JOSÉ EDUARDO ALVES GRACIANO

SÍNTESE ÓTIMA DE PROCESSOS NÃO ISOTÉRMICOS DE
TRATAMENTO DE EFLUENTES

São Paulo
2012

JOSÉ EDUARDO ALVES GRACIANO

SÍNTESE ÓTIMA DE PROCESSOS NÃO ISOTÉRMICOS DE
TRATAMENTO DE EFLUENTES

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

São Paulo
2012

JOSÉ EDUARDO ALVES GRACIANO

SÍNTESE ÓTIMA DE PROCESSOS NÃO ISOTÉRMICOS DE
TRATAMENTO DE EFLUENTES

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

Área de concentração: Engenharia Química

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

São Paulo
2012

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

São Paulo, 13 de abril de 2012.

Assinatura do autor _____

Assinatura do orientador _____

FICHA CATALOGRÁFICA

Graciano, José Eduardo Alves

Síntese ótima de processos não isotérmicos de tratamento de efluentes / J.E.A. Graciano. -- ed.rev. -- São Paulo, 2012. 127 p.

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

1. Efluentes (Tratamento) 2. Processos não isotérmicos I. Universidade de São Paulo. Escola Politécnica. Departamento de Engenharia Química II. t.

DEDICATÓRIA

Dedico este trabalho aos meus pais, que sempre me apoiaram e fizeram o possível e o impossível, criando condições para que eu alcançasse meus sonhos.

AGRADECIMENTOS

Ao professor Galo Antonio Carrillo Le Roux, pela orientação e constante estímulo transmitido durante todo o trabalho.

Aos meus pais, Silvana de Oliveira Graciano e José Aparecido Alves Graciano, por todo o carinho, a dedicação e o apoio incondicional às minhas escolhas.

Às minhas irmãs Simone Alves Graciano e Juliana Alves Graciano, que sempre me serviram de inspiração.

À minha namorada Flávia Nunes Bom Sucesso, por todo amor, paciência, incentivo e risadas, que sempre me ajudaram a esquecer os pequenos problemas do dia-a-dia.

Ao meu amigo Lucas Caetano Grosche, por sempre afirmar que tudo daria certo, discordando de todos os meus argumentos contrários.

Aos meus colegas da República Ventania, por todas as risadas e comilanças nas noites de São Paulo.

Aos meus colegas de laboratório, pelo apoio e auxílio durante a execução do trabalho, bem como nos momentos de descontração que aliviaram as cargas da pesada rotina.

Ao CNPq, pelo apoio financeiro.

E a todos que colaboraram direta ou indiretamente, na execução deste trabalho.

Se, a princípio, a ideia não é absurda,
então não há esperança para ela.

(Albert Einstein)

RESUMO

As metodologias para a síntese de processos, baseadas em otimização de superestruturas, mostram-se mais poderosas do que as baseadas no projeto em heurísticas, já que levam em consideração as inúmeras possibilidades de construção do processo. É prática comum a utilização de modelos simplificados (como modelos de rendimento), na representação dos equipamentos dentro destas superestruturas, uma vez que a utilização de modelos fenomenológicos tornar-se-ia inviável, devido aos tempos computacionais e à dificuldade técnica de se programar os módulos e propriedades termodinâmicas de um simulador comercial, dentro de uma plataforma de otimização como o GAMS. Modelos com alta precisão, que não requerem grandes tempos computacionais, reduzidos ou de superfície de resposta, aproximam modelos fenomenológicos e podem ser introduzidos em problemas de síntese, obtendo soluções mais precisas. Neste trabalho, foram construídos modelos reduzidos para dois processos comumente encontrados em sistemas de tratamento de efluentes de refinarias de petróleo: uma torre de resfriamento e um *stripper* de vapor. Os dados utilizados para a correlação dos modelos reduzidos foram gerados, através da simulação de modelos semi-fenomenológicos ou fenomenológicos destes equipamentos. É proposta uma metodologia original para gerar modelos reduzidos, que diferentemente dos trabalhos anteriores em que se utilizam modelos reduzidos tipo caixa preta, emprega-se um modelo reduzido tipo caixa cinza para a representação da coluna de *stripper*, o que aumenta a capacidade de correlação do modelo ao conjunto de dados, resultando em menores erros de predição. Dois tipos clássicos de modelos reduzidos foram utilizados dentro dos modelos caixa-cinza: um modelo baseado em redes neurais e um modelo polinomial. Ambos mostraram-se capazes de representar o modelo fenomenológico com pequenos erros e permitindo resolver o problema de síntese em um tempo computacional razoável (da ordem de 10 segundos). Nota-se também que são obtidas várias soluções ótimas locais que diferem ligeiramente de acordo com a abordagem utilizada, mas que qualitativamente correspondem a um mesmo conjunto de soluções.

Palavras-chave: Síntese de processos. Otimização. Superestrutura. Modelos reduzidos.

ABSTRACT

The superstructure optimization-based methodologies for process synthesis can be more powerful than the heuristic based methodologies, because they cope the many possibilities in order to design the process. It is common practice to use simplified models (efficiency-based models), in the representation of equipment in the superstructures, because the use of phenomenological models would be unfeasible due the high computational time and the technical difficulties in order to program module and thermodynamics properties packages of commercial simulators, into an optimization platform as GAMS. High accuracy models, which do not require large computational time, can be obtained using different types of surrogate or response surface, approximate phenomenological models of the system and can be introduced into the synthesis problems, leading to more precise solutions. In this work, surrogate models were built for two processes usually found in water treatment networks in petroleum refineries: a cooling tower and a steam stripper. The data sets used for fitting the surrogate model were generated by the semi-phenomenological or the first principles model of those equipment. An original methodology for generating surrogate model is proposed that differently of previous works (which make use of black box surrogate models) uses gray box models to represents de stripper column. This approach improves the correlation capacity of the surrogate model to the set data and reduces the prediction errors. Finally, two classic surrogate models were used inside the gray-box models: a neural network based model and a polynomial model. The results showed that both are able to represent the phenomenological model with small errors to solve the synthesis problem in a short computational time (which not exceed in a magnitude of 10 seconds). It is noticed also that many local solutions are obtained, these differ slightly depending on the approach used, but qualitatively represent the same set of solutions.

Keywords: Process synthesis. Optimization. Superstructure. Surrogate models.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 2.1.1 – Representação da superestrutura de Takama et al. (1980)	4
Figura.2.1.2 - Esquema de construção do gráfico para análise <i>pinch</i>	5
Figura 2.2.1 - Representação esquemática das unidades de mistura de correntes....	9
Figura 2.2.2 - Representação esquemática das unidades de divisão de correntes ..	10
Figura 2.2.3 - Representação esquemática dos processos de tratamento ou uso de água.	11
Figura 2.3.1 – Representação esquemática da otimização baseada em modelos reduzidos.....	14
Figura 2.4.1 – Erro de predição pela complexidade do modelo	16
Figura 2.4.2 – Exemplo de curva de validação cruzada	17
Figura 2.5.1 – Representação de uma rede neural	18
Figura 2.5.2 – a) Aproximação de uma função contínua por sinos; b) implementação de um sino por um par de neurônios	20
Figura 3.1 – Torre de resfriamento.....	21
Figura 3.2.1 – Representação gráfica do modelo reduzido da torre de resfriamento	29
Figura 3.2.1.1 - Gráficos de paridade do modelo polinomial reduzido para TAC	30
Figura 3.2.1.2 - Gráficos de paridade do modelo polinomial reduzido para dT	31
Figura 3.2.1.3 - Gráficos de paridade do modelo polinomial reduzido para dF	31
Figura 3.2.2.1 – Gráficos de paridade do modelo de redes neurais para TAC	36
Figura 3.2.2.2 – Gráficos de paridade do modelo de redes neurais para dT	36
Figura 3.2.2.3 – Gráficos de paridade do modelo de redes neurais para dF	37
Figura 4.1.1- Experimento 1	41
Figura 4.1.2 – Experimento 2	42
Figura 4.1.3 - Esquema do processo de <i>stripper</i>	43
Figura 4.1.4 – Gráfico de custo da coluna.....	45
Figura 4.2.1 – Fluxograma do <i>stripper</i> com 8 possibilidades para escolha de equipamentos.....	47
Figura 4.2.2 – Representação gráfica para o bloco do trocador de calor	50
Figura 4.2.3 – Representação gráfica para o bloco do aquecedor	52

Figura 4.2.4 – Representação gráfica dos modelos de <i>stripper</i>	53
Figura 4.2.5 – Relação entre pontos convergidos e não convergidos	54
Figura 4.2.6 – Relação entre pontos convergidos e não convergidos - 200 pontos ..	55
Figura 4.2.7 – Relação entre pontos convergidos e não convergidos - 2.000 pontos	55
Figura 4.2.1.1 – Gráficos de paridade do modelo polinomial reduzido para TAC_{SR} e TAC_{SD}	59
Figura 4.2.1.2 - Gráficos de paridade do modelo polinomial reduzido para S_{SR}^{H2S} e S_{SD}^{H2S}	60
Figura 4.2.1.3 - Gráficos de paridade do modelo polinomial reduzido para S_{SR}^{NH3} e S_{SD}^{NH3}	60
Figura 4.2.1.4 - Gráficos de paridade do modelo polinomial reduzido para S_{SR}^{OIL} e S_{SD}^{OIL}	60
Figura 4.2.1.5 - Gráficos de paridade do modelo polinomial reduzido para dRF_{SR} e dRF_{SD}	61
Figura 4.2.1.6 - Gráficos de paridade do modelo polinomial reduzido para dT_{SR} e dT_{SD}	61
Figura 4.2.1.7 - Gráficos de paridade do modelo polinomial reduzido para V/L_{SR}	61
Figura 4.2.2.1 – Gráficos de paridade do modelo de redes neurais para TAC_{SR} e TAC_{SD}	64
Figura 4.2.2.2 - Gráficos de paridade do modelo de redes neurais para S_{SR}^{H2S} e S_{SD}^{H2S}	64
Figura 4.2.2.3 - Gráficos de paridade do modelo de redes neurais para S_{SR}^{NH3} e S_{SD}^{NH3}	64
Figura 4.2.2.4 - Gráficos de paridade do modelo de redes neurais para S_{SR}^{OIL} e S_{SD}^{OIL}	65
Figura 4.2.2.5 - Gráficos de paridade do modelo de redes neurais para dRF_{SR} e dRF_{SD}	65
Figura 4.2.2.6 - Gráficos de paridade do modelo de redes neurais para dT_{SR} e dT_{SD}	65
Figura 4.2.2.7 - Gráficos de paridade do modelo de redes neurais para V/L_{SR}	66
Figura 5.1 – Superestrutura do fornecimento de água da refinaria	68
Figura 5.2 – Representação da superestrutura com misturadores e divisores	69
Figura 5.3 - Superestrutura para sistema fechado de resfriamento	70
Figura 5.4 – Função objetivo versus espaço do problema	74

Figura 5.5 – Resultado da síntese com o modelo de redes neurais.....	77
Figura 5.6 – Resultado da síntese com o modelo de redes neurais.....	77
Figura 5.7 – Resultado da síntese com o modelo polinomial	80
Figura 5.8 – Resultado da síntese com o modelo polinomial	80
Figura A.1 – Gráfico de erro em função do número de termos da função polinomial, variável TAC^{film}	89
Figura A.2 – Gráfico de erro em função do número de termos da função polinomial, variável dT^{film}	89
Figura A.3 – Gráfico de erro em função do número de termos da função polinomial, variável $Floss^{film}$	90
Figura A.4 – Gráfico de erro em função do número de termos da função polinomial, variável TAC^{splash}	90
Figura A.5 – Gráfico de erro em função do número de termos da função polinomial, variável dT^{splash}	91
Figura A.6 – Gráfico de erro em função do número de termos da função polinomial, variável $Floss^{splash}$	91
Figura A.7 – Gráfico de erro em função do número de termos da função polinomial, variável $TAC^{trickle}$	92
Figura A.8 – Gráfico de erro em função do número de termos da função polinomial, variável $dT^{trickle}$	92
Figura A.9 – Gráfico de erro em função do número de termos da função polinomial, variável $Floss^{trickle}$	93
Figura D.1 – Gráfico de erro em função do número de termos da função polinomial, variável TAC_{SD}	105
Figura D.2 – Gráfico de erro em função do número de termos da função polinomial, variável dRF_{SD}	105
Figura D.3 – Gráfico de erro em função do número de termos da função polinomial, variável S_{SD}^{H2S}	106
Figura D.4 – Gráfico de erro em função do número de termos da função polinomial, variável S_{SD}^{NH3}	106
Figura D.5 – Gráfico de erro em função do número de termos da função polinomial, variável S_{SD}^{OIL}	107
Figura D.6 – Gráfico de erro em função do número de termos da função polinomial, variável dT_{SD}	107

Figura D.7 – Gráfico de erro em função do número de termos da função polinomial, variável TAC_{SR}	108
Figura D.8 – Gráfico de erro em função do número de termos da função polinomial, variável dRF_{SR}	108
Figura D.9– Gráfico de erro em função do número de termos da função polinomial, variável S_{SR}^{H2S}	109
Figura D.10 – Gráfico de erro em função do número de termos da função polinomial, variável S_{SR}^{NH3}	109
Figura D.11 – Gráfico de erro em função do número de termos da função polinomial, variável S_{SR}^{OIL}	110
Figura D.12 – Gráfico de erro em função do número de termos da função polinomial, variável dT_{SR}	110
Figura D.13 – Gráfico de erro em função do número de termos da função polinomial, variável V/L_{SR}	111

LISTA DE TABELAS

Tabela 1.1 – Fontes de efluentes aquosos de uma refinaria.....	1
Tabela 3.1.1 – Coeficientes de correlação para número de Merkel	23
Tabela 3.1.2 – Coeficientes de correlação para K_{fi}	25
Tabela 3.1.3 – Constantes para a equação (16)	26
Tabela 3.1.4 – Constantes de custo do preenchimento.	27
Tabela 3.2.1 – Limites e equações para amostragem da torre de resfriamento.....	28
Tabela 3.2.1.1 – Parâmetros e termos da identificação do TAC_{AS}^{film}	32
Tabela 3.2.1.2 – Número de termos, ordem e coeficiente de correlação do modelo polinomial reduzido da torre de resfriamento.	33
Tabela 3.2.2.1 – Número de neurônios e coeficiente de correlação do modelo polinomial reduzido da torre de resfriamento.	37
Tabela 4.2.1 – Possibilidades de configuração do processo de <i>stripper</i>	46
Tabela 4.2.1 - Limites das variáveis de entrada para a amostragem dos <i>stripper</i>	53
Tabela 4.2.1.1 – Número de termos, ordem e coeficiente de correlação do modelo polinomial reduzido do <i>steam stripper</i>	62
Tabela 4.2.2.1 – Número de neurônios e coeficiente de correlação do modelo de redes neurais do <i>stripper</i>	66
Tabela 5.1 – Resultados obtidos pelas otimizações do problema.....	72
Tabela 5.2 – Melhor ótimo obtido em cada sequência otimização (dólares/ano).....	72
Tabela 5.3 - Comparação da sequência dos ótimos obtidos pelo modelo polinomial e de redes neurais.....	73
Tabela 5.4 – Melhor resultado obtido pelo modelo de redes neurais	75
Tabela 5.5 – Diferença absoluta entre modelos reduzidos e os modelos fenomenológicos	76
Tabela 5.6 – Melhor resultado obtido pelo modelo polinomial.....	78
Tabela 5.7 – Diferença absoluta entre modelos reduzidos e os modelos fenomenológicos	79
Tabela B.1 – Parâmetros e termos da identificação do TAC_{AS}^{film}	94
Tabela B.2 – Parâmetros e termos da identificação do TAC_{AS}^{splash}	94
Tabela B.3– Parâmetros e termos da identificação do $TAC_{AS}^{trickle}$	95

Tabela B.4 – Parâmetros e termos da identificação do $dT_{AS}^{trickle}$	95
Tabela B.5 – Parâmetros e termos da identificação do dT_{AS}^{splash}	96
Tabela B.6 – Parâmetros e termos da identificação do dT_{AS}^{film}	96
Tabela B.7 – Parâmetros e termos da identificação do $Floss_{AS}^{splash}$	97
Tabela B.8 – Parâmetros e termos da identificação do $Floss_{AS}^{trickle}$	97
Tabela B.9 – Parâmetros e termos da identificação do TAC_{AS}^{film}	98
Tabela B.10 – Limites do conjunto de identificação da torre de resfriamento, preenchimento Film	98
Tabela B.11 – Limites do conjunto de identificação da torre de resfriamento, preenchimento Splash.....	99
Tabela B.11 – Limites do conjunto de identificação da torre de resfriamento, preenchimento Splash.....	99
Tabela C.1 – Parâmetros do modelo de redes neurais para a torre de resfriamento, TAC^{film}	100
Tabela C.2 – Parâmetros do modelo de redes neurais para a torre de resfriamento, dT^{film}	100
Tabela C.3 – Parâmetros do modelo de redes neurais para a torre de resfriamento, $Floss^{film}$	101
Tabela C.4 – Parâmetros do modelo de redes neurais para a torre de resfriamento, dT^{splash}	101
Tabela C.5 – Parâmetros do modelo de redes neurais para a torre de resfriamento, TAC^{splash}	102
Tabela C.6 – Parâmetros do modelo de redes neurais para a torre de resfriamento, $Floss^{splash}$	102
Tabela C.7 – Parâmetros do modelo de redes neurais para a torre de resfriamento, $TAC^{trickle}$	103
Tabela C.8 – Parâmetros do modelo de redes neurais para a torre de resfriamento, $dT^{trickle}$	103
Tabela C.9 – Parâmetros do modelo de redes neurais para a torre de resfriamento, $Floss^{trickle}$	104
Tabela E.1 – Parâmetros e termos da identificação do TAC_{SDAS}	112
Tabela E.2 – Parâmetros e termos da identificação do TAC_{SRAS}	112
Tabela E.3 – Parâmetros e termos da identificação do dRF_{SDAS}	113

Tabela E.4 – Parâmetros e termos da identificação do dRF_{SRAS}	113
Tabela E.5 – Parâmetros e termos da identificação do S_{SDAS}^{H2S}	114
Tabela E.6 – Parâmetros e termos da identificação do S_{SRAS}^{H2S}	114
Tabela E.7 – Parâmetros e termos da identificação do S_{SDAS}^{NH3}	115
Tabela E.8 – Parâmetros e termos da identificação do S_{SRAS}^{NH3}	115
Tabela E.9 – Parâmetros e termos da identificação do S_{SDAS}^{OIL}	116
Tabela E.10 – Parâmetros e termos da identificação do S_{SRAS}^{OIL}	116
Tabela E.11 – Parâmetros e termos da identificação do dT_{SDAS}	117
Tabela E.12 – Parâmetros e termos da identificação do dT_{SRAS}	117
Tabela E.13 – Parâmetros e termos da identificação do V/L_{SRAS}	117
Tabela E.14 – Limites do conjunto de identificação do stripper vapor direto.....	118
Tabela E.15 – Limites do conjunto de identificação do stripper com reboiler	119
Tabela F.1 – Parâmetros do modelo de redes neurais para <i>stripper</i> com vapor direto, TAC_{SD}	120
Tabela F.2 – Parâmetros do modelo de redes neurais para <i>stripper</i> com <i>reboiler</i> , TAC_{SR}	120
Tabela F.3 – Parâmetros do modelo de redes neurais para <i>stripper</i> com vapor direto, S_{SD}^{H2S}	121
Tabela F.4 – Parâmetros do modelo de redes neurais para <i>stripper</i> com <i>reboiler</i> , S_{SR}^{H2S}	121
Tabela F.5 – Parâmetros do modelo de redes neurais para <i>stripper</i> com vapor direto, S_{SD}^{NH3}	122
Tabela F.6 – Parâmetros do modelo de redes neurais para <i>stripper</i> com <i>reboiler</i> , S_{SR}^{NH3}	122
Tabela F.7 – Parâmetros do modelo de redes neurais para <i>stripper</i> com vapor direto, S_{SD}^{OIL}	123
Tabela F.8 – Parâmetros do modelo de redes neurais para <i>stripper</i> com <i>reboiler</i> , S_{SR}^{OIL}	123
Tabela F.9 – Parâmetros do modelo de redes neurais para <i>stripper</i> com vapor direto, dRF_{SD}	124
Tabela F.10 – Parâmetros do modelo de redes neurais para <i>stripper</i> com <i>reboiler</i> , dRF_{SR}	124

Tabela F.11 – Parâmetros do modelo de redes neurais para <i>stripper</i> com vapor direto, dT_{SD}	124
Tabela F.12 – Parâmetros do modelo de redes neurais para <i>stripper</i> com reboiler, dT_{SR}	125
Tabela F.13 – Parâmetros do modelo de redes neurais para <i>stripper</i> com <i>reboiler</i> , V/L_{SR}	125
Tabela G.1 – Condições de projeto do estudo de caso 1, unidades de uso, fontes e descartes de água	126
Tabela G.2 – Condições de projeto do estudo de caso 1, sistema de refrigeração	127
Tabela G.3 - Condições de projeto do estudo de caso 1, unidades de tratamento de efluentes.....	127

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

CFD	<i>Computational Fluid Dynamics</i>
DICOPT	<i>Discrete and Continuous Optimizer</i>
ElecNRTL	<i>Electrolyte Non-Random Two Liquid model</i>
GAMS	<i>General Algebraic Modeling System</i>
LP	<i>Linear Program</i>
MINLP	<i>Mixed Integer Nonlinear Program</i>
MSE	<i>Mixed Solvent Electrolyte model</i>
NLP	<i>Nonlinear Program</i>
NRTL	<i>Non-Random Two Liquid model</i>
ONU	<i>Organização das Nações Unidas</i>
RMSECV	<i>Root Mean Square Error of Cross-Validation</i>
SBB	<i>Solver Branch and Bound</i>
UNIQUAC	<i>UNIversal QUAsiChemical model</i>

LISTA DE SÍMBOLOS

Símbolos usados no capítulo 2

Símbolo	Unidade	Descrição
F_{SM}		Vazão de efluente do splitter S para o mixer M
F_{inP}	m^3/h	Vazão de efluente na entrada do processo P
F_{outP}		Vazão de saída do processo P
F_{lossP}		Vazão da corrente de perda do processo P
Z^j_S	ppmw	Concentração do componente j no stripper S
$Z^{in^j}_P$		Concentração do efluente j na entrada do processo P
$Z^{out^j}_P$		Concentração do contaminante j na saída do processo P
$Z^{loss^j}_P$		Concentração do contaminante j na corrente de perda do processo P
T_S	$^{\circ}C$	Temperatura do <i>splitter</i> S
T_{inP}		Temperatura do efluente na entrada do processo P
T_{outP}		Temperatura da saída do processo P
T_{lossP}		Temperatura da corrente de perda do processo P
S	ad.	Conjunto de <i>splitters</i>
M		Conjunto de <i>mixers</i>
j		Conjunto de contaminantes
P		Conjunto de processos

Símbolos usados no capítulo 3

Símbolo	Unidade	Descrição
A_{fr}	m^3	Área da secção transversal da torre
AS	ad.	Índice da variável reescalada
b_2	ad.	Bias da segunda camada da rede neural
b_1	ad.	Vetor de bias da primeira camada da rede neural
cpw	$J/(kg.^{\circ}C)$	Calor específico da água
CTC	Dólares	Custo fixo da torre
dF	%	Variação da vazão de água na torre
dT	$^{\circ}C$	Variação da temperatura da água na torre

Símbolo	Unidade	Descrição
F_a		Vazão de ar
F_{av}		Vazão média da corrente ar-vapor
Fw_{in}	m^3/h	Vazão de água na entrada da torre
Fw_{ev}		Vazão de água evaporada
Fw_d		Vazão de água perdida por arraste
Δh_i		Variação da entalpia da mistura ar-água em cada secção
h_{sa_i}		Entalpia da mistura ar-água saturado
h_{a_i}	J/kg	Entalpia da mistura ar-água
$h_{a_{in}}$		Entalpia da mistura ar-água na entrada da torre
$h_{sa_{out}}$		Entalpia da mistura ar-água na saída da torre
i	ad.	Pontos de Tchebyshev's
IW	ad.	Matriz de pesos da primeira camada da rede neural
Kfi	1/m	Coeficiente de perda de carga do recheio
kf	ad.	Fator anualizador
L_{fi}	m	Altura do preenchimento da torre
LW	ad.	Vetor de pesos para a segunda camada da rede neural
Me	ad.	Coeficiente de Merkel
OPC	U\$/ano	Custo operacional anual
PC_f	J/s	Potência do ventilador
PC_p	J/s	Potência da bomba
PV	Pa	Pressão de vapor da água
TA_{in}		Temperatura do ar na entrada da torre
TAC		Custo total anualizado
Tw_{in}	°C	Temperatura da água na entrada da torre
Tw_{out}		Temperatura da água na saída da torre
TWB_{in}		Temperatura do ar no setor úmido da torre
w_{out}	kg_{H_2O}/kg_{AR}	Umidade do ar na saída da torre
w_{in}	kg_{H_2O}/kg_{AR}	Umidade do ar na entrada da torre
y^j	ad.	Variáveis binárias de escolha do tipo de preenchimento $j = Film, Trickle e Splash$.
$Z_{in_{contaminante}}$	ppmw	Concentração de entrada de um determinado contaminante
$Z_{out_{contaminante}}$	ppmw	Concentração de saída de um determinado contaminante

ρ_m Kg/m³ Média geométrica da densidade da água

Símbolos usados no capítulo 4

Símbolo	Unidade	Descrição
a_p		Área superficial por volume de recheio
A_{AQ}	m ³	Área do aquecedor
A_{EI}		Área do trocador de calor IE
AS	ad.	Índice da variável reescalada
Cp_{IE}^{cool}		Calor específico da corrente fria do trocador de calor IE
Cp_{IE}^{hot}	J/(kg.°C)	Calor específico da corrente quente do trocador de calor IE
dT_{SD}		Diferença entre a temperatura de entrada e saída da coluna com vapor direto
dT_{SR}	°C	Diferença entre a temperatura de entrada e saída da coluna com <i>reboiler</i>
dRF_{SD}		Diferença relativa entre a vazão de entrada e saída da coluna com vapor direto
dRF_{SR}	%	Diferença relativa entre a vazão de entrada e saída da coluna com <i>reboiler</i>
$EFLUHOT$		Vazão de saída da coluna do stripper
$EFLUCOOL$		Vazão do efluente na saída do processo de stripper
$Feed_1$		Vazão de efluente na entrada da unidade do stripper
$Feed_2$		Vazão de efluente após trocador de calor
$Feed_3$		Vazão de efluente após aquecedor
Fin_{IE}^{cool}		Vazão de efluente frio na entrada do trocador de calor
Fin_{BP1}^{cool}		Vazão do efluente frio no <i>bypass</i> do trocador de calor
$Fout_{IE}^{cool}$		Vazão de efluente frio na saída do trocador de calor
Fin_{AQ}		Vazão de efluente na entrada do aquecedor
Fin_{BP2}		Vazão de efluente no <i>bypass</i> do aquecedor
$Fout_{AQ}$	m ³ /h	Vazão de efluente na saída do aquecedor
Fin_{SR}		Vazão de efluente na entrada da coluna com <i>reboiler</i>
Fin_{SD}		Vazão de efluente na entrada da coluna com injeção direta de vapor
$Fout_{SR}$		Vazão de efluente na saída da coluna com <i>reboiler</i>
$Fout_{SD}$		Vazão de efluente na saída da coluna com injeção direta de vapor
Fin_{IE}^{hot}		Vazão de efluente quente na entrada do trocador de calor
Fin_{BP3}^{hot}		Vazão de efluente quente no <i>bypass</i> do trocador de calor
$Fout_{IE}^{hot}$		Vazão de efluente quente na saída do trocador de calor
$Fvap_{SR}$		Vazão de vapor consumida pela coluna com <i>reboiler</i>
$Fvap_{AQ}$		Vazão de vapor consumida no aquecedor

Símbolo	Unidade	Descrição
$Fvap_{SD}$	m ³ /h	Vazão de vapor consumida pela coluna com injeção direta
H	m	Altura da coluna do stripper
$h_{0.8}^{170}$	J/kg	Calor latente da água à 170°C e 0,8 Mpa
$HETP$	m	Altura equivalente a um prato teórico
$HSdN_{SD}$	ad.	Concentração de H ₂ S dividida pela concentração de NH ₃ na entrada da coluna com vapor direto
$HSdN_{SR}$	ad.	Concentração de H ₂ S dividida pela concentração de NH ₃ na entrada da coluna com <i>reboiler</i>
k_{ano}	ad.	Fator anualizador
$LMTD_{IE}$	°C	Média logarítmica da temperatura das correntes do trocador de calor IE
MS_{2010}	ad.	Fator Marshall and Swift de 2010
MS_{2003}	ad.	Fator Marshall and Swift de 2003
NPT_{SR}	ad.	Número de pratos teóricos da coluna com reboiler
NPT_{SD}	ad.	Número de pratos teóricos da coluna com injeção direta
OdH_{SD}	ad.	Concentração de orgânicos dividida pela altura da coluna com vapor direto
OdH_{SR}	ad.	Concentração de orgânicos dividida pela altura da coluna com <i>reboiler</i>
$Pres_{SR}$	atm	Pressão no topo da coluna com vapor direto
$Pres_{SD}$	atm	Pressão no topo da coluna com <i>reboiler</i>
Q_{AQ}	J/h	Calor trocado no aquecedor
Q_{IE}	J/h	Calor trocado no trocador de calor IE
RRM_{SR}	ad.	Razão de refluxo molar da coluna com reboiler
RRM_{SD}	ad.	Razão de refluxo molar da coluna com injeção direta
S_{SD}^{θ}	ad.	Fator de stripper do contaminante θ da coluna com vapor direto $\theta = \text{NH}_3, \text{H}_2\text{S}$ e OIL
S_{SR}^{θ}	ad.	Fator de stripper do contaminante θ da coluna com <i>reboiler</i> $\theta = \text{NH}_3, \text{H}_2\text{S}$ e OIL
TAC_{EI}	U\$/ano	Custo total anualizado do trocador de calor IE
TAC_{SD}		Custo total anualizado da unidade de stripper com a coluna com injeção direta
TAC_{AQ}		Custo total anualizado do aquecedor
TAC_{SR}		Custo total anualizado da unidade de stripper com a coluna com reboiler
T_{IE}^{cool}	°C	Temperatura média do efluente frio que passa pelo trocador
T_{IE}^{hot}		Temperatura média do efluente quente que passa pelo trocador
T_{feed1}		Temperatura do efluente na entrada da unidade do stripper
Tin_{IE}^{cool}		Temperatura do efluente frio na entrada do trocador de calor
Tin_{BP1}^{cool}		Temperatura do efluente frio no <i>bypass</i> do trocador de calor

