



OTIMIZAÇÃO DINÂMICA DE UM PROCESSO DE MISTURA EM LINHA DE DIESEL

Dyego dos Santos Silva

Projeto de Final de Curso

Orientadores

Prof. Argimiro Resende Secchi, D.Sc.

Eng. Euclides Almeida Neto, D.Sc.

Setembro de 2012

OTIMIZAÇÃO DINÂMICA DE UM PROCESSO DE MISTURA EM LINHA DE DIESEL

Dyego dos Santos Silva

Projeto de Final de Curso submetido ao Corpo Docente da Escola de Química, como parte do requisitos necessários à obtenção do grau de Engenheiro Químico.

Aprovado por:

Prof. Evaristo Chalbaud Biscaia Júnior, D.Sc.

Prof. Maurício Bezerra de Souza Junior, D.Sc.

Eng. Lizandro de Sousa Santos, M.Sc.

Orientado por:

Prof. Argimiro Resende Secchi, D.Sc.

Eng. Euclides Almeida Neto, D.Sc.

Rio de Janeiro, RJ – Brasil
Setembro de 2012

Silva, Dyego dos Santos.

Otimização Dinâmica de um Processo de Mistura em Linha de Diesel /
Dyego dos Santos Silva. Rio de Janeiro: UFRJ/EQ, 2012.

x, 63 p.; il.

(Projeto Final) – Universidade Federal do Rio de Janeiro, Escola de
Química, 2012.

Orientadores: Argimiro Resende Secchi e Euclides Almeida Neto.

1. Otimização Dinâmica. 2. Mistura em Linha. 3. Óleo Diesel. 4. Projeto
Final. (Graduação – UFRJ/EQ). 5. Argimiro Resende Secchi e Euclides
Almeida Neto. I. Título.

*Dedico este trabalho à Deus, à
minha família e aos meus amigos.*

“Não sabes, não ouviste que o eterno Deus, o Senhor, o Criador dos fins da terra, nem se cansa, nem se fatiga? Não se pode esquadrihar o seu entendimento.

Faz forte ao cansado e multiplica as forças ao que não tem nenhum vigor.

Os jovens se cansam e se fatigam, e os moços de exaustos caem,

mas os que esperam no Senhor renovam as suas forças, sobem com asas como águias, correm e não se cansam, caminham e não se fatigam.”

Isaías 40: 28-31

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente à Deus, por ter me dado força e condições para eu concluir esta etapa da minha vida.

Agradeço à minha falecida mãe, Marly Ribeiro dos Santos Silva, por todo amor, carinho, educação e também pela orientação dada à mim, para que eu chegasse até aqui.

Agradeço ao meu pai, José Carlos Jacinto da Silva, e à sua esposa, Adeílda Soares, pelo apoio, incentivo e compreensão durante esses anos.

Agradeço aos meus orientadores, Argimiro Resende Secchi e Euclides Almeida Neto, pela ajuda, disponibilidade e compreensão durante a realização deste trabalho.

Agradeço aos meus amigos do LADES, pelo auxílio na realização deste trabalho, especialmente ao Lizandro de Sousa Santos, a quem agradeço pela amizade, pelos conselhos, como também pela predisposição a me ajudar e me ensinar.

Agradeço aos meus amigos por toda a ajuda e apoio durante esses anos.

Resumo do Projeto de Final de Curso apresentado à Escola de Química como parte dos requisitos necessários para obtenção do grau de Engenheiro Químico.

OTIMIZAÇÃO DINÂMICA DE UMA MISTURA EM LINHA DE DIESEL

Dyego dos Santos Silva

Setembro, 2012

Orientadores: Prof. Argimiro Resende Secchi, D.Sc.

Eng. Euclides Almeida Neto, D.Sc.

Nos dias atuais, os assuntos concernentes às questões ambientais, principalmente quanto aos impactos ambientais que os derivados do petróleo causam ao meio ambiente, estão cada vez mais presentes na área política, econômica e social. Diante dessa questão, as restrições impostas a esses produtos estão cada vez mais rigorosas, a ponto de afetar as margens de lucro nas refinarias, como também o processo de produção, que convive com a insegurança de obter produtos fora das especificações. Neste contexto, o uso de ferramentas mais sofisticadas, como a otimização dinâmica, é de grande aceitação para contornar estes problemas que não conseguem ser superados pelas tecnologias atuais como a otimização estacionária, devido às suas limitações, que faz com que esta tecnologia seja incapaz de otimizar o processo diante das restrições e de muitas perturbações dinâmicas normalmente presentes. Este trabalho propõe, otimizar dinamicamente um processo de mistura em linha de diesel para a produção de diesel S1800, que é um processo passível de alterações nas margens de lucro de um refinaria e que produz o derivado mais produzido no Brasil. Será avaliado a eficiência da otimização dinâmica com a presença de uma perturbação e também sem a presença da mesma, monitorando as propriedades quanto às restrições impostas pela ANP, na Resolução ANP N° 42.

ÍNDICE

1	Introdução	1
1.1	Contextualização	1
1.2	Objetivo e Estrutura do Trabalho	4
2	Revisão Bibliográfica	6
2.1	Otimização Dinâmica	6
2.1.1	Introdução.....	6
2.1.2	Formulação Geral do DAOP	7
2.1.3	Métodos de Resolução do DAOP	10
2.1.4	Exemplo Motivador: Reator CSTR Não Linear	13
2.2	Trabalhos e Pesquisas Recentes	15
2.3	Óleo Diesel	19
3	Processo de Mistura em Linha de Diesel.....	24
3.1	Unidade de Produção	24
3.2	Modelagem do Processo de MLD.....	27
3.2.1	Válvulas e Tanques Iniciais	27
3.2.2	Misturador	28
3.2.3	Tanque Final.....	32
3.3	Formulação do DAOP do Problema de Mistura em Linha de Diesel	35
3.4	Metodologia de Resolução do DAOP de Mistura em Linha de Diesel.....	39
4	Resultados e Discussões	42
4.1	Sem Corrente Selvagem	42
4.2	Com Corrente Selvagem	50
5	Conclusões	59
	Referências Bibliográficas	60

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1.1 – Matriz energética brasileira (Fonte: EPE, 2012).	2
Figura 1.2 – Ilustração de agregação de valor em uma refinaria (Fonte: Ferreira, 2008).	3
Figura 2.1 – Representação de uma região viável de um processo de mistura (Fonte: Ferreira, 2008).	10
Figura 2.2 – Exemplos de parametrização.	11
Figura 2.3 – Colocação em elementos finitos (Fonte: Lang e Biegler, 2007).	12
Figura 2.4 – Reator CSTR.	13
Figura 2.5 – Perfil ótimo das variáveis de controle do CSTR.	14
Figura 3.1 – Unidade de Mistura em Linha de Diesel.	24
Figura 3.2 – Método single-shooting (Fonte: Magalhães, 2010).	40
Figura 3.3 – Estrutura de comunicação EMSO-MATLAB.	41
Figura 4.1 – Vazão de Diesel HDT sem a Presença de Corrente Selvagem na Mistura. .	43
Figura 4.2 – Vazão de Diesel Externo sem a Presença de Corrente Selvagem na Mistura.	44
Figura 4.3 – Vazão de Diesel Pesado sem a Presença de Corrente Selvagem na Mistura.	45
Figura 4.4 – Vazão de Nafta Pesada 1 sem a Presença de Corrente Selvagem na Mistura.	45
Figura 4.5 – Vazão de Querosene sem a Presença de Corrente Selvagem na Mistura. .	46
Figura 4.6 – Vazão de Nafta Pesada 2 sem a Presença de Corrente Selvagem na Mistura.	47
Figura 4.7 – Massa Específica do Óleo Diesel S1800 sem a Presença de Corrente Selvagem na Mistura.	47
Figura 4.8 – Teor de Enxofre do Óleo Diesel S1800 sem a Presença de Corrente Selvagem na Mistura.	47
Figura 4.9 – Ponto de Fulgor do Óleo Diesel S1800 sem a Presença de Corrente Selvagem na Mistura.	48
Figura 4.10 – Viscosidade do Óleo Diesel S1800 sem a Presença de Corrente Selvagem na Mistura.	48
Figura 4.11 – Destilação 50% vol. do Óleo Diesel S1800 sem a Presença de Corrente Selvagem na Mistura.	48
Figura 4.12 – Destilação 85% vol. do Óleo Diesel S1800 sem a Presença de Corrente Selvagem na Mistura.	48
Figura 4.13 – Destilação 90% vol. do Óleo Diesel S1800 sem a Presença de Corrente Selvagem na Mistura.	49
Figura 4.14 – Número de Cetano do Óleo Diesel S1800 sem a Presença de Corrente Selvagem na Mistura.	49

