liq_nov1(u,C+4)+Lj1(u-1,1)*Liq_nov1(u-1,C+4))/Vap_nov1(u,C+4);
    elseif u>=2 && u<=Num_et(1)-1
        Vap_nov1(u,1)=(Alim_col1(u,1)*Alim_col1(u,C+4)+Vap1(u+1,1)*Vap_nov1(u+1,C+4)-
Lj1(u,1)*Liq_nov1(u,C+4)+Lj1(u-1,1)*Liq_nov1(u-1,C+4))/Vap_nov1(u,C+4);
    elseif u==1
        Vap_nov1(u,1)=(Alim_col1(u,1)*Alim_col1(u,C+4)+Vap1(u+1,1)*Vap_nov1(u+1,C+4)-
Lj1(u,1)*Liq_nov1(u,C+4)+U2(Ns(1),1)*Liq_nov2(Ns(1),C+4))/Vap_nov1(u,C+4);
    end
end
for i=1:Num_et(1)
    if i==1
        Liq_nov1(i,1)=Vap_nov1(i+1,1)+sum(Alim_col1(1:i,1)-W1(1:i,1)-U1(1:i,1))-Vap_nov1(1,1)+U2(Ns(1),1);
    elseif i>=2 && i<=Num_et(1)-1
        Liq_nov1(i,1)=Vap_nov1(i+1,1)+sum(Alim_col1(1:i,1)-W1(1:i,1)-U1(1:i,1))-Vap_nov1(1,1)+U2(Ns(1),1);
    elseif i==Num_et(1)
        Liq_nov1(i,1)=W2(Ns(2),1)+sum(Alim_col1(1:i,1)-W1(1:i,1)-U1(1:i,1))-Vap_nov1(1,1)+U2(Ns(1),1);
    end
end
%% Coluna principal
for i=2:Num_et(2)-1

```

```

if i>=2 && i<=Ns(1)-1
    alfa2(i,1)=Liq_nov2(i-1,C+4)-Vap_nov2(i,C+4);
    beta2(i,1)=Vap_nov2(i+1,C+4)-Liq_nov2(i,C+4);
    gama2(i,1)=(sum(-U2(1:i-1)-W2(1:i-1)))*(Liq_nov2(i,C+4)-Liq_nov2(i-1,C+4));
elseif i==Ns(1)
    alfa2(i,1)=Liq_nov2(i-1,C+4)-Vap_nov2(i,C+4);
    beta2(i,1)=Vap_nov2(i+1,C+4)-Liq_nov2(i,C+4);
    gama2(i,1)=(sum(-U2(1:i-1)-W2(1:i-1)))*(Liq_nov2(i,C+4)-Liq_nov2(i-
1,C+4))+Vap_nov1(1,1)*(Liq_nov2(i,C+4)-Vap_nov1(1,C+4));
elseif i>=Ns(1)+1 && i<=Ns(2)-1
    alfa2(i,1)=Liq_nov2(i-1,C+4)-Vap_nov2(i,C+4);
    beta2(i,1)=Vap_nov2(i+1,C+4)-Liq_nov2(i,C+4);
    gama2(i,1)=(sum(-U2(1:i-1)-W2(1:i-1))+Vap_nov1(1,1))*(Liq_nov2(i,C+4)-Liq_nov2(i-1,C+4));
elseif i==Ns(2)
    alfa2(i,1)=Liq_nov2(i-1,C+4)-Vap_nov2(i,C+4);
    beta2(i,1)=Vap_nov2(i+1,C+4)-Liq_nov2(i,C+4);
    gama2(i,1)=(sum(-U2(1:i-1)-W2(1:i-1))+Vap_nov1(1,1))*(Liq_nov2(i,C+4)-Liq_nov2(i-
1,C+4))+Lj1(end,1)*(Liq_nov2(i,C+4)-Liq_nov1(end,C+4))+W2(i,1)*(Vap_nov2(i,C+4)-Liq_nov2(i,C+4));
elseif i>=Ns(2)+1 && i<=Num_et(2)-1
    alfa2(i,1)=Liq_nov2(i-1,C+4)-Vap_nov2(i,C+4);
    beta2(i,1)=Vap_nov2(i+1,C+4)-Liq_nov2(i,C+4);
    gama2(i,1)=(sum(-U2(1:i-1)-W2(1:i-1))+Vap_nov1(1,1)+Lj1(Num_et(1),1))*(Liq_nov2(i,C+4)-Liq_nov2(i-
1,C+4));
end
end
Vap_nov2(1,1)=0;
Vap_nov2(2,1)=Vap2(2,1);
for i=2:Num_et(2)-1
    Vap_nov2(i+1,1)=(gama2(i,1)-(alfa2(i,1)*Vap_nov2(i,1)))/beta2(i,1);
end
for i=1:Num_et(2)
    if i==1
        Liq_nov2(i,1)=sum(-U2(1:i,1))+Vap_nov2(i+1,1);
    elseif i>=2 && i<=Ns(1)-1
        Liq_nov2(i,1)=sum(-U2(1:i,1))+Vap_nov2(i+1,1);
    elseif i>=Ns(1) && i<=Ns(2)-1
        Liq_nov2(i,1)=Vap_nov2(i+1,1)+sum(-U2(1:i,1))+Vap_nov1(1,1);
    elseif i>=Ns(2) && i<=Num_et(2)-1
        Liq_nov2(i,1)=sum(-U2(1:i,1)-W2(1:i,1))+Vap_nov2(i+1,1)+Liq_nov1(Num_et(1),1)+Vap_nov1(1,1);
    elseif i==Num_et(2)
        Liq_nov2(i,1)=sum(-U2(1:i,1)-W2(1:i,1))+Liq_nov1(Num_et(1),1)+Vap_nov1(1,1);
    end
end
Vap_nov=[Vap_nov2;Vap_nov1];
Liq_nov=[Liq_nov2;Liq_nov1];

```

Determinação das condições da alimentação (flash)

```

function [L,V,hf,vfrac,x,y]=flashalim2(fluxo,x0,Tf,P)
%Programa para determinacao dos fluxos no alimento, caso for liquido
% saturado, vapor saturado ou mistura liquido-vapor
%benzeno(1),tolueno(2),p-xileno(3)
[Tb,x,y]=principalflash(P,x0,0); %Determinação ponto de bolha com alfa=0
[Tr,x,y]=principalflash(P,x0,1); %Determinação ponto de orvalho com alfa=1
[Cpl,Cpv]=specificheat(Tf);
Keq=Kid(Tf,P);
function F=fobj(a0)
    F=((Keq'-1)./(a0*(Keq'-1)+1))*x0;
end
if Tf<=Tb %Alimentação como liquido saturado
    vfrac=0; %fluxo de vapor na vazao da alimentacao
    L=fluxo;
    V=(vfrac*fluxo);
    hf=x0'*Cpl; %entalpia do alimento
elseif Tf>=Tr %Alimentação como vapor saturado
    vfrac=1;
    V=fluxo; %fluxo de vapor na vazao da alimentacao
    L=((1-vfrac)*fluxo); %fluxo de liquido na vazao da alimentacao
    hf=x0'*Cpv; %entalpia do alimento
else %Mistura liquido vapor
    opts=optimset('TolX',1e-14);
    alfa= fzero(@fobj,0.5555,opts);
    x=x0./(alfa*(Keq-1)+1);
    y=Keq.*x;
    hv=y'*Cpv;
    hl=x'*Cpl;
    vfrac=alfa;
    V=(alfa*fluxo); %fluxo de vapor na vazao da alimentacao
    L=((1-alfa)*fluxo); %fluxo de vapor na vazao da alimentacao
    hf=(alfa*hv)+(1-alfa)*hl; %entalpia do alimento
end
end

```

Programa pressão de vapor

```
function pvap=psat(T)
%Programa feito para o cálculo das pressões de vapor usando equação de
%antoine, T em Kelvins, pressão em bares. Mistura Benzeno(1), Tolueno(2),
%p-Xileno(3)

A=[3.98523 4.05043 4.10494]';
B=[1184.240 1327.62000 1446.832]';
C=[217.572 217.62500 214.627]';

pvap=10.^(A-(B./(T+C-273.15)));      %Pressão de vapor dos componentes
end
```

Constantes de equilibrio

```
function K=Kid(T,P)
K=psat(T)./P;
end
```

Programa para determinação do ponto de bolha

```
function [T, x, y]= principalflash(P,x0,alfa)
%Rotina feita para calculo dos pontos de orvalho e bolha
Teb=ebulhicao();
% x0=xen./sum(xen);
function obj=fobj(T)
    K=Kid(T,P);
    obj=((K'-1)./(alfa*(K'-1)+1))*x0;
end
T0=(Teb(1)*x0(1)+(Teb(2)*x0(2)+(Teb(3)*x0(3)));
options=optimset('TolX',1e-14,'Tolfun',1e-14);
T = fzero(@fobj,T0,options);

Kres=Kid(T,P);
x=x0./(alfa*(Kres-1)+1);
y=Kres.*x;
end
```

Determinação das entalpias das fases líquidas e de vapor

```
function [haspenLpuro,haspenVpuro]=specificheat(T) % (kJ/kmol)

% Temperaturas de referencia e bolha
Treff=298.15;
Tb=ebulhicao();
hrefAspen=[49126.8622;12169.7291;-24191.916];

% Regresada com informacao de Aspen
AA=[1279.7 -13.406 0.056237 -0.00010186 6.9691e-008;
    491.2 -4.9144 0.022656 -4.234e-005 2.9854e-008;
    324.75 -2.9422 0.014579,-2.7179e-005,1.9102e-008];

% Regresada dos valores de Aspen
BB= [117.64 -0.96646 0.0046762 -7.3483e-006 4.0742e-009;
    16.026 -0.0021508 0.0019276 -3.8141e-006 2.4112e-009;
    52.5 -0.27672 0.0031435 -5.725e-006 3.4954e-009];

% Entalpia do líquido
CplA(1)=((AA(1,1)*(T-Treff))+((AA(1,2)/2)*(T^2-Treff^2))+((AA(1,3)/3)*(T^3-Treff^3))+((AA(1,4)/4)*(T^4-Treff^4))+((AA(1,5)/5)*(T^5-Treff^5)));
CplA(2)=((AA(2,1)*(T-Treff))+((AA(2,2)/2)*(T^2-Treff^2))+((AA(2,3)/3)*(T^3-Treff^3))+((AA(2,4)/4)*(T^4-Treff^4))+((AA(2,5)/5)*(T^5-Treff^5)));
CplA(3)=((AA(3,1)*(T-Treff))+((AA(3,2)/2)*(T^2-Treff^2))+((AA(3,3)/3)*(T^3-Treff^3))+((AA(3,4)/4)*(T^4-Treff^4))+((AA(3,5)/5)*(T^5-Treff^5)));
haspenLpuro= [CplA(1),CplA(2),CplA(3)]' + hrefAspen;

% Entalpia do vapor
% Paso1: del liquido a T de referncia hasta la saturación
CplA(1)=((AA(1,1)*(Tb(1)-Treff))+((AA(1,2)/2)*(Tb(1)^2-Treff^2))+((AA(1,3)/3)*(Tb(1)^3-Treff^3))+((AA(1,4)/4)*(Tb(1)^4-Treff^4))+((AA(1,5)/5)*(Tb(1)^5-Treff^5)));
CplA(2)=((AA(2,1)*(Tb(2)-Treff))+((AA(2,2)/2)*(Tb(2)^2-Treff^2))+((AA(2,3)/3)*(Tb(2)^3-Treff^3))+((AA(2,4)/4)*(Tb(2)^4-Treff^4))+((AA(2,5)/5)*(Tb(2)^5-Treff^5)));
CplA(3)=((AA(3,1)*(Tb(3)-Treff))+((AA(3,2)/2)*(Tb(3)^2-Treff^2))+((AA(3,3)/3)*(Tb(3)^3-Treff^3))+((AA(3,4)/4)*(Tb(3)^4-Treff^4))+((AA(3,5)/5)*(Tb(3)^5-Treff^5)));
CplAspenSat= [CplA(1),CplA(2),CplA(3)]' + hrefAspen;

% Paso 2: Cambio de fase a T de bolha
DHvapAspen=[30803.63;33362.464;35916.0476]; % kJ/kmol

% Paso 3: De vapor saturado ate T
```

```
%Capacidade calorifica do gas ideal (kJ/kmol k)
CpgiAs(1)=( (BB(1,1)*(T-Tb(1)))+( (BB(1,2)/2)*(T^2-Tb(1)^2)))+( (BB(1,3)/3)*(T^3-Tb(1)^3)))+( (BB(1,4)/4)*(T^4-Tb(1)^4)))+( (BB(1,5)/5)*(T^5-Tb(1)^5)); %Entalpia (kJ/kmol)
CpgiAs(2)=( (BB(2,1)*(T-Tb(2)))+( (BB(2,2)/2)*(T^2-Tb(2)^2)))+( (BB(2,3)/3)*(T^3-Tb(2)^3)))+( (BB(2,4)/4)*(T^4-Tb(2)^4)))+( (BB(2,5)/5)*(T^5-Tb(2)^5));
CpgiAs(3)=( (BB(3,1)*(T-Tb(3)))+( (BB(3,2)/2)*(T^2-Tb(3)^2)))+( (BB(3,3)/3)*(T^3-Tb(3)^3)))+( (BB(3,4)/4)*(T^4-Tb(3)^4)))+( (BB(3,5)/5)*(T^5-Tb(3)^5));
CpgiAs=CpgiAs';

haspenVpuro= CplAspenSat+DHvapAspen+CpgiAs;
end
```

Determinação da viscosidade em função da temperatura para a mistura Benzeno, Toluen, p-xileno

```
function ut=viscosidade(T,x) %Parâmetros obtidos da pagina coreana cheric.com
% T=(60+273.15); %Temperatura de operação
% x=[0.3 0.3 0.4]'; %Frações molares (Benzeno, Tolueno, p-xileno)
Vc=[256.00 316.00 378.00]'; %Volumen crítico
Tc=[562.05 591.65 616.20]'; %Temperatura critica
M=[78.114 92.141 106.67]'; %Peso molecular

%determinação do volume crítico Vcm e temperatura crítica Tcm da mistura a
%partir de parâmetros de interação
Vcij=[(Vc(1)+Vc(2))/2;
      (Vc(1)+Vc(3))/2;
      (Vc(2)+Vc(3))/2];
Tcij=[(Tc(1)*Tc(2))^(1/2);
      (Tc(1)*Tc(3))^(1/2);
      (Tc(2)*Tc(3))^(1/2)];

Vcm=((x.^2).*Vc)+(x(1)*x(2)*2*Vcij(1))+(x(1)*x(3)*2*Vcij(2))+(x(3)*x(2)*2*Vcij(3)); %Volume crítico da
mistura binária
Tcm=((Tc.*(x.^2).*Vc)+(x(1)*x(2)*2*Vcij(1)*Tcij(1))+(x(1)*x(3)*2*Vcij(2)*Tcij(2))+(x(3)*x(2)*2*Vcij(3)*Tcij(3)))/Vcm;

Mm=x'*M; %Peso molecular da mistura

%Parâmetro em da mistura
ei=(Vc.^(2/3))./((Tc.*M).^(1/2)); %Parâmetro para cada componente
em=(Vcm.^(2/3))./((Tcm.*Mm).^(1/2));
%
% %Temperatura que deve ser calculada a viscosidade do componente puro
To=(Tc*T)/Tcm;

%Determinação da viscosidade dos componentes puros
C=[4.612 148.9 -0.02544 2.222e-5; %Parâmetros obtidos da pagina coreana cheric.com
  -5.878 1287 0.004575 -4.49e-6;
  -7.79 1580 0.00873 -6.735e-6];

u=exp(C(:,1)+(C(:,2)./To)+(C(:,3).*To)+(C(:,4).*To.^2));
ut=(exp(x'*log(u.*ei)))/em;
end
```

Tensão superficial da mistura em função da temperatura