Símbolo	Unidade	Descrição
T_{feed2}		Temperatura do efluente após trocador de calor
$T_{out_{IE}^{cool}}$		Temperatura do efluente frio na saída do trocador de calor
$T_{in_{AQ}}$		Temperatura do efluente na entrada do aquecedor
$T_{in_{BP2}}$		Temperatura do efluente no <i>bypass</i> do aquecedor
T_{feed3}		Temperatura do efluente após o aquecedor
$T_{out_{AQ}}$		Temperatura do efluente na saída do aquecedor
$T_{in_{SR}}$		Temperatura do efluente na entrada da coluna com reboiler
$T_{in_{SD}}$	°C	Temperatura do efluente na entrada da coluna com injeção direta de vapor
$T_{efluhot}$		Temperatura do efluente após as colunas do stripper
$T_{out_{SR}}$		Temperatura do efluente na saída da coluna com reboiler
$T_{out_{SD}}$		Temperatura do efluente na saída da coluna com injeção direta de vapor
$T_{in_{IE}^{hot}}$		Temperatura do efluente quente na entrada do trocador de calor
$T_{in_{BP3}^{hot}}$		Temperatura do efluente quente no <i>bypass</i> do trocador de calor
$T_{eflucool}$		Temperatura do efluente na saída da unidade de satripper
$T_{out_{IE}^{hot}}$		Temperatura do efluente quente na saída do trocador de calor
$\frac{V}{L}$	ad.	Razão entre as vazões molares das correntes líquido e vapor da coluna do stripper
y_{SD}	ad.	Variável binária de escolha da coluna com vapor direto
y_{SR}		Variável binária de escolha da coluna com <i>reboiler</i>
y_{AQ}		Variável binária de escolha do aquecedor
y_{IE}		Variável binária de escolha do trocador de calor
Z_{feed1}^{NaCl}	ppmw	Concentração de sais na entrada da unidade de stripper
$Z_{eflucool}^{NaCl}$		Concentração de sais na saída da unidade de stripper
Z_{feed1}^{OIL}		Concentração de orgânicos na entrada da unidade de stripper
$Z_{eflucool}^{OIL}$		Concentração de orgânicos na saída da unidade de stripper
Z_{feed1}^{H2S}		Concentração de H ₂ S na entrada da unidade de stripper
$Z_{eflucool}^{H2S}$		Concentração de H ₂ S na saída da unidade de stripper
$Z_{in_{SR}}^{H2S}$		Concentração de H ₂ S na entrada da coluna com reboiler
$Z_{in_{SD}}^{H2S}$		Concentração de H ₂ S na entrada da coluna com injeção direta
$Z_{out_{SR}}^{H2S}$		Concentração de H ₂ S na saída da coluna com reboiler
$Z_{out_{SD}}^{H2S}$		Concentração de H ₂ S na saída da coluna de injeção direta

Símbolo	Unidade	Descrição
$Z_{feed1}^{NH_3}$		Concentração de NH_3 na entrada da unidade de stripper
$Z_{eflucool}^{NH_3}$		Concentração de NH_3 na saída da unidade de stripper
$Z_{inSR}^{NH_3}$		Concentração de NH_3 na entrada da coluna com reboiler
$Z_{inSD}^{NH_3}$		Concentração de NH_3 na entrada da coluna com injeção direta
$Z_{outSR}^{NH_3}$	ppmw	Concentração de NH_3 na saída da coluna com reboiler
$Z_{outSD}^{NH_3}$		Concentração de NH_3 na saída da coluna de injeção direta
Z_B		Concentração de contaminante na saída da coluna do stripper
Z_T		Concentração de contaminante na entrada da coluna do stripper

ad. = adimensional

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO	1
2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	3
2.1 Projeto de Sistemas de tratamento de água	3
2.1.1 <i>Objetivos do trabalho.....</i>	<i>8</i>
2.2 Modelagem matemática de uma superestrutura	9
2.3 Modelos reduzidos	12
2.4 Modelo Polinomial.....	15
2.5 Redes Neurais	18
3 TORRE DE RESFRIAMENTO	21
3.1 Modelo semi-fenomenológico para a torre de resfriamento	22
3.1.1 <i>Design térmico e hidráulico</i>	<i>22</i>
3.2. Modelo reduzido para a torre de resfriamento	28
3.2.1 <i>Modelo polinomial para a torre de resfriamento</i>	<i>30</i>
3.2.2 <i>Modelo de redes neurais para a torre de resfriamento.....</i>	<i>35</i>
4. STEAM STRIPPER.....	39
4.1. Modelo fenomenológico para o <i>Steam stripper</i>	39
4.2 Modelo reduzido para o <i>steam stripper</i>.....	46
4.2.1 <i>Modelo polinomial para a coluna do steam stripper</i>	<i>59</i>
4.2.2 <i>Modelo de redes neurais para a coluna do steam stripper.....</i>	<i>63</i>
5. ANÁLISE COMPARATIVA DOS MODELOS REDUZIDOS.....	68
6. CONCLUSÕES	81
BIBLIOGRAFIA	84
APÊNDICE A.....	89
APÊNDICE B.....	94
APÊNDICE C	100
APÊNDICE D	105
APÊNDICE E.....	112
APÊNDICE F.....	120
APÊNDICE G	126

1. INTRODUÇÃO

Segundo informações da ONU (2011), dos 1,4 bilhões de quilômetros cúbicos de água existentes na Terra, apenas 2,5% são de água potável. Deste volume, cerca de 70% encontra-se em geleiras ou na forma de neve, localizada em regiões montanhosas, 29,7% está armazenada nos lençóis freáticos e 0,3% encontra-se em rios e lagos. Do total de água potável consumida no mundo, 70% é destinada à agricultura, 8% ao consumo doméstico e 22% à indústria, ou seja, o consumo de água por parte da indústria é expressivo.

Devido à importância da água, sua utilização é alvo de restrições severas impostas pelos órgãos de fiscalização, causando aumento significativo no custo deste recurso. Desta forma, é papel da indústria a boa utilização da água, não apenas pela responsabilidade moral, mas também pela possibilidade de viabilizar o processo produtivo, trabalhando continuamente para a elevação da produtividade hídrica.

A água é elemento chave para o funcionamento normal da indústria química e petroquímica, o que gera efluentes aquosos que necessitam de tratamento para posterior descarte. Nas refinarias, os efluentes aquosos são formados em diversos processos, como nos exemplos mostrados na Tabela 1.1.

Tabela 1.1 – Fontes de efluentes aquosos de uma refinaria

Processo	Fonte de efluentes aquosos
Dessalgadora	Água de lavagem
Destilação atmosférica	Tambores de refluxo
Destilação à vácuo	Condensador barométrico
Coqueamento retardado	Remoção do coque das baterias e na etapa de injeção de vapor
Hidrocraqueamento	Fracionador
FCC	Fracionador
Visco-redução	Fracionador
Dessulfuração	Corrente cáustica de lavagem
Alquilação	Fracionador e corrente cáustica de lavagem

Fonte: Mariano (2001).

Nestes processos a água sofre contaminação por diversos elementos, como: H_2S , sólidos suspensos, sais, amônia, fenóis e metais pesados, necessitando de tratamento antes de sua disponibilização no meio ambiente, (BAGAJEWICKZ, 2000).

Esse tratamento pode ser feito por um sistema descentralizado (onde existe segregação das correntes efluentes antes do tratamento), ou sistema centralizado (onde todas as correntes efluentes são misturadas para posterior tratamento). O primeiro sistema mostra-se mais vantajoso, já que, segundo McLughlin et al. apud Wang e Smith (1994a) o custo de capital de uma operação de tratamento de efluentes é proporcional ao da vazão tratada e o custo operacional aumenta com a diminuição da concentração para uma dada massa de contaminante. Portanto, o tratamento distribuído de duas correntes, caso possuam contaminantes diferentes, resulta em menor custo de capital e operacional, se comparado ao sistema de tratamento centralizado. Logo, fez-se necessário o desenvolvimento de metodologias para o projeto de sistemas de tratamento descentralizados.

Diversas metodologias foram desenvolvidas para a síntese e otimização deste tipo de processo, sendo elas divididas em: programação matemática, *design* conceitual e análise gráfica. Destas, a primeira apresenta vantagens com relação às demais, já que, leva em consideração todas as possibilidades de configuração do sistema, diferentemente da abordagem de *design* conceitual que inicia o fluxograma a partir de um equipamento crítico e continua sua construção de dentro para fora, ou da análise gráfica, que se baseia em limites termodinâmicos do sistema.

Exemplos desses tipos de síntese e otimização podem ser encontrados em trabalhos como os de Takama et al. (1980), com redução de 55% nos custos em relação ao caso convencional, de Wang e Smith (1994), com redução de 25,8% no custo anualizado do processo e de Alva-Argaez et al. (1998), com redução total de custo de 554.408,00 dólares por ano.

No presente trabalho é desenvolvida uma abordagem matemática para o problema de síntese de processos e otimização de processos já existentes de tratamento de água, diferenciando-se de estudos anteriores pela utilização de modelos reduzidos (também conhecidos como modelos de superfície de resposta), para a representação dos processos de tratamento, empregados na formulação do problema.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1 Projeto de Sistemas de tratamento de água

Os efluentes aquosos gerados por uma refinaria de petróleo contêm diversos contaminantes, como: óleos, fenóis, sulfetos, sólidos dissolvidos, sólidos suspensos e metais tóxicos. A quantidade de poluentes no efluente é função do tipo de petróleo e do processo envolvido, diferentemente da concentração de poluentes que é função da quantidade de vapor e de água utilizado no processamento. É importante a distinção destas duas grandezas, quantidade e concentração, pois a análise de emissão de uma refinaria deve ser feita com relação à quantidade de poluentes emitidos por quantidade de petróleo processado, já que os processos, assim como o petróleo de alimentação variam de planta para planta, (BEYCHOK, 1967).

A grande variedade de configurações de processos e a diversidade das características de diferentes petróleos dificultam a predição e análise dos efluentes. No entanto, para o tipo de refinaria que iremos tratar neste trabalho (refinarias de primeira geração, que não incluem processos como: cloração, oxidação ou nitração), é possível a predição da produção de poluentes, que é necessária na aplicação das técnicas de sínteses que serão estudadas. Os dados referentes à produção de contaminantes pelos processos de refino foram obtidos no trabalho de Huang et al. (1999), baseado em um caso real.

A pesquisa sobre síntese de tratamento de efluentes de refinarias iniciou-se em 1980, quando Takama et al. (1980) publicaram o primeiro trabalho com o objetivo de diminuir o consumo geral de água de uma refinaria de petróleo através da segregação e integração de correntes de efluentes do processo. Para isto, Takama et al. (1980) modelaram seu problema como uma superestrutura, ou seja, uma malha de correntes que engloba todas as possibilidades de conexão entre os processos, através da utilização de *mixers* (misturadores de correntes) e *splitters* (separadores de correntes), como mostra a Figura 2.1.1.

Figura 2.1.1 – Representação da superestrutura de Takama et al. (1980)

Takama et al. (1980) efetuaram os balanços de massa para a superestrutura (que estão descritos na secção 2.2) e utilizaram modelos de eficiência para a representação dos processos de tratamento e uso de água. Devido ao grande número de possibilidades e às não convexidades¹ contidas nos termos bi-lineares² dos balanços de massa por componentes, houve a necessidade da implementação de uma metodologia para a resolução do NLP (problema não linear) formado, com restrições.

Já que as restrições de desigualdade eram difíceis de serem resolvidas, com o algoritmo de otimização de que dispunham (o método Complex), Takama et al. (1980) modificaram o problema, substituindo as desigualdades que impunham os limites de concentração dos contaminantes na entrada dos processos por uma função de penalidade, penalizando as restrições que não fossem obedecidas. Para complementar, Takama et al. adicionaram uma etapa de redução da superestrutura, em que são excluídas automaticamente as correntes com valores desprezíveis, garantindo que o método Complex não termine a busca prematuramente.

Após este primeiro trabalho, a pesquisa na área de síntese de sistemas de tratamento de água permaneceu latente por 14 anos, até que Wang e Smith (1994a) desenvolveram uma metodologia de análise gráfica para o projeto de sistemas distribuídos de água. O *water pinch* criado por Wang e Smith (1994a) era baseado na análise *pinch*, já utilizada no projeto de redes de trocadores de calores, bem desenvolvida à época. A análise *pinch* é um método gráfico que baseia-se nos limites termodinâmicos impostos aos processos. O procedimento criado por Wang e Smith (1994a, 1994b), consiste na construção de um gráfico, onde no eixo das abscissas está a escala de carga contaminante Δm_i , e no eixo das ordenadas está a

¹ não-convexidade – função que pode formar diversos mínimos locais no problema

² termo bi-linear – termo formado pela multiplicação de duas variáveis, no caso: vazão e concentração

escala de concentração C . Cada corrente é representada como uma seta, de comprimento igual à carga de contaminante e altura igual à diferença entre concentração de entrada e saída (ou meta).

As setas de efluentes são agrupadas em sequência, de maneira que não se sobreponham com relação à carga de contaminante, como descrito na Figura 2.1.2a. Em seguida é construída uma curva composta que representa a soma de todas as correntes efluentes do processo, ilustrada na Figura 2.1.2b. Posteriormente constrói-se a curva de tratamento, que é ajustada, seguindo todas as restrições de balanço de massa do processo de tratamento, até que encoste-se na curva de efluentes. O ponto onde a curva de tratamento encosta na curva de efluente é o limite termodinâmico para a troca de massa entre elas, este ponto é denominado *pinch* (Figura 2.1.2c). Caso a curva de tratamento ultrapasse a curva de efluentes, não poderá haver troca de contaminantes da corrente de efluente para a corrente de tratamento, portanto a região formada neste caso é impossível para a construção do sistema (Figura 2.1.2d).

Figura.2.1.2 - Esquema de construção do gráfico para análise *pinch*
Fonte: (WANG; SMITH,1994b).

Após a determinação da mínima vazão possível de tratamento, é construída a nova configuração do sistema de efluentes, respeitando o limite mínimo de vazão estabelecido pela análise *pinch*.

Embora a tecnologia *pinch* tenha aparecido em outros trabalhos, como: Wang e Smith (1994b), Dhole et al. (1996), Doyle e Smith (1997) e Kuo e Smith (1997, 1998a, 1998b), a abordagem gráfica para a resolução do problema de síntese de processos de tratamento acabou sucumbindo, pois mostrou-se limitada na resolução de problemas com números elevados de processos e múltiplos contaminantes.

No entanto, a pesquisa baseada na abordagem matemática continuou com Alva-Argáez et al. (1998), que modificaram a metodologia desenvolvida por Takama et al. (1980) adicionando uma variável binária a cada possível corrente de efluente, transformado o NLP em um MINLP (problema misto inteiro não linear). Além disto, o autor fixou a concentração de saída de cada processo de consumo e tratamento de água através de um contaminante limitante, eliminando os termos bi-lineares criados pelos balanços por componentes, formando assim um MILP (problema misto inteiro linear).

Galan e Grossmann (1998) desenvolveram uma metodologia heurística para encontrar bons limites inferiores para o ótimo global. A idéia básica é a obtenção de bons pontos iniciais através da resolução do LP (problema linear), gerado pela relaxação do NLP criado pela superestrutura. A utilização de diferentes funções objetivo para solucionar o LP obtido do problema original, encontra diferentes pontos iniciais, que são então utilizados na busca do NLP, chegando a diferentes ótimos locais. O melhor ótimo é então escolhido como limite superior e o algoritmo continua a busca retornando ao modelo relaxado.

Huang et al. (1999) resolveram o problema de alocação de correntes de efluentes aquosos para uma refinaria de petróleo, que incluía: sete processos de uso de água, três processos de pré tratamento, duas fontes e três possíveis descartes. Em seu trabalho, eles utilizam modelos dos processos de tratamento de efluentes ligeiramente mais sofisticados do que os utilizados até então, pois consideram possíveis perdas de água das unidades.

Em 2000 surge o primeiro *review* dessa área (BAGAJEWICZ, 2000), abordando métodos gráficos e de programação matemática para a resolução do problema de síntese de processos de tratamento de água. A partir daí, os trabalhos são voltados para a resolução ótima global dos NLP's e MINLP's criados na

modelagem das superestruturas, como nos trabalhos de: Lee e Grossmann (2001, 2003), Hernandez et al. (2004), Chang e Li (2005), Gabriel e El-Halwagi (2005), Bergamini et al. (2005), Karrupiah e Grossmann (2006), Meyers e Floudas (2006), Li e Chang (2007), Teles et al. (2008), Bergamini et al. (2008), Chang et al. (2009), Teles et al. (2009), Ahmetovic e Grossmann (2010) e Faria e Bagajewicz (2010).

Neste meio tempo, surgiram outros trabalhos unindo a síntese de processos de tratamento de água e a integração de energia, como: Dong et al. (2008), Bogajat e Bagajewicz (2008) e Kim et al. (2009).

Em 2010 surge o *review* mais recente da área (JEZOWSKI, 2010), que trata de integração de energia, massa e consumo de água. Este *review* traz anotações de 264 trabalhos publicados na área, além de sua opinião sobre os caminhos futuros.

Segundo Jezowski (2010, p.4513): “Apenas alguns trabalhos consideraram modelos mais detalhados de processo de tratamento; no entanto essas abordagens são muitas vezes limitadas a uma única tecnologia de tratamento de um tipo fixo.” Jezowski (2010, p.4513) também afirma que: “o ponto crucial envolve a aplicação de modelos mais rigorosos de processos: unidades de uso de água, assim como, processo de tratamento de efluentes”.

Por exemplo, um *stripper* para a remoção de um contaminante leve, como o H_2S , pode ser representado em uma superestrutura, utilizando a equação de Kremser:

$$\frac{Z_B}{Z_T} = \frac{S - 1}{S^{N+1} - 1} \quad S \neq 1 \quad (2.1.1)$$

Onde Z_B e Z_T são as concentrações do contaminante no topo e no fundo da coluna, N é o número de estágios teóricos da coluna e S é o fator de *stripping*, função da constante de equilíbrio e da razão molar entre a corrente de vapor e de líquido dentro da coluna.

Porém, o cálculo do equilíbrio implícito neste modelo, não leva em consideração parâmetros tais como a temperatura, nem a influência de outros contaminantes do líquido, além disto, considera o fator de *stripping* médio dentro da coluna, o que não é representativo no sistema real, já que este fator muda a cada estágio teórico (condição termodinâmica diferente). Sendo assim, para a obtenção

de resultados mais realistas ou mais representativos do processo real, seria necessária a utilização de modelos fenomenológicos.

A utilização de modelos mais rigorosos tornaria os resultados encontrados mais confiáveis, uma vez que a eliminação de hipóteses simplificadoras fortes, muitas vezes necessárias na concepção de modelos simplificados, diminui o desvio dos resultados em relação aos valores reais. No entanto, a utilização de modelos fenomenológicos em superestruturas de síntese tornar-se-ia inviável, devido ao tempo computacional elevado e às dificuldades técnicas de se programar os módulos e propriedades termodinâmicas de um simulador comercial, em uma plataforma de otimização como o GAMS.

Desta forma, seguindo o raciocínio de Jezowski (2010), faz-se necessária a construção de modelos de processos de tratamento de efluentes mais completos, ou seja, mais realistas, que levam em consideração parâmetros de construção dos equipamentos, de maneira a encontrar a melhor configuração do equipamento para o sistema de tratamento para o qual está sendo projetado. Esse modelo deve ser preciso para uma determinada faixa de trabalho, e de fácil implementação em uma superestrutura para síntese e otimização de processos de tratamentos de efluentes, o que pode ser alcançado com a utilização de modelos reduzidos (*surrogate models*), ou seja, modelos tipo “caixa preta”, que possuem alta-precisão dentro dos limites para os quais foram construídos, além de um pequeno tempo computacional, necessário para sua utilização em uma superestrutura.

2.1.1 Objetivos do trabalho

Neste trabalho pretende-se formular modelos mais realistas de equipamentos para utilização na síntese do tratamento de efluentes de uma refinaria de petróleo, seguindo orientação do *review*, (JEZÓWSKI, 2010). Para isso, serão aplicadas diferentes técnicas de construção de modelos reduzidos, a partir de dados coletados em experimentos computacionais realizados com a simulação de modelos semi-fenomenológicos e fenomenológicos. Os equipamentos escolhidos para a aplicação das técnicas serão uma torre de resfriamento e um *steam stripper*, já que ambos aparecem na configuração de sistemas de tratamento em refinarias e possuem

grande sensibilidade à temperatura, variável no projeto, seguindo trabalhos que levam em consideração a síntese de processos de tratamento de água juntamente à integração de energia, (BOGAJAT; BAGAJEWICZ, 2008).

Os modelos reduzidos criados serão aplicados a um problema semelhante ao apresentado por Huang et al. (1999), e serão comparados entre si com relação à capacidade de correlação do equipamento, ao tempo computacional e à capacidade de chegar ao melhor mínimo.

2.2 Modelagem matemática de uma superestrutura

Como dito anteriormente, a superestrutura é formada por uma malha de correntes que ligam entre si os processos de geração e tratamento de efluentes. A construção desta malha é possível graças à utilização de um misturador (*mixer*) antes e um divisor de correntes (*splitter*) depois de cada processo. Portanto, o modelo matemático da superestrutura deve contemplar os balanços de massa por componente, de energia e de massa total de cada corrente dos *mixers* e *splitters*. Neste trabalho foi considerado o modelo proposto por Takama et. al (1980), aliado à proposta de balanço de energia de Bogataj e Bagajewicz (2008).

O esquema apresentado pela Figura 2.2.3 representa o *mixer* utilizado neste trabalho.

Figura 2.2.1 - Representação esquemática das unidades de mistura de correntes

Balanço de massa total para o *mixer*

$$F_{inP} = \sum_S F_{SM} \quad (2.2.1)$$

Onde F_{SM} é a vazão do *splitter* S para o *mixer* M e F_{inP} é a vazão de efluente que entra do processo P.

Balanço de massa por componente para o *mixer*

$$Fin_P \cdot Zin_P^j = \sum_S (F_{SM} \cdot Z_S^j) \quad (2.2.2)$$

Onde Z_S^j é a concentração do contaminante j na saída do *splitter* S e Zin_P^j é a concentração de contaminante j que entra no processo P.

Balanço de energia para o *mixer*

$$Fin_P \cdot Tin_P \cdot Cp = \sum_S (F_{SM} \cdot T_S \cdot Cp) \quad (2.2.3)$$

Como hipótese simplificadora, considerou-se o calor específico para as correntes líquidas Cp , como constante. Desta forma, a equação (2.2.3) pode ser simplificada para equação (2.2.4).

$$Fin_P \cdot Tin_P = \sum_S (F_{SM} \cdot T_S) \quad (2.2.4)$$

Onde T_S é a temperatura do *splitter* S e Tin_P é a temperatura do efluente que entra no processo P.

O esquema apresentado pela Figura 2.2.2 representa os *splitters* utilizados neste trabalho.

Figura 2.2.2 - Representação esquemática das unidades de divisão de correntes

Balanço de massa total para o *splitter*

$$Fout_P = \sum_M F_{SM} \quad (2.2.5)$$

Onde $Fout_P$ é a vazão de saída do processo P.

Balanço de massa por componente para o *splitter*

$$Z_{out_p}^j = Z_s^j \quad (2.2.6)$$

Onde $Z_{out_p}^j$ é a concentração do contaminante j na corrente de saída do processo P.

Balanço de energia para o *splitter*

$$T_{out_p} = T_s \quad (2.2.7)$$

Onde T_{out_p} é a temperatura de saída do processo P

A Figura 2.2.3 mostra esquematicamente o modelo robusto proposto por Huang et al. (1999), que considera a corrente de entrada, saída e perda de um determinado processo.

Figura 2.2.3 - Representação esquemática dos processos de tratamento ou uso de água.

Balanço de massa total para processo de tratamento ou uso de água

$$F_{in_p} = F_{out_p} + F_{loss_p} \quad (2.2.8)$$

Onde F_{in_p} , F_{out_p} e F_{loss_p} são respectivamente as vazões de entrada saída e perda no processo P.

Balanço de massa por componente para processo de tratamento ou uso de água

$$F_{in_p} \cdot Z_{in_p}^j + L_p^j = F_{out_p} \cdot Z_{out_p}^j + F_{loss_p} \cdot Z_{loss_p}^j \quad (2.2.7)$$

Onde $Z_{in_p}^j$, $Z_{out_p}^j$ e $Z_{loss_p}^j$ são respectivamente as concentrações de entrada, saída e perda do componente j no processo P. Sendo L_p^j , a carga de contaminante j que é produzida no processo P, positiva para processos de uso e negativa para processo de tratamento.

No estudo de caso que do capítulo 5, a temperatura de saída do processo T_{out_p} , bem como a carga de contaminante adicionada ou removida do sistema L_p^j , serão dados fixos, com exceção dos modelos reduzidos construídos, a torre de resfriamento e o *steam stripper*.

2.3 Modelos reduzidos

Pode-se definir modelo como a descrição de um processo ou um objeto, que permite lidar com problemas complexos de maneira sistemática. No caso de um modelo matemático, tem-se um conjunto de equações que possibilitam a obtenção de uma solução do problema em questão, utilizando-se de um algoritmo, ou seja, um procedimento para alcançar a resolução do problema.

Um algoritmo é considerado mais eficiente pela capacidade de resolver o problema mais rapidamente, já que o tempo é um fator dominante, portanto útil para a comparação prática. Neste contexto, pode-se definir complexidade de um modelo, como sendo a função de complexidade do tempo requerido para que um algoritmo chegue a uma solução, dado o tamanho do problema (GAREY; JOHNSON, 1999).

A função de complexidade de tempo de um algoritmo pode se comportar polinomial ou exponencialmente. A maioria dos algoritmos de tempo exponencial são simplesmente variações de algoritmos de busca exaustiva (simplex), enquanto os algoritmos de tempo polinomial geralmente são aqueles nos quais os caminhos de busca são realizados no interior do problema (por exemplo, gradiente reduzido generalizado).

Desta maneira, pode-se considerar um problema como intratável, se para sua resolução, exige-se uma quantidade de tempo exponencial, o que depende do algoritmo escolhido e do modelo (conjunto de equações), que representa o problema.

Cada vez mais é possível a representação de fenômenos complexos da natureza através da modelagem matemática, porém, o aumento da complexidade dos modelos exige maiores tempos computacionais, e em alguns casos, necessitando de dias de simulação para chegar-se a um resultado. Isto piora na

otimização, já que é necessária a solução destes grandes modelos matemáticos diversas vezes para se alcançar um ponto ótimo. A utilização de modelos reduzidos torna tratável o problema de otimização de grandes modelos matemáticos.

Surrogate models, meta-modelos ou modelos de superfície de resposta, são modelos reduzidos que simulam o comportamento de um modelo fenomenológico complexo, a custo de um tempo computacional baixo. Estes modelos funcionam como uma caixa preta, já que desconsideram a fenomenologia do processo, sendo constituídos por equações onde as variáveis de saída do modelo reduzido são funções unicamente das variáveis de entrada (ou variáveis independentes) do modelo completo.

Existem diversos tipos de modelos reduzidos descritos na literatura, como por exemplo: modelos polinomiais, modelos de Kriging, redes neurais e *splines*. Estes modelos podem ser de interpolação, como no caso do Kriging *interpolation* e *splines* (onde a superfície de resposta passa por todos os pontos da amostra de ajuste), ou não, como no caso de modelos polinomiais e redes neurais (que minimizam a soma dos erros ao quadrado para a determinação dos parâmetros do modelo). No entanto, um modelo reduzido não é capaz de satisfazer todos os problemas, ou seja, ele pode representar muito bem um problema, enquanto, pode não representar adequadamente outro, (JONES et al., 2001). Desta forma, é impossível dizer se um modelo reduzido é melhor ou pior que outro, pois cada tipo vai se adaptar melhor a um determinado problema, cabendo a comparação caso a caso, sem possibilidade de generalização.

Este tipo de modelo vem sendo aplicado às diversas áreas da ciência, como: modelagem de blocos de circuito (GORISSEN et al., 2009); modelagem hidrológica, (COUCKYT et al., 2009); pacotes eletrônicos (ZHU; FRANZON, 2009); modelagem aerodinâmica (YU; YANG; YUE, 2010); modelagem de dados automotivos (JANSSON; ANSERSSON; NILSSON, 2005); modelagem de equipamentos da indústria química, (HENAO; MARAVELIAS, 2011) (CABALLERO; GROSSMANN, 2008).

Pode-se representar esquematicamente a otimização baseada em modelos reduzidos pela Figura 2.3.1.

Figura 2.3.1 – Representação esquemática da otimização baseada em modelos reduzidos

A amostragem é feita a partir das variáveis independentes escolhidas no modelo matemático completo. A partir do *range* operacional destas variáveis, pode-se executar uma amostragem randômica, análise fatorial ou Hipercubos Latinos. Após a amostragem, o modelo completo é alimentado com as variáveis de entrada e simulado para obtenção de um ponto estacionário. O conjunto de pontos estacionários fornecidos pelo modelo completo é, então, utilizado para a regressão dos parâmetros do modelo reduzido, que por fim será otimizado utilizando um algoritmo de otimização.

Em alguns trabalhos, a construção de modelos reduzidos foi utilizada na síntese de processos através da otimização de superestruturas. Caballero e Grossmann (2008) criaram uma metodologia para a construção e otimização de um modelo reduzido pelo método de interpolação Kriging, eles aplicaram a metodologia na síntese de um processo de produção de Anidrido ftálico a partir de o-xileno. Henao e Maravelias (2011) desenvolveram uma metodologia para a construção de modelos reduzidos com redes neurais, onde foram formulados modelos reduzidos para os principais equipamentos presentes em processos químicos, aplicando sua metodologia na síntese de um processo de fabricação de anidrido maleico.

Segundo Muller e Piché (2010), modelos polinomiais de graus diferentes podem ser facilmente construídos utilizando o método de mínimos quadrados para a determinação de seus parâmetros, sendo que em geral, modelos de segunda ordem são, na maioria das vezes, suficientes para a identificação do conjunto de dados.

Guerra e Le Roux (2011) utilizaram um modelo polinomial completo, linear com relação aos parâmetros, para a correlação de uma unidade de destilação e uma unidade de craqueamento catalítico de leite fluidizado, aplicando o modelo reduzido construído na programação de produção de refinarias de petróleo.