Figura 4.15 – Ponto de Entupimento do Óleo Diesel S1800 sem a Presença de Corrente Selvagem na Mistura.....	49
Figura 4.16 – Vazão de Diesel HDT com a Presença de Corrente Selvagem na Mistura.	51
Figura 4.17 – Vazão de Diesel Externo com a Presença de Corrente Selvagem na Mistura.	52
Figura 4.18 – Vazão de Diesel Pesado com a Presença de Corrente Selvagem na Mistura.	53
Figura 4.19 – Vazão de Nafta Pesada 1 com a Presença de Corrente Selvagem na Mistura.	53
Figura 4.20 – Vazão de Querosene com a Presença de Corrente Selvagem na Mistura.	54
Figura 4.21 – Vazão de Nafta Pesada 2 com a Presença de Corrente Selvagem na Mistura.	55
Figura 4.22 – Massa Específica do Óleo Diesel S1800 com a Presença de Corrente Selvagem na Mistura.....	55
Figura 4.23 – Teor de Enxofre do Óleo Diesel S1800 com a Presença de Corrente Selvagem na Mistura.....	55
Figura 4.24 – Ponto de Fulgor do Óleo Diesel S1800 com a Presença de Corrente Selvagem na Mistura.....	56
Figura 4.25 – Viscosidade do Óleo Diesel S1800 com a Presença de Corrente Selvagem na Mistura.	56
Figura 4.26 – Destilação 50% vol. do Óleo Diesel S1800 com a Presença de Corrente Selvagem na Mistura.....	56
Figura 4.27 – Destilação 85% vol. do Óleo Diesel S1800 com a Presença de Corrente Selvagem na Mistura.....	56
Figura 4.28 – Destilação 90% vol. do Óleo Diesel S1800 com a Presença de Corrente Selvagem na Mistura.....	57
Figura 4.29 – Número de Cetano do Óleo Diesel S1800 com a Presença de Corrente Selvagem na Mistura.....	57
Figura 4.30 – Ponto de Entupimento do Óleo Diesel S1800 com a Presença de Corrente Selvagem na Mistura.....	57

ÍNDICE DE TABELAS

Tabela 2.1 – Especificações do Óleo Diesel.....	23
Tabela 3.1 – Propriedades dos componentes dos tanques	25
Tabela 3.2 – Especificações do Diesel S1800	26
Tabela 3.3 – Preços dos componentes dos Tanques	26
Tabela 3.4 - Parâmetros de modelo do tanque e da válvula	28
Tabela 3.5 – Variáveis do modelo do misturador.....	31
Tabela 3.6 – Variáveis do modelo do tanque final	34
Tabela 4.1 – Resultados da otimização e simulação sem corrente selvagem	50
Tabela 4.2 – Resultados da otimização e simulação com corrente selvagem	58

Capítulo 1

Introdução

1.1 Contextualização

O aumento da competitividade e a rápida expansão do setor industrial, como também a crescente complexidade dos processos industriais exige uma modernização nos processos produtivos com o objetivo de aumentar as margens de lucro, atender as especificações dos produtos, impostas pelas agências reguladoras, que estão cada vez menos brandas, minimizar os impactos ambientais e atender às exigências do mercado consumidor quanto à qualidade do produto e ao tempo de entrega. Para isso, a indústria precisa se municiar de poderosas ferramentas de controle e otimização de processos a fim de operar próximas aos seus limites de operação de forma segura e eficaz.

A indústria de processamento de petróleo é um exemplo atual que se enquadra perfeitamente no parágrafo acima, pois sofre pressões pelas agências reguladoras como a ANP, pelo mercado consumidor e pela sociedade quanto a seus produtos, os derivados do petróleo, acerca da qualidade e principalmente acerca dos impactos ambientais que estes causam ao meio ambiente.

Contudo, responder à incumbência ambiental quase sempre afeta negativamente o lucro e limita a capacidade de refino, de outro modo não seriam necessárias leis e agências reguladoras (LEFFLER, 2008). Neste contexto, foram feitos esforços para buscar alternativas e meios de contornar esta situação, dos quais podemos citar, o uso de combustíveis de fontes renováveis, *os biocombustíveis*, e o uso de métodos e ferramentas de otimização e controle cada vez mais sofisticados e eficientes como o MPC e a D-RTO, visando atender às especificações e simultaneamente o aumento das margens de lucro.

Os biocombustíveis possuem considerável participação na matriz energética brasileira e têm como seus principais representantes, o biodiesel e o etanol. Desde 2010, o biodiesel é misturado em uma proporção de 5% a todo o diesel comercializado no país. O Brasil é reconhecido mundialmente por seu pioneirismo na introdução em sua matriz energética de um biocombustível produzido a partir da cana-de-açúcar: o

etanol. Desde a década de 1970, quando foi lançado o Proálcool, o etanol teve grande impulso, se tornando uma fonte importante de energia.

Embora, os combustíveis de fontes renováveis estejam em constante crescimento e desenvolvimento e cada vez mais participantes da matriz energética, não só do Brasil, como também de outros países, os combustíveis fósseis ainda continuarão possuindo maior destaque no cenário mundial. A Figura 1.1 mostra a participação dos tipos de fontes de energia na matriz energética brasileira.

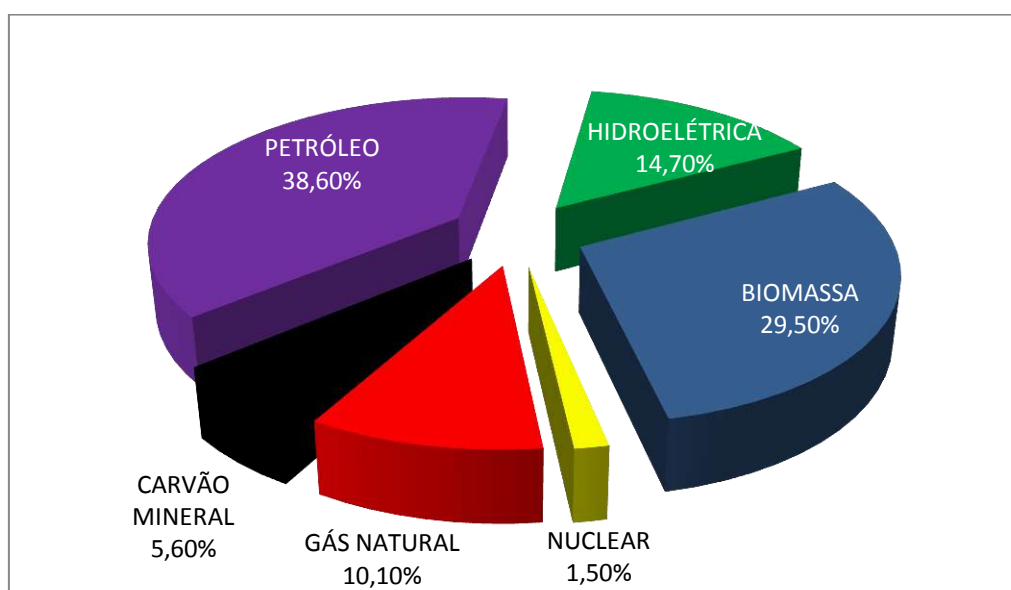


Figura 1.1 – Matriz energética brasileira (Fonte: EPE, 2012).

Os derivados do petróleo são obtidos através do processo de refino de petróleo que constitui operações como, destilação, conversão e tratamento, obtendo produtos de mais alto valor agregado, tais como, o óleo diesel, a gasolina, nafta, entre outros. No cenário nacional de produção de derivados do petróleo, o óleo diesel possui destaque importante, sendo o derivado de petróleo mais consumido e produzido em território nacional. Devido a essa estatística, o óleo diesel possui um papel de destaque, entre os derivados de petróleo, com relação ao impacto ambiental decorrente da emissão de gases de efeito estufa para a atmosfera pela sua queima.

A Figura 1.2 mostra o ganho de valor que ocorre em uma refinaria desde o petróleo até seus derivados.