```
function o=superf_tens(P,T,x) %Parâmetros obtidos da ajuda do aspen plus V. 7.2
%Constantes críticas do Poling and Prausnitz

% Correlação dos estados correspondentes
Pc=[48.95 41.08 35.11]'; %Pressão crítica (Benzeno, Tolueno, p-xileno)
Tc=[562.05 591.65 616.20]'; %Temperatura critica (Benzeno, Tolueno, p-xileno)
Tb=ebulhicao();
Tbr=Tb./Tc; %temperatura de ebulhicao reduzida
Tr=T./Tc; %Temperatura reduzida

Qp=(0.1196.*(1+((Tbr.*log(Pc./P))./(1-Tbr))))-0.279;
s=(Pc.^(2/3)).*(Tc.^(1/3)).*Qp.*(1-Tr).^(11/9);
o=x'*s; %tensão superficial da mistura (dyn/cm)
```

Densidade da mistura como liquido

```
function dL=densidade_liq(x,T) %Dados obtidos no livro de Perry & Green, P.2-98

D=[1.0162 0.26550 565.16 0.28212; %Benzeno, Tolueno, p-xileno
  0.8488 0.26655 591.80 0.28780;
  0.6816 0.25963 616.23 0.27680];

dLi=D(:,1)./(D(:,2).^(1+(1-(T./D(:,3))).^D(:,4))); %Densidade componentes puros em kmol/m^3
```

```
dLmol=dLi'*x; %densidade da fase liquida kmol/m^3
peso_mol= moleculaw(x);
dL=dLmol'*peso_mol; %densidade da mistura em fase liquida em kg/m^3
```

Densidade da mistura como vapor

```
function dV=densidade_vap(x,T,P) %Dados obtidos no livro de Perry & Green, P.2-98
dV=(P.*moleculaw(x))/(R*T); %Densidade do vapor usando correlação do gas ideal (kg/m^3)
end
```

Peso molecular da mistura

```
function Peso_mol= moleculaw(x);
% determinação do peso molecular da mistura
Peso_mol_i=[78.114 92.147 106.67]';
Peso_mol=x'*Peso_mol_i; %peso molecular da mistura em função da fração molar
end
```

Matriz tridiagonal para uma coluna convencional

```
clear all
close all
clc

% Numero de iteracoes
NumIter=100000;
% contador=1;

% Informacoes do alimento
%Informacao das caracteristicas da coluna

Num_et=36; %Numero de etapas
Et_alim=18; %Etapa de alimentacao
R=2.5;
P=1.01325;
F=200;
Tf=340;
D=160;

x01=0.800; %Fracao molar componente 1
x02=0.100; %Fracao molar componente 2
x03=1-x01-x02; %Fracao molar componente 3
x0=[x01, x02, x03]'; %Matriz de composicoes do alimento

x0norm=(x0./sum(x0));
C=length(x0);
Alim=zeros(Num_et,C+4);
Alim(Et_alim(1),1)=F; %Vazao de alimentacao (kmol/h)
Alim(Et_alim(1),2)=Tf; %Temperatura do alimento (K) 361.4947
Alim(Et_alim(1),3)=P; %Pressao do alimento (bar)

%Fracoes molares dos componentes no alimento
Alim(Et_alim,4:C+3)=x0norm;

% Cargas de calor en las etapas
Qj=zeros(Num_et,1); % (kJ/h)

%% Condicao termica da alimentacao, entalpia, determinacao da vazao liquido e vapor segundo
L_alim=zeros(Num_et,1);
V_alim=zeros(Num_et,1);
[Lo,V,hF]=flashalim2(Alim(Et_alim,1),x0norm,Alim(Et_alim,2),P);
L_alim(Et_alim(1),1)=Lo; %Vazao de liquido
V_alim(Et_alim(1),1)=V; %Vazao de vapor
Alim(Et_alim(1),C+4)=hF; %entalpia no alimento
%% Informacoes de salida de l?quidos U atraves da coluna
% [B,D,xb0,xd0]=perfilconcentraciones(Alim(Et_alim(1),1),Alim(Et_alim(1),4:C+3)',xdi);
Ns_liq=1; %matriz que corresponde a etapa de salida do liquido na etapa Ns
% %unicamente a salida de liquido do equipamento acontece no condensador como
% %fluxo de destilado
U=zeros(Num_et,C+4);
% U(Ns_liq(1),1)=160; %Vazao destilado
U(Ns_liq(1),1)=D; %Vazao destilado
U(Ns_liq(1),3)=Alim(Et_alim,3);
%% Informacoes de salidas lateais de vapores W
Ns_vap=[];
W=zeros(Num_et,C+4);
%% Liquido do fundo para determinacao da temperatura de bolha
L=zeros(Num_et,C+4);
L(Num_et(end),1)=sum(Alim(Et_alim,1))-sum(U(Ns_liq,1));
%% Geracao da matriz de vapor internos e equilibrios para cada componente
Vap=zeros(Num_et,C+4);
%Valores iniciais de temperatura e vazao de vapor
```

```

Ti=ebulhicao();
Tj=linspace(Ti(1),Ti(3),Num_et)'; %Perfil de temperaturas para valores iniciais
for n=1:Num_et
    K(n,1:C)=Kid(Tj(n),U(Ns_liq(1),3))';
    if n==1
        Vap(n,1)=0;
        Vap(n,2)=Tj(n);
        Vap(n,3)=U(Ns_liq(1),3);
    elseif n>=Et_alim
        Vap(n,1)=(U(Ns_liq(1)*(R+1))-V_alim(Et_alim,1));
        Vap(n,2)=Tj(n);
        Vap(n,3)=U(Ns_liq(1),3);
    else
        Vap(n,1)=(U(Ns_liq(1),1)*(R+1));
        Vap(n,2)=Tj(n);
        Vap(n,3)=U(Ns_liq(1),3);
    end
end
Vap_nov=zeros(Num_et,C+4);
Vap_nov(:,2)=Tj;
%% Inclusion del loop para iteracion
DT=zeros(1,NumIter);
for contador=1:NumIter

    for n=1:Num_et
        K(n,1:C)=Kid(Vap(n,2),U(Ns_liq(1),3))';
    end
    %% Construção da matriz tridiagonal
    Aj=zeros(Num_et,C); %Coeficiente A por cada componente en cada etapa
    Bj=zeros(Num_et,C); %Coeficiente B por cada componente en cada etapa
    Cj=zeros(Num_et,C); %Coeficiente C por cada componente en cada etapa
    xij=zeros(Num_et,C); %Fracciones de liquido en cada etapa
    for m=1:Num_et
        if m==1
            Bj(m,:)=-(Vap(m+1,1)+sum(Alim(1:m,1)-W(1:m,1)-U(1:m,1))-
            Vap(1,1)+U(m,1)+(K(m,1:C)*(Vap(m,1)+W(m,1))));
            Cj(m,:)=Vap(m+1,1)*K(m+1,1:C);
        elseif m==Num_et
            Aj(m,:)=Vap(m,1)+sum(Alim(1:m-1,1)-W(1:m-1,1)-U(1:m-1,1))-Vap(1,1);
            Bj(m,:)=-(sum(Alim(1:m,1)-W(1:m,1)-U(1:m,1))-Vap(1,1)+U(m,1)+K(m,1:C)*(Vap(m,1)+W(m,1)));
        else
            Aj(m,:)=Vap(m,1)+sum(Alim(1:m-1,1)-W(1:m-1,1)-U(1:m-1,1))-Vap(1,1);
            Bj(m,:)=-(Vap(m+1,1)+sum(Alim(1:m,1)-W(1:m,1)-U(1:m,1))-
            Vap(1,1)+U(m,1)+(K(m,1:C)*(Vap(m,1)+W(m,1))));
            Cj(m,:)=Vap(m+1,1)*K(m+1,1:C);
        end
    end

    end
    Dj=-(Alim(:,1)*ones(1,C).*Alim(:,4:C+3));

    %%Coeficientes Aj, Bj, Cj diagonalizados por componente C
    for h=1:C
        Matr_A=diag(Aj(2:end,h),-1);
        Matr_B=diag(Bj(:,h));
        Matr_C=diag(Cj(1:end-1,h),1);
        Matr_trid=(Matr_A+Matr_B+Matr_C); %Obtencao da matriz tridiagonal
        tridiagonal=size(Matr_trid);
        D=Dj(:,h);
        xij(:,h)=linsolve(Matr_trid,D);
    end

    %% Cuarta etapa: Determinacion de las fracciones molares normalizadas
    xij_norm=zeros(Num_et,C); %Fracoes de liquido em cada etapa
    for k=1:Num_et
        xij_norm(k,:)=xij(k,:)/sum(xij(k,:));
    end
    L(:,4:C+3)=xij_norm;

    for i=1:Num_et
        [Tburb,xj,yj]=principalflash(P,L(i,4:C+3)',0); %Temp bolha
        [hlj,hvj]=specificeat(Tburb); % Entalpia liquido e vapor puros a Temp bolha
        L(i,2)=Tburb;
        L(i,3)=P;
        L(i,C+4)=L(i,4:C+3)*hlj; %Entalpia de liquido
        L(i,C+5)=viscosidade(Tburb,xj); %Viscosidade do liquido
        L(i,C+6)=superf_tens(P,Tburb,xj);
        L(i,C+7)=densidade_liq(xj,Tburb); %Densidade liquido
        L(i,C+8)=moleculaw(xj);

        Vap_nov(i,2)=Tburb;
        Vap_nov(i,3)=Alim(Et_alim,3);
        Vap_nov(i,4:C+3)=yj';
        Vap_nov(i,C+4)=yj'*hvj;
        Vap_nov(i,C+5)=densidade_vap(yj,Tburb,P);
        Vap_nov(i,C+6)=moleculaw(yj);
    end
end

```

```

%% Determinacao do calor no topo
Qj(1,1)= (Alim(1,1)+Vap(2,1)-Vap(1,1))*L(1,C+4)+Vap(1,1)*Vap_nov(1,C+4) - Alim(1,1)*Alim(1,C+4) -
Vap(2,1)*Vap_nov(2,C+4); % (kJ/h)
%% Carga de calor no reoferverdor
Qj(Num_et,1)=-sum(Alim(:,C+4).*Alim(:,1)-U(:,1).*L(:,C+4)-W(:,1).*W(:,C+4))....
-sum(Qj(1:Num_et-1,1))+Vap(1,1)*Vap_nov(1,C+4)+sum(Alim(:,1)-W(:,1)-U(:,1))*L(Num_et,C+4);
%% Determinacao das novas vazoes de vapor
Vap_nov(2,1)=U(1,1)*(R+1); %Vapor na etapa 2

for g=2:Num_et-1
    Alphaj= L(g-1,C+4)-Vap_nov(g,C+4);
    Betaj = Vap_nov(g+1,C+4)-L(g,C+4);
    Gammaj = (sum(Alim(1:g-1,1)-W(1:g-1,1)-U(1:g-1,1))-Vap_nov(1,1))*(L(g,C+4)-L(g-
1,C+4))+Alim(g,1)*(L(g,C+4)-Alim(g,C+4))....
+W(g,1)*(Vap_nov(g,C+4)-L(g,C+4))-Qj(g,1);
    Vap_nov(g+1,1)= (Gammaj-Alphaj*Vap_nov(g,1))/Betaj; %Novas vazoes de vapor
end
parfor y=1:Num_et-1
    L(y,1)= Vap_nov(y+1,1)+sum(Alim(1:y,1)-U(1:y,1)-W(1:y,1))-Vap(1,1);
end
for h=1:Num_et
    DT=sum((Vap_nov(h,2))-Vap(h,2)); %Cambio de temperatura
end
%% Determinacao das novas vazoes de vapor
Vap(:,2)=Vap_nov(:,2);
Vap(:,1)=Vap_nov(:,1);
iteracion=contador
if DT<=1e-6;
    break
end
end
end

```

Custos para uma sequência convencional

```

function [L,TAC1]=torrel(P,P_referv,Tf,F,x0,D,R,N,ii)
h=altura(P,Tf,x0,N);

[Qj,Vap_nov,L]=Inicial(F,Tf,P,x0,D,R,N,ii);

Area_coluna=area_equip(Vap_nov,L);

%Custo da coluna
Cust_Coluna=Cust_coluna(Area_coluna,h);
%Custos de capital
    %Custo dos trocadores de calor
A_refe=area_refervdor(Qj(end,1),L,P_referv);
A_cond=area_condensador(L,-Qj(1,1));
[Cust_ref,Cust_cond]=custo_trocadores(A_refe,A_cond);

Cust_capital=Cust_Coluna+Cust_ref+Cust_cond;
    %Custos de operacao
    %Custo de vapor no reoferverdor
[Tvap,H,F_vap,Cust_vapor]=cust_vapor_refervdor(Qj(end,1),P_referv);
    %Custo da agua no condensador
[cust_Agua_cond,Wc]=cust_agua_cond(L,-Qj(1,1),Qj(end,1),P_referv);

Cust_operac=((Cust_vapor*F_vap)+(cust_Agua_cond*Wc))*8760; %Wc vazao de agua de esfriamento em kg/h
%Total annual cost
K_cap=1/4;
TAC1=((2.43*K_cap+0.19)*Cust_capital)+Cust_operac)/1e6;

```

Solução simultânea para uma sequência convencional indireta

```

close all
clear all
clc
tic
%% Caracterizacao da alimentacao
Et_alim=32;
Ns2=15; %estagio de alimentacao para a coluna 2
Num_et(1)=70;
Num_et(2)=30;
Num_et_tot=Num_et(1)+Num_et(2);
D=[32.19 10];

% Sal_Lat=36;
F=100;
Tf=340;
R=[6.045 1.2];
S=[30 32.36269 30]; %Relac. liquidos laterales donde (1,2) Liquidos, (3) vapor
P=1.01325; %Pressao da coluna (bar)
x0=[0.33 0.33]; %Fracciones molares de la alimentacion del prefraccionador

```

```

x0(3)=1-x0(1)-x0(2);
C=length(x0);
x01=x0./sum(x0);
%% Cálculo valores inic
Alim_col1=zeros(Num_et(1),C+8);
V_alim1=zeros(Num_et(1),C+4);
L_alim1=zeros(Num_et(1),C+4);
Alim_col2=zeros(Num_et(2),C+8);
V_alim2=zeros(Num_et(2),C+4);
L_alim2=zeros(Num_et(2),C+4);
Alim_col1(Et_alim,1)=F;
Alim_col1(Et_alim,2)=Tf;
Alim_col1(Et_alim,3)=P;
Alim_col1(Et_alim,4:C+3)=x01;
%% Determinação da entalpia da alimentação
[L_alim1(Et_alim,1),V_alim1(Et_alim,1),Alim_col1(Et_alim,C+4)]=flashalim2(Alim_col1(Et_alim,1),Alim_col1(Et_alim,4:C+3),Alim_col1(Et_alim,2),Alim_col1(Et_alim,3));