Desta maneira, foi proposta a utilização de modelos polinomiais completos, lineares em relação aos parâmetros, para o desenvolvimento dos modelos reduzidos

deste trabalho. Estes modelos completos podem ser reduzidos, de maneira a obter-se uma boa relação entre predição e complexidade do modelo, seguindo a metodologia descrita na próxima secção 2.4.

Para a comparação com o modelo reduzido polinomial foi aplicada a metodologia proposta por Henao e Maravelias (2011) de redes neurais. O modelo de redes neurais está descrito na secção 2.5.

2.4 Modelo Polinomial

O modelo polinomial, linear com relação aos parâmetros, utilizado neste trabalho, é do tipo:

$$y = \theta^T \cdot Reg \quad (2.4.1)$$

Onde y é o vetor de variáveis dependentes, θ^T a transposta do vetor de parâmetros e Reg o vetor de regressores.

O vetor de regressores é um conjunto de termos resultante das m variáveis independentes x e da ordem do polinômio. Por exemplo, um modelo polinomial completo de terceira ordem com m variáveis pode ser representado pela equação (2.4.2), sendo que, x_i , x_j e x_k são as variáveis independentes do modelo e θ_0 , θ_i , $\theta_{i,j}$, $\theta_{i,j,k}$ são os parâmetros da correlação.

$$y = \theta_0 + \sum_{i=1}^m \theta_i \cdot x_i + \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^m \theta_{i,j} \cdot x_i \cdot x_j + \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^m \sum_{k=1}^m \theta_{i,j,k} \cdot x_i x_j x_k \quad (2.4.2)$$

O aumento no grau do polinômio, utilizado para identificação, melhora o ajuste do modelo ao conjunto de dados de calibração, podendo gerar sobre-ajuste. A Figura 2.4.1 é um gráfico do erro da predição sobre o número de termos do modelo.

Figura 2.4.1 – Erro de predição pela complexidade do modelo

No gráfico anterior, percebe-se que o erro sobre o conjunto de ajuste sempre diminui com o aumento da complexidade do modelo, enquanto o erro associado ao conjunto de validação decresce até certo ponto e depois começa a subir. A soma destas duas curvas resulta no erro de predição do modelo, que como pode ser observado, tem um mínimo o qual deve ser alcançado (ESBENSEN et al., 2006).

Existem diversas metodologias para a escolha do melhor modelo, que levam em consideração a complexidade e capacidade de predição obtida pelo modelo reduzido, em relação ao modelo completo, como: C_p de Mallows, J_p de Hocking, S_p de Hocking, Akaike, Press e o BIC (anotações de aula)³. Para a escolha do modelo reduzido deste trabalho, foi utilizada uma metodologia que combina o método da validação cruzada, para a determinação do número “ideal” de termos do modelo polinomial reduzido juntamente com a função de mínimos quadrados parciais do *toolbox* de PLS_*toolbox* da Eigen-Vector, para a escolha de quais termos “ $\theta_{i,j,k} \cdot f(x_i, x_j, x_k)$ ”, do modelo completo, formarão o modelo reduzido.

A validação cruzada é um método em que não se utilizam os pontos de ajuste para a validação do modelo. Para cada modelo, o algoritmo executa alternadamente o ajuste sem um determinado conjunto de pontos, que é utilizado para a validação do modelo. O processo é repetido diversas vezes, sendo que ora um ponto é utilizado para o ajuste, ora este mesmo ponto é utilizado para a validação.

Desta maneira, primeiramente é realizada uma análise por componentes principais, com o objetivo de ordenar os termos do regressor de acordo com os auto-

3 – Informação adquirida de anotações de aula de Identificação de Modelos de Processos Químicos, Departamento de Engenharia Química, Prof. Dr. Galo Antonio Carrillo Le Roux.

valores obtidos pela decomposição do produto da matriz de regressores. Então, o algoritmo calcula a raiz quadrada média da validação cruzada (RMSECV) equação (2.4.3), que é associada a cada variável latente (termo retirado da matriz de regressores). Como resultado, o algoritmo retorna um gráfico de RMSECV em função da variável latente, conforme pode ser visto no exemplo apresentado na Figura 2.4.2

$$RMSECV = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (\hat{y}_{i,crossval} - y_{i,crossval})^2}{n}} \quad (2.4.3)$$

Onde n é o número de pontos da validação cruzada, $\hat{y}_{i,crossval}$ é a i ésima variável predita do conjunto de validação cruzada e $y_{i,crossval}$ é a i ésima variável medida do conjunto de validação cruzada.

Figura 2.4.2 – Exemplo de curva de validação cruzada

Pode-se observar que a curva começa com um perfil assintótico, estabelecendo-se em um patamar, até que, com o aumento do número de termos, ocorre o sobre-ajuste do modelo, indicado pelo aumento do RMSECV. Já a curva RMSEC, refere-se ao valor da raiz quadrada dos erros ao quadrado, obtido pelos pontos de calibração. A escolha do número de variáveis do modelo reduzido é feita através da seleção do modelo que corresponde ao menor número de termos e que levam à melhor predição. No caso acima, uma boa escolha seria o modelo com 14 termos. A escolha dos 14 termos, que entrarão neste modelo, é realizada utilizando-

se a função de mínimos quadrados parciais, IPLS do *toolbox* de PLS_*toolbox* da Eigen-Vector.

2.5 Redes Neurais

A teoria de redes neurais surgiu com o estudo da fisiologia das células nervosas e a modelagem matemática do comportamento dessas células (KOVÁCS,1996). O neurônio biológico pode ser segmentado em três partes principais: árvore dendrital, soma e axônios. Os impulsos nervosos, que serão processados de alguma maneira pelo neurônio, são recebidos através da árvore dendrital, passam pela soma e por fim encaminham-se para o axônio, onde serão enviados aos dendritos de outros neurônios. Dessa maneira, pode-se entender o neurônio como um dispositivo computacional com muitas entradas e uma saída (KOVÁCS, 1996).

Por exemplo, pode-se representar esquematicamente uma rede neural particular de três camadas, sendo a primeira o vetor de entrada, a segunda (camada oculta) com 5 neurônios e a terceira com 1 neurônio, como ilustrado na Figura 2.5.1.

Figura 2.5.1 – Representação de uma rede neural

Onde, k é o conjunto de camadas, l é o conjunto de neurônios da camada k , w_l^k é o vetor de pesos que multiplica o vetor x de entrada, b_l^k é o vetor de bias e $f(\cdot)$ é a

função de ativação, sendo que para este trabalho, foi utilizada a função de tangente hiperbólica na segunda camada e a linear na terceira, já que segundo o teorema de Kolmogorov-Nielsen:

Existe sempre para uma dada função arbitrária, uma implementação exata com uma rede neural de três camadas, sendo a camada de entrada um vetor de dimensão n , a camada oculta composta por $(2n+1)$ neurônios, e a camada de saída com m neurônios representando as m componentes do vetor y , (KOVÁCS, 1996).

Matematicamente, temos a rede neural como uma função do tipo $y = f(x)$, dada pela equação (2.5.1):

$$y = LW.\tanh(IW.x + b2) + b3 \quad (2.5.1)$$

Os termos em vermelho pertencem à terceira camada, onde LW é a matriz de pesos para a camada linear, $b3$ é o vetor de bias da camada linear. Os termos em azul pertencem à segunda camada, onde IW é a matriz de pesos da camada oculta e $b2$ o vetor de bias da camada oculta. Por fim, x pertence à primeira camada. Os parâmetros da rede são identificados na etapa “treinamento”, que é realizada a partir de um conjunto de dados de entrada e saída, durante essa etapa, o erro entre as variáveis de saída preditas e medidas é minimizado, buscando o melhor conjunto de parâmetros de identificação.

Segundo Kovács (1996), pode-se considerar uma rede neural como um aproximador universal de funções, já que, de acordo com Girosi e Poggio (1990), uma função contínua pode ser representada por uma somatória de sinos e, conseqüentemente, estes sinos podem ser representados por pares de neurônios como mostra a Figura 2.5.2.

Figura 2.5.2 – A) Aproximação de uma função contínua por sinos; B) implementação de um sino por um par de neurônios

Fonte: (KOVÁCS,1996)

Desta maneira, podemos utilizar um modelo de redes neurais para representar funções complexas obtidas na modelagem fenomenológica, transformando-os assim, em modelos tipo “caixa preta”.

Neste trabalho foi utilizado o *Toolbox* de redes neurais do software MatLab[®] versão 7.8.0, com a estrutura de três camadas descrita anteriormente e a função de retropropagação para o treinamento da rede.

O aumento do número de neurônios na camada oculta aumenta o ajuste do modelo, mas aumenta também o tempo computacional de resposta da rede, ao vetor de entrada. Portanto, é necessária a análise do número de neurônios da camada oculta em relação ao erro obtido com a predição da rede neural. Para isto utilizou-se um gráfico de número de neurônios (da camada oculta), pelo erro de predição, ou seja, uma metodologia semelhante à utilizada para a redução do modelo polinomial completo descrita na seção 2.4, que utiliza o gráfico de RMSECV pelo número de termos na determinação do número “ideal” de termos do modelo reduzido.

3 TORRE DE RESFRIAMENTO

Na indústria, é comum haver a necessidade de resfriamento de efluentes líquidos quentes, cumprindo com restrições operacionais e/ou ambientais. Dentre as alternativas de tecnologia para a redução de temperatura de efluentes líquidos, as torres de resfriamento destacam-se como as mais utilizadas (KIM et al., 2001).

De acordo com Mohiuddin e Kant (1995a), as torres de resfriamento podem ser classificadas de diversas maneiras:

- com base na circulação de ar, natural (convecção natural) e mecânica (convecção forçada por ventiladores);
- com relação ao movimento relativo da água e do ar: corrente cruzada ou contracorrente;
- além do método de transferência de calor: úmido (usando resfriamento evaporativo), seco (quando não há troca de massa entre as correntes líquida e gasosa) e *wet-dry* (úmido-seco) quando os dois processos coexistem.

A Figura 3.1 ilustra uma torre de resfriamento mecânica, contracorrente e que utiliza resfriamento evaporativo, a qual será objeto de estudo neste trabalho.

- 1) Corpo da torre;
- 2) Preenchimento;
- 3) Eliminador de gotas;
- 4) Sistema de distribuição de água;
- 5) Ventilador;
- 6) Bacia coletora.

Figura 3.1 – Torre de resfriamento

Fonte: Catálogo SEMCO equipamentos.

3.1 Modelo semi-fenomenológico para a torre de resfriamento

As equações básicas para o projeto de torres de resfriamento foram propostas inicialmente por Walker et al., 1923 apud Mohiuddin e Kant (1996a), que desenvolveram as equações básicas para transferência total de massa e energia deste processo. Merkel, 1925 apud Mohiuddin e Kant (1996a) combinou os coeficientes de calor sensível e transferência de massa em um único coeficiente global para o processo. Esta metodologia é a mais aplicada até hoje e serve de base para o modelo semi-fenomenológico que fornecerá os dados para a formulação do modelo reduzido deste processo.

Kloppers e Kröger (2003) estudaram as relações empíricas da perda de pressão para três tipos mais utilizados de preenchimento de torres de resfriamento (*Splash fill*, *Trickle fill* e *Film fill*). Mais tarde, Kloppers e Kröger (2005) publicaram outro trabalho descrevendo uma relação empírica para o número de Merkel para os mesmos três tipos de preenchimento.

Os experimentos computacionais que geraram os dados utilizados neste trabalho, foram adquiridos do modelo semi-fenomenológico construído por Rubio-Castro et al. (2010), como apresentado a seguir. Porém, assim como os dados foram retirados de um modelo semi-fenomenológico, eles também poderiam ser obtidos a partir de experimentos com um modelo fenomenológico em CFD (Fluido Dinâmica Computacional), ou dados experimentais. A escolha pelo modelo semi-fenomenológico foi feita principalmente por conveniência prática.

3.1.1 Projeto térmico e hidráulico

As características de transferência de massa e calor, para cada tipo de preenchimento, são dadas pela correlação do número de Merkel desenvolvida por Kloppers e Kröger (2005), apresentada na equação **(3.1.1)**. As constantes para os três tipos diferentes de preenchimento são dadas na Tabela 3.1.1.

$$Me = c1 \left(\frac{Fw_{in}}{A_{fr}} \right)^{c2} \left(\frac{Fa}{A_{fr}} \right)^{c3} (L_{fi})^{1+c4} (Tw_{in})^{c5} \quad (3.1.1)$$

Onde Fw_{in} é a vazão de água na entrada do preenchimento, Fa é a vazão de ar, A_{fr} é a área da seção transversal do preenchimento, L_{fi} é a altura do preenchimento e Tw_{in} a temperatura da água na entrada da torre.

Tabela 3.1.1 – Coeficientes de correlação para número de Merkel

	Splash fill	Trickle fill	Film fill
c1	0,249013	1,930306	1,019766
c2	-0,464089	-0,568230	-0,428960
c3	0,653578	0,641400	0,782744
c4	-----	-0,352377	-0,292870
c5	-----	-0,178670	-----

Fonte: (KLOPPERS; KRÖGER, 2005)

O número de Merkel requerido é calculado utilizando o método de Tchebyshev's, como sugerido pelo CTI (Cooling Tower Institute) e descrito em Mohiuddin and Kant (1995a) equação (3.1.2):

$$Me = 0,25cp_w(Tw_{in} - Tw_{out}) \sum_{i=1}^4 1/\Delta h_i \quad (3.1.2)$$

Onde cp_w e calor específico da água, Tw_{out} é a temperatura de saída da água e Δh_i é a variação de entalpia da corrente gasosa em cada secção, descrita por:

$$\Delta h_i = hsa_i - ha_i, \quad i = 1, \dots, 4 \quad (3.1.3)$$

Sendo hsa_i a entalpia da mistura saturada ar-água, dada pela equação (3.1.4), e ha_i a entalpia da mistura ar-água, dada pelas equações (3.1.5), (3.1.6) e (3.1.7).

$$hsa_i = -6,3889 + 0,86582 Tw_i + 15,7154 \exp(0,054398 Tw_i), \quad i = 1, \dots, 4 \quad (3.1.4)$$

$$ha_i = ha_{in} + \frac{cp_w Fw_{in}}{Fa} (Tw_i - Tw_{out}), \quad i = 1, \dots, 4 \quad (3.1.5)$$

$$ha_{in} = -6,4 + 0,86582 TWB_{in} + 15,7154 \exp(0,0544 TWB_{in}) \quad (3.1.6)$$

$$Tw_i = Tw_{out} + TCH_i(Tw_{in} - Tw_{out}), \quad i = 1, \dots, 4 \quad (3.1.7)$$

Tendo TCH_i como a constante que representa os pontos de Tchebyshev ($TCH_1=0,1$; $TCH_2=0,4$; $TCH_3=0,6$; $TCH_4=0,9$).

A vazão de evaporação de água Fw_{ev} é dada como função da vazão de ar e da umidade deste ar na entrada w_{in} e na saída w_{out} do equipamento, equação (3.1.8). A vazão, devido ao arraste de água, é de aproximadamente 0,2% da vazão de água na entrada da torre, conforme equação (3.1.9) (KEMMER, 1988). A partir do balanço de massa global, podemos então determinar a vazão de água da saída da torre de resfriamento, equação (3.1.10).

$$Fw_{ev} = Fa(w_{out} - w_{in}) \quad (3.1.8)$$

$$Fw_d = 0,002Fw_{in} \quad (3.1.9)$$

$$Fw_{out} = Fw_{in} - Fw_{ev} - Fw_d \quad (3.1.10)$$

Como o método desenvolvido por Merkel assume-se que o ar sai saturado da torre de resfriamento. Pode-se calcular a entalpia da mistura ar-água na saída da torre através do balanço de energia, dado pela equação (3.1.11) e a temperatura do ar na saída da torre pela equação (3.1.12).

$$hsa_{out} = ha_{in} + \frac{cp_w}{Fa} (Fw_{in}Tw_{in} - Fw_{out}Tw_{out}) \quad (3.1.11)$$

$$hsa_{out} = -6,38887667 + 0,86581791 TA_{out} + 15,7153617 \exp(0,05439778 TA_{out}) \quad (3.1.12)$$

A correlação do coeficiente de perda de carga para cada tipo de preenchimento é dada pela equação (3.1.13). Os parâmetros empíricos desenvolvidos por Kloppers e Kröger (2003) estão listados na Tabela 3.1.2.

$$K_{fi} = \left[d_1 \left(\frac{Fw_{in}}{A_{fr}} \right)^{d_2} \left(\frac{Fa}{A_{fr}} \right)^{d_3} + d_4 \left(\frac{Fw_{in}}{A_{fr}} \right)^{d_5} \left(\frac{Fa}{A_{fr}} \right)^{d_6} \right] L_{fi} \quad (3.1.13)$$

Tabela 3.1.2 – Coeficientes de correlação para K_{fi}

	Splash fill	Trickle fill	Film fill
d1	3,179680	7,047319	3,897830
d2	1,083916	0,812454	0,777271
d3	-1,965400	-1,143846	-0,117270
d4	0,639088	2,677231	15,327472
d5	0,684936	0,294827	0,215975
d6	0,642767	1,018498	0,079696

Fonte: (KLOPPERS; KRÖGER, 2003)

Segundo Rubio-Castro et al. (2010), a perda de pressão através do preenchimento é dada conforme a equação **(3.1.14)**.

$$\Delta P_t = 0,8335 \frac{Fav_m^2}{\rho_m A_{fr}^2} (K_{fi} L_{fi} + 6,5) \quad (3.1.14)$$

Onde Fav_m é a média aritmética das vazões da corrente de ar-vapor que passa através do preenchimento dado pelas equações **(3.1.15)**, **(3.1.16)** e **(3.1.17)**. ρ_m é a média harmônica da densidade da corrente de ar úmido de entrada e da saída do preenchimento, equação **(3.1.18)**.

$$Fav_m = \frac{Fav_{in} + Fav_{out}}{2} \quad (3.1.15)$$

$$Fav_{in} = Fa + w_{in} Fa \quad (3.1.16)$$

$$Fav_{out} = Fa + w_{out} Fa \quad (3.1.17)$$

$$\rho_m = \frac{2}{\left(\frac{1}{\rho_{in}}\right) + \left(\frac{1}{\rho_{out}}\right)} \quad (3.1.18)$$

Já as propriedades físico-químicas: w_{in} umidade do ar na entrada da torre, w_{out} umidade do ar na saída da torre, PV pressão de vapor da água a uma determinada temperatura e ρ densidade da mistura ar-água, são dadas pelas equações **(3.1.19 – 3.1.22)**.

$$w_{in} = \left(\frac{2501,6 - 2,3263(TWB_{in})}{2501,6 + 1,8577(TA_{in}) - 4,184(TWB_{in})} \right) \left(\frac{0,62509(PV_{WB_{in}})}{P_t - 1,005(PV_{WB_{in}})} \right) - \left(\frac{1,00416(TA_{in} - TWB_{in})}{2501,6 + 1,8577(TA_{in}) - 4,184(TWB_{in})} \right) \quad (3.1.19)$$

$$w_{out} = \frac{0,62509 PV_{out}}{P_t - 1,005 PV_{out}} \quad (3.1.20)$$

$$\ln(PV) = \sum_{n=-1}^3 g_n T^n + 6,5459673 \ln(T) \quad (3.1.21)$$

$$\rho = \frac{P_t}{287,08 T} \left[1 - \frac{w}{w + 0,62198} \right] [1 + w] \quad (3.1.22)$$

Onde $PV_{WB_{in}}$ é a pressão de vapor da água na temperatura do setor úmido na entrada da torre, TWB_{in} é a temperatura do setor úmido na entrada da torre, TA_{in} é a temperatura do ar de entrada e PV_{out} é a pressão de vapor da água na temperatura de saída do ar. As constantes para a equação (3.1.21) estão listadas na Tabela 3.1.3.

Tabela 3.1.3 – Constantes para a equação (16)

n	g_n
-1	$-5,8002206 \times 10^3$
0	$1,3914993 \times 10^0$
1	$-4,8640239 \times 10^{-2}$
2	$4,1764768 \times 10^{-5}$
3	$-1,4452093 \times 10^{-8}$

Fonte: (BRITO, 2011)

O custo operacional OPC , equação (3.1.23), é função do número de horas de operação durante o ano H_Y , do custo unitário da energia elétrica ce , da potência gasta pelo ventilador PC_f , equação (3.1.24), e da potência gasta pelas bombas PC_p , equação (3.1.25), onde η_f , η_p são respectivamente a eficiência do ventilador e da bomba.

$$OPC = H_Y ce (PC_f + PC_p) \quad (3.1.23)$$

$$PC_f = \frac{Fav_{in} \Delta P_t}{\rho_{in} \eta_f} \quad (3.1.24)$$

$$PC_p = g \cdot \left[\frac{Fw_{in}(L_{fi} + 3,048)}{\eta_p} \right] \quad (3.1.25)$$

O custo fixo do equipamento é função de uma taxa fixa C_{CTF} , acrescido de custos relacionados aos ventiladores C_{CTMA} e ao tipo de preenchimento C_{CTV} , listado na Tabela 3.1.4.

$$CTC = (C_{CTF} + C_{CTV}A_{fr}L_{fi} + C_{CTMA}Fa) \quad (3.1.26)$$

Tabela 3.1.4 – Constantes de custo do preenchimento (Dólares/m³).

Splash fill	Trickle fill	Film fill
2006,6	1812,25	1606,15

Fonte: (RUBIO-CASTRO et al., 2010)

O custo anualizado total do sistema TAC (já atualizado para o ano de 2010) é dado pela equação **(3.1.27)**, onde kf é o fator de depreciação do equipamento igual a 0,334:

$$TAC = kf \cdot CTC + OPC \quad (3.1.27)$$

Em seu artigo, Rubio-Castro et al. (2010) aplicam um conjunto de restrições termodinâmicas equações **(3.1.28 – 3.1.33)** e restrições para o bom funcionamento da torre de resfriamento, equações **(3.1.34 – 3.1.36)**.

$$Tw_{out} \geq TWB_{in} + 2,8 \quad (3.1.28)$$

$$Tw_{out} \leq Tw_{env} \quad (3.1.29)$$

$$Tw_{in} \leq Tw_{in,max} \quad (3.1.30)$$

$$Tw_{in} > Tw_{out} \quad (3.1.31)$$

$$TA_{out} > TA_{in} \quad (3.1.32)$$

$$hsa_i - ha_i > 0, \quad i = 1, \dots, 4 \quad (3.1.33)$$

$$2,90 \leq \frac{Fw_{in}}{A_{fr}} \leq 5,96 \quad (3.1.34)$$

$$1,20 \leq \frac{Fa}{A_{fr}} \leq 4,25 \quad (3.1.35)$$

$$0,5 \leq \frac{Fw_{in}}{Fa} \leq 2,5 \quad (3.1.36)$$

3.2. Modelo reduzido para a torre de resfriamento

O modelo semi-fenomenológico da torre de resfriamento descrita, possui 47 variáveis e 42 equações, portanto o número de graus de liberdade desse sistema é igual a cinco. Dessa forma, é necessário fixar-se cinco variáveis para simular o comportamento do equipamento através do modelo apresentado no item anterior. As cinco variáveis de entrada escolhidas estão ligadas à correlação empírica do número de Merkel: Fw_{in} vazão de água na entrada da torre, Tw_{in} temperatura da água na entrada da torre, A_{fr} área da secção transversal do preenchimento, L_{fi} altura do preenchimento e Fa vazão de ar.

Os dados para o ajuste do modelo reduzido foram gerados através de simulações do modelo semi-fenomenológico programado em MATLAB® (versão 7.8.0). As variáveis de entradas foram amostradas randomicamente, seguindo seus limites inferiores e superiores, além das restrições para o bom funcionamento da torre, descritas nas inequações do modelo. Apenas os limites da altura L_{fi} variam com o tipo de preenchimento, de acordo com os experimentos realizados por Kloppers e Kröger (2003). Os limites utilizados, bem como as equações, estão listados na Tabela 3.2.1, onde rand é uma função randômica, que varia entre 0 e 1.

Tabela 3.2.1 – Limites e equações para amostragem da torre de resfriamento

Variável de entrada		Limite inferior	Limite superior
Fw_{in}	(kg/s)	50	600
Tw_{in}	(°C)	30	50
A_{fr}	(m ²)	$Fw_{in}/(2,9 + (5,96 - 2,9) * rand)$	
Fa	(kg/s)	$Afr * (1,2 + (4,25 - 1,2) * rand)$	
Preenchimento			
L_{fi}	Splash	0,3	3
	Trickle	0,09	1,53
	Filme	0,3	1,2

Foram realizadas 2000 simulações para cada tipo de preenchimento, sendo que apenas 1068, 1720 e 1502, convergiram respectivamente para os preenchimentos Filme, *Trickle* e *Splash*. Pode-se atribuir a não convergência pela

utilização do mesmo ponto inicial para todas as simulações. A partir destes três conjuntos de dados, foram ajustados os parâmetros do modelo reduzido polinomial e de rede neural. As variáveis escolhidas para a correlação destes modelos reduzidos foram: o TAC , custo total anualizado da torre de resfriamento, que é parte da função objetivo de nossa otimização; a dT , diferença entre a temperatura de água na saída e na entrada da torre; e a dF , que corresponde à vazão de evaporação e araste de água pelo ar.

A Figura 3.2.1 é a representação gráfica do modelo reduzido da torre de resfriamento, nela as variáveis em azul são as de entrada do modelo, vindas do processo, as variáveis em vermelho são variáveis de entrada e de construção do equipamento e as em preto são variáveis de saída do modelo reduzido.

Figura 3.2.1 – Representação gráfica do modelo reduzido da torre de resfriamento

Desta forma, o modelo reduzido em questão pode ser representado, para cada tipo de preenchimento, pelas equações (3.2.1 – 3.2.5).

$$TAC = f_1(Fw_{in}, Tw_{in}, Afr, Lfi, Fa) \quad (3.2.1)$$

$$dF = f_2(Fw_{in}, Tw_{in}, Afr, Lfi, Fa) \quad (3.2.2)$$

$$dT = f_3(Fw_{in}, Tw_{in}, Afr, Lfi, Fa) \quad (3.2.3)$$

$$Fw_{out} = Fw_{in} - dF \quad (3.2.4)$$

$$Tw_{out} = Tw_{in} - dT \quad (3.2.5)$$

3.2.1 Modelo polinomial para a torre de resfriamento

Para a correlação do processo na torre de resfriamento de água, foi proposto um modelo polinomial completo (de terceira ordem em relações as variáveis de entrada) para cada variável de saída e para cada tipo de preenchimento. Estes modelos completos foram então reduzidos, utilizando-se a metodologia proposta no capítulo 2.3. Os gráficos de paridade para o modelo polinomial reduzido estão representados nas Figuras 3.2.1.1, 3.2.1.2 e 3.2.1.3.

Figura 3.2.1.1 - Gráficos de paridade do modelo polinomial reduzido para TAC

Figura 3.2.1.1 - Gráficos de paridade do modelo polinomial reduzido para TAC

Figura 3.2.1.2 - Gráficos de paridade do modelo polinomial reduzido para dT

Figura 3.2.1.3 - Gráficos de paridade do modelo polinomial reduzido para dF

Nas figuras anteriores, pode-se observar o bom ajuste do modelo polinomial ao conjunto de dados formado pelas simulações do modelo semi-fenomenológico. Os gráficos de erro, em função do número de termos utilizado para escolha do melhor modelo polinomial reduzido, estão no **Apêndice A**. Os parâmetros estimados para todas as variáveis do modelo polinomial reduzido e os termos escolhidos para a identificação do modelo encontram-se no **Apêndice B**, apresentados como no exemplo mostrado na Tabela 3.2.1.1.

Tabela 3.2.1.1 – Parâmetros e termos da identificação do TAC_{AS}^{film}

$TAC_{AS}^{film} = \theta_{TAC}^{filmT} \cdot Reg_{TAC}^{film}$	
Reg_{TAC}^{film}	θ_{TAC}^{film}
y^{film}	-0,0172
Lfi_{AS}^{film}	0,2659
Fa_{AS}^{film}	0,9710
$Fwin_{AS}^{film^2}$	0,0471
$Fa_{AS}^{film^2}$	0,2294
$Fa_{AS}^{film^3}$	-0,1149
$Fwin_{AS}^{film} * Fa_{AS}^{film}$	-0,1353
$Afr_{AS}^{film} * Fa_{AS}^{film}$	-0,1619
$Lfi_{AS}^{film} * Fa_{AS}^{film}$	0,5013

O índice AS, que aparece na tabela acima, refere-se à variável reescalada utilizada para a identificação do modelo polinomial linear em relação aos parâmetros, o índice T é a transposta do vetor de parâmetros e y^{film} é a variável de escolha do tipo de preenchimento que multiplica o primeiro termo do modelo. Na Tabela 3.2.1.2, estão relacionados o número de termos, a ordem da equação reduzida e o respectivo coeficiente de correlação R^2 (calculado no conjunto de validação), para cada variável identificada no modelo polinomial reduzido da torre de resfriamento.

Tabela 3.2.1.2 – Número de termos, ordem e coeficiente de correlação do modelo polinomial reduzido da torre de resfriamento.

Variáveis de saída	nº de Termos	Ordem	R ²
TAC_{AS}^{film}	9	3	0,9963
TAC_{AS}^{splash}	17	3	0,9985
$TAC_{AS}^{trickle}$	10	3	0,9920
dT_{AS}^{film}	20	3	0,9855
dT_{AS}^{splash}	16	3	0,9855
$dT_{AS}^{trickle}$	15	3	0,9771
dF_{AS}^{film}	12	2	0,9912
dF_{AS}^{splash}	11	3	0,9878
$dF_{AS}^{trickle}$	11	3	0,9874

Na Tabela 3.2.1.2, pode-se observar que os coeficientes de correlação para o modelo polinomial reduzido da torre de resfriamento foram maiores que 0.9771. Isso mostra o bom ajuste do modelo reduzido no conjunto de dados gerados nas simulações do modelo semi-fenomenológico da torre de resfriamento, como podemos perceber também pelos gráficos de paridade das Figuras 3.2.1.1, 3.2.1.2 e 3.2.1.3.