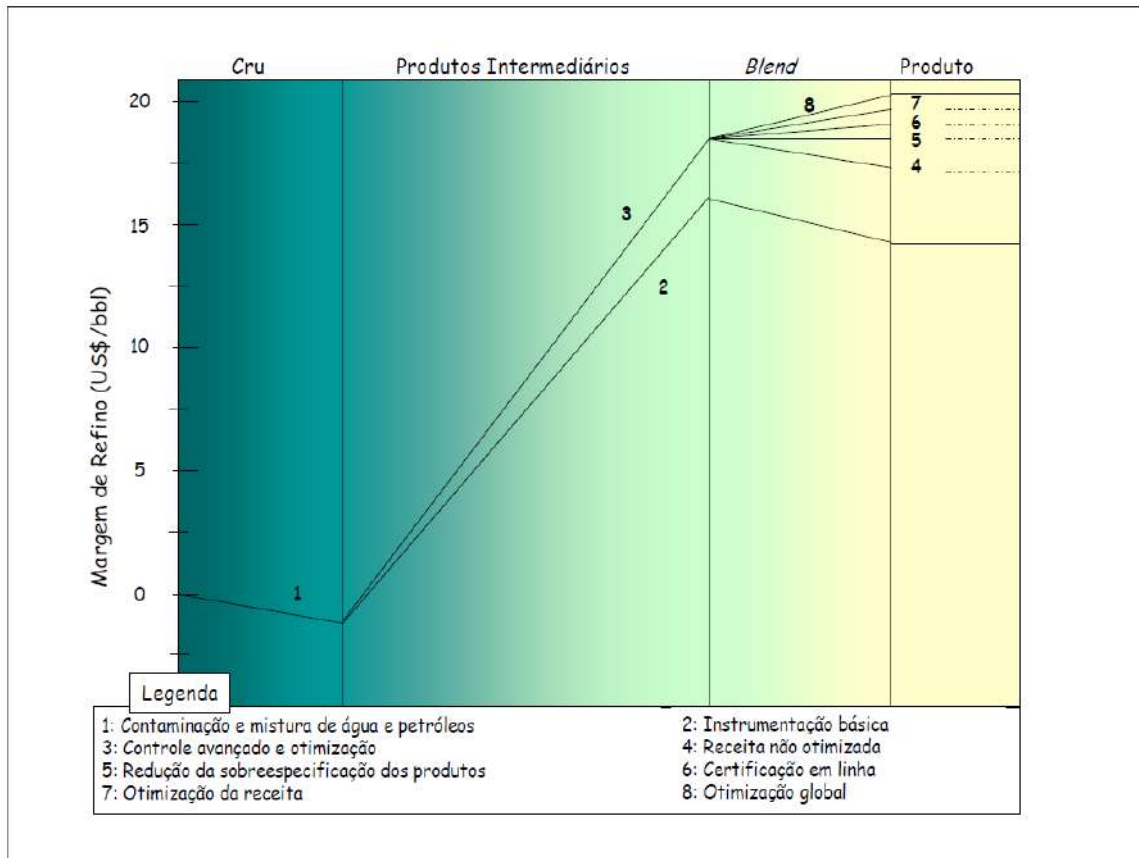


Figura 1.2 – Ilustração de agregação de valor em uma refinaria (Fonte: Ferreira, 2008).

A primeira coluna demonstra a degradação de valor que o petróleo sofre em decorrência da contaminação e mistura de água e outros tipos de petróleos. A coluna seguinte, representada pelas linhas 2 e 3, corresponde à agregação de valor devido às operações de refino que transformam o petróleo em seus derivados de mais alto valor agregado. A terceira coluna, como pode ser visto, o valor do produto pode sofrer elevação ou decaimento, dependendo da forma como são usadas as correntes de produtos intermediários de diferentes propriedades e de como são combinadas para fazer a mistura.

Os sistemas de mistura são importantes peças da otimização do processo produtivo (FERREIRA, 2008). Logo, esses sistemas possuem grande potencial para aplicação de ferramentas de otimização e controle cada vez mais sofisticados e eficientes como MPC e D-RTO, que auxiliam nas tomadas de decisão, escolhendo as melhores correntes para compor a mistura e conduzir o processo de mistura de forma otimizada, obtendo um produto final de mistura dentro das especificações e com um desperdício mínimo. Podemos citar como exemplo de produto originado por mistura, o óleo diesel, que é obtido através do processo de *mistura em linha de diesel* (MLD), que será abordado neste trabalho.

1.2 Objetivo e Estrutura do Trabalho

Este projeto tem como objetivo principal otimizar dinamicamente a produção de óleo diesel S1800 em um processo de mistura em linha, minimizando o custo de produção e produzindo óleo diesel com suas qualidades dentro das especificações impostas pela ANP (Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis), através da Resolução ANP N° 42, usando para isso, a ferramenta de otimização dinâmica.

Além disso, este trabalho tem como objetivo secundário fornecer mais um estudo de caso para problemas de otimização dinâmica, que é uma tecnologia em fase de desenvolvimento, comprovando sua eficiência na otimização de um processo de mistura em linha, o qual possui grande potencial para a aplicação de ferramentas de otimização visando o aumento da margem de lucro em refinarias.

Para atingir seu objetivo, o otimizador manipulará as vazões de correntes de diesel externo, diesel pesado, diesel hidrotratado, querosene e nafta pesada, fornecendo a trajetória ótima das vazões de cada componente, na forma de *set-points*, para os controladores, obtendo um volume de óleo diesel com as características como, a massa específica, teor de enxofre, ponto de fulgor, viscosidade, ponto de entupimento, número de cetano, destilação 50% vol. recuperados, destilação 85% vol. recuperados, destilação 90% vol. recuperados, dentro das especificações. Será feito também uma otimização considerando, além dos componentes acima, uma perturbação que será uma corrente selvagem de diesel leve, ou seja, uma corrente sem controle, analisando a eficiência do otimizador dinâmico diante desta perturbação.

Este trabalho está dividido em cinco capítulos. No presente capítulo, foi realizada uma contextualização sobre os derivados do petróleo no cenário mundial no que diz respeito a sua qualidade e seus impactos na sociedade e as alternativas propostas nos últimos anos para contornar os problemas concernentes a esses produtos.

No Capítulo 2, é apresentado resumidamente a teoria de otimização dinâmica juntamente com um exemplo motivador, como também alguns trabalhos recentes e linhas de pesquisas acerca do tema. Neste capítulo, também é feito uma abordagem sobre o óleo diesel, suas aplicações, classificações e suas propriedades principais que são analisadas pelas agências reguladoras.

O Capítulo 3 apresenta a unidade de mistura em linha de diesel, a modelagem de cada equipamento pertencente a essa unidade, a formulação do DAOP do problema proposto e sua metodologia de resolução.

No Capítulo 4 são feitas a análise e a discussão dos resultados obtidos pelo otimizador. Além disso, é feita uma análise a fim de verificar a eficiência do otimizador, através da comparação com outras simulações.

No Capítulo 5, é feita uma conclusão sobre o trabalho como também sugestões para trabalhos futuros.

No final do trabalho se encontra a lista das referências bibliográficas.

Capítulo 2

Revisão Bibliográfica

2.1 Otimização Dinâmica

2.1.1 Introdução

Em muitas plantas industriais, a trajetória ótima resultante da resolução do problema de otimização dinâmica pode ser utilizado como: (i) set-point de controladores; (ii) no estabelecimento de estratégias seguras para partida ou paradas de unidades de processo ou, (iii) na especificação de qualidade de produtos durante a transição de sequências de produção (SOUZA, 2007).

BRYSON JR. (1999) define a otimização dinâmica como o procedimento que determina a “história” das variáveis de estado e de controle de um determinado modelo dinâmico de processo, sob um período de tempo finito e que leve a maximizar (ou minimizar) uma dada função objetivo. Para FEEHERY (1998), o problema de otimização dinâmica (também conhecido como problema de controle ótimo) requer a determinação da evolução temporal de um conjunto de variáveis de controle de um sistema dinâmico e que maximize (ou minimize) uma dada medida de desempenho.

A otimização dinâmica, até a década de 1960, não tinha muito interesse por parte da indústria devido às grandes limitações da tecnologia e às dificuldades de implementação (MAGALHÃES, 2010). Mas com o desenvolvimento dos computadores, como também do desempenho e eficiência dos métodos de otimização e algoritmos NLP, a otimização dinâmica começou a despertar interesse do meio acadêmico e também das indústrias, tendo um grande impulso somente em estudos de casos *off-line*.

Os processos industriais estão cada vez mais complexos, devido a diversos fatores como: as perturbações dinâmicas presentes nos processos, mudanças nas programações de produção, transições operacionais e as especificações dos produtos que estão cada vez mais rigorosas. Contudo, as ferramentas usadas atualmente e já consolidadas como a RTO (Otimização Estacionária em Tempo Real), são limitadas pelas suas características estacionárias e não possuem recursos suficientes para contornar estes tipos de problemas. Logo, nesse contexto, a D-RTO (Otimização

Dinâmica em Tempo Real), surgiu como uma tecnologia com grande potencial, já que possui a capacidade de atender a todas as exigências das indústrias de processamento e reduzir a quantidade de produtos fora de especificação.