Alim_col=[Alim_col1;Alim_col2];
V_alim=[V_alim1;V_alim2];
L_alim=[L_alim1;L_alim2];
%% Vazoes de saída de líquido laterais
U=zeros(Num_et_tot,1); %Vazoes de saída lateral como líquido
U(1,1)=D(1); %kmol/h (Vazão destilado)
U(Num_et(1)+1,1)=D(2);
%% Vazoes de saída de vapor laterais
W=zeros(Num_et_tot,1); %Vazoes de saída lateral como vapor
%% Geracao das vazoes de vapor internas
Vap1=zeros(Num_et_tot,2);
% Suposicao das temperaturas para a primeira iteracao
Ti=ebulhicao();
Tj=linspace(Ti(1),Ti(3),Num_et_tot)';
Vap(:,2)=Tj;

for i=1:Num_et_tot
    %% Inicializacao das vazoes de vapor como fluxo molar constante, considerando
    %% as vazoes de vapor no líquido e saídas de vapor laterais
    if i==1
        Vap(i,1)=0;
    elseif i>2 && i<=Num_et(1)
        Vap(i,1)=(U(1,1)*(R(1)+1))-sum(V_alim(1:i,1)-W(1:i,1));
    elseif i==Num_et(1)+1
        Vap(i,1)=0;
    elseif i>Num_et(1)+2 && i<=Num_et(1)+Ns2-1
        Vap(i,1)=(U(Num_et(1)+1,1)*(R(2)+1))-sum(V_alim(Num_et(1)+1:i,1)-W(Num_et(1)+1:i,1));
    elseif i==Num_et(1)+Ns2
        Vap(i,1)=(U(Num_et(1)+1,1)*(R(2)+1))-sum(V_alim(Num_et(1)+1:i,1)-W(Num_et(1)+1:i,1));
    elseif i>Num_et(1)+Ns2+1 && i<=Num_et_tot
        Vap(i,1)=(U(1,1)*(R(2)+1))-sum(V_alim(i:Num_et(1),1))-sum(W(i:Num_et(1),1));
    end
end
Lj=zeros(Num_et_tot,1);
for i=1:Num_et_tot
    if i==1
        Lj(i,1)=Vap(i+1,1)+sum(Alim_col(1:i,1)-W(1:i,1)-U(1:i,1));
    elseif i>2 && i<=Num_et(1)-1
        Lj(i,1)=Vap(i+1,1)+sum(Alim_col(1:i,1)-W(1:i,1)-U(1:i,1));
    elseif i==Num_et(1)
        Lj(i,1)=sum(Alim_col(1:i,1)-W(1:i,1)-U(1:i,1));
    elseif i==Num_et(1)+1
        Lj(i,1)=sum(-U(Num_et(1)+1:i,1))+Vap(i+1,1);
    elseif i>Num_et(1)+2 && i<=Num_et(1)+Ns2(1)-1
        Lj(i,1)=sum(-U(Num_et(1)+1:i,1))+Vap(i+1,1);
    elseif i==Num_et(1)+Ns2(1)
        Lj(i,1)=sum(-U(Num_et(1)+1:i,1)-W(Num_et(1)+1:i,1))+Vap(i+1,1)+Lj(Num_et(1),1);
    elseif i>Num_et(1)+Ns2(1)+1 && i<=Num_et(1)+Num_et(2)-1
        Lj(i,1)=sum(-U(Num_et(1)+1:i,1)-W(Num_et(1)+1:i,1))+Vap(i+1,1)+Lj(Num_et(1),1);
    elseif i==Num_et_tot
        Lj(i,1)=sum(Alim_col(1:i,1)-W(1:i,1)-U(1:i,1));
    end
end
%% Loop for numero de iteracoes
MaxIterac=200;
Tmud=zeros(1,MaxIterac);
for cont=1:MaxIterac
    K=zeros(Num_et_tot,C);
    for i=1:Num_et_tot
        K(i,:)=Kid(Vap(i,2),P);
    end
    %% Geracao da matriz tridiagonal
    % Aj-l+Bj+Cj+1=D
    Aj=zeros(Num_et_tot,C);
    Bj=zeros(Num_et_tot,C);
    Cj=zeros(Num_et_tot,C);
    Dj=zeros(Num_et_tot,C);
    xij=zeros(Num_et_tot,C);
    for h=1:Num_et_tot

```



```

if h==1
    Bj(h,:)=-(Lj(h,1)+U(h,1))+((Vap(h,1)+W(h,1)).*K(h,:));
    Cj(h,:)=Vap(h+1,1).*K(h+1,:);
    Dj(h,:)=Alim_col(h,1).*Alim_col(h,4:C+3);
elseif h>=2 && h<=Num_et(1)-1
    Aj(h,:)=Lj(h-1,1);
    Bj(h,:)=-(Lj(h,1)+U(h,1))+((Vap(h,1)+W(h,1)).*K(h,:));
    Cj(h,:)=Vap(h+1,1).*K(h+1,:);
    Dj(h,:)=Alim_col(h,1).*Alim_col(h,4:C+3);
elseif h==Num_et(1)
    Aj(h,:)=Lj(h-1,1);
    Bj(h,:)=-(Lj(h,1)+U(h,1))+((Vap(h,1)+W(h,1)).*K(h,:));
    Dj(h,:)=Alim_col(h,1).*Alim_col(h,4:C+3);
elseif h==Num_et(1)+1
    Bj(h,:)=-(Lj(h,1)+U(h,1))+((Vap(h,1)+W(h,1)).*K(h,:));
    Cj(h,:)=Vap(h+1,1).*K(h+1,:);
    Dj(h,:)=Alim_col(h,1).*Alim_col(h,4:C+3);
elseif h>=Num_et(1)+2 && h<=Num_et(1)+Ns2(1)-1
    Aj(h,:)=Lj(h-1,1);
    Bj(h,:)=-(Lj(h,1)+U(h,1))+((Vap(h,1)+W(h,1)).*K(h,:));
    Cj(h,:)=Vap(h+1,1).*K(h+1,:);
    Dj(h,:)=Alim_col(h,1).*Alim_col(h,4:C+3);
elseif h==Num_et(1)+Ns2
    Aj(h,:)=Lj(h-1,1);
    Bj(h,:)=-(Lj(h,1)+U(h,1))+((Vap(h,1)+W(h,1)).*K(h,:));
    Cj(h,:)=Vap(h+1,1).*K(h+1,:);
    Dj(h,:)=Alim_col(h,1).*Alim_col(h,4:C+3);
elseif h>=Num_et(1)+Ns2(1)+1 && h<=Num_et_tot-1
    Aj(h,:)=Lj(h-1,1);
    Bj(h,:)=-(Lj(h,1)+U(h,1))+((Vap(h,1)+W(h,1)).*K(h,:));
    Cj(h,:)=Vap(h+1,1).*K(h+1,:);
    Dj(h,:)=Alim_col(h,1).*Alim_col(h,4:C+3);
elseif h==Num_et_tot
    Aj(h,:)=Lj(h-1,1);
    Bj(h,:)=-(Lj(h,1)+U(h,1))+((Vap(h,1)+W(h,1)).*K(h,:));
    Dj(h,:)=Alim_col(h,1).*Alim_col(h,4:C+3);
end
end

%% Geracao dos pontos fora da diagonal
EE1=zeros(Num_et_tot,Num_et_tot);
EE2=zeros(Num_et_tot,Num_et_tot);
EE3=zeros(Num_et_tot,Num_et_tot);

EE1(Ns2+Num_et(1),Num_et(1))=Lj(Num_et(1),1);
EE2(Ns2+Num_et(1),Num_et(1))=Lj(Num_et(1),1);
EE3(Ns2+Num_et(1),Num_et(1))=Lj(Num_et(1),1);
%% Matriz tridiagonal com elementos nao zeros fora da diag
Matr_A1=diag(Aj(2:end,1),-1)+EE1;
Matr_A2=diag(Aj(2:end,2),-1)+EE2;
Matr_A3=diag(Aj(2:end,3),-1)+EE3;
Matr_B1=diag(Bj(:,1));
Matr_B2=diag(Bj(:,2));
Matr_B3=diag(Bj(:,3));
Matr_C1=diag(Cj(1:end-1,1),1);
Matr_C2=diag(Cj(1:end-1,2),1);
Matr_C3=diag(Cj(1:end-1,3),1);

Matr_trid1=(Matr_A1+Matr_B1+Matr_C1); %Obtencao da matriz tridiagonal
Matr_trid2=(Matr_A2+Matr_B2+Matr_C2);
Matr_trid3=(Matr_A3+Matr_B3+Matr_C3);
D1=Dj(:,1);
D2=Dj(:,2);
D3=Dj(:,3);
xij(:,1)=Matr_trid1\D1; %Fracoes liquidas obtidas
xij(:,2)=Matr_trid2\D2; %Fracoes liquidas obtidas
xij(:,3)=Matr_trid3\D3; %Fracoes liquidas obtidas
figure(9)
% Normalizacao das fracoes liquidas obtidas
Liq=zeros(Num_et_tot,C+8);
Vap_nov=zeros(Num_et_tot,C+6);
xij_norm=zeros(Num_et_tot,C);
for i=1:Num_et_tot
    xij_norm(i,:)=xij(i,:)/sum(xij(i,:));
    Liq(i,4:C+3)=xij_norm(i,:);
    Liq(i,3)=P;
%Determinacao do ponto de bolha em cada estagio da coluna e fracoes da
%fase de vapor
[Liq(i,2),x,yij]=principalflash(P,Liq(i,4:C+3)',0);
Vap_nov(i,4:C+3)=yij;
[hlj,hvj]=specificeat(Liq(i,2));
Liq(i,C+4)=Liq(i,4:C+3)*hlj;
% Matriz de informacoes do vapor
Vap_nov(i,2)=Liq(i,2);
Vap_nov(i,3)=P;
Vap_nov(i,C+4)=Vap_nov(i,4:C+3)*hvj;
Vap_nov(i,C+5)=densidade_vap(yij,Vap_nov(i,2),Vap_nov(i,3));
Vap_nov(i,C+6)=moleculaw(yij);

```

```

% %Matriz de informacoes do liquido
    Liq(i,C+5)=viscosidade(Liq(i,2),x);
    Liq(i,C+6)=superf_tens(Liq(i,3),Liq(i,2),x);
    Liq(i,C+7)=densidade_liq(x,Liq(i,2));
    Liq(i,C+8)=moleculaw(x);
end
%% Determinacao das cargas de calor do refervedor e do condensador
Qj=zeros(Num_et_tot,1);
% % Calor no condensador
Qj(1,1)=Alim_col(1,1)*Alim_col(1,C+4)+Vap(2,1)*Vap_nov(2,C+4)-((Lj(1)+U(1,1))*Liq(1,C+4));
% %Calor no refervedor
Qj(Num_et(1),1)=sum((Alim_col(1:Num_et(1),C+4).*Alim_col(1:Num_et(1),1))-
(Liq(1:Num_et(1),C+4).*U(1:Num_et(1),1))-(Vap_nov(1:Num_et(1),C+4).*W(1:Num_et(1),1)))...
-sum(Qj(1:Num_et(1)-1,1))+Vap(1,1)*Vap_nov(1,C+4)-Lj(Num_et(1))*Liq(Num_et(1),C+4);
Qj(Num_et(1)+1,1)=Alim_col(Num_et(1)+1,1)*Alim_col(Num_et(1)+1,C+4)+Vap(Num_et(1)+2,1)*Vap_nov(Num_et(1)+2,
C+4)-((Lj(Num_et(1)+1,1)+U(Num_et(1)+1,1))*Liq(Num_et(1)+1,C+4));
Qj(Num_et_tot,1)=sum((Alim_col(Num_et(1)+1:Num_et_tot,C+4).*Alim_col(Num_et(1)+1:Num_et_tot,1))-
(Liq(Num_et(1)+1:Num_et_tot,C+4).*U(Num_et(1)+1:Num_et_tot,1))-
(Vap_nov(Num_et(1)+1:Num_et_tot,C+4).*W(Num_et(1)+1:Num_et_tot,1)))...
-sum(Qj(Num_et(1)+1:Num_et_tot-1,1))+Vap(Num_et(1)+1,1)*Vap_nov(Num_et(1)+1,C+4)-
Lj(end)*Liq(Num_et_tot,C+4)+Lj(Num_et(1))*Liq(Num_et(1),C+4);
%% Determinacao dos coeficientes alfa, beta, gama, Novas vazoes de vapor e liquido
Vap_nov(1,1)=Vap(1,1);
Vap_nov(Num_et(1)+1,1)=Vap(Num_et(1)+1,1);
Vap_nov(2,1)=Vap(2,1);
Vap_nov(Num_et(1)+2,1)=Vap(Num_et(1)+2,1);
for i=1:Num_et_tot
    if i>=2 && i<=Num_et(1)-1
        Vap_nov(i+1,1)=(Qj(i,1)-(Alim_col(i,1).*Alim_col(i,C+4))-(Lj(i-1,1).*Liq(i-
1,C+4)))+(Lj(i,1)+U(i,1)).*Liq(i,C+4))+((Vap(i,1)+W(i,1)).*Vap_nov(i,C+4))/Vap_nov(i+1,C+4);
    elseif i>=Num_et(1)+2 && i<=Num_et(1)+Ns2-1
        Vap_nov(i+1,1)=(Qj(i,1)-(Alim_col(i,1).*Alim_col(i,C+4))-(Lj(i-1,1).*Liq(i-
1,C+4)))+(Lj(i,1)+U(i,1)).*Liq(i,C+4))+((Vap(i,1)+W(i,1)).*Vap_nov(i,C+4))/Vap_nov(i+1,C+4);
    elseif i==Num_et(1)+Ns2
        Vap_nov(i+1,1)=-(Lj(Num_et(1)).*Liq(Num_et(1),C+4))+Qj(i,1)-(Alim_col(i,1).*Alim_col(i,C+4))-
(Lj(i-1,1).*Liq(i-
1,C+4)))+(Lj(i,1)+U(i,1)).*Liq(i,C+4))+((Vap(i,1)+W(i,1)).*Vap_nov(i,C+4))/Vap_nov(i+1,C+4);
    elseif i>=Num_et(1)+Ns2+1 && i<=Num_et_tot-1
        Vap_nov(i+1,1)=(Qj(i,1)-(Alim_col(i,1).*Alim_col(i,C+4))-(Lj(i-1,1).*Liq(i-
1,C+4)))+(Lj(i,1)+U(i,1)).*Liq(i,C+4))+((Vap(i,1)+W(i,1)).*Vap_nov(i,C+4))/Vap_nov(i+1,C+4);
    end
end
for i=1:Num_et_tot
    if i>=1 && i<=Num_et(1)-1
        Liq(i,1)=Vap_nov(i+1,1)+sum(Alim_col(1:i,1)-U(1:i,1)-W(1:i,1));
    elseif i==Num_et(1)
        Liq(i,1)=sum(Alim_col(1:i,1)-U(1:i,1)-W(1:i,1));
    elseif i>=Num_et(1)+1 && i<=Num_et(1)+Ns2-1
        Liq(i,1)=Vap_nov(i+1,1)+sum(Alim_col(Num_et(1)+1:i,1)-U(Num_et(1)+1:i,1)-
W(Num_et(1)+1:i,1));
    elseif i>=Num_et(1)+Ns2 && i<=Num_et_tot-1
        Liq(i,1)=Vap_nov(i+1,1)+sum(Alim_col(Num_et(1)+1:i,1)-U(Num_et(1)+1:i,1)-
W(Num_et(1)+1:i,1))+Liq(Num_et(1),1);
    elseif i==Num_et_tot
        Liq(i,1)=sum(Alim_col(Num_et(1)+1:i,1)-U(Num_et(1)+1:i,1)-W(Num_et(1)+1:i,1))+Liq(Num_et(1),1);
    end
end
DT(:,1)=(Vap_nov(:,2)-Vap(:,2));
Tmud(cont)=abs(max(DT));
Vap(:,2)=Vap_nov(:,2);
Vap(:,1)=Vap_nov(:,1);
Lj(:,1)=Liq(:,1);
if Tmud(cont)<=1e-6
    break
end
end
toc
figure(2);
plot(Liq(1:Num_et(1),4),'bo-');
hold on
plot(Liq(1:Num_et(1),5),'rp-');
hold on
plot(Liq(1:Num_et(1),6),'ks-');
hold off
title('Perfil de concentracoes de liquido nas etapas Coluna principal')
xlabel('Estagio No.')
ylabel('Fracao molar de liquido')
legend('Benzeno','Tolueno','P-xileno');
figure(3);
plot(Liq(Num_et(1)+1:Num_et_tot,4),'bo-');
hold on
plot(Liq(Num_et(1)+1:Num_et_tot,5),'rp-');
hold on
plot(Liq(Num_et(1)+1:Num_et_tot,6),'ks-');
hold off
title('Perfil de concentracoes de liquido nos estágios Coluna 2')
xlabel('Estagio No.')

```