Baseado no conjunto de variáveis de saída, o modelo reduzido polinomial pode ser representado pelo conjunto de equações **(3.2.1.1 – 3.2.1.25)**. Os limites, inferior e superior de cada variável do modelo a seguir, encontram-se no **Apêndice B**.

$$\sum_{fill=1}^{fill} y^{fill} = 1 \quad fill = Splash, Trickle e Film \quad (3.2.1.1)$$

$$TAC_{min}^{fill} \cdot y^{fill} \leq TAC^{fill} \leq TAC_{max}^{fill} \cdot y^{fill} \quad (3.2.1.2)$$

$$dT_{min}^{fill} \cdot y^{fill} \leq dT^{fill} \leq dT_{max}^{fill} \cdot y^{fill} \quad (3.2.1.3)$$

$$dF_{min}^{fill} \cdot y^{fill} \leq dF^{fill} \leq dF_{max}^{fill} \cdot y^{fill} \quad (3.2.1.4)$$

$$Fw_{in_{min}}^{fill} \cdot y^{fill} \leq Fw_{in}^{fill} \leq Fw_{in_{max}}^{fill} \cdot y^{fill} \quad (3.2.1.5)$$

$$Tw_{in_{min}}^{fill} \cdot y^{fill} \leq Tw_{in}^{fill} \leq Tw_{in_{max}}^{fill} \cdot y^{fill} \quad (3.2.1.6)$$

$$Afr_{min}^{fill} \cdot y^{fill} \leq Afr^{fill} \leq Afr_{max}^{fill} \cdot y^{fill} \quad (3.2.1.7)$$

$$Lfi_{min}^{fill} \cdot y^{fill} \leq Lfi^{fill} \leq Lfi_{max}^{fill} \cdot y^{fill} \quad (3.2.1.8)$$

$$Fa_{min}^{fill} \cdot y^{fill} \leq Fa^{fill} \leq Fa_{max}^{fill} \cdot y^{fill} \quad (3.2.1.9)$$

$$TAC_{AS}^{fill} = (TAC^{fill} - (TAC_{max}^{fill} + TAC_{min}^{fill}) \cdot 0,5 \cdot y^{fill}) / (TAC_{max}^{fill} - TAC_{min}^{fill}) \quad (3.2.1.10)$$

$$dT_{AS}^{fill} = (dT^{fill} - (dT_{max}^{fill} + dT_{min}^{fill}) \cdot 0,5 \cdot y^{fill}) / (dT_{max}^{fill} - dT_{min}^{fill}) \quad (3.2.1.11)$$

$$dF_{AS}^{fill} = (dF^{fill} - (dF_{max}^{fill} + dF_{min}^{fill}) \cdot 0,5 \cdot y^{fill}) / (dF_{max}^{fill} - dF_{min}^{fill}) \quad (3.2.1.12)$$

$$Fw_{in_{AS}}^{fill} = (Fw_{in}^{fill} - (Fw_{in_{max}}^{fill} + Fw_{in_{min}}^{fill}) \cdot 0,5 \cdot y^{fill}) / (Fw_{in_{max}}^{fill} - Fw_{in_{min}}^{fill}) \quad (3.2.1.13)$$

$$Tw_{in_{AS}}^{fill} = (Tw_{in}^{fill} - (Tw_{in_{max}}^{fill} + Tw_{in_{min}}^{fill}) \cdot 0,5 \cdot y^{fill}) / (Tw_{in_{max}}^{fill} - Tw_{in_{min}}^{fill}) \quad (3.2.1.14)$$

$$Afr_{AS}^{fill} = (Afr^{fill} - (Afr_{max}^{fill} + Afr_{min}^{fill}) \cdot 0,5 \cdot y^{fill}) / (Afr_{max}^{fill} - Afr_{min}^{fill}) \quad (3.2.1.15)$$

$$Lfi_{AS}^{fill} = (Lfi^{fill} - (Lfi_{max}^{fill} + Lfi_{min}^{fill}) \cdot 0,5 \cdot y^{fill}) / (Lfi_{max}^{fill} - Lfi_{min}^{fill}) \quad (3.2.1.16)$$

$$Fa_{AS}^{fill} = (Fa^{fill} - (Fa_{max}^{fill} + Fa_{min}^{fill}) \cdot 0,5 \cdot y^{fill}) / (Fa_{max}^{fill} - Fa_{min}^{fill}) \quad (3.2.1.17)$$

$$TAC_{AS}^{fill} = \theta_{TAC}^{fill T} \cdot Reg_{TAC}^{fill} \quad (3.2.1.18)$$

$$dF_{AS}^{fill} = \theta_{dF}^{fill T} \cdot Reg_{dF}^{fill} \quad (3.2.1.19)$$

$$dT_{AS}^{fill} = \theta_{dT}^{fill T} \cdot Reg_{dT}^{fill} \quad (3.2.1.20)$$

$$dF = \sum_{fill=1}^3 dF^{fill} \quad (3.2.1.21)$$

$$dT = \sum_{fill=1}^3 dT^{fill} \quad (3.2.1.22)$$

$$F_{out} = F_{in} - dF \quad (3.2.1.23)$$

$$T_{out} = T_{in} - dT \quad (3.2.1.24)$$

$$TAC = \sum_{fill=1}^3 TAC^{fill} \quad (3.2.1.25)$$

$$Z_{in_{contaminante}} \cdot F_{Win} = Z_{out_{contaminante}} \cdot F_{Wout} \quad (3.2.1.26)$$

A equação (3.2.1.26) é o balanço de massa por contaminante, onde $Z_{in_{contaminante}}$ é a concentração de contaminante na corrente de entrada da torre e $Z_{out_{contaminante}}$ a concentração de saída. Esta equação não admite perda do contaminante pela corrente evaporada na torre de resfriamento e é fundamental para impor limites máximos de contaminantes no sistema de resfriamento, garantido assim o bom funcionamento do mesmo, problema que será encontrado no estudo de caso do capítulo 5.

3.2.2 Modelo de redes neurais para a torre de resfriamento

Para a comparação com o modelo polinomial do processo de resfriamento de água, foi proposta a utilização de um modelo de redes neurais, semelhante ao trabalho de Henao e Maravelias (2011). Para cada variável de saída TAC , dT e dF , de cada preenchimento, foi ajustada uma rede neural com três camadas, como a apresentada na secção 2.5 deste trabalho. O número de neurônios utilizados na segunda camada, de função tangente hiperbólica, foi determinado pelo estudo do melhor número de neurônios, aplicando-se metodologia semelhante a da escolha do número de termos do modelo polinomial. Os gráficos de erro por número de neurônios utilizados estão no **Apêndice C** e os gráficos de paridade para o modelo de rede neural estão representados nas Figuras 3.2.2.1, 3.2.2.2 e 3.2.2.3.

Figura 3.2.2.1 – Gráficos de paridade do modelo de redes neurais para *TAC*

Figura 3.2.2.2 – Gráficos de paridade do modelo de redes neurais para *dT*

Figura 3.2.2.3 – Gráficos de paridade do modelo de redes neurais para dF

Observando os gráficos de paridade, nota-se que o modelo de redes neurais apresentou ajuste semelhante ao obtido pelo modelo polinomial reduzido. Na Tabela 3.2.2.1, estão listados o número de neurônios da segunda camada e os coeficientes de correlação, para cada variável de saída identificada pelas redes neurais.

Tabela 3.2.2.1 – Número de neurônios e coeficiente de correlação do modelo polinomial reduzido da torre de resfriamento.

Variáveis de saída	nº de Neurônios	R^2
TAC_{AS}^{film}	6	0,9946
TAC_{AS}^{splash}	3	0,9960
$TAC_{AS}^{trickle}$	3	0,9916
dT_{AS}^{film}	6	0,9921
dT_{AS}^{splash}	5	0,9973
$dT_{AS}^{trickle}$	7	0,9928
dF_{AS}^{film}	7	0,9983

Variáveis de saída	nº de Neurônios	R ²
dF_{AS}^{splash}	4	0,9973
$dF_{AS}^{trickle}$	5	0,9917

Os coeficientes de correlação do modelo de redes neurais mostraram-se ligeiramente maiores do que os obtidos através do modelo polinomial reduzido, o que pode ser interpretado, que para este conjunto de dados, a capacidade de correlação do modelo de redes neurais é um pouco melhor.

A formulação do modelo reduzido de redes neurais é semelhante à formulação do modelo polinomial reduzido, com alteração nas equações (3.2.1.18), (3.2.1.19) e (3.2.1.20), que foram substituídas pelas equações (3.2.2.1), (3.2.2.2) e (3.2.2.3), apresentadas a seguir:

$$TAC_{AS}^{fill} = LW_{TAC}^{fill} \cdot \left(\frac{2}{1 + \exp(-2 \cdot (IW_{TAC}^{fill} \cdot x1 + b1_{TAC}^{fill}))} - 1 \right) + b2_{TAC}^{fill} \quad (3.2.2.1)$$

$$dF_{AS}^{fill} = LW_{dF}^{fill} \cdot \left(\frac{2}{1 + \exp(-2 \cdot (IW_{dF}^{fill} \cdot x1 + b1_{dF}^{fill}))} - 1 \right) + b2_{dF}^{fill} \quad (3.2.2.2)$$

$$dT_{AS}^{fill} = LW_{dT}^{fill} \cdot \left(\frac{2}{1 + \exp(-2 \cdot (IW_{dT}^{fill} \cdot x1 + b1_{dT}^{fill}))} - 1 \right) + b2_{dT}^{fill} \quad (3.2.2.3)$$

Onde $x1$ é o vetor das variáveis de entrada, IW^{fill} é a matriz de pesos para a segunda camada (tangente hiperbólica), $b2^{fill}$ é o vetor de bias da segunda camada da rede, LW^{fill} é o vetor de pesos para a terceira camada (linear) e $b3^{fill}$ é o bias da terceira camada da rede. Os parâmetros descritos acima se encontram no **Apêndice C**.

4. STEAM STRIPPER

Segundo Zygula (2008), o processo de *steam stripping* é utilizado frequentemente para a purificação de efluentes, permitindo a remoção de compostos voláteis através da destilação do componente pesado água. A temperatura de trabalho desse tipo de equipamento é elevada, normalmente fica próxima ao ponto de bolha da água. Devido à temperatura, o *steam stripping* permite a remoção de compostos mais pesados do que os processos de *stripping* com ar.

Esse equipamento consiste em uma coluna com alimentação do efluente pelo topo, rico em contaminante e previamente aquecido. O vapor é introduzido pelo fundo ou produzido por um *reboiler*, (HWANG et al., 1992). O contato entre as fases ocorre coluna abaixo, enquanto o efluente vai se tornando mais pobre, o vapor sobe enriquecendo-se com relação ao contaminante volátil.

Neste trabalho foi desenvolvido um *stripper* para a remoção de H_2S , NH_3 e orgânicos (óleos) de uma corrente efluente típica de refinaria de petróleo, que é objeto do estudo de caso do capítulo 5. A descrição do modelo fenomenológico para este equipamento está na próxima secção.

4.1. Modelo fenomenológico para o *Steam stripper*

No estudo de caso do capítulo 5, o efluente a ser tratado é uma mistura de H_2S , NH_3 , OIL (óleos) e sais em água, onde os óleos são uma mistura formada principalmente por parafinas, sendo aproximadamente 25% da massa destes óleos, composta de parafinas leves (com ponto de ebulição mais baixo do que a água), composição adotada por Huang et al. (1999), que é base do estudo de caso deste trabalho. Como hipótese simplificadora para o processo de stripping, utilizamos apenas o NaCl como sal contaminante do efluente, supondo que ele está totalmente dissociado na solução, por se tratar de um sal de eletrólitos fortes.

O H_2S e o NH_3 são eletrólitos fracos, os quais estão parcialmente dissociados no meio, por este motivo, o equilíbrio iônico destes eletrólitos

desempenha papel importante na remoção destes compostos pelo processo de *stripping* (LEE et al., 2003). No estudo são consideradas as seguintes equações de dissociação dos eletrólitos em meio aquoso, onde as constantes de equilíbrio são dadas em função da temperatura.

Existem diversos modelos termodinâmicos capazes de prever o comportamento de misturas líquido-líquido-vapor, porém a mistura a ser tratada é formada por um conjunto de eletrólitos, necessitando de um modelo termodinâmico que leve em consideração o comportamento destes. Dentre os modelos termodinâmicos de coeficiente de atividade disponíveis, capazes de prever o comportamento de eletrólitos no sistema, estão: o *electrolyte* NRTL da AspenTech, o MSE da *Oli Systems* e o UNIQUAC estendido da *Technical University of Denmark*, (LIN et al., 2009).

Tradicionalmente, os modelos termodinâmicos para soluções com eletrólitos possuem um ou mais termos de longo alcance (que levam em consideração as interações entre os íons) e um ou mais termos de curto alcance (que levam em consideração as interações entre íon dipolo e interações não-eletrostáticas). Neste trabalho foi utilizado o modelo termodinâmico ElecNRTL, que está disponível no pacote Aspen Plus® V7.1, que apresenta um termo de curto alcance (NRTL modificado para eletrólitos) e dois termos de longo alcance (Born e o de Pitzer-Debye-Hückel) (LIN et al., 2009).

O ElecNRTL é capaz de calcular o coeficiente de atividade de espécies iônicas e moleculares em eletrólitos aquosos, bem como em sistemas de misturas de solventes, reduzindo-se para o NRTL tradicional quando a concentração de

eletrólitos tende a zero Renon e Prausnitz, 1969, apud Aspen Plus® V7.1 Help (2008).

O equilíbrio do sistema descrito acima foi estudado através de experimentos computacionais realizados em Aspen Plus®. Primeiramente, foi simulada a alimentação de uma mistura de água com 6000 ppm de orgânicos (25% de n-heptano e 75% de n-nonano) em um estágio de equilíbrio trifásico, utilizando o modelo termodinâmico NRTL, para a predição dos coeficientes de atividade deste sistema termodinâmico. A mistura foi simulada em diferentes condições de temperatura e sempre à pressão de 1 atm. A Figura 4.1.1 mostra o resultado do experimento 1.

Figura 4.1.1- Experimento 1

No gráfico acima, as curvas em azul, vermelho e verde representam o número de mol de n-nonano, no líquido 1 (mais denso, água), no líquido 2 (menos denso) e no vapor. A curva em roxo representa o número de mols de água na fase vapor. A 20°C temos duas fases: líquido1 e líquido2. Com o aumento da temperatura, nota-se o aumento da solubilidade do n-nonano no líquido 1. A 66,11°C temos o início da vaporização do n-nonano e a 70°C alcança-se a quebra do sistema trifásico liq-liq-vap, com a solubilização total do n-nonano no líquido 1 (água), que neste ponto, devido à nomenclatura do software Aspen Plus®, passa ser chamado de líquido 2.

Seguindo o mesmo raciocínio do experimento anterior, o sistema completo com todos os contaminantes, H₂S, NH₃, NaCl e óleos, foi simulado agora com o

modelo termodinâmico ElecNRTL, levando em consideração todas as equações de dissociação descritas anteriormente (4.1.1) – (4.1.5). A Figura 4.1.2 mostra os resultados obtidos.

Figura 4.1.2 – Experimento 2

Assim como anteriormente, as curvas em azul, vermelho e verde representam o número de mols de n-nonano, respectivamente no líquido 1 (mais denso, água), no líquido 2 (menos denso) e no vapor. A curva em roxo refere-se ao número de mols de água na fase vapor.

Pode-se notar que, a solubilização do n-nonano na água, inicialmente é maior do que a apresentada na solução sem eletrólitos, e que com o aumento da temperatura, há o aumento da solubilidade do n-nonano na água, até que a 70°C acontece o desaparecimento de uma das fases, transformando-se em um sistema líquido vapor. Desta forma, podemos concluir que dentro da coluna do *stripper*, onde as temperaturas são maiores que 70°C, existe um sistema líquido vapor, o qual será considerado para simulação do equipamento.

A simulação do *steam stripper* foi realizada utilizando o modelo rigoroso RadFrac, do software Aspen Plus® V7.1, que emprega as equações de balanço de massa, de energia e de equilíbrio prato a prato para modelar o comportamento do equipamento.

O NaCl, embora modifique as características termodinâmicas da mistura a ser tratada, não sofre nenhuma alteração com relação a sua massa dentro da coluna do *stripper*. Portanto, para o modelo reduzido, a concentração de NaCl na saída do

stripper será obtida pelo balanço mássico do componente no sistema, não descartando a influência deste contaminante na eficiência do equipamento, já que a concentração de NaCl será utilizada como uma variável de entrada dos modelos reduzidos.

A pressão de trabalho do sistema é fator importante para o processo, já que, operando-se acima da pressão atmosférica, dificulta-se a volatilização, no entanto proporciona o aumento da temperatura dentro da coluna, sendo favorável à separação dos contaminantes. Porém, operando-se abaixo da pressão atmosférica, adiciona-se gastos com relação à manutenção do vácuo no sistema, o que não é economicamente interessante. Desta forma, no trabalho adotamos um *range* de pressão entre 1 e 2 atm no topo da coluna, considerando a influência da pressão na determinação do ponto ótimo de trabalho do equipamento.

Outro fator importante para o bom funcionamento do *steam stripper* é a temperatura do efluente na alimentação da coluna. Segundo estudo de Lee et al. (2003), a eficiência do *stripper* aumenta com o aumento da temperatura da corrente de alimentação. Desta maneira, é necessária a utilização de um trocador de calor para o reaproveitamento de energia entre a corrente de entrada e saída do processo e/ou um aquecedor alimentado por vapor na corrente de alimentação da coluna do *stripper*. A configuração desse processo, como um todo, está representada na Figura 4.1.3

Figura 4.1.3 – Esquema do processo de *stripper*

Na Figura 4.1.3, FEED1 é a corrente de efluente rico em contaminantes, que vem da planta para o processo de *stripping*, passando pelo trocador de calor para a integração de energia e depois pelo aquecedor, seguindo para a coluna onde ocorre a remoção dos contaminantes voláteis. EFLUHOT é o efluente pobre em contaminantes, que ao sair da coluna, vai em direção ao trocador de calor para a integração de energia e sai do processo de *stripper* como EFLUCOOL.

Foi considerada a utilização de recheio, e não de pratos, já que esse tipo de preenchimento apresenta maior eficiência em equipamentos com alta carga de líquido e baixa de vapor, o que ocorre em sistemas diluídos, como o apresentado nesse trabalho. O diâmetro da coluna é determinado pelo Aspen Plus®, através do cálculo da capacidade máxima do preenchimento, o qual é realizado de maneira diferente para preenchimentos de fornecedores diferentes. Em nosso trabalho, utilizamos um recheio tipo *Pall ring* plástico, do fornecedor Raschig, de 25mm de dimensão e área superficial de $220 \text{ m}^2/\text{m}^3$, (Aspen Plus® V7.1 Help, 2008).

Segundo Kister e Larson, 1997 apud Green e Perry (2008), a altura de recheio equivalente a um prato teórico *HETP*, pode ser expressa em função da área superficial por volume de recheio a_p . Para recheios do tipo *Pall ring* temos:

$$HETP = 93/a_p \quad (4.1.6)$$

A regra acima pode ser aplicada para sistemas de substâncias orgânicas e de hidrocarbonetos, que possuam tensão superficial relativamente baixa ($< 25 \text{ mN/m}$). Líquidos de tensão superficial superiores a este, não possuem boa aderência na superfície do preenchimento, causando um aumento na altura equivalente a um prato teórico. Já em sistemas aquosos, com tensão superficial próxima a 70 mN/m , o valor obtido como resultado da equação (4.1.6) dever ser dobrado, (GREEN; PERRY, 2008).

Se pensarmos nos equipamentos básicos do processo, pode-se citar dois deles: a coluna de destilação e os trocadores de calor, que correspondem ao *reboiler*, condensador, aquecedor da alimentação e trocador de calor para integração de energia. O cálculo do custo fixo desses equipamentos foi realizado através do gráfico de custo em relação à dimensão do equipamento em questão, (PETERS, 2003).

Um exemplo da obtenção deste custo fixo é dado na Figura 4.1.4. Neste gráfico, o custo por metro de coluna é função do diâmetro da mesma. A partir da escolha do tipo de material utilizado para a construção da coluna (no caso o Haveg), pode-se fazer a amostragem da curva correspondente e posterior regressão por mínimos quadrados deste conjunto de dados. A função resultante desta regressão está representada pela linha em vermelho no gráfico a seguir, assim como sua equação. Desta forma, a partir determinação da altura e diâmetro da coluna (dados fornecidos pela simulação), pode-se calcular o custo fixo do equipamento.

Figura 4.1.4 – Gráfico de custo da coluna.

Fonte: (PETERS, 2003)

A mesma metodologia foi utilizada para o cálculo do custo do *reboiler*, condensador, aquecedor e trocador de calor para a integração de energia, com base nos gráficos de custo destes equipamentos em função da área de troca térmica.

Já o custo operacional do processo, foi calculado considerando o custo do vapor consumido no aquecedor, *reboiler* ou injeção direta na coluna, somado ao custo da água consumida no condensador do topo da coluna. Ambos os custos, fixo e operacional, foram atualizados de acordo com o índice de custo Marshall e Swift, para o terceiro quadrimestre do ano de 2010. O custo total anualizado do processo,

obtido na equação (4.1.7), é a soma do custo operacional e do custo fixo multiplicado por um fator anualizador, dado na equação (4.1.8). Este fator anualizador é função do tempo de vida útil do equipamento e da taxa mínima de atratividade da planta, (PETERS, 2003).

$$TAC = kf.CF + COP \quad (4.1.7)$$

$$kf = \frac{(1+i)^n}{(1+i)^n - 1} \quad (4.1.8)$$

Nas equações anteriores, temos: TAC representando o custo total anualizado do processo de stripper, kf o fator anualizador, CF o custo fixo do processo, COP o custo operacional, i a taxa mínima de atratividade da planta (adotada como 0,135 ou 13,5%) e n o tempo de vida útil do equipamento em anos (10 anos).

4.2 Modelo reduzido para o *steam stripper*

De acordo com a descrição do processo de *stripper* realizada no item anterior, formulou-se um modelo reduzido com oito possibilidades de configuração de equipamentos, como apresentado na Tabela 4.2.1.

Tabela 4.2.1 – Possibilidades de configuração do processo de <i>stripper</i>	
Configuração	
1 ^a	SR
2 ^a	SD
3 ^a	SR com AQ
4 ^a	SD com AQ
5 ^a	SR com IE
6 ^a	SD com IE
7 ^a	SR com IE e AQ
8 ^a	SD com IE e AQ

Na Tabela 4.2.1, SR representa o *stripper* de coluna com *reboiler*, SD o *stripper* de coluna com vapor direto, AQ o aquecedor da corrente de entrada com

vapor e IE o trocador de calor para integração de energia entre corrente de entrada e saída da coluna de *stripper*. Para que a escolha da melhor configuração do processo seja feita através da otimização do modelo reduzido, foi necessária a utilização de quatro variáveis binárias no modelo, as quais representam a utilização ou não de cada equipamento y_{IE} , y_{AQ} , y_{SD} , y_{SR} . O modelo do processo pode então, ser representado pela Figura 4.2.1.

Figura 4.2.1 – Fluxograma do *stripper* com 8 possibilidades para escolha de equipamentos

As correntes BP1, BP3 e BP2 representam os *bypass* (desvio), respectivamente para o trocador de calor e o aquecedor, caso estes equipamentos não sejam escolhidos para a configuração final do processo. Seguindo o fluxograma apresentado pela Figura 4.2.1, pode-se fazer o balanço das vazões para o processo através das equações (4.2.1) – (4.2.11). Da mesma maneira que a vazão, pode-se representar os balanços de energia nas equações (4.2.15) – (4.2.22) e o balanço de massa por componente, pelas equações (4.2.23) – (4.2.29).

Balanços de massa do processo de *steam stripper*:

$$Feed1 = Fin_{IE}^{cool} + Fin_{BP1}^{cool} \quad (4.2.1)$$

$$Feed2 = Fout_{IE}^{cool} + Fin_{BP1}^{cool} \quad (4.2.2)$$

$$Feed2 = Fin_{AQ} + Fin_{BP2} \quad (4.2.3)$$

$$Feed3 = Fout_{AQ} + Fin_{BP2} \quad (4.2.4)$$

$$Feed3 = \textcolor{blue}{Fin}_{SR} + \textcolor{blue}{Fin}_{SD} \quad (4.2.5)$$

$$EFLUHOT = \textcolor{blue}{Fout}_{SR} + \textcolor{blue}{Fout}_{SD} \quad (4.2.6)$$

$$EFLUHOT = \textcolor{blue}{Fin}_{IE}^{hot} + Fin_{BP3}^{hot} \quad (4.2.7)$$

$$EFLUCOOL = Fout_{IE}^{hot} + Fin_{BP3}^{hot} \quad (4.2.8)$$

$$Fout_{IE}^{cool} = Fin_{IE}^{cool} \quad (4.2.9)$$

$$Fout_{IE}^{hot} = Fin_{IE}^{hot} \quad (4.2.10)$$

$$Fout_{AQ} = Fin_{AQ} \quad (4.2.11)$$

Os balanços de energia apresentados a seguir estão simplificados, pela hipótese de que C_p (calor específico da água) é constante com a temperatura, além disso, as vazões em cada equação abaixo são iguais, como no exemplo apresentado pelas equações (4.2.12 – 4.2.14):

$$T_{feed1} \cdot Feed1 \cdot Cp = \textcolor{blue}{Tin}_{IE}^{cool} \cdot \textcolor{blue}{Fin}_{IE}^{cool} \cdot Cp + Tin_{BP1}^{cool} \cdot Fin_{BP1}^{cool} \cdot Cp \quad (4.2.12)$$

$$\text{Como: } Feed1 = \textcolor{blue}{Fin}_{IE}^{cool} \cdot y_{EI} = Fin_{BP1}^{cool} \cdot (1 - y_{EI}) \text{ e } Cp \text{ é constante} \quad (4.2.13)$$

$$\text{Temos: } T_{feed1} = \textcolor{blue}{Tin}_{IE}^{cool} + Tin_{BP1}^{cool} \quad (4.2.14)$$

Balanços de energia do processo de *steam stripping*:

$$T_{feed1} = \textcolor{blue}{Tin}_{IE}^{cool} + Tin_{BP1}^{cool} \quad (4.2.15)$$

$$T_{feed2} = \textcolor{blue}{Tout}_{IE}^{cool} + Tin_{BP1}^{cool} \quad (4.2.16)$$

$$T_{feed2} = \textcolor{blue}{Tin}_{AQ} + Tin_{BP2} \quad (4.2.17)$$

$$T_{feed3} = \textcolor{blue}{Tout}_{AQ} + Tin_{BP2} \quad (4.2.18)$$

$$T_{feed3} = \textcolor{blue}{Tin}_{SR} + \textcolor{blue}{Tin}_{SD} \quad (4.2.19)$$

$$T_{efluhot} = \textcolor{blue}{Tout}_{SR} + \textcolor{blue}{Tout}_{SD} \quad (4.2.20)$$

$$T_{efluhot} = \textcolor{blue}{Tin}_{IE}^{hot} + Fin_{BP3}^{hot} \quad (4.2.21)$$

$$T_{eflucool} = \textcolor{blue}{Tout}_{IE}^{hot} + Tin_{BP3}^{hot} \quad (4.2.22)$$

Balances de massa por componentes:

$$Feed1 * Z_{feed1}^{NaCl} = EFLUCOOL * Z_{eflucool}^{NaCl} \quad (4.2.23)$$

$$Z_{feed1}^{H2S} = Z_{inSR}^{H2S} + Z_{inSD}^{H2S} \quad (4.2.24)$$

$$Z_{eflucool}^{H2S} = Z_{outSR}^{H2S} + Z_{outSD}^{H2S} \quad (4.2.25)$$

$$Z_{feed1}^{NH3} = Z_{inSR}^{NH3} + Z_{inSD}^{NH3} \quad (4.2.26)$$

$$Z_{eflucool}^{NH3} = Z_{outSR}^{NH3} + Z_{outSD}^{NH3} \quad (4.2.27)$$

$$Z_{feed1}^{OIL} = Z_{inSR}^{OIL} + Z_{inSD}^{OIL} \quad (4.2.28)$$

$$Z_{eflucool}^{OIL} = Z_{outSR}^{OIL} + Z_{outSD}^{OIL} \quad (4.2.29)$$

Nas equações de balanço anteriores, os índices *cool* e *hot* representam, respectivamente, a corrente fria e a corrente quente do trocador de calor para a integração de energia, *Fin* é a vazão de entrada, *Fout* a vazão de saída, *Tin* a temperatura na vazão de entrada, *Tout* a temperatura da vazão de saída, *Zin* a concentração do contaminante (especificada pelo índice superior) na corrente de entrada (especificada no índice inferior) e *Zout* a concentração do contaminante (especificada pelo índice superior) na corrente de saída (especificada no índice inferior).

Cada variável, nos termos à direita da igualdade nas equações de balanço, foi colocada em uma equação tipo Big-M e Mini-M. Essa equação exerce a função de chave “liga e desliga” mantendo-a entre os seus limites superior e inferior, por exemplo, na equação (4.2.1), para as duas variáveis do lado direito da igualdade Fin_{IE}^{cool} e Fin_{BP1}^{cool} , temos as equações (4.2.30) e (4.2.31).

$$Fin_{IE}^{cool} \cdot y_{IE} \leq Fin_{IE}^{cool} \leq Fin_{IE}^{cool} \cdot y_{IE} \quad (4.2.30)$$

$$Fin_{BP1}^{cool} \cdot (1 - y_{IE}) \leq Fin_{BP1}^{cool} \leq Fin_{BP1}^{cool} \cdot (1 - y_{IE}) \quad (4.2.31)$$

Quando y_{IE} é igual a 1 (ou seja, o trocador de calor é escolhido), a variável Fin_{BP1}^{cool} é igual a zero, desta maneira, a vazão da entrada do fluido frio do trocador é

igual à vazão FEED1. No entanto, quando a variável y_{IE} é igual a zero, a vazão de alimentação do trocador de calor é zero e a vazão pelo *bypass* BP1 é igual à vazão FEED1, o que indica que o trocador é descartado no modelo.

As variáveis em destaque azul nas equações (4.2.1) – (4.2.29), são as variáveis de entrada do modelo para os blocos referentes aos equipamentos: trocador de calor, aquecedor e coluna do *stripper*. As variáveis em destaque preto são as de saída para estes mesmos blocos. A Figura 4.2.2 mostra o primeiro bloco, trocador de calor.