A otimização estática (RTO) apresenta algumas limitações. Nota-se que o RTO integrado com o controle avançado pode não realizar todo o potencial de otimização da unidade de processo. Isto porque a otimização estática visualiza somente o estado final da planta, e poderá ocorrer do controle avançado (MPC) não poder atingir o ponto ótimo ao longo da trajetória. Já a otimização dinâmica (D-RTO) não só otimiza o estado final, como também o caminho do processo, podendo ter uma realização maior do que o RTO (ALMEIDA e SECCHI, 2011).

Porém esta ferramenta, diferentemente da RTO, ainda não é uma ferramenta consolidada, possuindo ferramentas comerciais apenas no modo *off-line*. Nesse contexto, surge o incentivo ao desenvolvimento da otimização dinâmica on-line (conectado à planta).

A otimização dinâmica em tempo real é uma área particularmente interessante, pois representa um desafio e um salto nas soluções atuais de otimização em tempo real. Há muitos trabalhos e vários softwares que resolvem o problema de otimização dinâmica, porém não em malha fechada e integrada com a planta real (ALMEIDA, 2011).

2.1.2 Formulação Geral do DAOP

Para realizar a otimização dinâmica de um processo, inicialmente precisa-se formular o problema de otimização dinâmica (DAOP – *Differential Algebraic Optimization Problems*), ou seja, definir os elementos que compõem o DAOP. A formulação de um problema de otimização dinâmica varia de um caso para outro, mas no geral é constituído por uma ou mais funções objetivo, restrições de igualdade e restrições de desigualdade. A forma geral de um problema de otimização dinâmica é exibida abaixo.

$$\min_{x(t), u(t), t_f} \text{ ou } \max \quad J(x(t), u(t), t) = \phi(x(t_f), t_f) + \int_{t_0}^{t_f} \varphi(x(t), u(t), t) dt$$

Sujeito a:

$$\begin{array}{l}
F\left(\frac{dx(t)}{dt}, x(t), y(t), u(t), t\right) = 0 \\
H(x(t), y(t), u(t), t) = 0 \\
x(t_0) = x_0 \\
G(x(t), y(t), u(t), t) \leq 0 \\
x_{\min} \leq x(t) \leq x_{\max} \\
y_{\min} \leq y(t) \leq y_{\max} \\
u_{\min} \leq u(t) \leq u_{\max} \\
t_0 \leq t \leq t_f
\end{array}
\left. \vphantom{\begin{array}{l} \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \end{array}} \right\}
\begin{array}{l}
\text{Modelo Dinâmico (ODE)} \\
\text{Equações Algébricas} \\
\text{Condições Iniciais} \\
\text{Restrições de Desigualdade}
\end{array}
\tag{2.1}$$

Onde:

- J - Função Objetivo;
- F - Equações Diferenciais;
- H - Equações Algébricas;
- G - Inequações Algébricas;
- x - Vetor de Variáveis de Estado;
- y - Vetor de Variáveis Algébricas;
- u - Vetor de Variáveis de Controle;
- t_0 - Tempo Inicial
- t_f - Tempo Final.

A seguir, será descrito cada um dos elementos citados acima, que compõem a formulação do DAOP:

Função Objetivo

É a métrica utilizada para a otimização. Normalmente, essa métrica é relacionada a critérios econômicos, como: maximizar lucro; minimizar custos; minimizar consumo de insumos e energia. Nos processos de mistura, os objetivos mais comuns são: minimizar *giveaway*, ou seja, a folga entre a qualidade do produto e a sua especificação; minimizar custos de produção; maximizar lucro de produção e minimizar vazões ou estoques de componentes. Vale ressaltar que essas funções objetivo podem ser utilizadas em conjunto, através de uma combinação com sintonia de pesos, quando se deseja atender a mais de um objetivo.

Restrições de Igualdade

As restrições de igualdade compreendem o modelo dinâmico do processo e também restrições que são impostas ao longo do horizonte de tempo ou no instante final. O modelo dinâmico do processo define a trajetória e o comportamento das variáveis de estado, sendo composto por equações diferenciais obtidas através dos balanços de massa, de energia e de quantidade de movimento e por equações algébricas que compreendem equações de equilíbrio, de propriedades físicas, etc. O conjunto formado pelo modelo dinâmico e pelas equações algébricas forma um sistema de equações algébrico-diferenciais (DAEs – *Differential-Algebraic Equations*).

Restrições de Desigualdade

Restrições são limites que definem a região viável de operação, ou seja, limitam a região de busca da solução ótima do problema. Existem vários tipos de restrições, como as *restrições de domínios* que limitam as variáveis de controle, de estado ao longo do horizonte de otimização e o tempo; as *restrições terminais* que limitam as variáveis ou definem os valores das variáveis de controle e estado no tempo final; as *restrições interiores* que limitam os valores das variáveis em determinados intervalos de tempo dentro do horizonte de otimização, entre outras.

As restrições podem ser referentes a variáveis ligadas diretamente ao objetivo de otimização (ex.: máximo investimento permitido), a variáveis ligadas a limitações de equipamentos (ex.: máxima vazão da bomba), a aspectos de segurança (ex.: máxima pressão no reator), ao meio ambiente (ex.: máxima carga de poluentes permitida), (MAGALHÃES, 2010).

Em processos de mistura, as principais restrições são: especificações dos produtos, estoques, elasticidade dos mercados, limites de equipamentos e programação de produção, como pode ser visto na Figura 2.1.

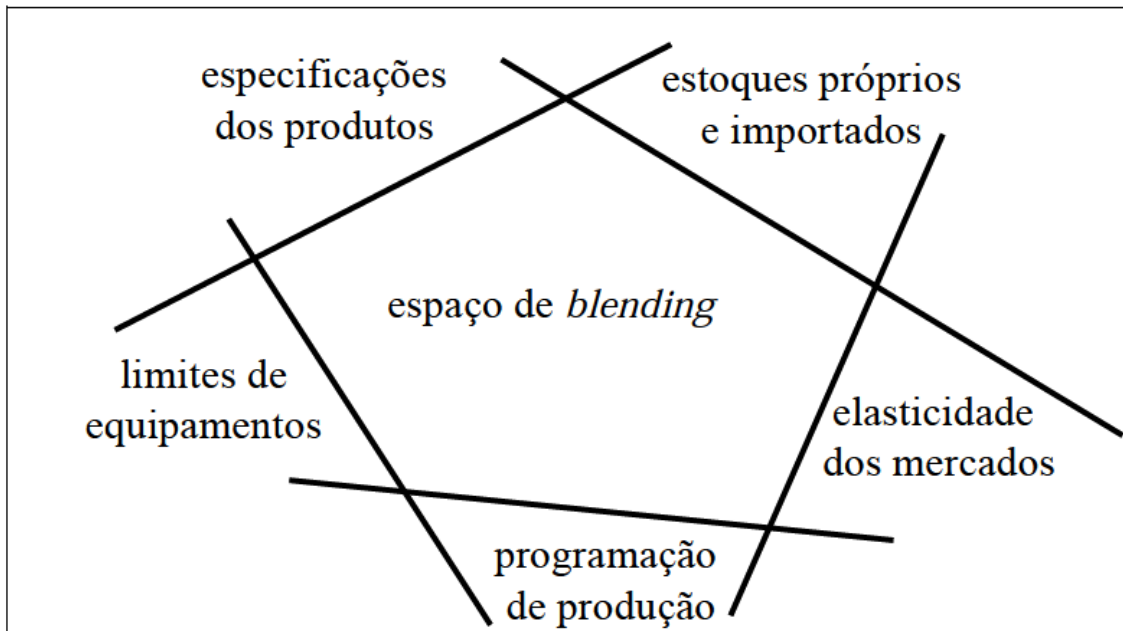


Figura 2.1 – Representação de uma região viável de um processo de mistura (Fonte: Ferreira, 2008).

2.1.3 Métodos de Resolução do DAOP

Os métodos de resolução de problemas de otimização dinâmica, são divididos em duas classes: *métodos indiretos* e *métodos diretos*.