```
ylabel('Fracao molar de liquido')
legend('Benzeno','Tolueno','P-xileno');
```

Função objetivo com penalidade para sequências convencionais

```
function TAC=total_annual_cost_penal(x)
global Altura1 Qj1 Area_coluna1 A_refe1 A_cond1 Cust_capital1 Cust_operac1 TAC1 Fund_Col1
global Altura2 Qj2 Area_coluna2 A_refe2 A_cond2 Cust_capital2 Cust_operac2 TAC2 Fund_Col2
% global Vapguarda Primeira_vez
% global Vapguarda1 Vapguarda2 Primera_vez1 Primera_vez2
% x0: Matriz de informacoes que contem: (1) Vazao destilado coluna 1
% (2) Relacao de refluxo coluna 1
% (3) Vazao destilado coluna 2
% (4) Relacao de refluxo coluna 2
[P,P_referv,Tf,F, fra_alim,N,ii]=dados_entrada(); %Geracao dos dados de entrada
[Altura1,Qj1,L_Col1,Area_coluna1,A_refe1,A_cond1,Cust_capital1,Cust_operac1,TAC1]=torrel(P,P_referv,Tf,F, fra_alim,x(1),x(2),N(1),ii(1)); %Original
[Altura2,Qj2,L_Col2,Area_coluna2,A_refe2,A_cond2,Cust_capital2,Cust_operac2,TAC2]=torrel(P,P_referv,L_Col1(1,2),x(1),L_Col1(1,4:6)',x(3),x(4),N(2),ii(2)); %original
Fund_Col1=L_Col1(end,6);
Fund_Col2=L_Col2(end,5);
g1=0.99-L_Col1(end,6);
g2=0.99-L_Col2(end,5);
if g1 >=0
    p1=1e15*g1^2; %original
else
    p1=0;
end
if g2 >=0
    p2=1e15*g2^2; %original
else
    p2=0;
end
TAC=(TAC1+TAC2+p1+p2)/1e6; %Original
```

Otimização combnatoria para sequências convencionais

```
close all
clear all
clc
global NTc11 NFc11 NTc22 NFc22 Fund_Col1 Fund_Col2
% Neste programa os parametros de composicoes na alimentacao, numero de
% etapas e etapa de alimentaca sao mudados nos arquivos total_annual_cost.m
% e nonlincontr.m, para realizar analise de sensibilidade
F=200; %Vazao de alimentacao [kmol/h]
R0=[6.000;9.000]; %Valores iniciais para comp 01/01/08
D0=[40.0000;20.0000]; %Valores iniciais para comp 01/01/08
% x0: Matriz de informacoes iniciais que contem: (1) Vazao destilado coluna 1
% (2) Relacao de refluxo coluna 1
% (3) Vazao destilado coluna 2
% (4) Raz de refluxo coluna 2
% Valores de inicializacao da otimizacao
x0=[D0(1);R0(1);D0(2);R0(2)];
x=[D0(1);R0(1);D0(2);R0(2)];
% Limites para relacao de relfuxo (1) col 1, (2), col 2
%inferior
lb1=[0.10;0.1000]; %Rel ref inferior para frac_alim=[0.1 0.1 0.8]
ub1=[30;30]; %Rel ref superior para frac_alim=[0.8 0.1 0.1]
% Limites para vazao destilado (1) col 1, (2), col 2
lb2=[30;18]; %Destil inferior para frac_alim=[0.1 0.1 0.8]
ub2=[50;21]; %Destil superior para frac_alim=[0.1 0.1 0.8]

% Limites para vazao destilado y relacao de refluxo col 1 col 2
lb=[lb2(1);lb1(1);lb2(2);lb1(2)]; %Original
ub=[ub2(1);ub1(1);ub2(2);ub1(2)]; %Original
Informacao do numero de etapas (NTc), Etapa de alimentacao (NFc)
NTc1=[38 39 40]; %numero de etapas torre 1
NFc1=[11 12 13]; %etapa de alimentacion torre1

NTc2=[28 29 30]; %numero de columnas torre 2
NFc2=[10 11 12]; %etapa de alimentacion torre 2
tic
xop=zeros(2000,4);
fop=zeros(2000,1);
offset=1;
for cont1=1:length(NTc1)
    NTc11= NTc1(cont1);
    for cont2=1: length(NFc1)
        NFc11= NFc1(cont2);
        for cont3=1:length(NTc2)
            NTc22 = NTc2(cont3);
            for cont4=1:length(NFc2)
                NFc22= NFc2(cont4);
```

```

%funcao de otimizacao
opts = optimset('display','iter','MaxFunEvals',inf);
[x,fval,exitflag]=fmincon(@total_annual_cost_penal,x0,[],[],[],[],lb,ub,[],opts);
optimzacion=optimzacion+1;
xop(optimzacion,:)=x';
fop(optimzacion,:)=fval;

%armazem dados
filename='optimi.xls';
A = [NTc11,NFc11, NTC22,NFc22,xop(optimzacion,:),Fund_Col1,Fund_Col2,fop(optimzacion,:)];
sheet=1;
xlrange=sprintf('A%d',offset);
xlswrite(filename,A,sheet,xlrange);
offset=offset+1;

end
end
end
end
toc

```

Valor de fronteira para uma sequência convencional

```

close all
clear all
clc

P=1.01325; %Pressao da coluna [bar]
P_referv=10*P; %Pressao de operacao do refervedor [bar]
Tf=340; %Temperatura da alimentacao [K]
F=200; %Vazao de alimentacao [kmol/h]
x0=[0.100 0.100 0.800]'; %Fraccoes da alimentacao
nr=100; %Número de etapas na seccao de retificacao
ns=100; %Número de etapas na seccao de retificacao
% % Variáveis com condicao inicial
xd1=0.99; %Quantidade de Produto desejado no destilado na coluna 1 (pto ligeiro A)
xb3=0.99; %Quantidade de Produto desejado no destilado na coluna 2 (pto ligeiro B)
R1=8;
R2=11; %Refluxo para coluna 2
y01=R1;
y02=R2;
ub1=6;
tic
[B1,D1,xb01,xd01,T1,Qc1,Qb1,ii1,N1,TAC1]=torrel(P,P_referv,Tf,F,x0,xd1,nr,ns,R1);
[B2,D2,xb02,xd02,T2,Qc2,Qb2,ii2,N2,TAC2]=torre2(P,P_referv,T1,B1,xb01,xb3,nr,ns,R2);
toc
xlswrite('direta',[R1,B1,D1,xb01(1),xb01(2),xb01(3),xd01(1),xd01(2),xd01(3),T1,Qc1,Qb1,ii1(1),N1,TAC1,R2,B2,
D2,xb02(1),xb02(2),xb02(3),xd02(1),xd02(2),xd02(3),T2,Qc2,Qb2,ii2(1),N2,TAC2]','A48:AD48');
%% Custo total anualizado para as duas colunas
TAC=TAC1+TAC2;

```

Valor de fronteira para uma coluna convencional

```

function [B,D,xb0,xd0,T,Qc,Qb,ii,N,TAC1]=torrel(P,P_referv,Tf,F,x0,xbi,nr,ns,R);
y0=R;
%Determinacao dos perfis fase liquida
[B,D,xb0,xd0]=perfilconcentracoes(F,x0,xbi);
% function TAC1=obj(y0)
T=temp_fundo(P,xd0);
[Vr,Lr,Vr1,Lr1,Qc]=rectificationcalc(x0,D,xd0,P,nr,y0);
[Qb,hbv0,hb0]=refervedor(x0,F,P,B,D,Tf,xb0,Qc,Lr1);
[L1,hL1,V]=fluxo_liq(P,x0,B,xb0,Qb,hbv0,hb0);
[Lm1,Sm,Vm]=etapa_fondol(P,x0,B,xb0,Qb,hb0,L1,V,ns,y0);
[A_topo A_fundo]=area_equip(Vr,Lr,Lm1,Vm);
[xi,yi,ii,N]=graph(xb0,xd0,Lr,Lm1)
% ii=[19;4]';
h=altura(P,Tf,x0,N);
% %Custo da coluna
Cust_Coluna=Cust_coluna(A_topo,A_fundo,h);
% %Custos de capital
% %Custo dos trocadores de calor
A_refe=area_refervedor(Qb,Lm1,P_referv);
A_cond=area_condensador(Lr,Qc);
[Cust_ref,Cust_cond]=custo_trocadores(A_refe,A_cond);
Cust_capital=Cust_Coluna+Cust_ref+Cust_cond;
% %Custos de operacao
% %Custo de vapor no refervedor
[Tvap,H,F_vap,Cust_vapor]=cust_vapor_refervedor(Qb,P_referv);
% %Custo da agua no condensador
[cust_Agua_cond,Wc]=cust_agua_cond(Lr,Qc,Qb,P_referv);

Cust_operac=((Cust_vapor*F_vap)+(cust_Agua_cond*Wc))*8760; %Wc vazao de agua de esfriamento em kg/h
% %Total annual cost
K_cap=1/4;
TAC1=((2.43*K_cap+0.19)*Cust_capital)+Cust_operac)/1e6;
end

```



```

L1(2)=principalflash(L1(3),L1(4:6)',0); %Temperatura do liquido que entra ao refervedor
x=L1(4:6)';
L1(7)=viscosidade(L1(2),x);
L1(8)=superf_tens(L1(3),L1(2),x);
L1(9)=densidade_liq(x,L1(2)); %Densidade do liquido (kg/m^3)
L1(10)=moleculaw(x);
Cp=specificheat(L1(2));
hL1=L1(4:6)*Cp; %Entalpia da vazão do liquido que entra ao refervedor
function ER=ener_ref(V0)
    ER=((L1(1)*hL1)-(B*hb0)+Qb)/hvb0-V0; %Função objetivo para calcular a vazão de vapor gerado no
refervedor
end
V=fzero(@ener_ref,V0); %Vapor calculado para a saída da etapa
end

```

Perfil de concentrações na zona de fundo da coluna