Figura 4.2.2 – Representação gráfica para o bloco do trocador de calor

A variável em vermelho é a variável de construção do equipamento A_{IE} , a área de troca térmica. A equação (4.2.32) é o cálculo de custo do equipamento, onde: TAC_{IE} é o custo total anualizado do trocador, função do fator anualizador k_f , área de troca térmica e por fim, os índices de custo Marshall e Swift do ano de 2010 e 2003, MS_{2010} e MS_{2003} .

$$TAC_{IE} = k_f \cdot (153,92 \cdot A_{IE} + 8784,9 \cdot y_{IE}) * \frac{MS_{2010}}{MS_{2003}} \quad (4.2.32)$$

A equação (4.2.33) é a equação geral do trocador de calor, onde: Q_{IE} é a potência trocada no equipamento, $LMTD_{IE}$ é a média logarítmica das temperaturas dada pela equação (4.2.34) e U_{IE} é o coeficiente global de troca térmica do trocador, parâmetro igual a $7701,6 \frac{kJ}{m^2 \cdot s \cdot K}$, (KERN, 1987).

$$Q_{IE} = A_{IE} \cdot LMTD_{IE} \cdot U_{IE} \quad (4.2.33)$$

$$LMTD_{IE} = \left((T_{IE}^{hot} - T_{IE}^{cool}) \times (T_{IE}^{hot} - T_{IE}^{cool}) \right) \times \left(\frac{(T_{IE}^{hot} - T_{IE}^{cool}) + (T_{IE}^{hot} - T_{IE}^{cool})}{2} \right)^{1/3} \quad (4.2.34)$$

A equação (4.2.34) é a aproximação de Chen para a média logarítmica das temperaturas de um trocador. Segundo Yee et al. (1990) essa equação apresenta vantagens com relação à equação tradicional, pois não causa os mesmos erros numéricos quando as diferenças entre as temperaturas tendem a zero ou são iguais.

As equações (4.2.35) e (4.2.36) representam os calores sensíveis, trocados pela corrente fria e quente, respectivamente.

$$Q_{IE} = Fin_{IE}^{cool} \cdot Cp_{IE}^{cool} \cdot (T_{IE}^{cool} - T_{IE}^{cool}) \quad (4.2.35)$$

$$Q_{IE} = Fin_{IE}^{hot} \cdot Cp_{IE}^{hot} \cdot (T_{IE}^{hot} - T_{IE}^{hot}) \quad (4.2.36)$$

A equação (4.2.37), assim como a (4.2.38), são as médias aritméticas das temperaturas em Kelvin, respectivamente para a corrente, fria e quente.

$$T_{IE}^{cool} = (273,15 \cdot 2 \cdot y_{IE} + T_{IE}^{cool} + T_{IE}^{cool}) \cdot 0,5 \quad (4.2.37)$$

$$T_{IE}^{hot} = (273,15 \cdot 2 \cdot y_{IE} + T_{IE}^{hot} + T_{IE}^{hot}) \cdot 0,5 \quad (4.2.38)$$

Os calores específicos médios para as correntes, fria e quente, são dados pelas equações (4.2.39) e (4.2.40).

$$Cp_{IE}^{cool} = (276,37 - 2090,1 \cdot T_{IE}^{cool} + 8,125 \cdot T_{IE}^{cool^2} - 0,014116 \cdot T_{IE}^{cool^3} + 9,3701 \cdot 10^{-6} \cdot T_{IE}^{cool^4}) / 18015 \quad (4.2.39)$$

$$Cp_{IE}^{hot} = (276,37 - 2090,1 \cdot T_{IE}^{hot} + 8,125 \cdot T_{IE}^{hot^2} - 0,014116 \cdot T_{IE}^{hot^3} + 9,3701 \cdot 10^{-6} \cdot T_{IE}^{hot^4}) / 18015 \quad (4.2.40)$$

As equações (4.2.41) e (4.2.42) são restrições para o bom funcionamento do trocador de calor, que garantem uma diferença mínima entre a temperatura da corrente quente e a fria.

$$20. y_{IE} \leq \textcolor{blue}{Tin}_{IE}^{cool} \leq \textcolor{blue}{Tout}_{IE}^{hot} - 10. y_{IE} \quad (4.2.41)$$

$$\textcolor{blue}{Tout}_{IE}^{cool} \leq \textcolor{blue}{Tin}_{IE}^{hot} - 10. y_{IE} \quad (4.2.42)$$

O modelo matemático para o aquecedor é semelhante ao do trocador de calor, formado pelas equações (4.2.32), (4.2.35), (4.2.37) e (4.2.38), adicionado à equação (4.2.43), que neste caso representa o calor fornecido pela corrente quente, vapor saturado a 0,8 MPa (corrente de vapor que alimenta a planta). Desta maneira, a energia fornecida pelo vapor é o calor latente de condensação, a essa temperatura e pressão, ao invés do calor sensível. A representação gráfica do bloco do aquecedor está na Figura 4.2.3, onde as variáveis de entrada do modelo estão em azul, as variáveis de construção em vermelho e as variáveis de saída, em preto.

$$Q_{AQ} = Fvap_{AQ} \cdot h_{0,8}^{170} \quad (4.2.43)$$

Figura 4.2.3 – Representação gráfica para o bloco do aquecedor

A Figura 4.2.4 é a representação gráfica do bloco da coluna com *reboiler* e da coluna de vapor direto. Os modelos, desses dois blocos, foram construídos e adicionados ao modelo reduzido do *steam stripper*.

Para a simulação do modelo fenomenológico da coluna de stripper no Aspen Plus[®], além da informação sobre a composição da corrente de entrada, é necessária a especificação de um conjunto de variáveis de construção do equipamento. No caso, as variáveis escolhidas foram o número de pratos teóricos **NPT**, a razão molar de refluxo **RRM**, a vazão de vapor no reboiler ou na injeção direta **Fvap** e a pressão no topo da coluna **Pres**.

A amostragem do modelo fenomenológico da coluna de *stripper* foi realizada da mesma maneira que para as torres de resfriamento, ou seja, de forma randômica, respeitando os limites inferiores e superiores para cada variável de entrada.

A Tabela 4.2.1 mostra os limites das variáveis de entrada, que foram base para a amostragem do *stripper*, onde *rand* é uma função randômica, que varia entre 0 e 1.

Tabela 4.2.1 - Limites das variáveis de entrada para a amostragem dos *stripper*

Variável	Unidade	Limite inferior	Limite superior
$Fin_{stripper}$	(kg/h)	1000	200000
$Zin_{stripper}^{H_2S}$	(ppmw)	10	500
$Zin_{stripper}^{NH_3}$	(ppmw)	10	500
$Zin_{stripper}^{NaCl}$	(ppmw)	100	9500
$Tin_{stripper}$	(°C)	70	100
NPT		$2 \text{ e } 3^4$	20
$Fvap_{stripper}$	(kg/h)	$Fin_{stripper} \cdot (0,15 - 0,05) \cdot rand$	
RRM		0,5	2
$Pres \text{ do topo}$	(atm)	1	2

Figura 4.2.4 – Representação gráfica dos modelos de *stripper*

4 – Devido a nomenclatura do software ASPEN Plus® que considera o reboiler como um estágio teórico, o número de estágios teóricos mínimo para a coluna com *reboiler* é 3, enquanto que, para a coluna sem *reboiler* é 2.

A partir das informações da Tabela 4.2.1, 2.000 pontos de amostragem foram obtidos com a ajuda de um programa desenvolvido em MatLab[®]. As simulações foram então feitas no Aspen Plus[®], com a utilização da ferramenta *Model Analysis Tool – Sensitivity* (ferramenta de análise de sensibilidade). De 2.000 simulações para cada coluna (*com e sem reboiler*), apenas 1.822 convergiram a soluções viáveis para a coluna de vapor direto e 1.709 para a coluna com *reboiler*.

Visando analisar o motivo da não convergência de alguns pontos do conjunto de amostragem, o conjunto de dados do *stripper* com *reboiler* foi colocado em um gráfico de porcentagem de vapor (em relação à vazão de efluente na entrada) dividido pela pressão (no topo da coluna) em função da temperatura da corrente de alimentação, como mostrado da Figura 4.2.5.

Figura 4.2.5 – Relação entre pontos convergidos e não convergidos

Verifica-se que a não convergência dos pontos pode ser devido à utilização de pontos iniciais ruins na simulação. Visando facilitar a análise, um conjunto menor, com 200 pontos e nas mesmas condições, foi simulado utilizando bons pontos iniciais para garantir que esse fator não influencie na amostragem. O conjunto de dados resultante foi, então, colocado em um gráfico semelhante ao anterior, como ilustra a Figura 4.2.5.

Figura 4.2.6 – Relação entre pontos convergidos e não convergidos - 200 pontos

No gráfico da Figura 4.2.6, pode-se perceber um perfil, bem definido, dos pontos que não convergiram (em vermelho). Nessa região não se tem energia suficiente para obter vapor no primeiro estágio da coluna, portanto, é necessária a adição de uma restrição para o bom funcionamento do *stripper*, baseada no limite apresentado pela linha roxa da figura acima. Essa mesma linha foi adicionada ao gráfico com 2.000 pontos e aparece na Figura 4.2.7.

Figura 4.2.7 – Relação entre pontos convergidos e não convergidos - 2.000 pontos

O limite estabelecido pela análise do conjunto de dados com 200 pontos está representado em roxo na Figura 4.2.7, a ele foi adicionado uma margem de segurança, representada pela reta em laranja. Este novo limite separa a região viável, acima da reta, que será utilizada para a regressão dos parâmetros do modelo

reduzido. O mesmo procedimento foi aplicado para o *stripper* sem *reboiler*, que apresentou o mesmo comportamento.

A partir dos limites estipulados, adicionaram-se duas restrições de desigualdade ao modelo reduzido, restringindo-se a região viável, equações (4.2.44) - (4.2.45), onde a temperatura é dada em graus Celsius e a pressão em atm.

$$\frac{P_{vap_{SR}}}{Pres_{SR}} \geq -0,0016.Tin_{SR} + 0,18 \quad (4.2.44)$$

$$\frac{P_{vap_{SD}}}{Pres_{SD}} \geq -0,0012.Tin_{SD} + 0,1399 \quad (4.2.45)$$

Os dois conjuntos de dados, formados pela região viável, foram utilizados para a regressão dos parâmetros do processo de *stripping*, tanto no modelo reduzido polinomial, quanto no modelo de rede neural. Durante a etapa de correlação das colunas de *stripper*, pode-se perceber que não houve um bom ajuste de parâmetros pelo modelo polinomial completo de quarta ordem, assim como no modelo de rede neural com até 20 neurônios na camada oculta. Portanto fez-se necessária a reformulação do modelo reduzido de *stripper*.

Segundo Kremser, 1930 apud Hwang (1992), pode-se descrever a performance de um *steam stripper* sem *reboiler* pela equação (4.2.46) e de um *stripper* com *reboiler* pela equação (4.2.47).

$$\frac{Z_B}{Z_T} = \frac{S - 1}{S^{H+1} - 1} \quad S \neq 1 \quad (4.2.46)$$

$$\frac{Z_B}{Z_T} = \frac{S - 1}{\left(S - \frac{V}{L}\right) \cdot S^H - \left(1 - \frac{V}{L}\right)} \quad S \neq 1 \quad (4.2.47)$$

Onde, Z_B é a concentração em ppmw do contaminante na saída do efluente, Z_T é a concentração em ppmw do contaminante na entrada de efluente, S é o fator de *stripping* para determinado contaminante, V é a vazão molar de vapor dentro da coluna, L é a vazão molar de líquido dentro da coluna e H (em metros) é a altura da coluna de *stripper*.

Considerando as equações apresentadas anteriormente, pode-se encontrar a concentração dos contaminantes na saída da coluna, quando se conhece o fator de

stripping para aquele contaminante, e no caso da coluna com *reboiler*, conhecendo-se também a relação da vazão molar média entre líquido e vapor dentro da coluna.

Desta maneira, o fator de *stripping* para cada contaminante (variável auxiliar $S^{contaminate}$) e a relação da vazão molar entre líquido e vapor, devem ser encontrados em função das variáveis de entrada do modelo. O fator de *stripping* para cada caso foi obtido resolvendo-se as equações não lineares (4.2.46) e (4.2.47), para o conjunto de dados fornecido pelas simulações, com a ajuda do algoritmo de Levenberg-Marquardt, enquanto que, a relação da vazão molar entre líquido e vapor é um dado fornecido pelas simulações no Aspen Plus®. A correlação das duas variáveis apresentou melhora em comparação com a correlação direta das concentrações de saída do H₂S, NH₃ e OIL.

Outras modificações foram realizadas na identificação do *stripper*. Notou-se (através de tentativa e erro), que a correlação das variáveis de saída, S^{H_2S} , S^{NH_3} , S^{OIL} e F_{out} , melhora quando se substitui F_{vap_S} e Fin_S da matriz de regressores, pela porcentagem de vapor $\frac{F_{vap_S}}{Fin_S}$. Da mesma forma, foi substituído o termo Zin^{NH_3} por $\frac{Zin^{H_2S}}{Zin^{NH_3}}$, para a correlação de S^{H_2S} e Zin^{OIL} , por $\frac{Zin^{OIL}}{H}$ para a correlação de S^{OIL} . Por fim, foi realizada a troca entre a variável F_{out} por dRF , que é a diferença relativa entre a vazão de saída e entrada da coluna, dada pela equação (4.2.48), assim como para T_{out} substituída por dT , dada pela equação (4.2.49).

$$dRF = \frac{F_{out} - Fin}{Fin} \quad (4.2.48)$$

$$dT = \frac{T_{out} - T_{in}}{T_{in}} \quad (4.2.49)$$

Adicionadas as modificações descritas acima, o modelo reduzido para a coluna de *stripper* com vapor direto, pode ser descrito pelas equações (4.2.50) – (4.2.55), mais as equações auxiliares (4.2.56) – (4.2.61), e para o *stripper* com *reboiler* as equações são (4.2.62) – (4.2.68) e as equações auxiliares (4.2.69) – (4.2.74).

$$S_{SD}^{H_2S} = f_1 \left(Zin_{SD}^{H_2S}, \frac{Zin_{SD}^{H_2S}}{Zin_{SD}^{NH_3}}, Zin_{SD}^{OIL}, Zin_{SD}^{NaCl}, T_{in_{SD}}, \frac{Fin_{SD}}{F_{vap_{SD}}}, H_{SD}, RRM_{SD}, Pres_{SD} \right) \quad (4.2.50)$$

$$S_{SD}^{NH3} = f_2 \left(Zin_{SD}^{H2S}, Zin_{SD}^{NH3}, Zin_{SD}^{OIL}, Zin_{SD}^{NaCl}, Tin_{SD}, \frac{Fin_{SD}}{Fvap_{SD}}, H_{SD}, RRM_{SD}, Pres_{SD} \right) \quad (4.2.51)$$

$$S_{SD}^{OIL} = f_3 \left(Zin_{SD}^{H2S}, Zin_{SD}^{NH3}, \frac{Zin_{SD}^{OIL}}{H_{SD}}, Zin_{SD}^{NaCl}, Tin_{SD}, \frac{Fin_{SD}}{Fvap_{SD}}, H_{SD}, RRM_{SD}, Pres_{SD} \right) \quad (4.2.52)$$

$$dRF_{SD} = f_4 \left(Zin_{SD}^{H2S}, Zin_{SD}^{NH3}, Zin_{SD}^{OIL}, Zin_{SD}^{NaCl}, Tin_{SD}, \frac{Fin_{SD}}{Fvap_{SD}}, H_{SD}, RRM_{SD}, Pres_{SD} \right) \quad (4.2.53)$$

$$dT_{SD} = f_5 \left(Zin_{SD}^{H2S}, Zin_{SD}^{NH3}, Zin_{SD}^{OIL}, Zin_{SD}^{NaCl}, Tin_{SD}, \frac{Fin_{SD}}{Fvap_{SD}}, H_{SD}, RRM_{SD}, Pres_{SD} \right) \quad (4.2.54)$$

$$TAC_{SD} = f_6(Zin_{SD}^{H2S}, Zin_{SD}^{NH3}, Zin_{SD}^{OIL}, Zin_{SD}^{NaCl}, Tin_{SD}, Fin_{SD}, H_{SD}, RRM_{SD}, Fvap_{SD}, Pres_{SD}) \quad (4.2.55)$$

$$Fout_{SD} = Fin_{SD} \cdot (1 + dRF_{SD}) \quad (4.2.56)$$

$$Tout_{SD} = Tin_{SD} \cdot (1 + dT_{SD}) \quad (4.2.57)$$

$$Zout_{SD}^{H2S} = \frac{Zin_{SD}^{H2S} \cdot (S_{SD}^{H2S} - 1)}{(S_{SD}^{H2S(H_{SD}+1)} - 1)} \quad (4.2.58)$$

$$Zout_{SD}^{NH3} = \frac{Zin_{SD}^{NH3} \cdot (S_{SD}^{NH3} - 1)}{(S_{SD}^{NH3(H_{SD}+1)} - 1)} \quad (4.2.59)$$

$$Zout_{SD}^{OIL} = \frac{Zin_{SD}^{OIL} \cdot (S_{SD}^{OIL} - 1)}{(S_{SD}^{OIL(H_{SD}+1)} - 1)} \quad (4.2.60)$$

$$Zout_{SD}^{NaCl} = \frac{Zin_{SD}^{NaCl} \cdot Fin_{SD}}{Fout_{SD}} \quad (4.2.61)$$

$$S_{SR}^{H2S} = f_7 \left(Zin_{SR}^{H2S}, \frac{Zin_{SR}^{H2S}}{Zin_{SR}^{NH3}}, Zin_{SR}^{OIL}, Zin_{SR}^{NaCl}, Tin_{SR}, \frac{Fin_{SR}}{Fvap_{SR}}, H_{SR}, RRM_{SR}, Pres_{SR} \right) \quad (4.2.62)$$

$$S_{SR}^{NH3} = f_8 \left(Zin_{SR}^{H2S}, Zin_{SR}^{NH3}, Zin_{SR}^{OIL}, Zin_{SR}^{NaCl}, Tin_{SR}, \frac{Fin_{SR}}{Fvap_{SR}}, H_{SR}, RRM_{SR}, Pres_{SR} \right) \quad (4.2.63)$$

$$S_{SR}^{OIL} = f_9 \left(Zin_{SR}^{H2S}, Zin_{SR}^{NH3}, \frac{Zin_{SR}^{OIL}}{H_{SR}}, Zin_{SR}^{NaCl}, Tin_{SR}, \frac{Fin_{SR}}{Fvap_{SR}}, H_{SR}, RRM_{SR}, Pres_{SR} \right) \quad (4.2.64)$$

$$dRF_{SR} = f_{10} \left(Zin_{SR}^{H2S}, Zin_{SR}^{NH3}, Zin_{SR}^{OIL}, Zin_{SR}^{NaCl}, Tin_{SR}, \frac{Fin_{SR}}{Fvap_{SR}}, H_{SR}, RRM_{SR}, Pres_{SR} \right) \quad (4.2.65)$$

$$dT_{SR} = f_{11} \left(Zin_{SR}^{H2S}, Zin_{SR}^{NH3}, Zin_{SR}^{OIL}, Zin_{SR}^{NaCl}, Tin_{SR}, \frac{Fin_{SR}}{Fvap_{SR}}, H_{SR}, RRM_{SR}, Pres_{SR} \right) \quad (4.2.66)$$

$$V/L_{SR} = f_{12} \left(Zin_{SR}^{H2S}, Zin_{SR}^{NH3}, Zin_{SR}^{OIL}, Zin_{SR}^{NaCl}, Tin_{SR}, \frac{Fin_{SR}}{Fvap_{SR}}, H_{SR}, RRM_{SR}, Pres_{SR} \right) \quad (4.2.67)$$

$$TAC_{SR} = f_{13}(Zin_{SR}^{H2S}, Zin_{SR}^{NH3}, Zin_{SR}^{OIL}, Zin_{SR}^{NaCl}, Tin_{SR}, Fin_{SR}, H_{SR}, RRM_{SR}, Fvap_{SR}, Pres_{SR}) \quad (4.2.68)$$

$$\mathbf{Fout}_{SR} = \mathbf{Fin}_{SR} \cdot (1 + dRF_{SR}) \quad (4.2.69)$$

$$\mathbf{Tout}_{SR} = \mathbf{Tin}_{SR} \cdot (1 + dT_{SR}) \quad (4.2.70)$$

$$\mathbf{Zout}_{SR}^{H2S} = \frac{\mathbf{Zin}_{SR}^{H2S} \cdot (\mathbf{S}_{SR}^{H2S} - 1)}{(\mathbf{S}_{SR}^{H2S} - V/L_{SR}) \cdot \mathbf{S}_{SR}^{H2S(H_{SR})} - (1 - V/L_{SR})} \quad (4.2.71)$$

$$\mathbf{Zout}_{SR}^{NH3} = \frac{\mathbf{Zin}_{SR}^{NH3} \cdot (\mathbf{S}_{SR}^{NH3} - 1)}{(\mathbf{S}_{SR}^{NH3} - V/L_{SR}) \cdot \mathbf{S}_{SR}^{NH3(H_{SR})} - (1 - V/L_{SR})} \quad (4.2.72)$$

$$\mathbf{Zout}_{SR}^{OIL} = \frac{\mathbf{Zin}_{SR}^{OIL} \cdot (\mathbf{S}_{SR}^{OIL} - 1)}{(\mathbf{S}_{SR}^{OIL} - V/L_{SR}) \cdot \mathbf{S}_{SR}^{OIL(H_{SR})} - (1 - V/L_{SR})} \quad (4.2.73)$$

$$\mathbf{Zout}_{SR}^{NaCl} = \frac{\mathbf{Zin}_{SR}^{NaCl} \cdot \mathbf{Fin}_{SR}}{\mathbf{Fout}_{SR}} \quad (4.2.74)$$

As informações sobre a correlação do modelo reduzido para a coluna do *stripper* são apresentadas no próximo tópico.

4.2.1 Modelo polinomial para a coluna do steam stripper

O modelo da coluna do *stripper*, apresentado anteriormente, possui 25 equações e 35 variáveis, ou seja, 10 graus de liberdade. Para a identificação da coluna do *stripper* foi proposto um modelo polinomial completo, de quarta ordem (em relação às variáveis de entrada), para cada uma das 13 variáveis escolhidas para correlação. Estes modelos completos foram reduzidos utilizando-se a metodologia proposta na secção 2.3. Os gráficos de paridade para o modelo polinomial reduzido estão representados nas Figuras 4.2.1.1 - 4.2.1.7.

Figura 4.2.1.1 – Gráficos de paridade do modelo polinomial reduzido para TAC_{SR} e TAC_{SD}

Figura 4.2.1.2 - Gráficos de paridade do modelo polinomial reduzido para $S_{SR}^{H_2S}$ e $S_{SD}^{H_2S}$

Figura 4.2.1.3 - Gráficos de paridade do modelo polinomial reduzido para $S_{SR}^{NH_3}$ e $S_{SD}^{NH_3}$

Figura 4.2.1.4 - Gráficos de paridade do modelo polinomial reduzido para S_{SR}^{OIL} e S_{SD}^{OIL}

Figura 4.2.1.5 - Gráficos de paridade do modelo polinomial reduzido para dRF_{SR} e dRF_{SD}

Figura 4.2.1.6 - Gráficos de paridade do modelo polinomial reduzido para dT_{SR} e dT_{SD}

Figura 4.2.1.7 - Gráficos de paridade do modelo polinomial reduzido para V/L_{SR}

Observando os gráficos de paridade acima, podemos perceber um bom ajuste do modelo polinomial reduzido, aos conjuntos de dados do *stripper*.

Os gráficos de escolha do número de termos do modelo polinomial estão no **Apêndice D**. Já as tabelas com os parâmetros de regressão e os termos utilizados

no modelo polinomial reduzido, assim com os limites inferiores e superiores para o reescalonamento das variáveis, se encontram no **Apêndice E**.

Na Tabela 4.2.1.1, estão relacionados os números de termos, a ordem das equações e o coeficiente de correlação para o conjunto de validação, para o modelo polinomial reduzido do *steam stripper*.

Tabela 4.2.1.1 – Número de termos, ordem e coeficiente de correlação do modelo polinomial reduzido do *steam stripper*.

Variáveis de saída	nº de termos	ordem	R ²
TAC_{SR}	7	1 ^a	0,9993
TAC_{SD}	10	2 ^a	0,9998
S_{SR}^{H2S}	26	4 ^a	0,9011
S_{SD}^{H2S}	25	4 ^a	0,9050
S_{SR}^{NH3}	18	4 ^a	0,9826
S_{SD}^{NH3}	23	4 ^a	0,9907
S_{SR}^{OIL}	20	4 ^a	0,9783
S_{SD}^{OIL}	25	4 ^a	0,9471
dRF_{SR}	11	2 ^a	0,9985
dRF_{SD}	11	3 ^a	0,9931
dT_{SR}	6	2 ^a	0,9999
dT_{SD}	5	2 ^a	0,9999
V/L_{SR}	6	2 ^a	0,9994

Os coeficientes de correlação (R^2), para a identificação dos fatores de *stripping*, sugerem uma correlação não tão boa quanto às apresentadas pelas outras variáveis, este mesmo comportamento é corroborado pelos gráficos de paridade. Isso se deve à faixa de trabalho destas variáveis, desta forma, pequenos erros em relação à predição em massa dos contaminantes, podem representar erros visualmente maiores quando tratados em sistemas diluídos, com concentrações baixas em ppmw, que estão na ordem de 10^{-6} kg/kg.

O modelo polinomial reduzido para o *steam stripper* pode, então, ser escrito a partir das equações vistas na secção 4.2, substituindo-se as equações (4.2.50) – (4.2.55) e (4.2.62) – (4.2.68), pelas equações (4.2.1.1) – (4.2.1.9).

$$TAC_{SD\ AS} = \theta_{TAC_{SD}}^T \cdot Reg_{TAC_{SD}} \quad (4.2.1.1)$$

$$TAC_{SR\ AS} = \theta_{TAC_{SR}}^T \cdot Reg_{TAC_{SR}} \quad (4.2.1.2)$$

$$dRF_{SD\ AS} = \theta_{dRF_{SD}}^T \cdot Reg_{dRF_{SD}} \quad (4.2.1.3)$$

$$dRF_{SR\ AS} = \theta_{dRF_{SR}}^T \cdot Reg_{dRF_{SR}} \quad (4.2.1.4)$$

$$dT_{SD\ AS} = \theta_{dT_{SD}}^T \cdot Reg_{dT_{SD}} \quad (4.2.1.5)$$

$$dT_{SR\ AS} = \theta_{dT_{SR}}^T \cdot Reg_{dT_{SR}} \quad (4.2.1.6)$$

$$S_{SD\ AS}^{H2S} = \theta_{S_{SD}^{H2S}}^T \cdot Reg_{S_{SD}^{H2S}} \quad (4.2.1.7)$$

$$S_{SR\ AS}^{H2S} = \theta_{S_{SR}^{H2S}}^T \cdot Reg_{S_{SR}^{H2S}} \quad (4.2.1.8)$$

$$S_{SD\ AS}^{NH3} = \theta_{S_{SD}^{NH3}}^T \cdot Reg_{S_{SD}^{NH3}} \quad (4.2.1.9)$$

$$S_{SR\ AS}^{NH3} = \theta_{S_{SR}^{NH3}}^T \cdot Reg_{S_{SR}^{NH3}} \quad (4.2.1.10)$$

$$S_{SD\ AS}^{OIL} = \theta_{S_{SD}^{OIL}}^T \cdot Reg_{S_{SD}^{OIL}} \quad (4.2.1.11)$$

$$S_{SR\ AS}^{OIL} = \theta_{S_{SR}^{OIL}}^T \cdot Reg_{S_{SR}^{OIL}} \quad (4.2.1.12)$$

$$V/L_{SR\ AS} = \theta_{V/L_{SR}}^T \cdot Reg_{V/L_{SR}} \quad (4.2.1.13)$$

Nas equações acima, o índice AS indica a variável reescalada, utilizada para a identificação.

4.2.2 Modelo de redes neurais para a coluna do *steam stripper*

Assim como foi feito para o processo de torres de resfriamento, também foi criado um modelo de redes neurais para o *steam stripper*, com a finalidade de comparar o desempenho computacional com o modelo polinomial reduzido. Nas

Figuras 4.2.2.1 – 4.2.2.7 estão os gráficos de paridade para o modelo de redes neurais do *steam stripper*.

Figura 4.2.2.1 – Gráficos de paridade do modelo de redes neurais para TAC_{Sr} e TAC_{Sd}

Figura 4.2.2.2 - Gráficos de paridade do modelo de redes neurais para $S_{Sr}^{H_2S}$ e $S_{Sd}^{H_2S}$

Figura 4.2.2.3 - Gráficos de paridade do modelo de redes neurais para $S_{Sr}^{NH_3}$ e $S_{Sd}^{NH_3}$

Figura 4.2.2.4 - Gráficos de paridade do modelo de redes neurais para S_{SR}^{OIL} e S_{SD}^{OIL}

Figura 4.2.2.5 - Gráficos de paridade do modelo de redes neurais para dRF_{SR} e dRF_{SD}

Figura 4.2.2.6 - Gráficos de paridade do modelo de redes neurais para dT_{SR} e dT_{SD}

Figura 4.2.2.7 - Gráficos de paridade do modelo de redes neurais para V/L_{SR}

Os gráficos de paridade mostram um melhor ajuste do modelo de redes neurais, se comparados aos apresentados pelo modelo polinomial, o que é confirmado quando se confronta os coeficientes de correlação obtidos pelas redes neurais com os coeficientes de correlação do modelo polinomial, Tabela 4.2.2.1.

Tabela 4.2.2.1 – Número de neurônios e coeficiente de correlação do modelo de redes neurais do *stripper*.

Variáveis de saída	nº de neurônios	R^2
TAC_{SR}	2	0,9999
TAC_{SD}	2	0,9999
S_{SR}^{H2S}	5	0,9657
S_{SD}^{H2S}	8	0,9731
S_{SR}^{NH3}	3	0,9812
S_{SD}^{NH3}	4	0,9847
S_{SR}^{OIL}	11	0,9964
S_{SD}^{OIL}	6	0,9297
dRF_{SR}	3	0,9993
dRF_{SD}	3	0,9822
dT_{SR}	2	0,9999
dT_{SD}	2	0,9999
V/L_{SR}	2	0,9994

As matrizes de pesos e os vetores de bias para o modelo de rede neural do *stripper* encontram-se no **Apêndice F**.

Os resultados de correlação mostraram-se melhores para o modelo de redes neurais, do que para o modelo polinomial de quarta ordem, na maioria das variáveis de saída dos modelos reduzidos. No capítulo seguinte será analisado o comportamento de cada modelo, quando colocado dentro de uma superestrutura para otimização e síntese de um processo de tratamento de efluentes.

5. ANÁLISE COMPARATIVA DOS MODELOS REDUZIDOS

Para o estudo de caso, foi proposto um problema semelhante ao apresentado por Huang et al. (1999), o qual considera apenas sais, óleos e H_2S , como contaminantes do sistema. No entanto de acordo com Beychok (1967), a amônia é um contaminante comum nos efluentes de uma refinaria de petróleo e desta forma, é necessário considerar sua presença, para a obtenção de um modelo mais condizente com o processo de tratamento deste tipo de efluente.