Os ***métodos indiretos*** fundamentam-se na teoria do controle ótimo (Princípio do Máximo de Pontryagin), a qual maximiza ou minimiza o Hamiltoniano, levando a função objetivo, de forma indireta, ao seu máximo ou mínimo. Esses métodos também são conhecidos como métodos analíticos pelo fato de utilizar as condições de otimalidade para transformar o DAOP em um problema de valor de contorno duplo, que era resolvido analiticamente (MAGALHÃES, 2010).

Contudo, os métodos indiretos apresentam limitações devido à necessidade da estimativa inicial de variáveis auxiliares (adjuntas), sem significado físico, para resolver o modelo dinâmico, quando estas não puderem ser eliminadas (QUINTO, 2010). Além disso, estes métodos apresentam dificuldades, ao resolver problemas de dimensão elevada, como é o caso de problemas presentes nas indústrias de processos que possuem modelos muito complexos e com grande número de variáveis. Este princípio é muito utilizado na solução de problemas de balística e astronáutica, e em alguns poucos casos de otimização de sistemas em batelada (ALMEIDA, 2011).

Para contornar esses obstáculos, têm-se os ***métodos diretos*** que fornecem a solução numérica do DAOP e aplicam diretamente os fundamentos da programação

não linear (NLP) ao problema de otimização (SOUZA, 2007). Estes métodos se baseiam na discretização das variáveis ao longo do horizonte de otimização.

Os métodos diretos podem ser divididos em dois tipos, de acordo com o nível de discretização das variáveis do DAOP: *métodos sequenciais* (discretização parcial) e *métodos simultâneos* (discretização total).

Nos **métodos sequenciais**, apenas as variáveis de controle são discretizadas, sendo as variáveis de estado obtidas pela integração do sistema de equações algébrico-diferenciais por um método numérico de integração (ex.: método de Runge-Kutta). Para resolver um DAOP usando este método, inicialmente se faz a discretização da variável de controle que é feita dividindo o horizonte de tempo em subintervalos (iguais ou diferentes), onde as variáveis de controle serão aproximadas ou representadas por uma função (ex.: expansão polinomial de Lagrange, splines, constantes por partes, linear por partes, etc.), integra-se o sistema de DAEs ao longo desse horizonte, calcula-se a função objetivo e os gradientes e após isso se resolve o problema NLP (*Non-Linear Programming*), usando um algoritmo de otimização (ex.: SQP, rSQP, Ponto-Interior).

Para fins ilustrativos, é exibido na Figura 2.2, uma trajetória de variável de controle usando uma parametrização constante por partes e outra usando uma parametrização linear por partes.

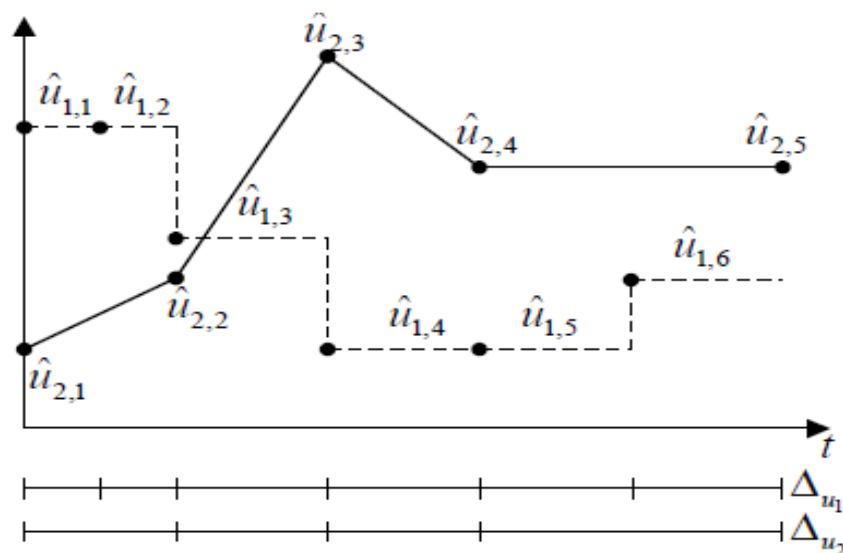


Figura 2.2 – Exemplos de parametrização.

Os métodos sequenciais recebem esse nome, pois resolvem o problema de otimização em uma sequência de integração e otimização (MAGALHÃES, 2010). Podemos citar como exemplos de métodos sequenciais encontrados na literatura, os métodos *single-shooting* e *multiple-shooting*. A abordagem sequencial apresenta bom desempenho na solução de problemas de grande dimensão e de modelos complexos (VASSILIADIS *et al.*, 1994a, 1994b e TOLSMAN e BARTON, 1998).

Os **métodos simultâneos**, além de discretizar as variáveis de controle, também discretizam as variáveis de estado, convertendo o sistema DAEs em equações algébricas. Nestes métodos a integração do sistema de equações algébrico-diferenciais e a otimização, são resolvidos simultaneamente, o que explica o nome do método. Na literatura, pode-se encontrar alguns tipos de métodos simultâneos, como os métodos de *colocação ortogonal*, *colocação em elementos finitos* e *diferenças finitas*.

A abordagem simultânea se consolidou como uma boa opção para solução de problemas de otimização dinâmica, após a aplicação do método em uma série de processos químicos por CUTHRELL (1986) e CUTHRELL e BIEGLER (1989) que permitiu tratar descontinuidades nas variáveis de controle e em algumas de estados (QUINTO, 2010).

Na Figura 2.3 é ilustrado o método de colocação em elementos finitos.

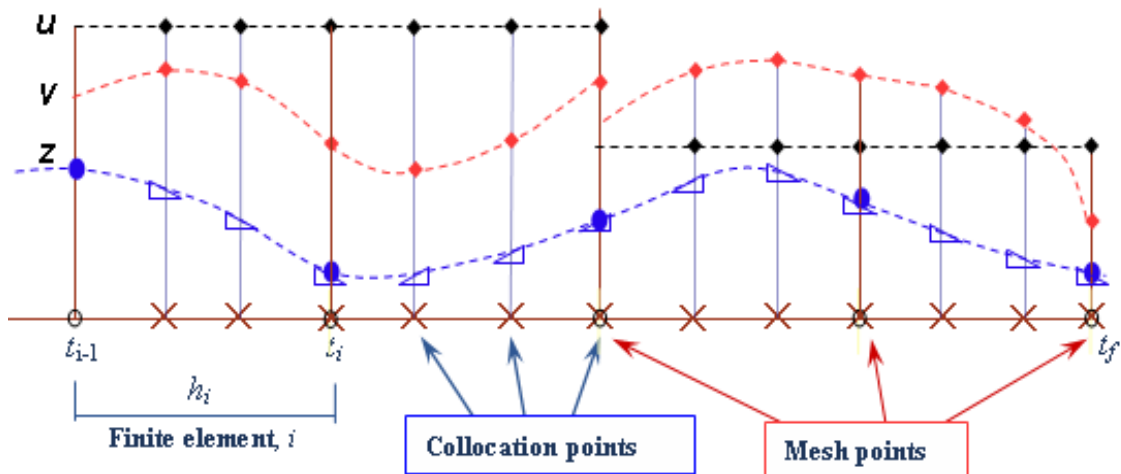


Figura 2.3 – Colocação em elementos finitos (Fonte: Lang e Biegler, 2007).

2.1.4 Exemplo Motivador: Reator CSTR Não Linear

Para fins motivacionais, nesta seção é apresentado um problema de otimização dinâmica multivariável de um reator CSTR não linear resolvido por CANTO *et al.* (2001), Figura 2.4, no qual são manipuladas 4 variáveis de controle: 3 vazões de alimentação e a energia utilizada para promover a reação fotoquímica. O objetivo deste problema é maximizar o lucro do sistema.

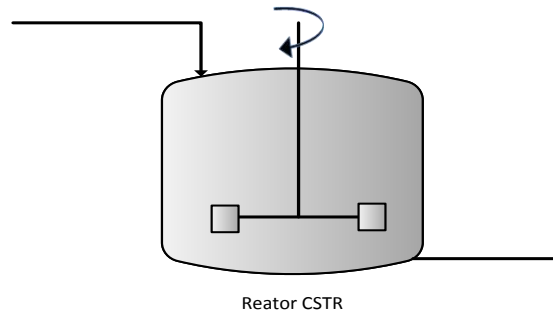


Figura 2.4 – Reator CSTR.