```

function [Lm1,Sm,Vm]=etapafondol(P,x0,B,xb0,Qb,hb0,L1,V,ns,R)
% function [Lm1,Sm,Vm]=etapafondol(P,x0,B,xb0,Qb,hvb0,hb0,ns,R)
% Bc-- Matriz de informação da vazão de fundo
% Bc(1)--Vazão em Kmol/h
% Bc(2)--Temperatura (k)
% Bc(3)--Pressão (bar)
% Bc(4:6)--Composições do benzeno (4)Tolueno(5) p-Xileno(6)
% Bc(7)--Viscosidade (cP)
% Bc(8)--Tensão superficial (din/cm)
% Bc(9)--Densidade (kg/m^3)
% Bc(9)--Peso molecular (kg/m^3)
%% Determinacao da matriz de fundos
C=length(x0);
[Tm,xm,yim]=principalflash(P,xb0,0);
[Cpl,Cpv]=specificheat(Tm);
hb0=xm'*Cpl; %entalpia de fundos
u=viscosidade(Tm,xm);
o=superf_tens(P,Tm,xm);
dL=densidade_liq(xm,Tm); %Densidade do liquido (kg/m^3)
Bc=[B Tm P xb0' u o dL]; %Matriz de informações do liquido
%Determinacion de Sm, relacion de reflujo del rehervidor
function FO=refref(Sm0)
xi=(Sm0/(1+Sm0))*yim+(Bc(4:6)'/ (1+Sm0)); %Frações novas de liquido
[Tm,xm,y]=principalflash(Bc(3),xi,0);
[Cpl,Cpv]=specificheat(Bc(2));
hlm=xm'*Cpl; %Entalpia de liquido
hvm=y'*Cpv; %entalpia de vapor
FO=(Qb/Bc(1))+((1+Sm0)*hlm)-(Sm0*hvm)-hb0;
end
Sm0=V/B;
%% Vazão de liquido que entra ao refervedor
Lm1=zeros(ns,C+7);
Vm=zeros(ns,C+5);
Lm1(1,:)=L1;
options=optimset('TolX',1e-12,'Tolfun',1e-12);
[Sm,fval,exitflag]=fzero(@refref,Sm0,options);
for j=1:ns
    Lm1(j,4:6)=((Sm/(1+Sm))*yim)+(Bc(4:6)'/ (1+Sm0)); %Frações de liquido novas
    Lm1norm(j,4)=Lm1(j,4)/(Lm1(j,4)+Lm1(j,5)+Lm1(j,6)); %Fracões de liquidos normalizados
    Lm1norm(j,5)=Lm1(j,5)/(Lm1(j,4)+Lm1(j,5)+Lm1(j,6));
    Lm1norm(j,6)=Lm1(j,6)/(Lm1(j,4)+Lm1(j,5)+Lm1(j,6));
    [Lm1(j,2),Lm1(j,4:6),yim]=principalflash(Bc(3),Lm1norm(j,4:6)',0); %Temperatura de bolha e fracao
de vapor
    [Cpl,Cpv]=specificheat(Lm1(j,2));
    hlim=Lm1(j,4:6)*Cpl; %Entalpia de liquido
    Lm1(j,1)=Sm*Bc(1); %Vazão do liquido kmol/h
    Lm1(j,3)=Bc(3); %Pressão
    Lm1(j,7)=viscosidade(Lm1(j,2),Lm1(j,4:6)'); %Viscosidade da mistura (cP)
    Lm1(j,8)=superf_tens(Lm1(j,3),Lm1(j,2),Lm1(j,4:6)'); %Tensão superficial (din/cm)
    Lm1(j,9)=densidade_liq(Lm1(j,4:6)',Lm1(j,2)); %Densidade (kg/m^3)
    Lm1(j,10)=moleculaw(Lm1(j,4:6)'); %Peso molecular (kg/m^3)
%% Vazões de vapor
Vm(j,1)=(1+Sm)*Bc(1);
Vm(j,2)=Lm1(j,2);
Vm(j,3)=Bc(3);
Vm(j,4:6)=yim;
Vm(j,7)=densidade_vap(Vm(j,4:6)',Vm(j,2),Vm(j,3));
Vm(j,8)=moleculaw(Vm(j,4:6)');
end
end

```

APÊNDICE C. RESULTADOS PARA UMA OTIMIZAÇÃO COMBINATÓRIA EM UMA CONFIGURAÇÃO DWC.

Num estágios prefac	Estágio alimentaç ão	Num estágios col principal	Estágio Conexão superior	Estágio Saída lateral	Estágio Conexão inferior	Vazão Destilado (kmol/h)	Razão de refluxo	Vazão de líquido conexão superior (kmol/h)	Vazão saída lateral (kmol/h)	Vazão de vapor conexão inferior (kmol/h)	Fração molar benzeno	Fração molar tolueno	Fração molar P- xileno	TAC X10 ⁸ (US\$/ano)
19	9	43	7	24	36	15	23,36978	89,06782	15,43989	100,8638	0,999967	0,98	0,990135	4,530741
19	9	43	5	24	36	15	23,68717	89,12565	15	100,7221	0,999956	0,980076	0,99	4,554204
21	11	43	5	24	36	15	22,98114	89,07709	16,41352	100,5563	0,999959	0,98	0,990368	4,561464
21	10	43	5	24	36	15	23,58877	89,39809	15	100,3643	0,999952	0,979999	0,990312	4,602735
19	10	42	6	24	36	15	24,11773	89,10852	16,71956	100,7213	0,999952	0,98	0,990268	4,641392
21	11	42	6	24	36	15	23,84	89,0849	16,51213	100,7331	0,99995	0,981291	0,99	4,666476
20	10	43	5	24	37	15	24,15251	89,18372	15,78525	100,44	0,999957	0,982827	0,99	4,668478
19	10	43	6	24	36	15	24,38	89,59091	15	100,16	0,999939	0,980252	0,99	4,68054
20	11	42	5	24	36	15	24,07402	89,14482	17,06232	100,4678	0,999948	0,97765	0,990118	4,681986
20	10	43	7	24	37	15	24,2692	89,57722	15,42217	100,1103	0,999956	0,981937	0,99	4,694269
19	10	42	5	24	36	15	24,82054	89,10212	16,96141	100,5427	0,99995	0,98	0,990968	4,727526
21	11	42	5	24	36	15	24,38276	89,17287	16,90066	100,4382	0,999947	0,979999	0,990748	4,731843
20	10	42	7	24	36	15	24,7411	89,17498	15,78449	100,6444	0,999952	0,981372	0,99	4,734649
19	11	43	7	24	36	15	24,59259	89,11328	15,68874	100,7754	0,999954	0,983198	0,99	4,753747
19	9	43	7	25	36	15	25,13777	89,06922	15	100,8552	0,999958	0,98	0,990864	4,759417
21	11	43	6	24	37	15	24,33327	89,70381	17,59334	100,1434	0,999963	0,979999	0,991467	4,762297
19	10	42	7	24	36	15	25,07049	89,22969	16,96228	100,5832	0,999957	0,98	0,991122	4,774866
21	10	43	7	24	37	15	24,78315	89,38338	16,46491	100,526	0,999969	0,98	0,990694	4,779823
21	10	43	6	24	37	15	24,95829	89,4789	16,02703	100,2767	0,999963	0,98	0,990643	4,791747
19	11	43	6	24	36	15	24,99645	89,45382	16,23786	100,4344	0,999949	0,98	0,99124	4,799134
21	11	43	6	24	36	15	24,56232	89,70019	17,60321	100,1523	0,999962	0,98	0,993237	4,799432
21	11	43	5	24	37	15,55732	23,89421	89,25965	17,0217	100,3976	0,99995	0,979999	0,991164	4,810796
20	11	43	6	24	37	15	24,78854	89,85247	18,08469	99,93806	0,999962	0,979999	0,99212	4,815411
21	10	43	7	24	36	15	25,00565	89,37923	16,47467	100,5344	0,999968	0,98	0,992383	4,816112
21	10	43	6	24	36	15	25,1533	89,47499	16,03553	100,2843	0,999961	0,98	0,992253	4,8244
21	10	42	7	24	36	15	25,53815	89,09716	16,25065	100,7723	0,999959	0,98	0,990639	4,852081
20	11	43	6	24	36	15	25,03997	89,84977	18,09553	99,94646	0,999961	0,98	0,99385	4,855413
19	9	42	7	24	36	15	26,11288	89,14498	15	100,6073	0,99995	0,981502	0,99	4,855998
19	11	42	6	24	36	15	25,64417	89,79699	16,57811	100,1469	0,999932	0,98	0,99123	4,865323
19	9	43	6	25	37	15	26,10339	89,30618	15	100,4022	0,999951	0,98	0,990372	4,870673
20	11	42	5	25	36	15	25,73615	89	15,93422	100,5448	0,999923	0,980108	0,99	4,876728
21	10	42	6	24	36	15	25,86733	89,15583	15	100,5584	0,999942	0,982454	0,99	4,879807
21	11	43	7	24	37	15	25,28684	90,01084	17,30344	99,69062	0,999962	0,98	0,992073	4,89089
19	11	42	6	24	37	15,41783	24,98226	89,08613	18,06437	100,9078	0,999955	0,979155	0,989904	4,898809
20	11	43	7	24	38	15	25,62928	89,91729	17,07973	99,77297	0,999961	0,983498	0,99	4,91974
19	9	43	6	24	38	15,35626	25,70632	89,19119	17,50384	100,8527	0,999972	0,98	0,99001	4,92111
20	11	42	7	24	36	15	26,01127	89,27442	15,33005	100,4959	0,999934	0,984723	0,99	4,926526
21	11	43	7	24	36	15	25,54634	90,00588	17,3149	99,70177	0,99996	0,98	0,993752	4,9319
21	11	43	6	24	38	15,40092	24,95254	89,77063	17,9192	100,0823	0,999964	0,974828	0,989969	4,936922
19	9	43	6	24	37	15,39139	25,72761	89,19084	17,50475	100,8534	0,99997	0,98	0,992267	4,940131
21	10	43	7	25	36	15	26,12893	89,00834	15,18907	100,9808	0,999961	0,981665	0,99	4,945083
19	11	42	7	25	36	15	26,23515	89,05234	16,37858	100,8049	0,999942	0,979999	0,990798	4,949735
20	10	43	7	24	36	15	26,26913	89,54256	15,51107	100,1866	0,999957	0,98	0,991536	4,950631
19	10	43	5	25	37	15	26,59366	89,53424	15	100,2407	0,99993	0,981428	0,99	4,955916
20	10	43	5	25	36	15	26,50806	89,40107	15	100,3298	0,999938	0,979999	0,990484	4,961979
19	10	42	5	24	37	15,55023	25,60412	89,30053	17,59772	100,366	0,999944	0,98	0,990566	4,962745
19	9	42	5	24	36	15	27,04086	89,22364	16,01441	100,6006	0,99995	0,98	0,991304	4,967463
19	10	43	5	24	37	15	26,71928	89,75908	16,05515	99,99335	0,99995	0,98	0,99139	4,979871
20	10	43	7	25	36	15	26,58005	89,38835	15	100,3319	0,999947	0,979999	0,990726	4,986077
20	11	43	5	25	37	15	26,35179	89	15,77399	101	0,999949	0,982705	0,98952	4,989133
19	9	43	6	24	36	15,52725	25,80622	89,18965	17,50812	100,8559	0,999967	0,98	0,9939	4,991637
21	11	42	7	24	36	15	26,52344	89,64498	15	100,0833	0,999928	0,981433	0,99	4,995539
20	10	43	6	24	38	15	26,63766	89,87445	17,25112	99,87411	0,999965	0,98	0,990481	5,001999
19	10	43	5	24	36	15	26,84182	89,75443	16,06054	99,99995	0,999948	0,98	0,992667	5,002793
21	11	43	7	25	37	15	26,41005	89,30502	15	100,583	0,999943	0,984108	0,99	5,011666
20	10	43	6	24	37	15	26,71381	89,87278	17,25446	99,87729	0,999963	0,98	0,992666	5,019347
19	10	43	6	25	37	15	26,98834	89,15237	15	100,7446	0,999941	0,984769	0,99	5,02045
19	11	43	7	25	36	15	26,70965	89,34837	15	100,4776	0,999931	0,982234	0,99	5,020849
20	11	41	6	24	36	15	26,94597	89,07314	17,28588	100,6551	0,999938	0,979999	0,990201	5,031573
20	11	41	7	24	36	15	27,07099	89,1886	16,7731	100,5276	0,999938	0,980789	0,99	5,050834
21	10	42	5	24	37	15	27,24843	89,24701	16,81055	100,4668	0,999957	0,98	0,990072	5,055337
20	10	43	7	25	38	15,05807	27,00363	89,58001	15,95535	100,1662	0,999956	0,981493	0,99	5,062904
20	10	43	6	24	36	15	27,01653	89,86647	17,2679	99,88975	0,999962	0,98	0,994193	5,065964
19	11	43	6	25	36	15	27,13831	89,33251	15	100,4617	0,999918	0,983156	0,99	5,070496
19	11	43	5	26	37	15	27,25021	89,19754	15,78901	100,7405	0,999926	0,980783	0,99	5,074978
19	11	41	7	24	36	15	27,42233	89,28311	16,29784	100,5721	0,99993	0,983273	0,99	5,081958
21	10	43	7	25	38	15	27,11637	89,00686	17,39404	100,9849	0,999973	0,98	0,9903	5,085007
21	10	42	7	25	36	15	27,42646	89,18639	15	100,5491	0,999938	0,98	0,990686	5,085948
19	11	43	5	26	36	15	27,2937	89,19557	15,79087	100,7432	0,999922	0,98	0,990702	5,086325
19	9	42	7	25	36	15	27,93156	89,12927	15	100,6794	0,999941	0,98	0,990777	5,088999
20	11	42	5	25	37	15	27,26009	89	17,1376	101	0,999945	0,980811	0,990421	5,091057
21	11	42	7	25	36	15	27,32774	89,39567	15	100,2898	0,999921	0,980568	0,99	5,099004
21	10	42	5	24	36	15	27,53569	89,24098	16,82296	100,4784	0,999955	0,98	0,992217	5,099926
19	11	41	6	24	36	15	27,70828	89,33546	16,86393	100,25	0,999927	0,98	0,990194	5,101515
20	10	43	6	25	37	15	27,52997	89,11675	15	100,7978	0,999948	0,98404	0,99	5,101836
20	11	43	7	24	37	15	26,96447	89,90184	17,13942	99,81969	0,999961	0,979944	0,99262	5,103055
21	11	41	7	24	36	15	27,44018	89,10673	16,56323	100,6053	0,99994	0,981526	0,99	5,108435
19	10	43	6	26	37	15	27,76444	89,48779	15	100,302	0,999922	0,98	0,990298	5,112953
21	10	43	5	24	38	15,67771	26,23893	89,00035	16,82865	100,9994	0,999966	0,982999	0,99	5,118082

Num estágios prefac	Estágio alimentaç ão	Num estágios col principal	Estágio Conexão superior	Estágio Saída lateral	Estágio Conexão inferior	Vazão Destilado (kmol/h)	Razão de refluxo	Vazão de líquido conexão superior (kmol/h)	Vazão saída lateral (kmol/h)	Vazão de vapor conexão inferior (kmol/h)	Fração molar benzeno	Fração molar tolueno	Fração molar P- xileno	TAC X10 ⁶ (US\$/ano)
21	10	43	5	26	38	16,16338	29,04652	89,3916	16,21497	100,4404	0,999921	0,979999	0,991582	5,615141
19	11	42	5	25	37	15	31,36468	89	19,17137	101	0,999957	0,98	0,993153	5,619708
21	10	42	6	24	38	16,32874	28,9996	89,12104	17,48373	100,8314	0,999949	0,983184	0,99	5,640396
20	9	41	7	24	36	15	32,44815	89,14193	16,7156	100,3038	0,999963	0,98	0,990906	5,643362
20	9	41	7	24	36	15	32,44815	89,14193	16,7156	100,3038	0,999963	0,98	0,990906	5,643362
21	11	42	7	26	37	15	31,68842	89,28093	15	100,5173	0,999913	0,982345	0,99	5,651482
19	11	42	7	26	36	15	31,91925	89,21405	15	100,6336	0,999903	0,982187	0,99	5,652946
19	10	42	7	26	37	15	32,21576	89,22981	15	100,6053	0,999918	0,982514	0,99	5,657643
19	11	42	5	25	38	15	31,85337	89	16,87323	101	0,999942	0,987961	0,99	5,662147
19	10	41	5	24	36	15	32,61554	89,22028	15	100,6268	0,9999	0,98704	0,99	5,670152
20	10	41	6	24	37	15	32,42663	90,36681	16,61372	99,90349	0,999931	0,981133	0,99	5,672108
19	10	41	6	24	37	16,14573	29,91108	89,76876	18,22305	100,3367	0,999923	0,98	0,99092	5,673436
20	11	42	6	25	38	15	31,76676	89,80203	18,35949	100,0947	0,999952	0,98	0,990713	5,674364
21	10	42	7	26	36	15	32,05038	89,06915	15	100,8295	0,999925	0,98	0,992127	5,676992
21	11	42	5	26	37	15,32539	31,19875	89,23434	16,32217	100,7568	0,999909	0,979999	0,991377	5,678648
20	10	42	7	25	37	16,15328	29,74263	89,50333	16,23412	100,2784	0,999916	0,979999	0,991971	5,680146
20	11	42	6	25	36	15	32,05286	89,09821	15	100,8224	0,99991	0,985654	0,99	5,680162
21	10	43	6	26	38	16,11569	29,53634	89,30416	16,68597	100,7055	0,999937	0,979999	0,992041	5,681767
19	9	41	6	24	36	15	32,82941	89,6108	17,0026	100,2648	0,999943	0,98	0,992344	5,682243
19	9	43	5	24	37	17,39646	27,59214	89,58469	17,42065	100,301	0,999922	0,98	0,994448	5,688191