Na Figura 5.1, podem-se observar as unidades que formam a superestrutura do estudo de caso, onde temos: 2 possíveis fontes de água, 7 unidades de uso, 3 unidades de tratamento e 3 possíveis descartes. Embora na figura a seguir o sistema de refrigeração é apresentado como unidade de consumo de água, é importante frisar que o modelo reduzido do equipamento da torre de resfriamento, que está inserido na unidade de refrigeração, é na verdade, uma unidade de tratamento de água.

Figura 5.1 – Superestrutura do fornecimento de água da refinaria

A água da refinaria é fornecida por um rio próximo a ela e também, a partir da drenagem dos tanques de estocagem do petróleo. Entretanto, três processos requerem água com alta qualidade: Lavagem de amônia, Unidades de fracionamento e Caldeira, a qual é suprida pela unidade de purificação de água.

A configuração apresentada também considera dois processos de pré-tratamento dos efluentes, os quais são responsáveis pela adequação dos limites de contaminantes para seu descarte, que pode ser feito: na Unidade de tratamento de efluentes do *Site*, UTES (pois a refinaria em questão está localizada em um grande parque industrial, que possui uma unidade central de tratamento de efluentes), na Unidade de tratamento de efluentes da Planta, UTEP (que possui um sistema de tratamento de fim de linha), ou então, no rio, que pode ser utilizado para o descarte dos efluentes, desde que sejam obedecidas as restrições ambientais estabelecidas pelos órgãos de fiscalização.

Essas unidades de processamento foram ligadas entre si através de uma malha formada por misturadores e divisores, que estão representados com um círculo branco e um círculo azul, respectivamente, na Figura 5.2.

Figura 5.2 – Representação da superestrutura com misturadores e divisores

Como ilustrado na Figura 5.2, cada divisor pode enviar efluente para qualquer misturador. A modelagem matemática deste tipo de estrutura foi abordada na seção 2.2 deste trabalho, assim como os modelos simplificados das unidades de uso e tratamento, que também foram discutidas nessa seção. Ainda observando esta figura, verificamos as unidades com o contorno pontilhado, representando os modelos reduzidos que foram construídos neste estudo e estão descritos nas seções 3 e 4.

A unidade - Superestrutura de refrigeração - é formada por uma superestrutura secundária, que corresponde ao sistema distribuído de refrigeração da planta, problema semelhante ao resolvido por Rubio-Castro et al. (2010), podendo ser representado esquematicamente pela Figura 5.3, onde TC são os trocadores de calor, responsáveis pelo intercâmbio de energia entre as correntes de refrigeração e as correntes de processos da refinaria.

Figura 5.3 - Superestrutura para sistema fechado de resfriamento

Na Figura 5.3, os círculos em azul e branco representam o divisor e o misturador da superestrutura primária (abastecimento de água da planta), respectivamente, enquanto os quadriláteros em azul e branco ilustram os divisores e misturadores da superestrutura secundária (sistema distribuído de refrigeração).

Os dados referentes às condições de todas as unidades presentes nas superestruturas, primária e secundária, estão listados do **Apêndice G**. Na busca de

soluções mais plausíveis, foram adicionadas restrições evitando a recirculação de água em todas as unidades. Além disso, segundo resolução do CONAMA nº 430/2011, continua proibida a diluição de efluentes contaminados para o alcance dos limites impostos pelos descartes, desta forma, as possíveis correntes que sairiam da fonte de água fresca e do purificador para os descartes e pré-tratamentos, foram fixadas em zero.

A função objetivo, escolhida para a otimização do modelo, é o custo total anualizado do sistema de distribuição de água, que é o resultado da soma dos custos de todos os processos de pré-tratamento e descarte de água, dada pela equação (5.1):

$$Obj: TAC_T = TAC_{st} + TAC_{ref} + TAC_{sep} + TAC_{pur} + TAC_{plant} + TAC_{site} \quad (5.1)$$

Onde, TAC_T é o custo total do sistema de abastecimento de água da planta, TAC_{st} o custo do *stripper*, TAC_{ref} o custo da torre de refrigeração, TAC_{sep} custo do separador de óleo API (*American Petroleum Institute*), TAC_{pur} custo da purificação de água, TAC_{plant} custo do descarte de água na estação de tratamento da planta e TAC_{site} o custo de descarte de água na estação de tratamento do parque industrial. Em adição aos custos que compõem a equação anterior, seria interessante a adição do custo de utilização da água do rio, que é cobrado em algumas regiões pelos órgãos de fiscalização. No entanto, esse custo não foi utilizado no presente estudo de caso por depender de uma série de fatores de caracterização do rio.

Dessa forma, dois problemas foram criados, um utilizando os modelos reduzidos polinomiais e outro com os modelos reduzidos de redes neurais. As superestruturas, incluindo os modelos reduzidos da torre de resfriamento e do *stripper* de vapor, foram então formulada em GAMS 23.6. O modelo polinomial resultou em um problema misto inteiro não linear com 543 variáveis, sendo 61 delas fixas e 378 restrições de igualdade, dando um total de 104 graus de liberdade, enquanto o modelo de redes neurais resultou em um MINLP com 642 variáveis sendo 61 delas fixas e 477 restrições de igualdade, ou seja, os mesmos 104 graus de liberdade.

Ambos os problemas acima foram resolvidos utilizando o método de Outer Approximation do *solver* DICOPT e o método de Branch and Bound do *solver* SBB, em um computador Intel(R) Core(TM)2 Quad CPU Q8400 @ 2.67 GHz.

Foram realizadas 1000 otimizações para cada modelo e para cada *solver*, partindo de pontos iniciais randômicos. Os resultados obtidos estão descritos na Tabela 5.1:

Tabela 5.1 – Resultados obtidos pelas otimizações do problema

Modelo	Indicadores estudados	Solver utilizado	
		DICOPT	SBB
Polinomial	Número de pontos convergidos de 1000	152	165
	Número de ótimos locais encontrados	38	42
	Número de otimizações que chegaram ao melhor ótimo	4	1
	Tempo médio de otimização (segundos)	3,95	4,69
Redes Neurais	Número de pontos convergidos de 1000	173	158
	Número de ótimos locais encontrados	57	40
	Número de otimizações que chegaram ao melhor ótimo	1	2
	Tempo médio de otimização (segundos)	5,46	7,08

Analisando a Tabela 5.1, verifica-se que, o modelo polinomial e o modelo de redes neurais obtiveram-se resultados semelhantes com relação aos parâmetros descritos, ou seja, desempenho computacional foi praticamente o mesmo, com uma ligeira vantagem de tempo para o modelo polinomial, devido ao seu menor número de equações.

A Tabela 5.2 mostra o melhor mínimo obtido em cada sequência de otimização:

Tabela 5.2 – Melhor ótimo obtido em cada sequência otimização (dólares/ano)

Modelo	Solver utilizado	
	DICOPT	SBB
Polinomial	3.371.047	3.368.128
Redes Neurais	3.370.437	3.370.437

O melhor ponto obtido pelo modelo de redes neurais foi o mesmo para a otimização com ambos os *solvers*, enquanto que para o modelo polinomial, o melhor resultado foi o obtido pelo *solver* SBB. A diferença relativa entre os pontos

mostrados na tabela anterior, não passa de 0,09%. Contudo, essa pequena diferença no valor da função objetivo não significa que as soluções são semelhantes, já que, são pontos ótimos locais diferentes, com diferentes escolhas de configuração das correntes na superestrutura.

De fato, os erros obtidos por cada um dos modelos reduzidos são diferentes, para cada região do espaço de solução, por exemplo, o 5º melhor ponto obtido pelo modelo de redes neurais tem a mesma configuração de correntes que o melhor ponto do modelo polinomial, entretanto, com um valor da função objetivo ligeiramente maior, 0,36%. O mesmo ocorre com o oposto, o 6º melhor ponto do modelo polinomial apresenta a mesma configuração que o melhor ponto do modelo de redes neurais, com uma diferença de apenas 0,45% no valor da função objetivo. Na Tabela 5.3 pode-se encontrar a relação do mesmo ótimo obtido por cada modelo (mesma configuração de equipamentos e correntes), em ordem decrescente da função objetivo.

Tabela 5.3 - Comparação da sequência dos ótimos obtidos pelo modelo polinomial e de redes neurais

Redes Neurais		Polinomial		Diferença percentual
Ordem	TAC_T (U\$/ano)	Ordem	TAC_T (U\$/ano)	
1º	3370436,84	6º	3385608,13	-0,45
2º	3370812,88	11º	3455074,31	-2,50
3º	3371928,52	14º	3502730,67	-3,88
4º	3376620,90	3º	3371574,51	0,15
5º	3380296,59	1º	3368127,80	0,36

Sendo assim, as evidências mostram que a função real (modelo fenomenológico), para a qual se deseja obter o valor ótimo global, possui diversos ótimos locais próximos à solução global, por esse motivo, os erros contidos nos modelos reduzidos afetam a escolha de qual ponto equivale ao ponto ótimo global da função real.

Na Figura 5.4 é apresentada uma ilustração livre do comportamento dos modelos estudados.

Figura 5.4 – Função objetivo versus espaço do problema

Observa-se que, para os diferentes ótimos locais do modelo fenomenológico, o modelo polinomial e o de redes neurais apresentam diferentes resultados. Desta maneira, não se pode determinar qual é a melhor representação do modelo fenomenológico, mas sim, garantir que é necessária a análise dos melhores resultados obtidos em cada sequência de otimização, para a determinação de qual é o mais conveniente a ser construído.

Outra consideração importante é que as correlações de custos de equipamentos da literatura têm uma precisão em torno de 20%, (PETERS; 2003), o que já impossibilita a correlação exata da função real, tornando desprezíveis as diferenças apresentadas entre os melhores ótimos encontrados por cada modelo.

Dos resultados apresentados na tabela 5.2, o ótimo encontrado pelo modelo de redes neurais, prevê a construção de um *stripper* para uma vazão de tratamento de 199 m^3 de efluente por hora, enquanto que, o melhor ótimo apresentado pelo modelo polinomial, prevê a construção de um *stripper* com capacidade de aproximadamente 81 m^3 por hora. Todavia, o consumo de água fresca no melhor ponto do modelo de redes neurais é de 282 m^3 por hora, à medida que, para o modelo polinomial é de 310 m^3 por hora. Por fim, a vazão de descarte é de 259 e de 293 m^3 por hora, respectivamente, para o modelo de redes neurais e o modelo polinomial.

Levando-se em consideração a diminuição do impacto ao meio ambiente (menor consumo e emissão de água), a melhor opção para a construção do sistema de efluentes é o ponto ótimo encontrado pelo modelo de redes neurais. É importante destacar que, o modelo polinomial também encontrou esta configuração, no entanto,

ela não corresponde ao seu melhor ótimo, devido aos erros de aproximação do modelo.

Portanto, a abordagem permite revelar alguns pontos ótimos locais, que praticamente correspondem aos ótimos locais que seriam obtidos com o modelo fenomenológico, não com necessariamente os mesmos valores da função objetivo (devido à aproximação que é feita pelo procedimento). Vimos que no caso da aproximação por redes neurais e por polinômios, estes mínimos aparecem em ordem trocada, mas correspondem às mesmas configurações do sistema.

Como os custos de equipamentos são também aproximados, é interessante fazer uma análise qualitativa entre os melhores resultados. Desta forma o procedimento, seja com redes neurais ou polinômios permite listar um elenco de resultados equivalentes.

Na Tabela 5.4, pode-se visualizar o resultado obtido no melhor ponto do modelo de redes neurais.

Tabela 5.4 – Melhor resultado obtido pelo modelo de redes neurais	
Variáveis	Modelo RN*
Custo total (\$/ano)	3.370.436,91
Custo do Separador de óleo (\$/ano)	126.195,70
Custo do stripper (\$/ano)	761.057,20
Custo da unidade de purificação (\$/ano)	576.397,34
Custo UTEP (\$/ano)	673.882,00
Custo UTES (\$/ano)	1.133.280,00
Custo Torre de resfriamento (\$/ano)	99.624,67
y_{SR}	1
y_{SD}	0
y_{IE}	1
y_{AQ}	0
y^{film}	1
y^{splash}	0
$y^{trickle}$	0

* RN – Redes neurais

Pode-se notar que a maior participação do custo total é dada pelo descarte de efluente, que representa 53,62% do custo total do processo, enquanto que, o *stripper* de vapor representa 22,59%, a unidade de purificação 17,10%, o separador de óleo API 3,74%, e a torre de resfriamento 2,95%.

Com relação às decisões de construção dos equipamentos, no processo de *stripper* foi escolhida a configuração da coluna com *reboiler*, com um trocador de calor para a integração de energia (entre a corrente de entrada e saída do processo de *stripper*). Já para a torre de resfriamento, o recheio escolhido foi do tipo Filme.

Após análise, os resultados do modelo de redes neurais foram comparados aos fornecidos pelo modelo fenomenológico, alimentado com as variáveis de entrada e de construção obtidas pela otimização do problema. Esses resultados são apresentados na Tabela 5.5.

Tabela 5.5 – Diferença absoluta entre modelos reduzidos e os modelos fenomenológicos

	Variáveis de saída	RN*	FN**	Diferença absoluta
<i>Stripper</i>	Vazão de saída (m ³ /h)	196,57	196,50	- 0,07
	Concentração H ₂ S na saída (ppm)	11,30	7,00	- 4,3
	Concentração NH ₃ na saída (ppm)	59,65	51,00	- 8,65
	Concentração ORG na saída (ppm)	1,16	0,00	- 1,16
	Concentração NaCl na saída (ppm)	705,40	718,00	12,6
	TAC (U\$/ano)	682.600,00	704.824,54	22.224,54
Torre de Resfriamento	Variação entre vazão de entrada e saída (m ³ /h)	16,87	17,30	0,43
	Variação de temperatura (°C)	10,23	10,36	0,13
	TAC (U\$/ano)	99.624,67	106.122,24	6.497,57

* RN - Redes Neurais

** FN – Fenomenológico

É possível observar uma pequena diferença nos custos, do modelo de redes neurais em relação ao modelo fenomenológico, erro igual a 0,85% do custo total do sistema de tratamento, além disso, o modelo de redes neurais do *stripper* apresentou valores da concentração de saída (para H₂S, NH₃ e orgânicos) ligeiramente maiores aos obtidos pelo modelo fenomenológico, o que proporciona uma margem de segurança para a construção do equipamento real.

As diferenças apresentadas entre o modelo de redes neurais e o modelo fenomenológico da torre de resfriamento, da mesma forma, mostraram-se pequenas.

As Figuras 5.5 e 5.6 ilustram o resultado final obtido pelo modelo de redes neurais, respectivamente para estrutura primária e secundária.

Figura 5.5 – Resultado da síntese com o modelo de redes neurais

Figura 5.6 – Resultado da síntese com o modelo de redes neurais

A Tabela – 5.6 mostra os resultados do melhor ótimo obtido pelo modelo polinomial.

Tabela 5.6 – Melhor resultado obtido pelo modelo polinomial	
Variáveis	Modelo PL*
Custo total (\$/ano)	3.368.127,80
Custo do Separador de óleo (\$/ano)	157.367,62
Custo do stripper (\$/ano)	302.506,04
Custo da unidade de purificação (\$/ano)	576.397,33
Custo UTEP (\$/ano)	1.062.260,26
Custo UTES (\$/ano)	1.133.280,00
Custo Torre de resfriamento (\$/ano)	136.316,53
y_{SR}	0
y_{SD}	1
y_{IE}	1
y_{AQ}	0
y^{film}	1
y^{splash}	0
$y^{trickle}$	0

* PL – Polinomial

Assim como no resultado obtido pelo modelo de redes neurais, a maior participação do custo total do modelo polinomial é dada pelo descarte de efluente, que representa 65,19% do custo total do processo, enquanto que, a unidade de purificação 17,11%, o *stripper* de vapor representa 8.98%, o separador de óleo API 4,67%, e a torre de resfriamento 4,05%. Neste caso podemos notar a inversão entre a participação dos custos do *stripper* e da unidade de purificação, comparado ao resultado obtido pelo modelo de redes neurais.

Com relação às decisões de construção dos equipamentos, no processo de *stripper* foi escolhida a configuração da coluna com injeção de vapor direto, com um trocador de calor para a integração de energia (entre a corrente de entrada e saída do processo de *stripper*), estrutura diferente do ótimo apresentado pelo modelo de redes neurais. Já para a torre de resfriamento, o recheio escolhido foi do tipo Filme.

Os resultados obtidos pelo modelo polinomial também foram comparado ao do modelo fenomenológico, esta comparação está resumida na Tabela 5.7.

Tabela 5.7 – Diferença absoluta entre modelos reduzidos e os modelos fenomenológicos

	Variáveis de saída	PL *	FN **	Diferença absoluta
<i>Stripper</i>	Vazão de saída (m ³ /h)	85,18	85,12	-0,06
	Concentração H ₂ S na saída (ppm)	10,14	15,00	4,86
	Concentração NH ₃ na saída (ppm)	86,98	92,00	5,02
	Concentração ORG na saída (ppm)	0,13	0,00	-0,13
	Concentração NaCl na saída (ppm)	1285,23	1233,00	-52,23
	TAC (U\$/ano)	285.863,51	280.880,00	-4983,51
Torre de Resfriamento	Variação entre vazão de entrada e saída (m ³ /h)	17,16	18,17	1,01
	Variação de temperatura (°C)	9,97	9,90	-0,07
	TAC (U\$/ano)	136.320,00	150.608,15	14288,15

* PL – Polinomial

** FN – Fenomenológico

É possível observar uma pequena diferença nos custos, do modelo de redes neurais em relação ao modelo fenomenológico, erro igual a 0,57% do custo total do sistema de tratamento, foram encontradas também pequenas diferenças para as concentrações de saída, vazão de efluente e parâmetros da torre de resfriamento, semelhantemente aos resultados da comparação anterior, entre o modelo de redes neurais e fenomenológico.

As Figuras 5.7 e 5.8 ilustram o resultado final obtido pelo modelo polinomial, respectivamente para estrutura primária e secundária.

Figura 5.7 – Resultado da síntese com o modelo polinomial

Figura 5.8 – Resultado da síntese com o modelo polinomial

6. CONCLUSÕES

Esta dissertação teve como objetivo a criação de modelos reduzidos capazes de simular o comportamento de equipamentos, que possuem modelos fenomenológicos complexos e demandam grande tempo computacional, de maneira a deixar tratável, a síntese mais realista deste tipo de processo através da otimização de superestruturas.

No capítulo 3, foram desenvolvidos dois modelos reduzidos para uma torre de resfriamento, o polinomial e o de redes neurais. Os modelos propostos (tipo caixa preta), foram capazes de correlacionar bem o conjunto de dados fornecido pelas simulações do modelo semi-fenomenológico deste equipamento.

Já no capítulo 4, foram formulados os modelos para o processo de *stripper* de vapor. Neste caso, para que o modelo reduzido pudesse correlacionar adequadamente o conjunto de dados fornecido pelo modelo fenomenológico da coluna do *stripper*, foi proposta a utilização de um modelo simples, mas com fundamentação teórica, que é chamado de caixa cinza, o que possibilitou a correlação apropriada do conjunto de pontos fornecido pelo modelo fenomenológico, graças à introdução de uma variável auxiliar (fator de *stripper*).

A utilização de modelos reduzidos tipo caixa cinza é uma contribuição importante, já que, ele permite aumentar a aplicabilidade da técnica a fenômenos mais complexos, que dificilmente seriam representados por modelos caixa preta tradicionais, como é caso do *stripper* apresentado neste estudo, que além de possuir fenômenos termodinâmicos difíceis de representar (como o equilíbrio líquido-vapor com eletrólitos), é um sistema diluído com concentrações em ppm (10^{-6} kg/kg), necessitando de modelos com erros ainda menores para representação condizente do sistema, o que foi alcançado com a ajuda dos modelos reduzidos tipo caixa cinza, utilizados no presente trabalho.

No capítulo 5, os modelos construídos nos capítulos 3 e 4, foram aplicados a um estudo de caso. O problema foi representado por dois sistemas de equações diferentes, um com modelos polinomiais e outro com modelos de redes neurais, ambos levaram a resultados semelhantes com relação ao tempo computacional ($CPU\ time < 7,08\ s$) e ao número de pontos convergidos. As otimizações

apresentaram diversos ótimos locais diferentes, sendo que as diferenças no valor da função objetivo foram pequenas.

Por meio da comparação do melhor ótimo, obtido por cada modelo, é possível concluir que os modelos (polinomial e redes neurais) não são idênticos, mas levam a resultados equivalentes. Além disso, devido ao fato do problema conter mínimos locais próximos com relação ao valor da função objetivo, porém em regiões diferentes do espaço possível, os pequenos erros inclusos em cada modelo afetam a escolha do melhor mínimo.

A característica da função problema (possuir vários mínimos praticamente equivalentes com relação ao valor da função objetivo) leva a discussão sobre a escolha da melhor configuração do sistema. Como a diferença entre os melhores ótimos obtidos são mínimas é essencial uma análise qualitativa para a comparação destes resultados, pois a possível obtenção do ótimo global matemático não garantiria a obtenção da melhor configuração, devido aos erros das funções de custos que encontramos na literatura, em torno de 20%.

Desta forma esta técnica deve ser encarada como ferramenta pelos engenheiros de processo e não um método que lhe determinem definitivamente a maneira ideal como deve ser construído um processo, sendo importante a sua utilização com cautela, ou seja, levando-se em consideração os múltiplos ótimos presentes no problema.

Com relação a trabalhos futuros, é recomendável que todos os modelos dentro da superestrutura para síntese, sejam substituídos pelos modelos reduzidos, se necessário, utilizando os tipos caixa cinza, como o formulado neste trabalho para o *stripper* de vapor (o que aumenta a capacidade de correlação do modelo), possibilitando a obtenção de resultados ainda mais confiáveis, pois seriam obtidos por modelos mais representativos dos sistemas reais.

A síntese e otimização de processos baseada em superestrutura é uma ferramenta importante para economia de recursos e preservação do meio ambiente. A melhoria desta técnica pela utilização de modelos reduzidos permite tratar problemas mais representativos, tornando-se uma ferramenta ainda mais valiosa para a o projeto de sistemas de tratamento. Desta maneira, a nova proposta de modelos reduzidos tipo caixa cinza, possibilita a representação de fenômenos mais complexos, viabilizando a utilização de modelos reduzidos na representação de

equipamentos, que antes eram tratados apenas como modelos muito simples, baseados em rendimentos constantes.

BIBLIOGRAFIA

- AHMETOVIĆ, E.; GROSSMANN, I. E. Global superstructure optimization for the design of integrated process water networks. **AIChE Journal**, p. n/a-n/a, 2010.
- ALVAARGAEZ, A; KOKOSSIS, A. C.; SMITH, R. Wastewater minimisation of industrial systems using an integrated approach. **Computers & Chemical Engineering**, v. 22, p. S741-S744, 1998.
- BAGAJEWICZ, M. A review of recent design procedures for water networks in refineries and process plants*1. **Computers & Chemical Engineering**, v. 24, n. 9-10, p. 2093-2113, 2000.
- BERGAMINI, M.; AGUIRRE, P.; GROSSMANN, I. E. Logic-based outer approximation for globally optimal synthesis of process networks. **Computers & Chemical Engineering**, v. 29, n. 9, p. 1914-1933, 2005.
- BERGAMINI, M.; GROSSMANN, I. E.; SCENNA, N.; AGUIRRE, P. An improved piecewise outer-approximation algorithm for the global optimization of MINLP models involving concave and bilinear terms. **Computers & Chemical Engineering**, v. 32, n. 3, p. 477-493, mar 2008.
- Beychok, M.R. **Aqueous wastes from petroleum and petrochemical plants**, John Wiley & Sons, London, United Kingdom, 1967.
- BOGATAJ, M.; BAGAJEWICZ, M. J. Synthesis of non-isothermal heat integrated water networks in chemical processes. **Computers & Chemical Engineering**, v. 32, n. 12, p. 3130-3142, 2008.
- BRITO J. F. B. Considerações sobre psicrometria. **Sociedade Brasileira de Controle de Contaminação**, v. 45, p. 34-41, 2010.
- CABALLERO, J. A.; GROSSMANN, I. E. An algorithm for the use of surrogate models in modular flowsheet optimization. **AIChE Journal**, v. 54, n. 10, p. 2633-2650, 2008.
- CHANG, C.-T.; LI, B.-H. Improved Optimization Strategies for Generating Practical Water-Usage and -Treatment Network Structures. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 44, n. 10, p. 3607-3618, 2005.
- CHANG, C.-T.; LI, B.-H.; LIOU, C.-W. Development of a Generalized Mixed Integer Nonlinear Programming Model for Assessing and Improving the Operational Flexibility of Water Network Designs. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 48, n. 7, p. 3496-3504, 2009.
- COUCKUYT, I.; GORISSEN, D.; ROUHANI, H.; LAERMANS, E.; DHAENE, T. Evolutionary regression modeling with active learning: An application to rainfall runoff modeling. In: *INTERNATIONAL CONFERENCE ON ADAPTIVE AND NATURAL COMPUTING ALGORITHMS*, set. 2009, Berlin Heidelberg, v. LNCS 5495, p. 548-558.
- DHOLE, V. R.; RAMCHANDANI, N.; TAINSH, R. A.; WASILEWSKI, MAREK. Make your process water pay for itself. **Chemical Engineering**, v. 103, n. 1, p. 4, 1996.

DONG, H.; LIN, C.; CHANG, C. Simultaneous optimization approach for integrated water-allocation and heat-exchange networks. **Chemical Engineering Science**, v. 63, n. 14, p. 3664-3678, 2008.

DOYLE, S.; SMITH, R. Targeting Water Reuse with Multiple Contaminants. **Process Safety and Environmental Protection**, v. 75, n. 3, p. 181-189, 1997.

ESBENSEN, K. H.; GUYOT, D.; WESTAD, F.; HOUMOLLER, L. P. Multivariate data analysis - In practice 5th edition. Norway: Camo, 2006. 598 pg.

FARIA, D. C.; BAGAJEWICZ, M. J. Novel bound contraction procedure for global optimization of bilinear MINLP problems with applications to water management problems. **Computers & Chemical Engineering**, v. 35, n. 3, p. 446-455, 2011.

GABRIEL, F. B.; EL-HALWAGI, M. M. Simultaneous synthesis of waste interception and material reuse networks: Problem reformulation for global optimization. **Environmental Progress**, v. 24, n. 2, p. 171-180, 2005.

GALAN, B.; GROSSMANN, I. E. Optimal Design of Distributed Wastewater Treatment Networks. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 37, n. 10, p. 4036-4048, 1998.

GAREY, M.R.; JOHNSON, D.S. **Computers and Intractability – A Guide to the Theory of NP-Completeness**. New York: W.H. Freeman and Company, 1979.

GIROSI, F.; POGGIO, T. **Networks and the best approximation property. Biological Cybernetics**, v. 63, p. 169-176, jul 1990.

GORISSEN, D.; COUCKUYT, I.; LAERMANS, E.; DHAENE, T. Multiobjective global surrogate modeling, dealing with the 5-percent problem. **Engineering with Computers**, v. 26, p. 81-98, ago 2009.

GORISSEN, D.; DHAENE, T.; DEMEESTER, P.; BROECKHOVE, J. **Handbook of Research on Grid Technologies and Utility Computing: Concepts for Managing Large-Scale Applications**, chapter Grid enabled surrogate modeling. New York: Idea Group Inc (IGI), 2009: 249–258

GREEN, D.W.; PERRY, R. H. et al. **Perry's Chemical Engineers' Handbook**, 8e. McGraw-Hill, New York, USA, 2008.

GUERRA, O. J.; ROUX, G. A. C. LE. Improvements in Petroleum Refinery Planning: 1. Formulation of Process Models. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, p. 110817105801013, ago 2011.

HENAO, C. A.; MARAVELIAS, C. T. Surrogate-based superstructure optimization framework. **AIChE Journal**, v. 57, n. 5, p. 1216-1232, maio 2011.

HERNANDEZ, R.; CASTELLANOS, J.; ZAMORA, J. Superstructure decomposition and parametric optimization approach for the synthesis of distributed wastewater treatment networks. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 43, n. 9, 2004.

HUANG, C.-H.; CHANG, C.-T.; LING, H.-C.; CHANG. A Mathematical Programming Model for Water Usage and Treatment Network Design. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 38, n. 7, p. 2666-2679, 1999.

HWANG, Y. L.; KELLER, G. E.; OLSON, J. D. Steam stripping for removal of organic pollutants from water. 1. Stripping effectiveness and stripper design. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 31, n. 7, p. 1753-1759, 1992.

JANSSON T.; ANDERSSON A. e NILSON L. **Optimization of draw-in for an automotive sheet metal part, an evaluation using surrogate models and response surfaces**, Journal of Materials Processing Technology, v. 159, nº 3 (fevereiro, 2005): 426-434.

JEŻOWSKI, J. Review of Water Network Design Methods with Literature Annotations. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 49, n. 10, p. 4475-4516, 2010.

Jones, D.R.; Schonlau, M.; Welch, W.J. Efficient global optimization of expensive black-box function, **Journal of Global Optimization** 13, nº.4 (junho 1998): 455-492.

KARUPPIAH, R.; GROSSMANN, I. E. Global optimization for the synthesis of integrated water systems in chemical processes. **Computers & Chemical Engineering**, v. 30, n. 4, p. 650-673, 2006.

KEMMER, F.N. **The NALCO Water Handbook**. McGraw-Hill, New York, USA, 1988.

KERN, D.Q. **Processos de transferência de calor**, Guanabara, Rio de Janeiro, 1987.

KIM, J. Design of cooling systems for effluent temperature reduction. **Chemical Engineering Science**, v. 56, n. 5, p. 1811-1830, 2001.

KIM, J.; KIM, J.; KIM, J.; YOO, C.; MOON, I. A simultaneous optimization approach for the design of wastewater and heat exchange networks based on cost estimation. **Journal of Cleaner Production**, v. 17, n. 2, p. 162-171, jan 2009.

KLOPPERS, J. C.; KRÖGER, D. G. Loss coefficient correlation for wet-cooling tower fills. **Applied Thermal Engineering**, v. 23, n. 17, p. 2201-2211, 2003.

KLOPPERS, J. C.; KRÖGER, D. G. Refinement of the Transfer Characteristic Correlation of Wet-Cooling Tower Fills. **Heat Transfer Engineering**, v. 26, n. 4, p. 35-41, 2005.

KOVÁCS, Z.L. **Redes neurais artificiais: fundamentos e aplicações**, São Paulo: Editora Livraria da Física, 1996.

KUO, W.; SMITH, R. Effluent treatment system design. **Chemical Engineering Science**, v. 52, n. 23, p. 4273-4290, 1997.