A formulação do DAOP do reator CSTR não linear, segue abaixo:

Maximizar: $J = x_8(t_f)$

Sujeito a:

Restrições de Igualdade:

$$\frac{dx_1}{dt} = u_4 - q \cdot x_1 - 17,6 \cdot x_1 \cdot x_2 - 23 \cdot x_1 \cdot x_6 \cdot u_3$$

$$\frac{dx_2}{dt} = u_1 - q \cdot x_2 - 17,6 \cdot x_1 \cdot x_2 - 146 \cdot x_2 \cdot x_3$$

$$\frac{dx_3}{dt} = u_2 - q \cdot x_3 - 73 \cdot x_2 \cdot x_3$$

$$\frac{dx_4}{dt} = -q \cdot x_4 + 35,2 \cdot x_1 \cdot x_2 - 51,3 \cdot x_4 \cdot x_5$$

$$\frac{dx_5}{dt} = -q \cdot x_5 + 219 \cdot x_2 \cdot x_3 - 51,3 \cdot x_4 \cdot x_5$$

$$\frac{dx_6}{dt} = -q \cdot x_6 + 102,6 \cdot x_4 \cdot x_5 - 23 \cdot x_1 \cdot x_6 \cdot u_3$$

$$\frac{dx_7}{dt} = -q \cdot x_7 + 46 \cdot x_1 \cdot x_6 \cdot u_3$$

$$\frac{dx_8}{dt} = 5,8 \cdot (q \cdot x_1 - u_4) - 3,7 \cdot u_1 - 4,1 \cdot u_2 + q \cdot (23 \cdot x_4 + 11 \cdot x_5 + 28 \cdot x_6 + 35 \cdot x_7) - 5 \cdot u_3^2 - 0,099$$

$$q = u_1 + u_2 + u_4$$

$$t_f = 0.2$$

$$x(t_0) = [0,1883 \quad 0,2507 \quad 0,0467 \quad 0,0899 \quad 0,1804 \quad 0,1394 \quad 0,1046 \quad 0,0000]$$

Restrições de Desigualdade:

$$0 \leq u_1 \leq 20$$

$$0 \leq u_2 \leq 6$$

$$0 \leq u_3 \leq 4$$

$$0 \leq u_4 \leq 20$$

Onde x_1, x_2, \dots, x_8 são as concentrações das espécies, u_1, u_2 e u_4 são as vazões de alimentação e u_3 é a energia para promover a reação fotoquímica.

O método de resolução utilizado no problema foi o método direto sequencial *single-shooting*, com uma função de parametrização constante por partes nas variáveis de controle utilizando 32 estágios para discretizar essas variáveis.

O problema NLP gerado foi resolvido pelo algoritmo de otimização *SQP* (*Sequential Quadratic Programming*), utilizando o solver *fmincon* do MATLAB R2010a, obtendo um valor para a função objetivo igual a 21,806.

As trajetórias das variáveis de controle são apresentadas na Figura 2.5.

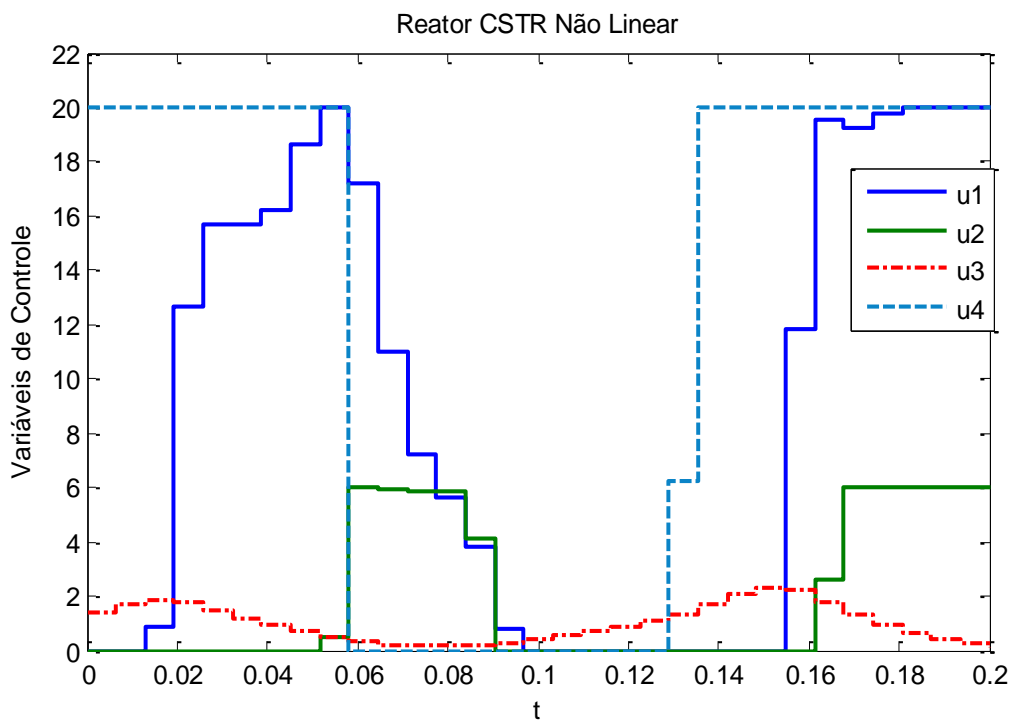


Figura 2.5 – Perfil ótimo das variáveis de controle do CSTR.

2.2 Trabalhos e Pesquisas Recentes

Como a otimização dinâmica é ainda uma ferramenta em fase de consolidação, diferentemente da RTO e do MPC, muitos trabalhos e estudos foram feitos, nos últimos anos, visando contribuir para a consolidação dessa tecnologia. Neles, percebe-se a tentativa de aperfeiçoamento do desempenho dos métodos e algoritmos de otimização dinâmica, através de modificações e até mesmo inserções de ferramentas que melhoram seu desempenho e precisão.

Os problemas de otimização dinâmica de engenharia química são, em sua maioria, de dimensão elevada, possuindo muitas restrições de igualdade e desigualdade que devem ser satisfeitas, tornando difícil a resolução do sistema de equações algébrico-diferencial. Uma característica importante desses problemas é a variação do índice diferencial, que quantifica o nível de dificuldade da resolução do sistema de DAEs, em decorrência da ativação e desativação das restrições de desigualdade ao longo do horizonte de tempo. A variação do índice diferencial eleva o esforço computacional de resolução do DAOP, pois a essa variação estão associadas algumas etapas durante a execução do problema: identificação da ativação e desativação das restrições, redução do índice diferencial, chaveamento e reinicialização do modelo. Além do custo computacional, há algumas desvantagens decorrentes da execução dessas etapas, como a ocorrência de descontinuidades e até mesmo perdas de informações devido à diferenciação.

Algumas alternativas promissoras foram feitas recentemente, visando à melhoria da resolução de sistemas de equações algébrico-diferenciais nos problemas de otimização dinâmica.

SOUZA (2007) seguiu a sugestão de VIEIRA (2001) do uso de funções de regularização no tratamento de descontinuidades presentes na resolução de problemas contendo restrições de desigualdade. Utilizando uma abordagem numérica de resolução de problemas de otimização, as funções de regularização foram aplicadas com sucesso, incorporando as restrições de desigualdade às restrições de igualdade evitando a etapa de reinicialização do modelo.

QUINTO (2010) propôs, com sucesso, uma nova metodologia para a resolução analítica de problemas de otimização dinâmica, fazendo uso de funções regularizadoras e do procedimento de eliminação de variáveis adjuntas, evitando não só a etapa de reinicialização do modelo como também o problema de valor de contorno de difícil resolução associado às variáveis adjuntas, através da eliminação destas, diminuindo o custo computacional.

Existem outros meios de se tratar as discontinuidades presentes em problemas de otimização dinâmica, além do uso de funções de regularização, como a utilização de funções penalidade e funções barreira.

Conforme já dito anteriormente, existem dois métodos de resolução de problemas de otimização dinâmica, os métodos diretos e os indiretos. Porém os métodos indiretos apresentam limitações na resolução do DAOP em engenharia química, que são problemas de dimensão elevada e com grande número de variáveis, logo os métodos diretos são os mais utilizados. Nos métodos diretos, o nível de discretização influencia diretamente na qualidade da solução. Pelo fato dos métodos diretos se tratarem de uma abordagem que fornece a solução numérica do problema, quanto maior o nível de discretização, mais próxima da solução analítica estará a solução numérica, ou seja, mais precisa será a solução, porém o custo computacional aumentará, pois o aumento da discretização resultará em um problema de NLP de dimensões maiores. Por outro lado, uma discretização inadequada pode ocasionar problemas como as imprecisões nas soluções, perdas de oportunidades de otimização, além de afetar o desempenho e robustez do otimizador.

Devido aos fatores negativos citados acima, a adaptação de malhas discretas é um tema da otimização dinâmica que merece grande atenção e onde se encontra um grande potencial para o avanço da otimização dinâmica.