19	10	42	6	26	37	15,04813	32,27354	89	16,61516	100,9898	0,999932	0,98	0,992102	5,696912
20	9	42	6	25	38	17,08282	28,35241	89	17,53033	101	0,999935	0,98	0,990193	5,697973
20	9	42	6	25	38	17,08282	28,35241	89	17,53033	101	0,999935	0,98	0,990193	5,697973
19	10	43	6	25	36	15	32,31274	89	15	101	0,999942	0,985684	0,990712	5,703582
19	11	42	7	24	38	15,77238	30,44767	89,02753	16,57145	100,9226	0,999938	0,989968	0,99	5,706098
19	10	43	5	26	37	15	32,65128	89,29041	15	100,587	0,999927	0,982661	0,99	5,725267
19	10	42	5	26	37	15	32,8833	89,21466	15	100,641	0,999897	0,984027	0,99	5,7286
19	9	42	7	26	36	15	33,04526	89,08919	15	100,7956	0,999927	0,98	0,992328	5,739884
21	11	42	6	25	36	15	32,58461	89,26769	15	100,6078	0,999915	0,983139	0,99	5,754677
21	11	43	7	25	36	15	32,50972	89	15	101	0,999944	0,986082	0,991373	5,795656
20	10	41	5	24	37	15	33,41141	89,09928	16,39045	100,7445	0,999934	0,986906	0,99	5,795741
20	11	43	7	26	38	15	32,72164	89	15,18471	101	0,99994	0,986445	0,99	5,798456
21	11	42	5	26	38	15,8637	31,23055	89	16,85962	101	0,999914	0,978696	0,989635	5,836991
19	10	42	6	24	38	17,70116	28,21419	89,38532	18,09398	100,6197	0,999946	0,98	0,990197	5,847713
20	9	42	5	26	37	16,24557	31,36062	89,1834	15,0933	100,7182	0,999881	0,982552	0,990208	5,869442
20	9	42	5	26	37	16,24557	31,36062	89,1834	15,0933	100,7182	0,999881	0,982552	0,990208	5,869442
21	10	43	7	24	38	17,38877	28,38899	89,81543	18,61164	100,12	0,999949	0,98	0,994067	5,884747
19	9	42	5	24	38	17,09297	29,66641	89,69215	18,90983	100,1573	0,999938	0,98	0,991933	5,885332
19	9	41	5	24	37	16,46528	31,40926	89,7473	16,05535	99,33049	0,999882	0,980031	0,99	5,88907
19	9	41	7	25	36	15	34,45669	89,06291	16,40742	100,8748	0,999937	0,98	0,992128	5,889841
21	11	42	5	24	37	15	33,49337	90,5089	16,96291	99	0,999938	0,97835	0,993045	5,892198
19	10	42	7	26	38	15,58503	32,63881	89,55326	16,34735	100,3074	0,99992	0,98	0,990517	5,898364
19	11	41	6	26	36	15	34,15221	89	16,03848	101	0,999885	0,98	0,990966	5,910541
19	10	41	5	25	37	15	34,46274	89	16,88714	101	0,999926	0,983864	0,990495	5,916817
20	10	43	7	26	38	15	33,8171	89	15	101	0,999943	0,988299	0,991991	5,922138
20	9	43	6	24	36	15	34,36527	91	15	99	0,999951	0,98	0,993295	5,940495
20	9	43	6	24	36	15	34,36527	91	15	99	0,999951	0,98	0,993295	5,940495
20	10	41	7	24	37	16,65175	30,75005	89,82558	17,87356	99,984	0,999919	0,98	0,991538	5,941397
21	10	41	5	25	37	15,91546	32,44012	89	16,83533	101	0,999917	0,981388	0,99	5,942652
19	9	42	5	24	37	17,27644	29,76401	89,69058	18,91363	100,1604	0,99993	0,98	0,994425	5,958025
19	11	41	5	24	37	15	34,75476	91	17,74518	99	0,999921	0,976749	0,991605	5,994571
20	10	42	7	24	38	15	34,70214	89,06771	15	100,8045	0,999944	0,991154	0,99	5,999599
19	10	42	6	26	38	15,85771	32,89908	89,17465	17,3337	100,8164	0,999922	0,98	0,991291	6,015654
20	10	42	5	26	36	18,27586	28,33202	89,16214	16,48776	100,8258	0,999552	0,980226	0,99	6,019606
19	10	42	7	24	38	15	34,97414	89	15	101	0,999942	0,992596	0,990151	6,024543
20	9	41	5	24	37	15	35,60723	89,13296	17,22404	100,8078	0,999964	0,983162	0,99	6,024794
20	9	41	5	24	37	15	35,60723	89,13296	17,22404	100,8078	0,999964	0,983162	0,99	6,024794
19	11	43	6	25	38	19,21843	26,58073	89,00821	15,00353	100,9735	0,999072	0,981907	0,99	6,029386
20	11	41	6	26	37	15	34,97403	89,00029	16,10937	100,9967	0,999897	0,980214	0,99	6,029586
20	10	41	6	24	36	15	35,48581	90,73999	15	99,20369	0,999895	0,98	0,991248	6,031728
19	9	42	6	25	38	17,24573	30,60955	89,91818	16,16339	100,2761	0,999873	0,98	0,990247	6,032874
19	10	42	6	24	37	19,22294	26,97876	89,3469	15,4946	100,6601	0,999292	0,981932	0,99	6,035655
20	11	41	6	26	36	15	35,09763	89	16,1147	101	0,999891	0,98	0,991242	6,040372
21	10	41	6	25	37	16,06963	32,86141	89,00007	16,3539	100,9998	0,999906	0,98303	0,99	6,049216
20	9	42	6	24	36	18,38163	28,34578	89,01436	18,73152	100,9726	0,99993	0,9819	0,994631	6,050392
20	9	42	6	24	36	18,38163	28,34578	89,01436	18,73152	100,9726	0,99993	0,9819	0,994631	6,050392
20	9	42	5	25	38	17,41303	30,24241	89,55168	17,64415	100,4826	0,999915	0,98	0,991502	6,051823
20	9	42	5	25	38	17,41303	30,24241	89,55168	17,64415	100,4826	0,999915	0,98	0,991502	6,051823
19	9	43	5	26	38	18,70263	27,96081	89,24337	17,6337	100,8312	0,999737	0,983662	0,99	6,05227
20	11	42	6	26	36	15	35,04823	89	15	101	0,999895	0,985608	0,990012	6,055652
20	9	41	6	25	36	15	35,91037	89,53832	15,29732	100,1894	0,999927	0,981608	0,99	6,056967
20	9	41	6	25	36	15	35,91037	89,53832	15,29732	100,1894	0,999927	0,981608	0,99	6,056967
21	10	43	6	25	38	15	35,10518	90,99999	15	99	0,999938	0,98	0,991784	6,062447
21	10	42	7	24	38	15	35,14508	89,06428	15	100,8483	0,999947	0,990063	0,99	6,064958
19	10	42	5	24	38	18,64141	28,13568	89,64582	17,82242	100,1253	0,999788	0,980286	0,991278	6,071281
19	11	43	5	24	36	15	35,05143	89,73327	15	99	0,999907	0,984047	0,993225	6,07146
20	10	42	6	25	38	16,03055	32,85022	89,74613	18,57304	100,2524	0,999943	0,98	0,992083	6,079508
21	10	43	6	25	37	15	35,26953	91	15	99	0,999934	0,98	0,993109	6,090507
20	9	42	7	24	37	15	35,98446	91	15	99	0,999947	0,98	0,991307	6,101685
20	9	42	7	24	37	15	35,98446	91	15	99	0,999947	0,98	0,991307	6,101685

Num estágios prefac	Estágio alimentaç ão	Num estágios col principal	Estágio Conexão superior	Estágio Saída lateral	Estágio Conexão inferior	Vazão Destilado (kmol/h)	Razão de refluxo	Vazão de líquido conexão superior (kmol/h)	Vazão saída lateral (kmol/h)	Vazão de vapor conexão inferior (kmol/h)	Fração molar benzeno	Fração molar tolueno	Fração molar P- xileno	TAC X10 ⁶ (US\$/ano)
20	10	42	6	26	38	16,47604	32,73018	89,04024	16,16649	100,9512	0,999884	0,981664	0,99	6,158961
21	10	43	7	26	36	15	35,62057	89	15	101	0,999945	0,986182	0,992901	6,160713
19	10	41	7	25	37	15	36,62823	89,02401	15	100,8963	0,999911	0,988448	0,99	6,189775
19	9	41	7	25	37	15,79774	34,88946	89,23981	17,1752	100,7054	0,99993	0,98	0,991358	6,190106
21	10	42	5	25	36	17,45351	30,79212	89,27629	17,7896	100,5429	0,999879	0,978127	0,995138	6,192235
21	10	41	6	24	37	16,6418	32,53482	89,65986	18,73912	100,2082	0,999928	0,98	0,992356	6,195749
20	9	42	5	24	38	15	36,69554	89,01739	18,50496	99	0,999978	0,98	0,991574	6,195988
20	9	42	5	24	38	15	36,69554	89,01739	18,50496	99	0,999978	0,98	0,991574	6,195988
19	10	42	5	26	38	16,84815	32,31714	89	17,10343	101	0,999866	0,980076	0,991277	6,199116
20	10	42	5	24	38	15	36,27173	89,23509	20,83131	100,7085	0,999983	0,98	0,992746	6,202652
19	9	43	7	26	36	15	36,41961	89	15	101	0,999944	0,985799	0,994487	6,209047
20	9	42	6	24	38	15,36888	35,98329	91	15,91032	99	0,99995	0,98	0,990379	6,212798
20	9	42	6	24	38	15,36888	35,98329	91	15,91032	99	0,99995	0,98	0,990379	6,212798
21	11	41	7	25	37	15	36,3595	89,02794	15	100,874	0,999909	0,988836	0,99	6,219074
20	9	42	5	24	37	15	36,82352	89,01383	18,51076	99	0,999977	0,98	0,993774	6,22028
20	9	42	5	24	37	15	36,82352	89,01383	18,51076	99	0,999977	0,98	0,993774	6,22028
20	10	43	5	26	38	17,37476	31,11525	89,78125	17,4577	100,0505	0,999873	0,976391	0,994041	6,22336
19	11	41	7	26	37	15,23297	36,1092	89,45185	15,75367	100,5441	0,999887	0,980753	0,99	6,225098
21	10	42	7	25	37	15	36,46441	89	15	101	0,999937	0,988773	0,992333	6,234451
20	11	42	7	24	38	15	36,33954	89,0225	15	100,9212	0,999936	0,992728	0,99	6,235862
20	10	41	6	25	37	15	36,97523	89,04172	15	100,8861	0,999904	0,988147	0,99	6,236855
20	9	42	7	26	36	15	36,97885	89	15	101	0,999939	0,983941	0,991249	6,239171
20	9	42	7	26	36	15	36,97885	89	15	101	0,999939	0,983941	0,991249	6,239171
19	9	43	5	25	38	18,64557	29,20644	89,59163	17,6064	100,4059	0,999627	0,980649	0,990962	6,240172
20	10	41	5	26	37	15	37,12553	89,03649	15,7961	100,107	0,999887	0,98	0,990322	6,242954
21	10	43	5	24	37	18,40082	29,13512	90,01055	18,57008	99,84389	0,999907	0,979999	0,995547	6,248157
21	11	43	7	25	38	15	36,23559	89	15	101	0,999947	0,988345	0,990836	6,257113
20	10	42	5	24	37	15	36,66684	89,2185	20,84897	100,7321	0,999981	0,98	0,994993	6,260917
21	10	43	5	25	37	15	36,57025	89	15	101	0,999947	0,989138	0,992659	6,266807
20	9	43	5	26	38	15	37,21441	91	15	99	0,999938	0,98	0,991383	6,271105
20	9	43	5	26	38	15	37,21441	91	15	99	0,999938	0,98	0,991383	6,271105
19	9	42	7	24	38	15	37,31643	89	15	101	0,999948	0,9903	0,990554	6,274494
20	10	43	7	26	36	15	36,69015	89	15	101	0,999939	0,987306	0,99335	6,283962
21	10	42	7	26	38	15	36,97239	89	15	101	0,99993	0,986472	0,990105	6,285935
21	11	43	5	26	38	17,04045	31,8687	89,56054	17,95062	100,4616	0,999891	0,976779	0,994426	6,28626
21	10	41	7	24	37	17,39575	31,60253	89,60516	18,55866	100,249	0,999921	0,9776	0,992494	6,287618
20	11	41	5	25	36	16,82404	32,9579	89,50237	17,59005	100,4852	0,999923	0,980383	0,99	6,288587
19	11	42	7	25	38	15	36,89598	89,0161	15	100,9391	0,999926	0,992205	0,99	6,29041
20	9	42	5	24	36	15	37,3418	89	18,53485	99	0,999975	0,98	0,995211	6,292614
20	9	42	5	24	36	15	37,3418	89	18,53485	99	0,999975	0,98	0,995211	6,292614
19	11	43	6	24	38	15	36,7158	89	15	101	0,999937	0,992027	0,991327	6,297267
21	11	42	6	24	38	15	36,81914	89,06681	15	100,8894	0,999932	0,991989	0,99	6,299516
19	11	42	6	26	37	15	37,13228	89,11622	15	100,822	0,99998	0,987868	0,99	6,30022
19	9	43	5	26	37	19,41213	28,40291	89,24724	17,64886	100,8324	0,999217	0,98	0,99519	6,311922
21	10	41	7	25	37	15	37,45265	89,04475	15	100,8948	0,999919	0,986913	0,99	6,31234
20	11	43	5	26	37	17,09721	31,89726	89,56012	17,95176	100,4624	0,999933	0,98	0,993619	6,313178
21	11	41	6	24	37	18,88241	29,21228	89,05792	16,47964	100,7779	0,999569	0,982245	0,99	6,326263
21	11	42	7	26	38	15	36,91066	89	17,13706	101	0,999945	0,984104	0,991581	6,333102
20	9	41	7	25	36	15	38,14244	89	15	101	0,999932	0,985601	0,99015	6,345184
20	9	41	7	25	36	15	38,14244	89	15	101	0,999932	0,985601	0,99015	6,345184
20	11	41	7	26	37	15	37,66397	89,00416	15	100,9361	0,999889	0,984751	0,99	6,36432
19	10	42	6	25	38	15	37,90946	89	15,12592	101	0,999929	0,990559	0,99	6,37028
19	10	41	7	26	37	15	38,17378	89,01379	15	100,9434	0,999894	0,984186	0,99	6,376091
19	11	42	5	24	38	17,23508	32,47346	89,45603	18,9762	100,6403	0,999913	0,979999	0,993141	6,380005
20	10	42	6	24	38	15	37,76206	91	19,26384	99	0,999964	0,98	0,993042	6,385832
21	11	41	7	26	37	15	37,8633	89,01733	15	100,9255	0,999892	0,984393	0,99	6,400397
19	10	43	5	24	38	18,52232	30,08376	89	19,94756	101	0,999915	0,98	0,995686	6,410526
20	9	42	6	26	36	18,50792	30,64494	89	16,66288	101	0,999738	0,982765	0,99	6,411983
20	9	42	6	26	36	18,50792	30,64494	89	16,66288	101	0,999738	0,982765	0,99	6,411983
20	11	42	7	25	38	16,88097	33,45735	89,00053	15,37662	100,9849	0,999847	0,985163	0,99	6,414586
20	11	41	5	25	37	19,02692	29,69514	89	17,12677	101	0,999245	0,979975	0,990976	6,419046
21	11	41	5	24	36	15,07151	38,10246	89,43034	15,02119	100,5772	0,999891	0,986354	0,99	6,42545
19	9	42	5	26	38	18,72964	30,68049	89,37373	17,72639	101	0,999731	0,984302	0,99	6,441113
20	11	43	6	26	38	17,39349	32,33584	89,83064	17,41185	100,0092	0,999897	0,98	0,99274	6,443313
19	9	43	6	25	38	18,41279	30,8293	89,9159	18,5066	99,89697	0,999924	0,98	0,994462	6,446495
20	10	41	6	26	37	15	38,75509	89,01744	15	100,9531	0,999883	0,984663	0,99	6,452093
21	10	42	6	24	37	18,4142	30,68525	89,81176	18,48874	100,004	0,999903	0,98	0,99441	6,452201
20	11	42	7	25	37	17,32627	32,76333	89,72995	17,50152	100,1411	0,99994	0,98	0,992373	6,457403
19	9	42	7	25	37	15	38,82923	89	15	101	0,999937	0,988935	0,992758	6,465992
20	10	42	6	24	37	15,13027	38,00792	91	19,27499	99	0,99996	0,98	0,995233	6,469259
19	9	43	5	26	36	18,89697	30,29926	89	16,81103	101	0,999412	0,986326	0,99	6,473565
20	10	43	5	24	36	16,40379	34,74428	89	16,2989	100,8474	0,999962	0,985789	0,984653	6,474535
20	10	43	5	25	38	18,27142	31,0407	89,95616	18,44662	99,86735	0,99989	0,98	0,994495	6,478326
20	11	42	5	25	38	18,96283	29,93557	89	17,2073	101	0,985125	0,958331	0,992055	6,479036
19	9	42	6	24	38	19,12411	30,15066	89	17,80663	101	0,999723	0,98	0,993094	6,48059