KUO, W.; SMITH, R. Designing for the Interactions Between Water-Use and Effluent Treatment. **Chemical Engineering Research and Design**, v. 76, n. 3, p. 287-301, 1998a.

KUO, W.; SMITH, R. Design of Water-Using Systems Involving Regeneration. **Process Safety and Environmental Protection**, v. 76, n. 2, p. 94-114, 1998b.

LEE, S. ; GROSSMANN, I. E. A global optimization algorithm for nonconvex generalized disjunctive programming and applications to process systems. **Computers & Chemical Engineering**, v. 25, n. 11-12, p. 1675-1697, 2001.

LEE, S. ; GROSSMANN, I. E. Global optimization of nonlinear generalized disjunctive programming with bilinear equality constraints: applications to process networks. **Computers & Chemical Engineering**, v. 27, n. 11, p. 1557-1575, 2003.

LEE, S. Y.; LEE, J. M.; LEE, D.; LEE I. Improvement in Steam Stripping of Sour Water through an Industrial-Scale Simulation. **Korean Journal of Chemical Engineering**. v. 21, n. 3, p. 549-555, 2003.

- LI, B.-H.; CHANG, C.-T. A Simple and Efficient Initialization Strategy for Optimizing Water-Using Network Designs. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 46, n. 25, p. 8781-8786, 2007.
- LIN, Y.; KATE, A. TEN; MOOIJER, M. *et al.* Comparison of activity coefficient models for electrolyte systems. **AIChE Journal**, p. n/a-n/a, 2009.
- MARIANO, J. B. **Impactos ambientais do refino de petróleo**. 2001. 279p. Dissertação (Mestrado) - COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, 2005
- MEYER, C. A.; FLOUDAS, C. A. Global optimization of a combinatorially complex generalized pooling problem. **AIChE Journal**, v. 52, n. 3, p. 1027-1037, 2006.
- MOHIUDDIN, A.; KANT. K. Base de connaissances pour la conception methodique des tours de refroidissement. Premiere partie: Sélection et caractéristiques des tours. **International Journal of Refrigeration**, v. 19, n. 1, p. 43-51, 1996a.
- MOHIUDDIN, A. ; KANT. K. Base de connaissances pour la conception systematique de tours de refroidissement humides Deuxieme partie: parametres de garnissage et autres parametres de conception. **International Journal of Refrigeration**, v. 19, n. 1, p. 52-60, 1996b.
- MÜLLER, J.; PICHÉ, R. Mixture surrogate models based on Dempster-Shafer theory for global optimization problems. **Journal of Global Optimization**, v. 51, p. 79-104, out 2010.
- ONU. Statistics: Graphs&Maps disponível. em: <http://www.unwater.org/statistics.html>. Acesso em: 29 de setembro de 2011
- PETERS, M.S. *et al.* **Plant design and economics for chemical engineers**. 5e. McGraw-Hill, New York, USA, 2003.
- RUBIO-CASTRO, E.; SERNA-GONZÁLEZ, M.; PONCE-ORTEGA, J. M. Optimal design of effluent-cooling systems using a mathematical programming model. **Applied Thermal Engineering**, v. 30, n. 14-15, p. 2116-2126, 2010.
- TAKAMA, N.; KURIYAMA. T.; SHIROKO. K.; UMEDA. T. Optimal water allocation in a petroleum refinery. **Computers & Chemical Engineering**, v. 4, n. 4, p. 251-258, 1980.
- TELES, J. P.; CASTRO, P. M.; NOVAIS, A. Q. LP-based solution strategies for the optimal design of industrial water networks with multiple contaminants. **Chemical Engineering Science**, v. 63, n. 2, p. 376-394, 2008.
- TELES, J. P.; CASTRO, P. M.; NOVAIS, A. Q. MILP-based initialization strategies for the optimal design of water-using networks. **Chemical Engineering Science**, v. 64, n. 17, p. 3736-3752, 2009.
- WANG, Y. P.; SMITH, R. Wastewater minimisation. **Chemical Engineering Science**, v. 49, n. 7, p. 981-1006, 1994a.
- WANG, Y.-P.; SMITH, ROBIN. Design of distributed effluent treatment systems. **Chemical Engineering Science**, v. 49, n. 18, p. 3127-3145, 1994b.
- YEE, T. F.; GROSSMANN, I.E.; KRAVANJA, Z. Simultaneous optimization models for heat integration—I. Area and energy targeting and modeling of multi-stream exchangers. **Computers & Chemical Engineering**, v. 14, n. 10, p. 1151-1164, out 1990.

YU, K.; YANG, X.; YUE, Z. Aerodynamic and heat transfer design optimization of internally cooling turbine blade based different surrogate models. **Structural and Multidisciplinary Optimization**, v. 44, n. 1, p. 75-83, out 2010.

ZHU T.; FRANZON P. D. Application of surrogate modeling to generate compact and PVT-sensitive IBIS models. In Proceedings of the 18th Conference on Electrical Performance of Electronic Packaging and Systems (EPEPS), outubro 2009.

ZYGULA, T. M. Designing steam stripping columns for wastewater. **Periódico**, v. 115, n. 5, p. 52-57, maio 2008.

APÊNDICE A

Gráficos de erro em função do número de termos para a escolha do modelo polinomial reduzido da torre de resfriamento.

Figura A.1 – Gráfico de erro em função do número de termos da função polinomial, variável TAC^{film}

Figura A.2 – Gráfico de erro em função do número de termos da função polinomial, variável dT^{film}

Figura A.3 – Gráfico de erro em função do número de termos da função polinomial, variável $Floss^{film}$

Figura A.4 – Gráfico de erro em função do número de termos da função polinomial, variável TAC^{splash}

Figura A.5 – Gráfico de erro em função do número de termos da função polinomial, variável dT^{splash}

Figura A.6 – Gráfico de erro em função do número de termos da função polinomial, variável $Floss^{splash}$

Figura A.7 – Gráfico de erro em função do número de termos da função polinomial, variável $TAC^{trickle}$

Figura A.8 – Gráfico de erro em função do número de termos da função polinomial, variável $dT^{trickle}$

Figura A.9 – Gráfico de erro em função do número de termos da função polinomial, variável $Floss^{trickle}$

APÊNDICE B

Termos escolhidos para o modelo polinomial reduzido da torre de resfriamento e parâmetros correlacionados.

Tabela B.1 – Parâmetros e termos da identificação do TAC_{AS}^{film}

$TAC_{AS}^{film} = \theta_{TAC}^{filmT} \cdot Reg_{TAC}^{film}$	
Reg_{TAC}^{film}	θ_{TAC}^{film}
y^{film}	-0,0172
Lfi_{AS}^{film}	0,2659
Fa_{AS}^{film}	0,9710
$Fw_{inAS}^{film^2}$	0,4710
$Fa_{AS}^{film^2}$	0,2294
$Fa_{AS}^{film^3}$	-0,1109
$Fw_{inAS}^{film} \cdot Fa_{AS}^{film}$	-0,1353
$Afr_{AS}^{film} \cdot Fa_{AS}^{film}$	-0,1619
$Lfi_{AS}^{film} \cdot Fa_{AS}^{film}$	0,5013

Tabela B.2 – Parâmetros e termos da identificação do TAC_{AS}^{splash}

$TAC_{AS}^{splash} = \theta_{TAC}^{splashT} \cdot Reg_{TAC}^{splash}$	
Reg_{TAC}^{splash}	θ_{TAC}^{splash}
y^{splash}	-0,0460
Fw_{inAS}^{splash}	0,1236
Afr_{AS}^{splash}	-0,1175
Lfi_{AS}^{splash}	0,4472
Fa_{AS}^{splash}	0,8964
$Afr_{AS}^{splash^2}$	0,5151
$Lfi_{AS}^{splash^2}$	0,1351
$Fa_{AS}^{splash^2}$	0,7650
$Fw_{inAS}^{splash} \cdot Afr_{AS}^{splash}$	-0,148
$Fw_{inAS}^{splash} \cdot Lfi_{AS}^{splash}$	0,1075
$Fw_{inAS}^{splash} \cdot Fa_{AS}^{splash}$	0,2583
$Afr_{AS}^{splash} \cdot Lfi_{AS}^{splash}$	0,0489
$Afr_{AS}^{splash} \cdot Fa_{AS}^{splash}$	-1,3680
$Lfi_{AS}^{splash} \cdot Fa_{AS}^{splash}$	0,5925
$Afr_{AS}^{splash^2} \cdot Tw_{inAS}^{splash}$	0,2452
$Lfi_{AS}^{splash^2} \cdot Fa_{AS}^{splash}$	0,2930
$Afr_{AS}^{splash} \cdot Lfi_{AS}^{splash} \cdot Fa_{AS}^{splash}$	-0,4475

Tabela B.3– Parâmetros e termos da identificação do $TAC_{AS}^{trickle}$

$TAC_{AS}^{trickle} = \theta_{TAC}^{trickle^T} \cdot Reg_{TAC}^{trickle}$	
$Reg_{TAC}^{trickle}$	$\theta_{TAC}^{trickle}$
$y^{trickle}$	0,1715
$FW_{inAS}^{trickle}$	0,0283
$Lfi_{AS}^{trickle}$	0,3030
$Fa_{AS}^{trickle}$	0,6032
$Lfi_{AS}^{trickle^2}$	0,1582
$Lfi_{AS}^{trickle} \cdot Fa_{AS}^{trickle}$	0,5674
$Lfi_{AS}^{trickle^2} \cdot Afr_{AS}^{trickle}$	-0,2272
$Lfi_{AS}^{trickle^2} \cdot Fa_{AS}^{trickle}$	0,5500
$Fa_{AS}^{trickle^2} \cdot Tw_{inAS}^{trickle}$	0,5957
$Tw_{inAS}^{trickle} \cdot Afr_{AS}^{trickle} \cdot Fa_{AS}^{trickle}$	-0,5054

Tabela B.4 – Parâmetros e termos da identificação do $dT_{AS}^{trickle}$

$dT_{AS}^{trickle} = \theta_{dT}^{trickle^T} \cdot Reg_{dT}^{trickle}$	
$Reg_{dT}^{trickle}$	$\theta_{dT}^{trickle}$
$y^{trickle}$	-0,0089
$FW_{inAS}^{trickle}$	-0,4170
$Tw_{inAS}^{trickle}$	0,7070
$Lfi_{AS}^{trickle}$	0,2121
$Fa_{AS}^{trickle}$	0,2660
$FW_{inAS}^{trickle^2}$	0,4485
$Tw_{inAS}^{trickle^2}$	0,0997
$Lfi_{AS}^{trickle^2}$	-0,9720
$Fa_{AS}^{trickle^2}$	-0,6048
$Lfi_{AS}^{trickle^3}$	0,2560
$Fa_{AS}^{trickle^3}$	1,924
$FW_{inAS}^{trickle} \cdot Tw_{inAS}^{trickle}$	-0,3539
$Tw_{inAS}^{trickle} \cdot Lfi_{AS}^{trickle}$	0,3180
$Tw_{inAS}^{trickle} \cdot Fa_{AS}^{trickle}$	0,6973
$Lfi_{AS}^{trickle^2} \cdot Tw_{inAS}^{trickle}$	-0,3518

Tabela B.5 – Parâmetros e termos da identificação do dT_{AS}^{splash}

$$dT_{AS}^{splash} = \theta_{dT}^{splash^T} \cdot Reg_{dT}^{splash}$$

Reg_{dT}^{splash}	θ_{dT}^{splash}
y^{splash}	-0,0487
FW_{inAS}^{splash}	0,3645
TW_{inAS}^{splash}	0,6043
Lfi_{AS}^{splash}	0,5846
Fa_{AS}^{splash}	0,2368
$FW_{inAS}^{splash^2}$	0,3417
$Lfi_{AS}^{splash^2}$	-0,2310
$Fa_{AS}^{splash^3}$	2,8279
$FW_{inAS}^{splash} \cdot Lfi_{AS}^{splash}$	0,3560
$TW_{inAS}^{splash} \cdot Lfi_{AS}^{splash}$	0,4392
$Lfi_{AS}^{splash} \cdot Fa_{AS}^{splash}$	0,3610
$TW_{inAS}^{splash^2} \cdot Fa_{AS}^{splash}$	-0,4285
$Lfi_{AS}^{splash^2} \cdot TW_{inAS}^{splash}$	-0,3667
$Fa_{AS}^{splash^2} \cdot TW_{inAS}^{splash}$	-1,6273
$Fa_{AS}^{splash^2} \cdot Lfi_{AS}^{splash}$	-1,1285
$FW_{inAS}^{splash} \cdot TW_{inAS}^{splash} \cdot Fa_{AS}^{splash}$	0,0508

Tabela B.6 – Parâmetros e termos da identificação do dT_{AS}^{film}

$$dT_{AS}^{film} = \theta_{dT}^{film^T} \cdot Reg_{dT}^{film}$$

Reg_{dT}^{film}	θ_{dT}^{film}
FW_{inAS}^{film}	-0,4472
TW_{inAS}^{film}	0,0224
Lfi_{AS}^{film}	-0,2411
Fa_{AS}^{film}	0,2326
$FW_{inAS}^{film^2}$	0,7171
$Fa_{AS}^{film^2}$	-0,7067
$FW_{inAS}^{film^3}$	-0,7900
$Fa_{AS}^{film^3}$	2,6971
$FW_{inAS}^{film} \cdot TW_{inAS}^{film}$	-1,0326
$FW_{inAS}^{film} \cdot Lfi_{AS}^{film}$	-0,1521
$TW_{inAS}^{film} \cdot Lfi_{AS}^{film}$	0,1602
$TW_{inAS}^{film} \cdot Fa_{AS}^{film}$	1,1569
$Lfi_{AS}^{film} \cdot Fa_{AS}^{film}$	0,3452
$FW_{inAS}^{film^2} \cdot TW_{inAS}^{film}$	0,8069
$TW_{inAS}^{film^2} \cdot FW_{inAS}^{film}$	0,4658
$TW_{inAS}^{film^2} \cdot Afr_{AS}^{film}$	-0,6885
$Afr_{AS}^{film^2} \cdot Fa_{AS}^{film}$	-1,5836
$Lfi_{AS}^{film^2} \cdot Fa_{AS}^{film}$	0,366
$FW_{inAS}^{film} \cdot TW_{inAS}^{film} \cdot Fa_{AS}^{film}$	-1,9500
$FW_{inAS}^{film} \cdot Afr_{AS}^{film} \cdot Fa_{AS}^{film}$	2,1813

Tabela B.7 – Parâmetros e termos da identificação do $Floss_{AS}^{splash}$

$Floss_{AS}^{splash} = \theta_{Floss}^{splash^T} \cdot Reg_{Floss}^{splash}$	
Reg_{Floss}^{splash}	θ_{Floss}^{splash}
y^{splash}	-0,1213
FW_{inAS}^{splash}	0,2187
Tw_{inAS}^{splash}	0,3450
Lfi_{AS}^{splash}	0,3372
Fa_{AS}^{splash}	0,5027
$FW_{inAS}^{splash} \cdot Tw_{inAS}^{splash}$	0,2090
$FW_{inAS}^{splash} \cdot Fa_{AS}^{splash}$	-0,0190
$Tw_{inAS}^{splash} \cdot Lfi_{AS}^{splash}$	0,2591
$Tw_{inAS}^{splash} \cdot Fa_{AS}^{splash}$	0,3761
$Fa_{AS}^{splash^2} \cdot Lfi_{AS}^{splash}$	-1,3926
$FW_{inAS}^{splash} \cdot Tw_{inAS}^{splash} \cdot Lfi_{AS}^{spla.}$	0,3785

Tabela B.8 – Parâmetros e termos da identificação do $Floss_{AS}^{trickle}$

$Floss_{AS}^{trickle} = \theta_{Floss}^{trickle^T} \cdot Reg_{Floss}^{trickle}$	
$\theta_{Floss}^{trickle}$	$Reg_{Floss}^{trickle}$
$y^{trickle}$	-0,1405
$FW_{inAS}^{trickle}$	0,2333
$Tw_{inAS}^{trickle}$	0,3474
$Lfi_{AS}^{trickle}$	0,1383
$Fa_{AS}^{trickle}$	0,4413
$Lfi_{AS}^{trickle^2}$	0,1309
$FW_{inAS}^{trickle} \cdot Tw_{inAS}^{trickle}$	0,2742
$FW_{inAS}^{trickle} \cdot Lfi_{AS}^{trickle}$	0,2244
$Tw_{inAS}^{trickle} \cdot Lfi_{AS}^{trickle}$	0,0769
$Tw_{inAS}^{trickle} \cdot Fa_{AS}^{trickle}$	0,3505
$FW_{inAS}^{trickle} \cdot Tw_{inAS}^{trickle} \cdot Lfi_{AS}^{trickle}$	0,3082

Tabela B.9 – Parâmetros e termos da identificação do TAC_{AS}^{film}

$TAC_{AS}^{film} = \theta_{TAC}^{filmT} \cdot Reg_{TAC}^{film}$	
θ_{TAC}^{film}	Reg_{TAC}^{film}
γ^{film}	-0,0619
FW_{inAS}^{film}	0,2620
Tw_{inAS}^{film}	0,4573
Lfi_{AS}^{film}	0,1353
Fa_{AS}^{film}	0,4624
$Fa_{AS}^{film^2}$	-0,4041
$FW_{inAS}^{film} \cdot Tw_{inAS}^{film}$	0,3843
$FW_{inAS}^{film} \cdot Fa_{AS}^{film}$	0,2621
$Tw_{inAS}^{film} \cdot Afr_{AS}^{film}$	-0,1212
$Tw_{inAS}^{film} \cdot Lfi_{AS}^{film}$	0,0942
$Tw_{inAS}^{film} \cdot Fa_{AS}^{film}$	0,5528
$Afr_{AS}^{film} \cdot Lfi_{AS}^{film}$	0,2396

Tabela B.10 – Limites do conjunto de identificação da torre de resfriamento, preenchimento Film

Variável	<i>max</i>	<i>min</i>
Fin (kg/s)	599,3040	50,1041
Tin (°C)	49,9768	30,0058
Afr (m ²)	199,8223	9,3296
Lfi (m)	1,1957	0,3014
Fa (kg/s)	704,3880	13,6486
TAC (dolares/ano)	5,0158e5	1,91141e4
$Floss$ (kg/s)	15,6215	0,4523
dT (°C)	22,7555	1,5184

Tabela B.11 – Limites do conjunto de identificação da torre de resfriamento, preenchimento Splash

Variável	Max	Min
Fin (kg/s)	599,7309	50,0216
Tin (°C)	49,9968	30,0352
$Afr(m^2)$	201,6879	9,4775
Lfi (m)	2,9988	0,3022
Fa (kg/s)	810,0327	12,1613
TAC (dolares/ano)	7,5604e5	2,2950e4
$Floss$ (kg/s)	13,9652	0,2130
dT (°C)	17,5287	0,5310

Tabela B.12 – Limites do conjunto de identificação da torre de resfriamento, preenchimento Splash

Variável	Max	Min
Fin (kg/s)	599,9898	50,0921
Tin (°C)	49,9783	30,0030
$Afr(m^2)$	198,9703	9,2759
Lfi (m)	1,5291	0,0900
Fa (kg/s)	684,9342	15,4202
TAC (dolares/ano)	7,0746e5	2,1357e4
$Floss$ (kg/s)	17,1271	0,3360
dT (°C)	20,3663	1,3055

APÊNDICE C

Parâmetros do modelo de redes neurais para a torre de resfriamento.

Tabela C.1 – Parâmetros do modelo de redes neurais para a torre de resfriamento, TAC^{film}

IW_{TAC}^{film}	-0,06870	-0,02333	1,676375	-0,15068	-2,15294	
	2,651108	-0,38967	-2,09937	-0,97441	0,945586	
	-1,44499	-0,97015	-0,54176	0,710477	2,02653	
	0,028736	-0,03467	0,95751	0,373898	-0,37525	
	-0,01300	0,048521	-0,93444	-0,44870	1,104067	
	0,068564	-0,01979	1,245229	-0,09391	-0,02818	
$b2_{TAC}^{film}$	0,574807					
	2,17578					
	-0,21415					
	-0,54706					
	0,826425					
	1,271684					
LW_{TAC}^{film}	-0,57424	0,001548	-0,0122	1,671162	1,02151	0,281699
$b3_{TAC}^{film}$	0,085974					

Tabela C.2 – Parâmetros do modelo de redes neurais para a torre de resfriamento, dT^{film}

IW_{dT}^{film}	3,216517	-5,53633	4,945174	-8,59184	2,077892	
	-0,06114	-0,33966	-0,10735	-0,13107	0,977827	
	-0,16528	0,491062	-0,06882	0,102578	0,389199	
	-1,37012	0,400273	-0,40305	0,150868	0,633921	
	-4,35391	1,460711	-0,89233	4,278554	-0,94985	
	0,03337	-1,08936	0,20452	1,936836	0,24899	
$b2_{dT}^{film}$	-7,54649					
	3,832511					
	-0,1722					
	-1,81677					
	0,50038					
	2,090509					
LW_{dT}^{film}	-0,01456	3,039366	1,37465	1,153915	-0,00274	0,110099
$b3_{dT}^{film}$	-1,79043					

Tabela C.5 – Parâmetros do modelo de redes neurais para a torre de resfriamento, TAC^{splash}

IW_{TAC}^{splash}	-1,59672	1,439378	2,207149	0,68028	0,974867	
	0,03998	0,009077	0,023941	0,333253	0,318646	
	1,777886	-0,37369	0,043733	1,363015	0,099298	
	-0,48169	-0,2091	0,270675	0,645423	0,081116	
	0,00968	-0,01085	0,23133	-0,46383	0,438500	
	-0,80991	-1,37727	0,762596	-0,94542	-1,61330	
$b2_{TAC}^{splash}$	2,761457					
	-0,58950					
	-0,29743					
	0,464566					
	1,201883					
	-2,74437					
LW_{TAC}^{splash}	0,000719	2,462877	0,005847	0,042855	1,015773	-0,00544
$b3_{TAC}^{splash}$	0,349767					

Tabela C.6 – Parâmetros do modelo de redes neurais para a torre de resfriamento, $Floss^{splash}$

IW_{Floss}^{splash}	0,210654	0,26557	-0,05479	0,796681	0,230044
	-0,02666	0,255807	0,300347	-2,22205	0,419723
	-0,17318	-0,26674	0,042186	-0,57863	0,17883
	-0,02269	0,314468	0,01871	0,32920	-0,41381
$b2_{Floss}^{splash}$	-1,20275				
	0,336323				
	1,187282				
	-1,78226				
LW_{Floss}^{splash}	-7,12062	0,095922	-13,1066	-4,3688	
$b3_{Floss}^{splash}$	0,530579				

Tabela C.7 – Parâmetros do modelo de redes neurais para a torre de resfriamento, $TAC^{trickle}$

$IW_{TAC}^{trickle}$	-0,12285	-0,02732	1,264589	0,329362	-1,76911
	0,235955	0,015347	-1,51016	0,570621	0,666026
	-0,04604	-0,00177	0,251002	-0,28425	-0,41823
	1,116197	1,34194	0,351661	1,22309	0,457014
	-0,05881	-0,0117	0,358334	0,324224	-0,71973
$b2_{TAC}^{trickle}$	-1,20275				
	0,336323				
	1,187282				
	-1,78226				
$LW_{TAC}^{trickle}$	-7,162	0,095922	-13,1066	-4,36688	
$b3_{TAC}^{trickle}$	0,530579				

Tabela C.8 – Parâmetros do modelo de redes neurais para a torre de resfriamento, $dT^{trickle}$

$IW_{dT}^{trickle}$	0,059685	-0,3582	-0,06737	-0,17188	2,53602		
	101796	-0,22739	0,010962	-0,51506	0,1694		
	-0,05716	0,116204	-0,0104	0,852105	0,07473		
	-13,2654	11,80707	6,82727	-4,52829	-5,48979		
	8,174743	7,632297	-9,76828	9,168403	14,83835		
	-1,34293	0,4074	-0,05914	0,195981	0,25777		
	-13,3144	-5,08965	24,56152	-3,0617	2,852241		
$b2_{dT}^{trickle}$	3,585299						
	0,37753						
	-0,5134						
	6,69419						
	6,29461						
	-2,30074						
	-11,9523						
$LW_{dT}^{trickle}$	3,480823	-3,93762	-2,15432	-0,00184	-0,00432	2,935118	-0,02316
$b3_{dT}^{trickle}$	-0,20663						

Tabela C.9 – Parâmetros do modelo de redes neurais para a torre de resfriamento, $Floss^{trickle}$

$IW_{Floss}^{trickle}$	0,133297	0,436095	0,004005	0,106141	0,372915
	-0,61866	0,327783	0,094061	0,175085	0,695777
	0,076734	0,190364	0,016091	-0,53384	0,292708
	0,13449	0,043029	-0,01336	0,140054	0,02057
	-0,01495	-0,35352	0,02772	0,006067	0,649828
$b2_{Floss}^{trickle}$	0,705599				
	0,728161				
	0,436108				
	-0,00494				
	-0,50085				
$LW_{Floss}^{trickle}$	-1,80904	0,830913	1,344294	5,751901	-0,92373
$b3_{Floss}^{trickle}$	-0,63842				

APÊNDICE D

Gráficos de erro em função do número de termos para a escolha do modelo polinomial reduzido do *steam stripper*.

Figura D.1 – Gráfico de erro em função do número de termos da função polinomial, variável TAC_{SD}

Figura D.2 – Gráfico de erro em função do número de termos da função polinomial, variável dRF_{SD}

Figura D.3 – Gráfico de erro em função do número de termos da função polinomial, variável S_{SD}^{H2S}

Figura D.4 – Gráfico de erro em função do número de termos da função polinomial, variável S_{SD}^{NH3}

Figura D.5 – Gráfico de erro em função do número de termos da função polinomial, variável S_{SD}^{OIL}

Figura D.6 – Gráfico de erro em função do número de termos da função polinomial, variável dT_{SD}

Figura D.7 – Gráfico de erro em função do número de termos da função polinomial, variável TAC_{SR}

Figura D.8 – Gráfico de erro em função do número de termos da função polinomial, variável dRF_{SR}

Figura D.9– Gráfico de erro em função do número de termos da função polinomial, variável S_{SR}^{H2S}

Figura D.10 – Gráfico de erro em função do número de termos da função polinomial, variável S_{SR}^{NH3}

Figura D.11 – Gráfico de erro em função do número de termos da função polinomial, variável S_{SR}^{oil}

Figura D.12 – Gráfico de erro em função do número de termos da função polinomial, variável dT_{SR}

Figura D.13 – Gráfico de erro em função do número de termos da função polinomial, variável V/L_{SR}

APÊNDICE E

Termos escolhidos para o modelo polinomial reduzido do *steam stripper* e parâmetros correlacionados.