Existem três formas de se realizar a adaptação de malhas, que são: *redistribuição da malha*, *refinamento local da malha*, *alteração do método de solução*. A *redistribuição da malha* se baseia na alocação de pontos na malha de acordo com o erro da região, não havendo alteração do número de pontos dentro da malha. O *refinamento local da malha* se baseia na inclusão e remoção de pontos e a *alteração do método de solução* se baseia na alteração na ordem de aproximação nas regiões de maiores erros ou gradientes sem a mudança da distribuição de pontos.

Alguns métodos de adaptação de malhas utilizam uma das estratégias acima. Os que mais se destacam são: *Adaptação pelo Método de Betts* (BETTS e HUFFMAN, 1998), *Adaptação por Métodos Simultâneos* (TANARTKIT e BIEGLER, 1997) e *Adaptação Multi-escalas*.

O método de adaptação multi-escalas utiliza a estratégia de refinamento local da malha e tem-se destacado nos últimos anos, com alguns trabalhos importantes na área de otimização dinâmica. BINDER *et al.* (2000) evidenciam a utilização de malhas adaptativas para a parametrização da variável de controle. Em SCHLEGEL *et al.* (2004), as funções wavelets foram utilizadas para avaliação dos pontos em potencial da malha.

A adaptação multi-escalas é feita de forma cíclica que consiste nas etapas: otimização do processo, geralmente usando uma malha uniforme; adaptação da malha no domínio wavelets; análise e proposta de uma nova malha do domínio wavelets;

reconstrução da malha no domínio do tempo e re-otimização do processo. Primeiramente é realizada uma otimização dinâmica, obtendo um perfil ótimo. A partir deste perfil, faz-se uma transformada wavelets, obtendo o mesmo no domínio wavelets. Após isso, é feita o procedimento de descarte e inclusão de pontos de discretização, através da análise dos coeficientes wavelets da malha, utilizando uma política de limiarização (*thresholding*). Os coeficientes de grande magnitude, que estiverem acima deste limiar, não serão descartados e representam regiões propensas à inclusão de pontos na malha, já os coeficientes que estiverem abaixo, serão descartados, pois representam regiões da malha, nas quais não há necessidade de muitos pontos para uma representação adequada. Depois de ter sido feito o procedimento de descarte e inclusão de pontos, é feita a transformada wavelets inversa, transformando a malha já adaptada, do domínio wavelets para o domínio tempo, obtendo uma malha precisa com um número mínimo de pontos. Com esta malha adaptada, faz-se uma nova otimização, repetindo as etapas abordadas acima.

A literatura dispõe de algumas políticas de limiarização (*thresholding*) que podem ser usadas na análise dos coeficientes wavelets. SANTOS *et al.* (2012), analisaram a influência das regras de *thresholding*, nos problemas de controle ótimo e concluíram que deve ser feita uma escolha adequada dessas regras disponíveis, a fim de obter um boa adaptação da malha.

A otimização dinâmica em tempo real (DRTO) é uma aplicação *online*, sendo executada de forma cíclica e conectada à planta, onde se coletam informações de instrumentos da planta e se realiza o cálculo da trajetória ótima das variáveis de controle, com o auxílio de algoritmos de otimização dinâmica. Os valores das ações de controle calculadas, são implementados na planta na forma de *set-points* ou em sistemas de controle avançado (MPC), como trajetórias de referência, alterando o ponto de operação.

Vale ressaltar que os sistemas de otimização dinâmica *off-line*, como o gPROMS, estão praticamente consolidados e maduros, porém as aplicações em tempo real ainda estão em fase de desenvolvimento e ainda há grandes evoluções a serem feitas nesta área. Visto isso, algumas tentativas de aplicação da otimização dinâmica foram feitas ao longo desses últimos anos.

Recentemente, surgiram as primeiras iniciativas no intuito de criar uma estrutura de D-RTO tal qual a estrutura de RTO (otimização estacionária). BACKX, BOSGRA e MARQUARDT (2000) propuseram uma estrutura de D-RTO integrando com NMPC. KADAM *et al.* (2002) fizeram uma análise das diferentes estruturas de D-RTO, introduzindo o conceito de disparador de D-RTO.

MAGALHÃES (2010), desenvolveu uma nova estrutura de D-RTO (Otimização Dinâmica em Tempo Real) para operar em plantas de processo, que foi testada em um

reator CSTR com cinética de Van der Vusse. Foi realizado um estudo de caso, otimizando dinamicamente o sistema, com a presença de perturbações comuns ao processo, usando um método direto de resolução com *single-shooting* e um novo conceito de disparador de D-RTO, que consiste em um módulo que dispara a execução do D-RTO em momentos oportunos melhorando o desempenho da otimização.

ALMEIDA e SECCHI (2006) discutiram uma aplicação de otimização dinâmica em tempo real para uma complexa unidade industrial de FCC (Fluidized-Bed Catalytic Cracking).

A utilização da DRTO é suscetível a instabilidades ou inadequações nos resultados do otimizador, desempenho inadequado ou até mesmo a ocorrência de falhas na solução do DAOP. Sabendo disso, ALMEIDA (2011) desenvolveu um sistema de D-RTO para operar em indústrias de processos, introduzindo algumas melhorias, como também desenvolveu uma ferramenta de diagnóstico e sintonia de D-RTO, fornecendo suporte à operação, identificando e notificando ao engenheiro quando ocorre problemas na solução do problema de otimização dinâmica e buscando novas oportunidades de otimização. ALMEIDA (2011) também ressalta que a presença de inviabilidades é um dos problemas mais frequentes encontrados em operações em tempo real. Visto isso, ele propôs uma metodologia de soluções de inviabilidades baseada na reformulação do DAOP original como um problema de otimização multi-objetivos com relaxamento das restrições.

Houve tentativas de usar ferramentas de otimização em processos de mistura em linha de diesel.

MARCOVISTZ (2011) analisou como as variações na qualidade e na quantidade de insumos como o diesel HDT, nafta pesada, diesel pesado, diesel externo e querosene influenciam no teor de enxofre, ponto de fulgor e densidade do óleo diesel S1800, se baseando em cenários distintos e utilizando o método de otimização de enxame de partículas. Foram verificados os efeitos gerados pelos distúrbios estocásticos e os efeitos gerados pela inclusão de duas correntes de diesel leve como distúrbios determinísticos. Também foi estudado a possibilidade de produção de óleo diesel S500 na mesma unidade de produção do óleo diesel S1800, através de alternativas de insumos ou na forma de controle.

FERREIRA (2008) aliou os conceitos de otimização da cadeia logística e a otimização global de processos. Tendo como cenário a Refinaria de Paulínia (REPLAN), propôs uma modificação na sua hierarquia de decisões de produção, acrescentando mais um nível entre os níveis de programação de produção e detalhamento operacional, para otimizar o processo de produção de óleo diesel interior e óleo diesel metropolitano, visando obter máximo lucro. A necessidade de modificação foi constatada após verificação de que o sistema de mistura em linha existente não

conseguiria produzir a nova especificação de óleo diesel metropolitano com uma vazão razoável, tomando muito tempo do sistema e restringindo o volume total da outra especificação do combustível, o óleo diesel interior (FERREIRA, 2008).

2.3 Óleo Diesel

O óleo diesel é o derivado da destilação do petróleo mais consumido no Brasil e é constituído por hidrocarbonetos saturados de cadeias longas e baixas concentrações de enxofre, nitrogênio e oxigênio. Apresenta características como: odor forte e característico, volatilidade baixa, límpido, medianamente tóxico, isento de material em suspensão e pouco inflamável (PETROBRAS DISTRIBUIDORA). Recebeu este nome em homenagem a Rudolf Diesel que desenvolveu o motor de combustão interna a pressão constante, chamado motor do ciclo diesel.

O óleo diesel é utilizado em motores de combustão interna e ignição por compressão (motores do ciclo diesel) empregados nas mais diversas aplicações, tais como: automóveis, furgões, ônibus, caminhões, pequenas embarcações marítimas, máquinas de grande porte, locomotivas, navios e geradores elétricos (PETROBRAS DISTRIBUIDORA).

O óleo diesel pode ser classificado, de acordo com sua aplicação, em: óleo diesel rodoviário e óleo diesel marítimo.