20	10	42	6	26	37	17,3895	33,08139	89,48459	17,41717	100,5163	0,999847	0,975287	0,994064	6,483132
21	11	43	6	26	38	17,20691	32,89974	89,85443	17,66801	100,026	0,999933	0,979999	0,992763	6,485452
20	11	43	5	25	36	17,11872	33,09767	89,67892	18,89309	100,2144	0,99991	0,978298	0,997347	6,492715
19	10	41	6	26	36	15	39,25592	89	15	101	0,99987	0,985098	0,990448	6,498091
21	10	42	5	26	36	18,68467	30,62235	89	17,19681	101	0,998472	0,939532	0,996263	6,501472
19	9	41	6	25	37	17,59812	33,37498	89	17,00105	101	0,999848	0,981641	0	

Num estágios prefac	Estágio alimentaç ão	Num estágios col principal	Estágio Conexão superior	Estágio Saída lateral	Estágio Conexão inferior	Vazão Destilado (kmol/h)	Razão de refluxo	Vazão de líquido conexão superior (kmol/h)	Vazão saída lateral (kmol/h)	Vazão de vapor conexão inferior (kmol/h)	Fração molar benzeno	Fração molar tolueno	Fração molar P- xileno	TAC X10 ⁶ (US\$/ano)
19	9	41	6	26	36	15	39,99999	89	15	101	0,999887	0,982351	0,991737	6,558285
19	9	41	7	26	36	15	39,99997	89	15	101	0,9999	0,9816	0,991881	6,565209
19	11	41	7	25	37	15	39,42528	89,01008	15	100,9762	0,999903	0,990964	0,99	6,565873
19	10	43	6	25	38	18,40503	31,40931	89,80801	18,49395	100,1274	0,999892	0,98	0,994897	6,566021
19	11	41	6	26	37	15,73534	37,69302	89,82413	15,95815	100,3065	0,999828	0,979999	0,990378	6,567487
19	10	41	5	24	38	17,21099	34,45383	89,36746	18,08552	100,5714	0,999896	0,982231	0,99	6,574037
20	11	43	5	26	38	17,20332	33,64066	89,7197	18,50842	100,278	0,999951	0,98	0,99372	6,575795
20	9	41	5	24	36	15	40	89	17,42827	101	0,99996	0,985616	0,993224	6,580393
20	9	41	5	24	36	15	40	89	17,42827	101	0,99996	0,985616	0,993224	6,580393
20	11	43	5	24	38	18,03553	31,92148	90,07651	19,13943	99,82618	0,999929	0,98	0,995335	6,583781
20	10	41	5	25	36	15	39,99999	89	15	99	0,999879	0,984345	0,991264	6,5858
19	9	43	7	24	37	19,25369	30,11096	89,45095	18,61447	100,4997	0,999892	0,982024	0,996498	6,589391
20	10	41	7	26	37	15	39,82154	89	15	101	0,999897	0,984603	0,990288	6,590364
21	10	41	5	25	36	17,62868	33,47844	89,30988	17,94649	100,6758	0,999838	0,976942	0,994303	6,590699
19	10	41	7	24	37	17,67661	33,62464	89,19794	15	100,7809	0,999766	0,98435	0,99	6,591564
20	11	42	5	26	37	15	39,44982	89,02657	15	100,9622	0,999889	0,988391	0,99	6,592446
20	9	41	7	26	36	15,5361	38,67805	89	16,00998	101	0,999919	0,98	0,991682	6,594798
20	9	41	7	26	36	15,5361	38,67805	89	16,00998	101	0,999919	0,98	0,991682	6,594798
19	10	41	6	25	36	15	39,99998	89	15	101	0,999891	0,989166	0,991228	6,595731
20	9	42	6	24	37	15	39,99998	91	15	99	0,99994	0,98281	0,992021	6,596399
20	9	42	6	24	37	15	39,99998	91	15	99	0,99994	0,98281	0,992021	6,596399
19	9	42	5	26	36	15	39,99993	89	15	101	0,999911	0,985404	0,99356	6,596996
20	10	43	6	25	38	18,3327	31,64772	89,8354	18,67214	100,1221	0,999918	0,98	0,99492	6,597448
19	9	43	5	25	37	19,61569	29,79059	89,59594	17,62625	100,4085	0,999027	0,98	0,996367	6,599259
20	11	41	7	24	37	15	39,57094	89	15	101	0,999917	0,992604	0,990283	6,599871
20	10	41	6	26	36	15	39,99997	89	15	101	0,999879	0,984757	0,990395	6,600361
19	9	43	5	25	36	18,89998	31,08594	89,31403	16,49458	100,6006	0,999237	0,984328	0,99	6,602513
20	10	41	6	25	36	15	39,99998	89	15	101	0,999899	0,988356	0,991055	6,606296
21	11	42	6	26	38	15	39,3634	89,0298	15	100,9571	0,999908	0,989795	0,99	6,607451
19	10	41	7	26	36	15	39,99997	89	15	101	0,999886	0,983602	0,992181	6,607614
20	9	42	7	24	36	15	39,9999	91	15	99	0,999943	0,982317	0,99331	6,609105
20	9	42	7	24	36	15	39,9999	91	15	99	0,999943	0,982317	0,99331	6,609105
19	9	41	6	24	37	17,33801	34,44255	90,01297	19,15428	99,90316	0,999918	0,98	0,993527	6,609779
20	11	41	7	25	37	15	39,69375	89,00835	15	100,9842	0,999906	0,990509	0,99	6,609977
19	9	42	6	25	36	15	39,99993	89	15	101	0,999929	0,988829	0,994018	6,61057
21	10	41	6	25	36	17,59765	33,66603	89,21261	17,59118	100,7346	0,999843	0,977932	0,994122	6,612817
19	10	41	7	25	36	15	39,99998	89	15	101	0,999904	0,989096	0,992649	6,613784
19	10	42	5	26	36	15	39,99997	89	15	101	0,9999	0,986569	0,990197	6,615002
21	11	42	6	26	37	15	39,5324	89,02368	15	100,9672	0,999905	0,98705	0,99	6,61947
19	10	42	5	25	36	15	39,99998	89	15	101	0,999915	0,988385	0,990908	6,620729
21	10	41	6	26	36	15	39,99997	89	15	101	0,999883	0,982996	0,991851	6,621877
20	9	43	5	26	37	15	39,99999	91	15	99	0,999934	0,981365	0,993006	6,626286
20	9	43	5	26	37	15	39,99999	91	15	99	0,999934	0,981365	0,993006	6,626286
20	10	41	5	24	36	15	40	89	16,7006	101	0,999932	0,989662	0,993887	6,627034
19	10	42	6	25	36	15	39,99997	89	15	101	0,99992	0,988305	0,991117	6,62767
21	10	41	7	26	36	15	39,99998	89	15	101	0,999897	0,982164	0,991985	6,62855
21	10	41	7	25	36	15	39,99997	89	15	101	0,999913	0,987436	0,992458	6,634514
19	11	41	7	26	36	15	39,99996	89	15	101	0,999878	0,986097	0,991214	6,636808
19	9	43	7	26	38	15	39,94262	89	15	101	0,999946	0,989067	0,993249	6,638957
19	10	42	7	26	36	15	39,99996	89	15	101	0,999913	0,987431	0,992724	6,642013
19	11	41	7	25	36	15	39,99996	89	15	101	0,999896	0,990513	0,991767	6,642826
20	11	41	7	26	36	15	39,99998	89	15	101	0,999882	0,985605	0,991162	6,647923
20	9	43	5	25	38	18,01537	32,75098	90,03152	19,27879	99,91371	0,999938	0,98	0,995619	6,648072
20	9	43	5	25	38	18,01537	32,75098	90,03152	19,27879	99,91371	0,999938	0,98	0,995619	6,648072
20	9	42	6	26	38	18,92029	31,46454	89,23854	17,72813	100,7622	0,999805	0,980707	0,991562	6,649139
20	9	42	6	26	38	18,92029	31,46454	89,23854	17,72813	100,7622	0,999805	0,980707	0,991562	6,649139
19	9	43	6	26	36	15	39,99997	89	15	101	0,999938	0,987534	0,99495	6,650199
20	9	43	5	25	36	15	39,99995	89	15	101	0,999952	0,988864	0,993336	6,650913
20	9	43	5	25	36	15	39,99995	89	15	101	0,999952	0,988864	0,993336	6,650913
21	11	41	6	26	36	15	39,99998	89	15	101	0,999865	0,986058	0,990731	6,652104
20	11	42	6	26	38	16,53136	36,02541	89,00003	15,73663	101	0,999828	0,984999	0,99	6,653416
20	11	41	7	25	36	15	39,99996	89	15	101	0,999899	0,989979	0,991717	6,653912
19	10	43	6	24	38	15	39,99998	91	15	99	0,999932	0,984826	0,993547	6,657199
19	10	43	5	26	36	15	39,99996	89	15	101	0,999925	0,987789	0,991707	6,659408
21	10	41	5	24	38	17,82734	33,57937	89,30852	17,95045	100,6785	0,999885	0,982662	0,99	6,660412
19	11	42	6	26	36	15	39,99998	89	15	101	0,999887	0,98897	0,991051	6,662978
21	11	41	7	25	36	15	39,99997	89	15	101	0,999903	0,989291	0,991618	6,664388
20	9	41	5	26	37	18,8967	31,90974	89,00057	17,41572	100,9989	0,999617	0,980687	0,99	6,664405
20	9	41	5	26	37	18,8967	31,90974	89,00057	17,41572	100,9989	0,999617	0,980687	0,99	6,664405
19	10	43	5	25	36	15	40	89	15	101	0,999934	0,989091	0,992268	6,664993
19	10	43	6	24	37	18,95292	30,95994	89,13938	18,37836	100,8073	0,999822	0,984671	0,996229	6,665515
20	11	42	5	26	36	15	39,99997	89	15	101	0,999884	0,988122	0,990688	6,665641
19	10	43	6	26	36	15	39,99997	89	15	101	0,999928	0,987715	0,991903	6,666541
21	10	42	6	26	36	15	39,99997	89	15	101	0,999913	0,986112	0,99372	6,668209
20	10	42	7	24	37	15	40	89	15	101	0,999938	0,992844	0,993381	6,669844
21	11	41	7	26	36	15	39,99998	89	15	101	0,999885	0,984004	0,992251	6,670332
19	9	41	6	24	38	17,46277	34,74247	89,16575	17,77085	100,8077	0,99991	0,985532	0,99	6,672356
21	11	41	7	24	37	15	40	89	15	101	0,999919	0,993177	0,991172	6,675245
21	10	41	5	26	37	15,38138	39,46913	89,00535	16,92591	100,9936	0,999906	0,97962	0,991717	6,676161
20	10	43	7	24	38	15	39,8738	89	15	101	0,999953	0,99184	0,992779	6,681224
21	11	42	6	26	36	15	39,99997	89	15	101	0,9999	0,986754	0,990734	6,682629
20	10	43	5	26	36	15	39,99997	89	15	101	0,999928	0,988877	0,993603	6,683708
21	11	42	7	25	38	19,10704	30,90228	89,01067	15,21445	100,9724	0,999643	0,982874	0,	

Num estágios prefac	Estágio alimentaç ão	Num estágios col principal	Estágio Conexão superior	Estágio Saída lateral	Estágio Conexão inferior	Vazão Destilado (kmol/h)	Razão de refluxo	Vazão de líquido conexão superior (kmol/h)	Vazão saída lateral (kmol/h)	Vazão de vapor conexão inferior (kmol/h)	Fração molar benzeno	Fração molar tolueno	Fração molar P- xileno	TAC X10 ⁶ (US\$/ano)
21	11	43	6	25	36	15	39,81833	89	15	101	0,999933	0,989507	0,992647	6,709969
20	11	43	6	26	36	15	40	89	15	101	0,999917	0,989286	0,992333	6,717008
21	11	42	7	24	37	16,58031	35,9307	89	20,48137	101	0,999993	0,98	0,995414	6,717023
21	10	42	5	25	38	16,27716	36,99825	89,84125	19,76628	100,2243	0,999995	0,98	0,993687	6,722619
19	11	43	5	25	37	19,81352	29,90703	89,00627	15	100,9688	0,997366	0,985105	0,99	6,723605
21	11	43	6	26	36	15	39,99997	89	15	101	0,999923	0,988149	0,992153	6,727045
19	11	43	5	25	36	19,82281	29,91257	89,00625	15	100,9689	0,997325	0,984812	0,989999	6,730506
20	9	43	5	26	36	18,5791	32,29769	89,70678	18,22373	100,2549	0,999853	0,980179	0,995664	6,734613
20	9	43	5	26	36	18,5791	32,29769	89,70678	18,22373	100,2549	0,999853	0,980179	0,995664	6,734613
21	10	41	6	24	38	17,93957	33,83351	89,21007	17,59889	100,7397	0,999878	0,983659	0,99	6,73635
20	10	43	5	24	38	15,20728	40	89	15	101	0,999944	0,989282	0,991282	6,74466
20	11	42	6	26	37	16,87802	35,86429	89,59182	17,84819	100,4298	0,999864	0,976139	0,994803	6,751147
20	9	42	6	26	37	19,1867	31,61395	89,23678	17,73348	100,7656	0,999715	0,98	0,993504	6,754952
20	9	42	6	26	37	19,1867	31,61395	89,23678	17,73348	100,7656	0,999715	0,98	0,993504	6,754952
20	11	43	7	25	36	15,07464	40	89	15	101	0,999933	0,990536	0,993234	6,755288
21	11	41	6	24	38	19,35237	31,16613	89	17,68877	101	0,999682	0,981062	0,99	6,762191
20	9	41	5	25	36	19,03275	32,3982	89,11714	15,8527	100,8782	0,998882	0,982517	0,99	6,768857
20	9	41	5	25	36	19,03275	32,3982	89,11714	15,8527	100,8782	0,998882	0,982517	0,99	6,768857
20	11	43	5	25	38	19,07372	31,24653	89,56637	18,5256	100,442	0,964839	0,983136	0,994339	6,770669
20	9	41	5	25	37	19,17306	32,05007	89,08356	18,50884	100,9191	0,999753	0,98	0,992739	6,777542
20	9	41	5	25	37	19,17306	32,05007	89,08356	18,50884	100,9191	0,999753	0,98	0,992739	6,777542
19	10	41	5	26	36	18,15977	34,02976	89,04135	17,00384	100,3991	0,999604	0,980883	0,99	6,786845
19	9	41	5	25	36	18,57071	33,45183	89,34394	17,46385	100,2402	0,999586	0,981791	0,990187	6,792653
20	10	42	5	26	38	15,54628	40	91	15	99	0,999857	0,981112	0,990888	6,798162
20	9	41	5	24	38	17,1453	36,25379	89,69752	19,90095	100,2745	0,999951	0,98	0,990896	6,800795
20	9	41	5	24	38	17,1453	36,25379	89,69752	19,90095	100,2745	0,999951	0,98	0,990896	6,800795
19	10	41	6	25	38	15,75127	39,48462	89,06249	17,63683	100,9347	0,999925	0,98709	0,99	6,804322
21	10	43	6	24	38	19,20295	31,28025	89,88291	18,68629	99,97543	0,999867	0,982082	0,995595	6,807654
20	10	41	5	25	38	15,78871	39,49846	89,08254	17,4266	99,45589	0,999915	0,984314	0,99	6,813543
20	9	41	5	25	38	17,42583	35,78715	89	19,11233	101	0,999927	0,98	0,990573	6,820105
20	9	41	5	25	38	17,42583	35,78715	89	19,11233	101	0,999927	0,98	0,990573	6,820105
21	10	42	6	25	38	18,40151	33,20898	89,71767	18,51963	100,2852	0,999907	0,98	0,990374	6,821495
20	10	42	5	25	37	18,2663	33,58663	89,75764	18,68486	100,257	0,999881	0,979999	0,994849	6,826338
19	9	41	5	25	37	18,89243	33,06971	89,45702	17,96501	99,97248	0,999729	0,98	0,992333	6,833713
21	10	41	5	24	37	18,33555	33,75909	89,77112	18,68187	100,2416	0,999857	0,979274	0,993752	6,844032
19	11	43	6	25	37	21,41452	28,10356	89	15,04314	101	0,997895	0,98	0,995641	6,850022
21	11	43	6	25	38	18,33237	33,06653	90,03465	18,59344	99,84348	0,999898	0,98	0,995322	6,856333
20	9	41	6	25	38	17,18482	36,79075	89,89174	17,62651	99,90038	0,999907	0,980356	0,99	6,875027
20	9	41	6	25	38	17,18482	36,79075	89,89174	17,62651	99,90038	0,999907	0,980356	0,99	6,875027
20	9	41	6	24	38	16,45894	38,60222	90,99999	17,62874	99	0,999937	0,980006	0,99	6,880378
20	9	41	6	24	38	16,45894	38,60222	90,99999	17,62874	99	0,999937	0,980006	0,99	6,880378
19	9	41	6	25	38	18,58199	34,07165	89,30019	18,31496	100,7078	0,999909	0,98	0,990239	6,886268
19	11	43	5	25	38	20,13128	30,44994	89,18032	15,95655	100,8042	0,842457	0,994475	0,989934	6,901088