Tabela E.1 – Parâmetros e termos da identificação do TAC_{SDAS}

$TAC_{SDAS} = \theta_{TACSD}^T \cdot Reg_{TACSD}$	
Reg_{TACSD}	θ_{SDAS}
y_{SD}	-0,0069
Fin_{SDAS}	-0,03406
Tin_{SDAS}	0,023342
H_{SDAS}	0,018822
$Fvap_{SDAS}$	1,013584
RRM_{SDAS}	0,021304
$Pres_{SDAS}$	-0,01984
$Fin_{SDAS} \cdot Tin_{SDAS}$	0,043812
$Fin_{SDAS} \cdot Pres_{SDAS}$	-0,03651
$Fvap_{SDAS} * RRM_{SDAS}$	0,04536

Tabela E.2 – Parâmetros e termos da identificação do TAC_{SRAS}

$TAC_{SRAS} = \theta_{TACSR}^T \cdot Reg_{TACSR}$	
Reg_{TACSR}	θ_{SRAS}
y_{SR}	-0,00535
Fin_{SRAS}	-0,0235
Tin_{SRAS}	0,021715
H_{SRAS}	0,018691
$Fvap_{SRAS}$	1,00395
RRM_{SRAS}	0,013511
$Pres_{SRAS}$	-0,01786

Tabela E.3 – Parâmetros e termos da identificação do dRF_{SDAS}

$dRF_{SDAS} = \theta_{dRFSD}^T \cdot Reg_{dRFSD}$	
Reg_{dRFSD}	θ_{SDAS}
y_{SD}	0,031606
Zin_{SDAS}^{OIL}	-0,05325
Tin_{SDAS}	-0,25856
$\frac{Fvap_{SDAS}}{Fin_{SDAS}}$	0,531947
RRM_{SDAS}	0,173802
$Pres_{SDAS}$	0,187724
RRM_{SDAS}^2	-0,13017
$Tin_{SDAS} \cdot RRM_{SDAS}$	0,178393
$\frac{Fvap_{SDAS}}{Fin_{SDAS}} \cdot RRM_{SDAS}$	0,330215
$Pres_{SDAS} \cdot RRM_{SDAS}$	-0,1259
$RRM_{SDAS}^2 \cdot \frac{Fvap_{SDAS}}{Fin_{SDAS}}$	-0,19756

Tabela E.4 – Parâmetros e termos da identificação do dRF_{SRAS}

$dRF_{SRAS} = \theta_{dRF SR}^T \cdot Reg_{dRF SR}$	
$Reg_{dRF SR}$	θ_{SRAS}
y_{SR}	0,266552
Zin_{SRAS}^{OIL}	-0,06905
Tin_{SRAS}	-0,33664
$\frac{Fvap_{SRAS}}{Fin_{SRAS}}$	-0,54834
RRM_{SRAS}	0,173404
$Pres_{SRAS}$	0,219547
RRM_{SRAS}^2	0,15724
$Pres_{SRAS}^2$	-0,05524
$Tin_{SRAS} \cdot RRM_{SRAS}$	0,233426
$\frac{Fvap_{SRAS}}{Fin_{SRAS}} \cdot RRM_{SRAS}$	0,37807
$Pres_{SRAS} \cdot RRM_{SRAS}$	-0,15271

Tabela E.5 – Parâmetros e termos da identificação do $S_{SD\ AS}^{H2S}$

$S_{SD\ AS}^{H2S} = \theta_{S_{SD\ AS}^{H2S}}^T \cdot Reg_{S_{SD\ AS}^{H2S}}$	
$Reg_{S_{SD\ AS}^{H2S}}$	$\theta_{S_{SD\ AS}}$
y_{SD}	-0,39066
$H_{SD\ AS}$	0,086286
$HSdN_{SD\ AS}^2$	0,688207
$H_{SD\ AS}^2$	0,89818
$H_{SD\ AS}^3$	-3,05165
$Zin_{SD\ AS}^{H2S} \cdot \frac{Fvap_{SD\ AS}}{Fin_{SD\ AS}}$	0,030223
$HSdN_{SD\ AS} \cdot H_{SD\ AS}$	0,894151
$HSdN_{SD\ AS} \cdot \frac{Fvap_{SD\ AS}}{Fin_{SD\ AS}}$	-0,4116
$H_{SD\ AS} \cdot \frac{Fvap_{SD\ AS}}{Fin_{SD\ AS}}$	-0,17542
$Zin_{SD\ AS}^{H2S^2} \cdot HSdN_{SD\ AS}$	0,13231
$HSdN_{SD\ AS} \cdot H_{SD\ AS}^2$	1,970662
$H_{SD\ AS}^2 \cdot \frac{Fvap_{SD\ AS}}{Fin_{SD\ AS}}$	0,377812
$H_{SD\ AS}^2 \cdot Pres_{SD\ AS}$	-0,11467
$Zin_{SD\ AS}^{H2S} \cdot HSdN_{SD\ AS} \cdot H_{SD\ AS}$	0,077531
$HSdN_{SD\ AS}^4$	-2,85755
$H_{SD\ AS}^4$	0,703658
$HSdN_{SD\ AS}^3 \cdot H_{SD\ AS}$	-2,86125
$H_{SD\ AS}^3 \cdot HSdN_{SD\ AS}$	-5,98614
$Zin_{SD\ AS}^{H2S^2} \cdot Zin_{SD\ AS}^{NaCl} \cdot H_{SD\ AS}$	0,387226
$Zin_{SD\ AS}^{H2S^2} \cdot Tin_{SD\ AS} \cdot H_{SD\ AS}$	-0,49319
$HSdN_{SD\ AS}^2 \cdot H_{SD\ AS} \cdot Pres_{SD\ AS}$	0,151381
$H_{SD\ AS}^2 \cdot Zin_{SD\ AS}^{H2S} \cdot HSdN_{SD\ AS}$	-0,52731
$H_{SD\ AS}^2 \cdot Zin_{SD\ AS}^{NaCl} \cdot HSdN_{SD\ AS}$	0,24044
$H_{SD\ AS}^2 \cdot HSdN_{SD\ AS} \cdot Tin_{SD\ AS}$	-0,46072
$\frac{Fvap_{SD\ AS}}{Fin_{SD\ AS}} \cdot H_{SD\ AS} \cdot HSdN_{SD\ AS}$	0,291997

Tabela E.6 – Parâmetros e termos da identificação do $S_{SR\ AS}^{H2S}$

$S_{SR\ AS}^{H2S} = \theta_{S_{SR\ AS}^{H2S}}^T \cdot Reg_{S_{SR\ AS}^{H2S}}$	
$Reg_{S_{SR\ AS}^{H2S}}$	$\theta_{SR\ AS}$
y_{SR}	-0,38956
$Tin_{SR\ AS}$	0,026766
$H_{SR\ AS}$	0,047
$\frac{Fvap_{SR\ AS}}{Fin_{SR\ AS}}$	0,085805
$HSdN_{SR\ AS}^2$	0,613632
$H_{SR\ AS}^2$	0,762733
$H_{SR\ AS}^3$	-3,0025
$Zin_{SR\ AS}^{H2S} \cdot H_{SR\ AS}$	-0,03075
$HSdN_{SR\ AS} \cdot H_{SR\ AS}$	0,6921
$H_{SR\ AS} \cdot \frac{Fvap_{SR\ AS}}{Fin_{SR\ AS}}$	-0,13655
$Zin_{SR\ AS}^{H2S^2} \cdot HSdN_{SR\ AS}$	0,160322
$HSdN_{SR\ AS}^2 \cdot Zin_{SR\ AS}^{H2S}$	0,108898
$HSdN_{SR\ AS}^2 \cdot Pres_{SR\ AS}$	-0,05
$H_{SR\ AS}^2 \cdot Zin_{SR\ AS}^{H2S}$	0,20608
$H_{SR\ AS}^2 \cdot Zin_{SR\ AS}^{NaCl}$	-1,0364
$\left(\frac{Fvap_{SR\ AS}}{Fin_{SR\ AS}}\right)^2 \cdot H_{SR\ AS}$	-0,12656
$HSdN_{SR\ AS}^4$	-2,55435
$H_{SR\ AS}^4$	0,74935
$HSdN_{SR\ AS}^3 \cdot H_{SR\ AS}$	-0,49538
$Zin_{SR\ AS}^{NaCl^3} \cdot H_{SR\ AS}$	0,232499
$H_{SR\ AS}^3 \cdot HSdN_{SR\ AS}$	-5,91146
$HSdN_{SR\ AS}^2 \cdot H_{SR\ AS}^2$	-3,69455
$H_{SR\ AS}^2 \cdot Zin_{SR\ AS}^{H2S} \cdot HSdN_{SR\ AS}$	0,34468
$H_{SR\ AS}^2 \cdot Zin_{SR\ AS}^{NaCl} \cdot HSdN_{SR\ AS}$	-1,95413
$H_{SR\ AS}^2 \cdot \frac{Fvap_{SR\ AS}}{Fin_{SR\ AS}} \cdot HSdN_{SR\ AS}$	-0,53523
$RRM_{SR\ AS}^2 \cdot Tin_{SR\ AS} \cdot H_{SR\ AS}$	-0,4891

Tabela E.7 – Parâmetros e termos da identificação do $S_{SD\ AS}^{NH3}$

$S_{SD\ AS}^{NH3} = \theta_{S_{SD\ AS}^{NH3}}^T \cdot Reg_{S_{SD\ AS}^{NH3}}$	
$Reg_{S_{SD\ AS}^{NH3}}$	$\theta_{S_{SD\ AS}}$
y_{SD}	0,015911
$Zin_{SD\ AS}^{H2S}$	-0,05687
$Tin_{SD\ AS}$	0,186185
$H_{SD\ AS}$	0,101235
$Fvap_{SD\ AS}$	
$Fin_{SD\ AS}$	0,864066
$RRM_{SD\ AS}$	-0,02831
$Pres_{SD\ AS}$	-0,2202
$\left(\frac{Fvap_{SD\ AS}}{Fin_{SD\ AS}}\right)^2$	-0,40887
$Zin_{SD\ AS}^{NH3\ 3}$	0,583765
$H_{SD\ AS}^3$	0,343881
$Zin_{SD\ AS}^{H2S} \cdot H_{SD\ AS}$	0,082761
$Zin_{SD\ AS}^{NH3} \cdot \frac{Fvap_{SD\ AS}}{Fin_{SD\ AS}}$	0,084742
$Tin_{SD\ AS} \cdot H_{SD\ AS}$	-0,1633
$Tin_{SD\ AS} \cdot \frac{Fvap_{SD\ AS}}{Fin_{SD\ AS}}$	-0,30313
$Tin_{SD\ AS} \cdot Pres_{SD\ AS}$	0,086818
$H_{SD\ AS} \cdot Pres_{SD\ AS}$	0,12454
$\frac{Fvap_{SD\ AS}}{Fin_{SD\ AS}} \cdot Pres_{SD\ AS}$	0,158547
$H_{SD\ AS}^2 \cdot \frac{Fvap_{SD\ AS}}{Fin_{SD\ AS}}$	-0,4539
$\left(\frac{Fvap_{SD\ AS}}{Fin_{SD\ AS}}\right)^2 \cdot H_{SD\ AS}$	-0,76442
$H_{SD\ AS} \cdot \frac{Fvap_{SD\ AS}}{Fin_{SD\ AS}} \cdot Pres_{SD\ AS}$	0,280523
$Zin_{SD\ AS}^{NH3\ 4}$	-0,82738
$H_{SD\ AS}^4$	-1,06168
$Zin_{SD\ AS}^{NaCl\ 4} \cdot Tin_{SD\ AS}$	-0,03148

Tabela E.8 – Parâmetros e termos da identificação do $S_{SR\ AS}^{NH3}$

$S_{SR\ AS}^{NH3} = \theta_{S_{SR\ AS}^{NH3}}^T \cdot Reg_{S_{SR\ AS}^{NH3}}$	
$Reg_{S_{SR\ AS}^{NH3}}$	$\theta_{S_{SR\ AS}}$
$Zin_{SR\ AS}^{H2S}$	-0,06671
$Zin_{SR\ AS}^{NH3}$	0,038368
$Tin_{SR\ AS}$	0,234747
$H_{SR\ AS}$	0,16218
$Fvap_{SR\ AS}$	
$Fin_{SR\ AS}$	0,958376
$RRM_{SR\ AS}$	-0,0268
$Pres_{SR\ AS}$	-0,22823
$Zin_{SR\ AS}^{NH3\ 2}$	-0,21905
$H_{SR\ AS}^2$	-0,28263
$\left(\frac{Fvap_{SR\ AS}}{Fin_{SR\ AS}}\right)^2$	-0,34292
$Zin_{SR\ AS}^{NH3\ 3}$	0,383261
$Tin_{SR\ AS} \cdot H_{SR\ AS}$	-0,18162
$Tin_{SR\ AS} \cdot \frac{Fvap_{SR\ AS}}{Fin_{SR\ AS}}$	-0,31555
$H_{SR\ AS}^2 \cdot \frac{Fvap_{SR\ AS}}{Fin_{SR\ AS}}$	-0,41327
$\left(\frac{Fvap_{SR\ AS}}{Fin_{SR\ AS}}\right)^2 \cdot H_{SR\ AS}$	-0,45819
$H_{SR\ AS}^3 \cdot \frac{Fvap_{SR\ AS}}{Fin_{SR\ AS}}$	0,743475
$\left(\frac{Fvap_{SR\ AS}}{Fin_{SR\ AS}}\right)^3 \cdot Pres_{SR\ AS}$	0,768034
$\left(\frac{Fvap_{SR\ AS}}{Fin_{SR\ AS}}\right)^2 \cdot H_{SR\ AS} \cdot Pres_{SR\ AS}$	1,123136

Tabela E.9 – Parâmetros e termos da identificação do $S_{SD\ AS}^{OIL}$

$S_{SD\ AS}^{OIL} = \theta_{S_{SD\ AS}^{OIL}}^T \cdot Reg_{S_{SD\ AS}^{OIL}}$	
$Reg_{S_{SD\ AS}^{OIL}}$	$\theta_{S_{SD\ AS}}$
y_{SD}	-0,40965
$OdH_{SD\ AS}$	0,035202
$H_{SD\ AS}$	-0,46212
$\frac{Fvap_{SD\ AS}}{Fin_{SD\ AS}}$	-0,04651
$OdH_{SD\ AS}^3$	0,324853
$H_{SD\ AS}^3$	-0,80828
$OdH_{SD\ AS} \cdot H_{SD\ AS}$	-0,91961
$Pres_{SD\ AS} \cdot H_{SD\ AS}$	-0,12533
$OdH_{SD\ AS} \cdot H_{SD\ AS}^2$	-1,10262
$\frac{Fvap_{SD\ AS}}{Fin_{SD\ AS}} \cdot H_{SD\ AS}^2$	0,224613
$Pres_{SD\ AS} \cdot H_{SD\ AS}^2$	1,158952
$\left(\frac{Fvap_{SD\ AS}}{Fin_{SD\ AS}}\right)^2 \cdot H_{SD\ AS}$	-0,76161
$OdH_{SD\ AS} \cdot Tin_{SD\ AS} \cdot H_{SD\ AS}$	0,233185
$H_{SD\ AS} \cdot OdH_{SD\ AS} \cdot \frac{Fvap_{SD\ AS}}{Fin_{SD\ AS}}$	-0,3574
$H_{SD\ AS}^4$	-0,88942
$H_{SD\ AS}^3 \cdot OdH_{SD\ AS}$	2,619264
$H_{SD\ AS}^3 \cdot Zin_{SD\ AS}^{NaCl}$	1,648395
$H_{SD\ AS}^3 \cdot Tin_{SD\ AS}$	0,40401
$H_{SD\ AS}^3 \cdot \frac{Fvap_{SD\ AS}}{Fin_{SD\ AS}}$	-1,45429
$H_{SD\ AS}^3 \cdot Pres_{SD\ AS}$	-4,24335
$OdH_{SD\ AS}^2 \cdot H_{SD\ AS}^2$	1,154775
$H_{SD\ AS}^2 \cdot \left(\frac{Fvap_{SD\ AS}}{Fin_{SD\ AS}}\right)^2$	-1,54265
$H_{SD\ AS}^2 \cdot OdH_{SD\ AS} \cdot Zin_{SD\ AS}^{NaCl}$	-0,7474
$H_{SD\ AS}^2 \cdot OdH_{SD\ AS} \cdot Pres_{SD\ AS}$	0,343969

Tabela E.10 – Parâmetros e termos da identificação do $S_{SR\ AS}^{OIL}$

$S_{SR\ AS}^{OIL} = \theta_{S_{SR\ AS}^{OIL}}^T \cdot Reg_{S_{SR\ AS}^{OIL}}$	
$Reg_{S_{SR\ AS}^{OIL}}$	$\theta_{S_{SR\ AS}}$
$y_{SR\ AS}$	-0,41262
$OdH_{SR\ AS}$	0,024195
$H_{SR\ AS}$	-0,33931
$H_{SR\ AS}^2$	0,850333
$OdH_{SR\ AS}^3$	0,360371
$OdH_{SR\ AS}^2 \cdot H_{SR\ AS}$	1,212143
$OdH_{SR\ AS}^2 \cdot \frac{Fvap_{SR\ AS}}{Fin_{SR\ AS}}$	-0,26778
$OdH_{SR\ AS} \cdot H_{SR\ AS}^2$	1,295862
$Tin_{SR\ AS} \cdot H_{SR\ AS}^2$	0,240443
$\frac{Fvap_{SR\ AS}}{Fin_{SR\ AS}} \cdot H_{SR\ AS}^2$	1,322878
$Pres_{SR\ AS} \cdot H_{SR\ AS}^2$	-0,32628
$Tin_{SR\ AS} \cdot H_{SR\ AS} \cdot OdH_{SR\ AS}$	-0,37652
$H_{SR\ AS} \cdot OdH_{SR\ AS} \cdot \frac{Fvap_{SR\ AS}}{Fin_{SR\ AS}}$	-0,94263
$H_{SR\ AS} \cdot OdH_{SR\ AS} \cdot Pres_{SR\ AS}$	0,384964
$H_{SR\ AS}^4$	2,310552
$H_{SR\ AS}^3 \cdot OdH_{SR\ AS}$	3,027179
$H_{SR\ AS}^3 \cdot Tin_{SR\ AS}$	-1,6491
$H_{SR\ AS}^3 \cdot \frac{Fvap_{SR\ AS}}{Fin_{SR\ AS}}$	-4,60838
$H_{SR\ AS}^3 \cdot Pres_{SR\ AS}$	1,741993
$\left(\frac{Fvap_{SR\ AS}}{Fin_{SR\ AS}}\right)^2 \cdot H_{SR\ AS}^2$	-0,70745

Tabela E.11 – Parâmetros e termos da identificação do dT_{SDAS}

$dT_{SDAS} = \theta_{dT_{SD}}^T \cdot Reg_{dT_{SD}}$	
θ_{SDAS}	Reg_{TACSD}
y_{SD}	0,024223
Tin_{SDAS}	-0,60601
H_{SDAS}	0,018264
$Pres_{SDAS}$	0,407242
$Pres_{SDAS}^2$	-0,11443

Tabela E.12 – Parâmetros e termos da identificação do dT_{SRAS}

$dT_{SRAS} = \theta_{dT_{SR}}^T \cdot Reg_{dT_{SR}}$	
θ_{SRAS}	Reg_{TACSR}
y_{SR}	0,0241
Zin_{SRAS}^{NaCl}	0,003534
Tin_{SRAS}	-0,60669
H_{SRAS}	0,018807
$Pres_{SRAS}$	0,406999
$Pres_{SRAS}^2$	-0,11471

Tabela E.13 – Parâmetros e termos da identificação do V/L_{SRAS}

$V/L_{SRAS} = \theta_{V/L_{SR}}^T * Reg_{V/L_{SR}}$	
θ_{SDAS}	Reg_{TACSD}
y_{SR}	-0,12193
Tin_{SRAS}	0,294657
$\frac{Fvap_{SRAS}}{Fin_{SRAS}}$	0,894316
RRM_{SRAS}	-0,01509
$Pres_{SRAS}$	-0,18245
$Pres_{SRAS}^2$	0,051422

Tabela E.14 – Limites do conjunto de identificação do stripper vapor direto

Variável	<i>max</i>	<i>min</i>
$Zin_{SD}^{H_2S}$ (ppmw)	499,8380	10,1278
$Zin_{SD}^{NH_3}$ (ppmw)	499,4793	10,0344
Zin_{SD}^{NaCl} (ppmw)	9,4852e3	103,0653
Tin_{SD} (°C)	99,9835	70,0022
$\frac{Fvap_{SD}}{Fin_{SD}}$	0,1499	0,0503
RRM_{SD}	1,9995	0,5001
H_{SD} (metros)	16,0636	1,6909
$S_{SD}^{H_2S}$	11,8797	0,0014
$S_{SD}^{NH_3}$	1,8651	0,05
Fin_{SD} (kg/h)	1,9990e5	5,0666e3
Zin_{SD}^{OIL} (ppmw)	5,9988e3	103,8861
dRF_{SD}	0,1203	0,0201
dT_{SD} (°C)	50,8806	1,4663
S_{SD}^{OIL}	25,4 84	0,9518
$Pres_{SD}$ (atm)	1,9991	,0001
$HSdN_{SD}$	41,7383	0,0256
OdH_{SD}	3,5126e3	7,1383
$Fvap_{SD}$ (kg/h)	2,9231e4	359,2212
TAC_{SD} (dolares/ano)	2,1139e6	2,8517e4

Tabela E.15 – Limites do conjunto de identificação do stripper com reboiler

Variável	<i>max</i>	<i>min</i>
$Zin_{SR}^{H_2S}$ (ppmw)	499,3114	10,1278
$Zin_{SR}^{NH_3}$ (ppmw)	497,9523	10,0344
Zin_{SR}^{NaCl} (ppmw)	9,4852e3	103,0653
Tin_{SR} (°C)	99,9835	70,0022
$Fvap_{SR}$	0,1499	0,0503
Fin_{SR}		
RRM_{SR}	1,9995	0,5001
H_{SR} (metros)	16,0636	1,6909
$S_{SR}^{H_2S}$	10,6711	0,0416
$S_{SR}^{NH_3}$	1,6050	0,0408
Fin_{SR} (kg/h)	1,9990e5	5,0666e3
V/L	0,1269	0,027
$Fvap_{SR}$ (kg/h)	2,9231e4	359,223
Zin_{SR}^{OIL} (ppmw)	5,998e3	103,8861
S_{SR}^{OIL}	20,5511	1,2275
dRF_{SR}	-0,0027	-0,0794
dT_{SR} (°C)	50,8974	1,4684
$Pres_{SR}$ (atm)	1,9991	1,0001
$HSdN_{SR}$	41,7303	0,0256
OdH_{SR}	3,5126e3	7,1383
TAC_{SR} (dolares/ano)	2,0595e6	2,8997e4

Tabela F.3 – Parâmetros do modelo de redes neurais para *stripper* com vapor direto, S_{SD}^{H2S}

$IW_{S_{SD}^{H2S}}$	-0,5256	0,034016	0,00723	-0,01791	-0,0455	-0,27426	-0,06605	0,002275	0,012694
	-0,25606	-0,12287	0,008233	-0,0626	0,055314	-0,26908	0,393054	-0,02475	-0,04356
	1,98819	-1,08315	0,022125	1,417563	0,807701	-0,21269	-1,11166	0,420562	-1,89264
	0,215171	0,399513	-2,35839	-4,0097	6,282225	-2,3935	2,258742	0,20058	1,499789
	0,249337	-0,25536	-0,02728	-0,09387	0,098042	-1,46818	0,492326	0,008193	-0,14684
	-0,26789	2,242814	-0,03071	-0,02334	-0,26584	2,848065	-0,24242	-0,03823	-0,03421
	-1,28862	-1,15861	-0,2992	-0,01721	-0,18713	0,753336	0,343205	-1,06353	1,351544
	-0,37691	-0,76575	0,025722	-0,23918	0,47354	0,584866	2,065838	-0,10593	-0,32351
$b2_{S_{SD}^{H2S}}$	-2,04973								
	-0,21956								
	-0,8292								
	-0,07654								
	-2,43142								
	6,179896								
	-1,29874								
	-1,85261								
$LW_{S_{SD}^{H2S}}$	-2,75577	0,291426	0,004248	-0,00094	0,466775	-3,82968	-0,00074	-0,07785	
$b3_{S_{SD}^{H2S}}$	0,864672								

Tabela F.4 – Parâmetros do modelo de redes neurais para *stripper* com *reboiler*, S_{SR}^{H2S}

$IW_{S_{SR}^{H2S}}$	0,321298	-1,21609	-0,07508	-0,16345	0,159271	-2,45122	0,189976	0,031506	-0,03038
	0,13874	-0,06647	-0,00208	-0,00775	0,089176	0,810591	0,382635	0,023827	-0,08626
	0,150548	-0,10565	-0,00015	-0,01832	0,133747	0,780528	0,593335	0,027356	-0,1264
	-0,28692	0,023598	-0,0089	-0,0122	-0,17796	-1,23488	-1,56158	-0,12834	0,358564
	0,927612	-0,00258	0,000214	0,022246	-0,05857	0,456642	-0,07899	0,01208	0,006989
$b2_{S_{SR}^{H2S}}$	-4,72817								
	0,544126								
	0,630704								
	-1,096								
	2,44571								
$LW_{S_{SR}^{H2S}}$	3,098039	-1,32671	1,51908	0,173016	1,477417				
$b3_{S_{SR}^{H2S}}$	0,827654								

Tabela F.7 – Parâmetros do modelo de redes neurais para *stripper* com vapor direto, S_{SD}^{oil}

$IW_{S_{SD}^{NH_3}}$	-2,64298	-4,37938	-5,90853	0,942298	-3,09371	0,314063	-11,104	-1,11455	3,174947
	-0,18193	-0,02923	-0,62654	0,261981	-0,49889	1,902913	-1,45845	-0,1944	0,428957
	-0,06836	-0,08799	0,733397	0,272697	-0,4797	-7,82201	-2,26211	0,052956	0,769285
	-1,04242	0,970532	-3,13931	1,094529	-1,10083	-0,11676	-0,06261	-0,35672	0,093668
	0,480083	-0,55783	1,403541	-0,64216	0,775627	1,136244	0,181699	0,285	-0,03184
	0,04695	-0,073	-0,28093	0,149317	-0,18267	4,217361	-1,00459	0,099686	0,309069
$b2_{S_{SD}^{NH_3}}$	10,59859								
	1,387571								
	-4,67464								
	-1,50402								
	0,298199								
	4,497202								
$LW_{S_{SD}^{NH_3}}$	0,038858	-0,1033	0,14233	-0,04625	-0,04679	-0,79268			
$b3_{S_{SD}^{NH_3}}$	0,039293								

Tabela F.8 – Parâmetros do modelo de redes neurais para *stripper* com *reboiler*, S_{SR}^{oil}

$IW_{S_{SD}^{NH_3}}$	-0,00297	0,008358	-0,19761	0,032536	0,070759	3,363283	0,136229	0,020262	-0,08117
	-0,00132	0,000609	-0,23217	0,006655	0,209803	4,006133	0,505576	0,015676	-0,20469
	-0,00116	0,008213	1,97697	0,044268	-0,03358	0,862534	-0,31934	-0,03123	0,171241
	0,010976	0,021298	-0,04093	-0,03753	0,09092	-1,41183	0,235331	-0,02315	-0,21782
	-0,49761	0,270828	-2,46814	-0,63777	-0,11102	1,512038	1,937968	-0,14651	-1,11228
	-0,00969	0,008957	-0,18694	0,051765	0,04254	3,552158	0,06304	0,030755	-0,04353
	-0,00011	1,019674	-0,53049	0,406885	0,630427	0,687485	-1,64509	-1,08746	-0,9848
	0,310603	-0,82287	-0,10384	0,057426	-0,09736	4,306633	0,014635	0,659013	0,7526
$b2_{S_{SD}^{NH_3}}$	2,802291								
	3,882735								
	4,146066								
	-2,92193								
	-0,26709								
	2,677773								
	0,006246								
	-2,10102								
$LW_{S_{SD}^{NH_3}}$	-5,32297	2,581584	2,321617	5,18985	-0,01188	2,747389	-0,00932	-0,01429	
$b3_{S_{SD}^{NH_3}}$	1,916628								

Tabela F.12 – Parâmetros do modelo de redes neurais para *stripper* com reboiler, dT_{SR}

IW_{dRFSD}	3,75E-06	5,52E-05	1,14E-05	-0,00016	0,027127	-0,00048	-1E-04	6,14E-06	-0,01063
	3,04E-05	0,00053	0,000303	-0,00021	-0,00053	0,015165	-0,00079	1,46E-05	0,353363

$b2_{dRFSD}$	0,015322
	1,8088

LW_{dRFSD}	-22,348	5,146221
--------------	---------	----------

$b3_{dRFSD}$	-4,52262
--------------	----------

Tabela F.13 – Parâmetros do modelo de redes neurais para *stripper* com *reboiler*, V/L_{SR}

$IW_{V/LSR}$	0,012092	-0,01099	0,000463	-0,1817	-0,47055	-0,00199	0,00014
	-0,03344	-0,01782	-0,01838	0,259187	0,665534	-0,06943	0,006139
	-1,47957	-2,2964	1,135705	0,860743	0,215764	1,34455	0,254165
$b2_{V/LSR}$	-0,4391						
	-1,00685						
	-2,64151						
$LW_{V/LSR}$	-1,4817	0,823035	0,00406				
$b3_{V/LSR}$	-0,05937						

APÊNDICE G

Condições de projeto para os processos do estudo de caso apresentado no capítulo 5. Os dados listados aqui foram retirados do artigo de Huang et al. (1999) e do livro de Beychok (1967).

Tabela G.1 – Condições de projeto do estudo de caso 1, unidades de uso, fontes e descartes de água

Unidade	Soluto	Carga de contaminante (kg/h)	Limite da concentração de entrada (ppm)	Limite da concentração de saída (ppm)	Perda de água da unidade (tons/h)	Consumo de água mín. (tons/h)	Consumo de água máx. (tons/h)	Temperatura de saída °C	Custos
Consumo Geral	Sais	7,125	300	-----	0	7.5	20	Igual a de entrada	-----
	orgânicos	52,500	50	-----					
	H ₂ S	0,221	0	-----					
	NH ₃	0,000	0	-----					
Lavagem com soda	Sais	0,180	300	500	0	2,4	10	40	-----
	orgânicos	1,200	50	500					
	H ₂ S	1,750	5000	12500					
	NH ₃	0,000	0	0					
Caldeira	Sais	0,000	10	150	18	19	30	100	-----
	orgânicos	0,000	1	50					
	H ₂ S	0,000	0	0					
	NH ₃	0,000	0	0					
Unidades de fracionamento	Sais	3,610	10	200	0	vazão fixa 19	-----	37.8	-----
	orgânicos	104,481	1	6500					
	H ₂ S	2,500	0	500					
	NH ₃	1,688	0	337,5					
Lavagem de amônia	Sais	7,485	10	7500	0	10	20	40	-----
	orgânicos	81,750	50	6500					
	H ₂ S	3,200	50	480					
	NH ₃	2,160	50	480					
Dessalga - dora	Sais	120,000	200	9500	0	70	100	47.5	-----
	orgânicos	480,000	100	6500					
	H ₂ S	1,875	20	45					
	NH ₃	0,000	20	45					
Água fresca	Sais	-----	-----	50	-----	-----	∞	20	-----
	orgânicos	-----	-----	15					
	H ₂ S	-----	-----	0					
	NH ₃	-----	-----	0					
Dreno da estocagem	Sais	-----	-----	135	-----	-----	15	20	-----
	orgânicos	-----	-----	45					
	H ₂ S	-----	-----	400					
	NH ₃	-----	-----	400					
UTE (PLANTA)	Sais	-----	364	-----	-----	0	360	-----	Proporcinal à vazão
	orgânicos	-----	759	-----					
	H ₂ S	-----	24	-----					
	NH ₃	-----	100	-----					
UTE (SITE)	Sais	-----	300	-----	-----	0	200	-----	Proporcinal à vazão
	orgânicos	-----	600	-----					
	H ₂ S	-----	20	-----					
	NH ₃	-----	100	-----					
Rio	Sais	-----	50	-----	-----	0	∞	-----	0
	orgânicos	-----	200	-----					
	H ₂ S	-----	1	-----					
	NH ₃	-----	20	-----					

Tabela G.2 – Condições de projeto do estudo de caso 1, sistema de refrigeração

Unidade	Soluto	Carga de contaminante (kg/h)	Limite da concentração de entrada (ppm)	Limite da concentração de saída (ppm)	Perda de água da unidade (tons/h)	Consumo de água mín. (tons/h)	Consumo de água máx. (tons/h)	Temperatura de saída °C	Custos
Cooling Water	Sais	0	2500	3115					
	orgânicos	0	220	220	Modelo reduzido	Modelo reduzido	Modelo reduzido	Modelo reduzido	Modelo reduzido
	H ₂ S	0	45	45					
	NH ₃	0	45	45					
TC1	Sais	0	2500	3115					
	orgânicos	0	220	220	0		Fixo 250	47	-----
	H ₂ S	0	45	45					
	NH ₃	0	45	45					
TC2	Sais	0	2500	3115					
	orgânicos	0	220	220	0		Fixo 300	45	-----
	H ₂ S	0	45	45					
	NH ₃	0	45	45					
TC3	Sais	0	2500	3115					
	orgânicos	0	220	220	0		Fixo 450	40	-----
	H ₂ S	0	45	45					
	NH ₃	0	45	45					

Tabela G.3 - Condições de projeto do estudo de caso 1, unidades de tratamento de efluentes

Unidade	Soluto	Porcentagem de remoção de contaminante	Limite da concentração de entrada (ppm)	Limite da concentração de saída (ppm)	Perda de água da unidade (tons/h)	Consumo de água mín. (tons/h)	Consumo de água máx. (tons/h)	Temperatura de saída °C	Custos
Purified water	Sais		50	10					
	orgânicos	concentração de saída fixa	15	1	-----	0	∞	igual ao de entrada	Proporcional à vazão
	H ₂		0	0					
	NH ₃		0	0					
Steam Stripper	Sais		12500	-----					
	orgânicos	Surrogate model	6000	-----	Modelo reduzido	Modelo reduzido	20	Modelo reduzido	Modelo reduzido
	H ₂ S		12500	-----					
	NH ₄		12500	-----					
API separator	Sais	25%	-----	-----					
	orgânicos	55%	-----	-----	-----	50	400	igual ao de entrada	Proporcional à vazão
	H ₂ S	0	-----	-----					
	NH ₅	0	-----	-----					