19	11	42	6	24	38	19,32123	32,14198	89	15,19404	101	0,999117	0,985918	0,99	6,910687
19	11	42	5	26	38	18,48254	33,82802	89,63445	16,92768	100,4508	0,976568	0,994458	0,982941	6,917778
21	10	42	6	26	38	19,17812	32,45963	89	16,58995	101	0,996123	0,813069	0,993882	6,918684
20	11	41	5	25	38	19,16469	32,6789	89	17,86851	101	0,999518	0,980028	0,990159	6,921754
20	11	42	7	26	38	19,21197	32,3538	89	15,88888	101	0,999668	0,98	0,991217	6,92664
20	11	41	5	24	36	17,74666	35,38284	89,84281	19,03379	100,1884	0,999913	0,979999	0,994964	6,928
19	10	42	5	25	38	18,34614	34,32023	89,89985	18,59312	99,99324	0,999871	0,98	0,993467	6,936647
19	10	41	5	24	37	18,18832	34,8973	89,9385	18,82021	99,97811	0,999886	0,98	0,9935	6,939554
20	10	42	6	25	37	18,31229	34,21905	89,73503	18,6028	100,2748	0,999892	0,979999	0,995014	6,940999
20	9	43	5	24	38	20,01911	31,23835	89	15	101	0,997472	0,98	0,994458	6,952135
9	43	5	24	38	20,01911	31,23835	89	15	101	0,997472	0,98	0,994458	6,952135	
21	11	41	7	26	38	16,23108	38,88894	89,02085	17,62597	100,9706	0,999906	0,98	0,990011	6,95334
20	11	41	5	24	38	18,64202	33,87369	89,49213	17,63156	100,5096	0,999719	0,983766	0,99	6,95471
19	11	41	5	24	38	18,62166	33,95155	89	18,64732	101	0,995673	0,906757	0,99109	6,958107
20	9	42	7	26	38	17,25133	36,87424	89,54166	17,60625	100,4567	0,999919	0,98	0,993068	6,963038
20	9	42	7	26	38	17,25133	36,87424	89,54166	17,60625	100,4567	0,999919	0,98	0,993068	6,963038
20	9	41	6	25	37	17,39895	36,89057	89,88975	17,62983	99,90343	0,999886	0,98	0,993032	6,967015
20	9	41	6	25	37	17,39895	36,89057	89,88975	17,62983	99,90343	0,999886	0,98	0,993032	6,967015
20	10	42	5	24	36	15,92768	39,78185	89,09192	20,99265	100,9152	0,999978	0,979999	0,997186	6,974881
19	10	41	7	26	38	16,051	40	89	17,71909	101	0,999913	0,980357	0,990124	6,97554
19	11	42	7	26	38	16,65891	38,1749	89,01922	15	100,9532	0,999817	0,987076	0,99	6,978887
19	11	41	6	24	37	17,54547	36,41326	89	15,94546	100,9083	0,999308	0,990556	0,983233	6,984956
20	11	43	5	26	37	18,32383	34,19321	89,71288	18,53185	100,293	0,999821	0,979999	0,996006	7,006062
19	11	41	5	25	38	16,43263	39,36091	90,31223	16,71535	99,6361	0,99983	0,981978	0,99	7,009654
19	11	41	6	24	38	16,82907	38,25042	89,11928	17,0088	100,9236	0,999878	0,987551	0,99	7,013365
19	9	42	5	25	36	16,82245	38,38918	89	16,36772	101	0,999885	0,986957	0,994216	7,013726
20	11	41	7	26	38	16,27977	39,43783	89,08231	17,83316	100,9186	0,999904	0,979999	0,990342	7,03185
19	10	41	5	26	37	18,72197	34,56726	89	17,50972	100,8267	0,999525	0,980132	0,991291	7,03667
19	9	41	5	26	37	16,47313	39,86266	89,3964	16,92389	100,6141	0,999868	0,98	0,992035	7,039672
19	9	41	7	24	38	17,28752	37,80135	89	16,55821	101	0,999903	0,988888	0,99	7,050692
19	10	41	7	25	38	18,78187	34,48336	89	16,72438	101	0,999763	0,98	0,990182	7,051153
20	11	42	6	25	37	18,38118	34,73371	89,76444	18,48308	100,1862	0,999853	0,979999	0,995178	7,067702
21	10	41	7	24	38	19,11968	33,77527	89,12489	17,1251	100,7533	0,999831	0,983521	0,989999	7,076067
20	9	41	7	26	37	16,47295	40	89	15	101	0,999861	0,985129	0,990131	7,077505
20	9	41	7	26	37	16,47295	40	89	15	101	0,999861	0,985129	0,990131	7,077505
20	11													

Num estágios prefac	Estágio alimentaç ão	Num estágios col principal	Estágio Conexão superior	Estágio Saída lateral	Estágio Conexão inferior	Vazão Destilado (kmol/h)	Razão de refluxo	Vazão de líquido conexão superior (kmol/h)	Vazão saída lateral (kmol/h)	Vazão de vapor conexão inferior (kmol/h)	Fração molar benzeno	Fração molar tolueno	Fração molar P- xileno	TAC X10 ⁶ (US\$/ano)
20	9	41	7	25	38	17,43616	38,33258	89,70097	18,43995	100,2944	0,999926	0,98	0,991045	7,187598
20	9	41	5	26	38	17,82368	37,71543	89,20591	17,44228	100,6692	0,999839	0,98	0,990025	7,200529
20	9	41	5	26	38	17,82368	37,71543	89,20591	17,44228	100,6692	0,999839	0,98	0,990025	7,200529
21	10	41	7	26	38	16,67241	40	89	17,43813	101	0,999908	0,980172	0,990175	7,201888
19	11	41	7	25	38	17,04299	39,24568	89,68349	18,01204	100,3102	0,999895	0,979999	0,991283	7,231191
19	11	43	6	26	38	20,80592	31,41067	89	16,01866	101	0,998565	0,98	0,994993	7,255775
19	11	42	5	25	36	18,58683	35,63264	89,01628	15,18498	100,9872	0,99882	0,987827	0,986113	7,285377
21	10	41	6	25	38	19,27178	34,8811	89	17,28677	101	0,999673	0,983738	0,99	7,285622
20	11	41	6	25	38	19,32476	34,70448	89,03844	16,82493	100,9541	0,999496	0,982527	0,99	7,2857
20	11	42	5	24	38	17,34113	38,58122	89,85709	19,55047	99	0,999923	0,979999	0,994879	7,292815
20	10	41	6	25	38	18,55034	36,52374	89,44212	17,41356	100,5838	0,999804	0,983118	0,99	7,29674
21	11	42	6	25	38	18,09521	36,90255	89,81941	18,98192	100,1984	0,999879	0,978682	0,994679	7,311232
19	11	41	5	25	37	17,15742	39,8523	91	17,61952	99	0,999872	0,979999	0,991861	7,325521
19	10	42	7	25	37	20,85391	32,2174	89	15,82854	101	0,999374	0,98	0,995116	7,3441
20	10	41	7	24	38	19,79454	34,49379	89,07932	16,05357	100,8643	0,99966	0,984409	0,989999	7,369999
20	10	41	6	24	38	19,22552	35,62677	90,15416	18,38292	100,0019	0,999819	0,980631	0,991705	7,379391
19	9	42	7	26	38	19,23951	35,7145	89	15,30833	101	0,999655	0,985107	0,99	7,384572
20	11	41	6	24	37	21,35124	31,69781	89	16,0555	101	0,998447	0,98	0,993649	7,389197
19	9	41	6	26	38	17,92603	38,9954	89	17,28858	101	0,999824	0,980917	0,990457	7,412779
21	11	41	5	24	37	17,8891	38,34877	90,05541	18,98395	99,97447	0,999861	0,98	0,994707	7,413712
21	11	41	6	26	37	17,28878	39,93289	89,50473	17,49858	100,4991	0,999802	0,976282	0,993285	7,418392
20	9	41	6	26	37	18,24868	38,304	89	17,76364	101	0,999892	0,98348	0,99	7,428427
20	9	41	6	26	37	18,24868	38,304	89	17,76364	101	0,999892	0,98348	0,99	7,428427
21	11	42	7	25	37	21,04616	32,07333	89	15,25941	101	0,999279	0,98	0,994901	7,429425
20	11	41	5	26	36	19,02176	36,37266	89,70096	16,72886	100,1029	0,999003	0,98	0,992033	7,447114
19	9	41	5	25	38	19,13982	36,72552	89,37886	17,92096	100,5836	0,999449	0,98	0,991774	7,453113
20	10	41	5	24	38	19,41906	35,74181	89,49345	18,56208	100,4311	0,997777	0,855462	0,992006	7,455435
21	10	41	5	26	36	17,49318	39,94615	89,00001	17,96172	101	0,999821	0,976999	0,994657	7,464752
19	11	41	5	26	37	19,08112	36,54378	89,00524	16,43315	100,9851	0,998812	0,983876	0,99	7,472895
21	11	41	6	25	38	20,96152	32,88469	89,00006	15,48878	100,9999	0,998614	0,980374	0,99	7,478566
20	10	42	6	24	36	17,63902	39,24353	91	19,32709	99	0,999918	0,98	0,997502	7,481908
20	10	41	7	26	38	17,70931	39,67377	89,12399	16,28811	100,8781	0,999817	0,981316	0,99	7,481922
19	11	42	5	26	36	18,12314	38,35511	89	15	101	0,990114	0,995826	0,977144	7,486913
21	11	41	6	25	37	20,97278	32,89128	89	15,48898	101	0,998477	0,98	0,992572	7,491051
20	9	41	6	24	37	17,92114	39,57224	91	19,08794	99	0,999912	0,98	0,994705	7,531168
20	9	41	6	24	37	17,92114	39,57224	91	19,08794	99	0,999912	0,98	0,994705	7,531168
19	10	41	5	26	38	19,26214	36,77112	89,45154	17,53815	100,8274	0,999415	0,980181	0,990411	7,534744
20	9	41	6	26	38	18,60407	38,61451	89	17,01554	100,5355	0,999774	0,98	0,990014	7,576536
20	9	41	6	26	38	18,60407	38,61451	89	17,01554	100,5355	0,999774	0,98	0,990014	7,576536
20	9	41	7	25	37	18,40791	38,76222	89,69134	18,45628	100,3098	0,999885	0,98	0,994406	7,58339
20	9	41	7	25	37	18,40791	38,76222	89,69134	18,45628	100,3098	0,999885	0,98	0,994406	7,58339
20	11	41	5	26	38	18,40617	38,65637	89	17,86197	101	0,993147	0,935474	0,991593	7,589155
20	11	41	7	24	38	18,07474	39,33855	89,8843	19,10584	100,124	0,999955	0,979999	0,992207	7,602721
20	11	42	5	26	38	17,97999	39,36672	89,77737	18,78064	100,2285	0,999888	0,98	0,993931	7,605548
19	11	42	5	24	37	20,17728	35,10145	89	15	101	0,996979	0,987559	0,989999	7,635621
19	11	41	6	26	38	19,26639	37,23907	89,20543	16,75935	100,8563	0,999447	0,98	0,990008	7,638308
20	11	43	6	24	38	19,53995	35,95433	89	15	101	0,998995	0,987787	0,99	7,640218
21	11	41	7	24	38	18,03847	39,57595	89,89711	19,17238	100,1169	0,999954	0,979999	0,992251	7,640312
19	10	41	6	25	37	18,14381	39,81015	89,75403	18,69909	100,2561	0,999899	0,980866	0,993849	7,647046
19	11	41	6	25	38	20,20284	35,46754	89	15,63217	101	0,998883	0,983074	0,99	7,652332
20	11	41	6	25	37	20,32577	35,24161	89,03321	16,84496	100,967	0,999059	0,98	0,99373	7,68418
19	10	41	6	26	37	18,98793	38,3909	90,34188	16,17334	99,70459	0,999462	0,98	0,991087	7,694915
19	9	41	7	25	38	19,61674	37,25548	89	16,18983	101	0,999695	0,984842	0,99	7,703505
21	10	41	5	26	38	18,44028	39,47643	89,16434	17,68057	100,8448	0,999773	0,983102	0,99	7,706486
20	10	42	7	26	38	20,57711	34,97855	89	15,86369	101	0,999465	0,98	0,993372	7,727652
20	10	41	5	25	37	18,33762	39,93516	89,7027	18,5255	99	0,999808	0,97753	0,994653	7,735473
20	11	42	6	24	38	19,74149	36,54191	89	15	101	0,998934	0,98765	0,99	7,749232
21	10	41	6	26	38	19,24581	38,20794	89	16,93803	101	0,999591	0,982715	0,99	7,785888
19	11	43	5	24	38	22,63829	31,7294	89	15	101	0,82519	0,996801	0,996062	7,823638
19	11	42	7	24	37	21,36802	33,99688	89	16,7075	101	0,999381	0,979966	0,996566	7,837966
21	11	41	5	26	37	20,7233	35,71855	89,31453	15	99	0,996782	0,98003	0,990151	7,867305
21	11	41	5	26	38	20,46018	36,25849	89,16754	16,54067	100,1016	0,997995	0,980257	0,990108	7,879415
20	10	41	6	26	38	19,13525	39,18992	89,37814	16,78889	100,6097	0,999584	0,982354	0,99	7,881779
19	11	41	5	26	38	19,20663	39,01855	89,29803	17,41858	100,5356	0,991775	0,91909	0,992257	7,890599
21	11	42	5	25	36	20,36325	36,18429	89	15	101	0,996858	0,986868	0,99	7,89789
19	10	43	5	25	38	18,604	40	89	15	101	0,998342	0,980843	0,990667	7,905802
20	10	43	6	24	36	20,81642	35,31447	89	15	101	0,630393	0,997502	0,991577	7,908237
19	9	41	7	25	36	19,38749	39,02062	89,557	19,35304	100,4488	0,999886	0,98	0,996741	7,943723
19	9	43	6	25	36	18,82321	40	89	15	101	0,999333	0,985741	0,992099	7,95301
19	11	41	5	26	36	20,38614	37,20677	89	16,46081	101	0,9974	0,979999	0,993603	7,997841
19	9	41	7	26	38	19,36114	39,99962	89	16,69866	101	0,999747	0,981922	0,990551	8,042962
21	10	43	7	26	38	19,18716	40	89	15	101	0,999622	0,98809	0,991714	8,142719
20	9	42	5	26	36	19,52448	40	89	15	101	0,997704	0,980755	0,994568	8,153555
20	9	42	5	26	36	19,52448	40	89	15	101	0,997704	0,980755	0,994568	8,153555
20	10	42	7	25	38	19,46215	40	89	15	101	0,999577	0,987836	0,991201	8,17438
20	11	43	7	25	38	19,22385	40	89	15	101	0,999578	0,988082	0,992489	8,174839
19	10	41	6	26	38	20,56502	38,33427	89,12025	15,34871	100,7458	0,99875	0,982201	0,99	8,196558
21	11	41	6	26	38	19,79148	39,55592	89	17,15849	101	0,999394	0,98	0,991457	8,206638
21	10	43	5	25	36	21,40386	36,02319	89	15	101	0,680289	0,996496	0,995013	8,219985
21	10	4												

Num estágios prefac	Estágio alimenta- ção	Num estágios col principal	Estágio Conexão superior	Estágio Saída lateral	Estágio Conexão inferior	Vazão Destilado (kmol/h)	Razão de refluxo	Vazão de líquido conexão superior (kmol/h)	Vazão saída lateral (kmol/h)	Vazão de vapor conexão inferior (kmol/h)	Fração molar benzeno	Fração molar tolueno	Fração molar P- xileno	TAC X10 ⁶ (US\$/ano)
21	10	41	7	25	38	21,25345	40	89	15,00011	101	0,999307	0,984478	0,991444	8,739862
19	11	42	7	25	37	21,10569	40	89	15	101	0,999178	0,98461	0,995827	8,757674
20	11	41	7	25	38	21,65594	39,27396	89	15,20491	101	0,999242	0,98	0,992477	8,765688
21	11	41	5	25	38	21,44774	39,79734	89,00126	15	100,9959	0,995931	0,986551	0,99	8,789912
19	9	42	6	26	38	21,83936	40	89	15	101	0,997958	0,985628	0,993341	8,925921
21	10	42	5	26	38	21,79117	40	89	15	101	0,995309	0,986683	0,992139	8,963626
21	11	41	5	25	37	21,8465	40	89	15	101	0,995147	0,985499	0,992798	8,966806
20	11	42	7	24	37	21,71842	40	89	15	101	0,999116	0,986218	0,996216	8,986677
20	11	43	5	24	36	22,10609	40	89	15,42959	101	0,994644	0,988043	0,996853	9,169502
19	11	41	5	25	36	15	40	90,99919	15	99	0,999817	0,979904	0,990846	930682,3
19	11	41	6	25	37	15,83081	31,45907	89,31205	17,32314	100,5712	0,999901	0,976774	0,990266	72634549
20	11	41	6	26	38	18,09418	38,9341	89,05662	17,342	100,9427	0,996142	0,984425	0,988559	93551533