De acordo com a Resolução ANP Nº 42, o óleo diesel rodoviário pode, por sua vez, ser classificado em óleo diesel A (sem adição de biodiesel) e óleo diesel B (com adição de biodiesel). Cada um desses óleos possuem designações de acordo com o teor de enxofre na sua composição, como pode ser visto abaixo:

- a) Óleo diesel A S50 e B S50: combustíveis com teor de enxofre, máximo, de 50mg/kg (50 ppm).
- b) Óleo diesel A S500 e B S500: combustíveis com teor de enxofre, máximo, de 500mg/kg (500 ppm).
- c) Óleo diesel A S1800 e B S1800: combustíveis com teor de enxofre, máximo, de 1800mg/kg (1800 ppm).

O óleo diesel marítimo pode ser dividido em dois: óleo diesel marítimo comercial e óleo diesel especial para a marinha/ártico.

O óleo diesel marítimo comercial é utilizado em embarcações marítimas, sendo necessário a especificação do ponto de fulgor, para maior segurança em embarcações marítimas, a fim de prevenir explosões nos porões dessas embarcações.

O óleo diesel especial para a marinha/ártico é destinado para atender necessidades militares, apresentando maior rigidez quanto às características de ignição, volatilidade, escoamento a baixas temperaturas e de teor de enxofre.

A ANP, Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis, é o órgão que regula e fiscaliza, o suprimento de derivados de petróleo, gás natural e seus derivados, como também a qualidade destes, interagindo com os diversos segmentos do setor. Esta revisão objetiva regular a qualidade dos combustíveis de forma evolutiva e contínua, interagindo com os diversos segmentos do setor e atendendo aos anseios da sociedade quanto à adequação ao uso, à realidade brasileira, à sustentabilidade do desenvolvimento energético, à proteção do meio ambiente e aos direitos do consumidor (FERREIRA, 2008).

A ANP estabelece as especificações técnicas (características físico-químicas) dos derivados de petróleo, gás natural e dos biocombustíveis e realiza permanente monitoramento da qualidade desses produtos nos pontos-de-venda (AGÊNCIA NACIONAL DO PETRÓLEO, GÁS NATURAL E BIOCOMBUSTÍVEIS – ANP). Essas especificações são os valores limites que as propriedades mais relevantes do combustível pode assumir.

As propriedades mais relevantes do óleo diesel rodoviário, que a ANP atribui especificações, são: Ponto de Fulgor, Teor de Enxofre, Massa Específica, Viscosidade, Ponto de Entupimento, Número de Cetano, Destilação 50 %, 85% e 90% recuperados.

A descrição das propriedades acima e seu significado para a qualidade do óleo diesel, estão resumidas abaixo:

- a) **Ponto de Fulgor:** É a menor temperatura na qual o combustível se vaporiza em quantidade suficiente para formar com o ar uma mistura inflamável, na presença de uma fonte de calor, sem que ocorra a combustão do combustível. O monitoramento desta propriedade é muito importante no que se refere a segurança, devido aos riscos de transporte, armazenagem e manuseio do combustível. O ponto de fulgor é uma propriedade que difere líquidos combustíveis, que apresentam ponto de fulgor igual ou superior a 70°C e inferior a 93,3°C, de inflamáveis, que apresentam ponto de fulgor inferior a 70°C e pressão de vapor que não exceda 2,8 kg/cm² absoluta a 37,7°C.

- b) **Teor de Enxofre:** O enxofre é um contaminante presente nos derivados do petróleo, como o diesel. Sua presença é muito indesejada devido a formação de compostos corrosivos na combustão, danificando as partes metálicas dos motores e também a formação de compostos que são emitidos na atmosfera, nocivos a saúde, causando por exemplo, problemas respiratórios e também compostos responsáveis pela formação de chuva ácida. Por tudo isso a concentração de enxofre é uma propriedade muito importante a ser controlada, no processo de produção de diesel. Mas se por um lado, a presença de enxofre é indesejada, por outro, é um benefício para o combustível, pois aumenta sua lubricidade, logo é necessária a utilização de aditivo a fim de corrigir a lubricidade em processos destinados à redução de enxofre.
- c) **Massa Específica:** Indica a quantidade de massa por unidade de volume do combustível que é injetada no motor. Como os motores são projetados para operar com combustíveis em uma determinada faixa de massa específica e sabendo que a bomba injetora alimenta o motor com volumes constantes, se a massa específica aumentar acima desta faixa, a massa de combustível injetada aumentará, levando a uma mistura rica de ar/combustível, aumentando assim a emissão de poluentes como hidrocarbonetos, monóxido de carbono e material particulado. Já se a massa específica diminuir, a massa de combustível injetada diminuirá, levando a formação de uma mistura pobre de ar/combustível, o que ocasiona uma perda de potência do motor e ao aumento de consumo de combustível. Logo, a especificação da massa específica corresponde a um compromisso entre potência e emissões.
- d) **Viscosidade:** É uma medida da resistência do líquido ao escoamento e apresenta variações com a temperatura do fluido em uma proporção inversa. Quanto maior a viscosidade, menor a eficiência do sistema de injeção de combustível, já que a atomização se torna grosseira, aumentando o tamanho das gotículas e diminuindo a área de contato com os gases pressurizados no interior da câmara de combustão, inibindo a evaporação do combustível e favorecendo a queima incompleta. Já baixos valores de viscosidade geram desgastes precoces nos elementos do sistema de injeção de combustível, que requerem lubrificação, queda na capacidade de pressurização do combustível pelo sistema de injeção, comprometendo a combustão. Logo, a viscosidade do diesel deve estar contida em uma faixa (limite superior e inferior).
- e) **Ponto de Entupimento:** É a maior temperatura em que o diesel, quando resfriado não flui através de um filtro padronizado, ou leva mais de 60 segundos para passar através do filtro, devido aos cristais formados pela deposição de parafinas, os quais tem tamanho suficiente para entupir um filtro

padrão. Esta propriedade está relacionada ao escoamento do diesel a baixas temperaturas.

- f) **Número de Cetano:** Indica a capacidade de uma mistura de ar e combustível entrar em ignição espontânea (ou autoignição) quando submetida à compressão. Diferentemente dos motores à gasolina ou álcool, que tem uma ignição por centelha, nos motores diesel, o início da combustão se dá por autoignição do combustível, quando comprimido junto com o ar. Então o número de cetano deve ser alto o suficiente para permitir boa qualidade de ignição e operação suave do motor. Caso o número de cetano seja baixo, haverá dificuldade na partida do motor a frio, depósito nos pistões, aparecimento de fumaça branca na exaustão devido à combustão incompleta e mau funcionamento do motor, aumento de ruído (batida diesel) que é devido ao atraso da ignição ocasionado pelo acúmulo de combustível sem queimar na câmara, que quando entra em autoignição, provoca aumento brusco de pressão e um forte ruído característico. O número de cetano pode ser aumentado através do uso de aditivos.

- g) **Destilação 50% recuperado:** É a temperatura na qual, 50% do volume do produto é destilado. Esta análise visa controlar a relação entre o teor de frações leves e pesadas no produto com objetivo, entre outros de possibilitar um bom desempenho do motor quando o mesmo já se encontra em regime normal de funcionamento e nas retomadas de velocidade. As características dessa fração do diesel têm influência na facilidade de partida dos motores, pois a ela está relacionada à facilidade de ignição desse combustível.

- h) **Destilação 85% recuperado:** É a temperatura na qual 85% do volume do produto é destilado. Esta análise visa controlar o teor de frações pesadas no óleo com o objetivo de minimizar a formação de depósitos no motor, as emissões gasosas de hidrocarbonetos não queimados, a emissão de fumaça preta e de óxidos de nitrogênio.

- i) **Destilação 90% recuperado:** É a temperatura na qual 90% do volume do produto é destilado. Esta avalia a contaminação por materiais com alto ponto de ebulição, a exemplo de óleos usados de motor.

Na Resolução ANP N° 42, ficaram estabelecidas as especificações do óleo diesel A e B, de uso rodoviário, para comercialização em todo o território nacional. Algumas dessas especificações são mostradas na Tabela 2.1.

Tabela 2.1 – Especificações do Óleo Diesel

Característica	Óleo Diesel		
	S50	S500	S1800
Ponto de Fulgor mín. (°C)	38		
Teor de Enxofre máx. (mg/kg)	50	500	1800
Massa Específica a 20°C (kg/m ³)	820 a 850	820 a 865	820 a 880
Viscosidade a 40°C (mm ² /s)	2 a 5		
Ponto de Entupimento de filtro a frio, máx. (°C)	dez a mar	12	
	abr e set	7	
	mai a ago	3	
	out e nov	9	
Número de Cetano mín.	46	46	42
Destilação 50% vol. Recuperado (°C)	245 a 310		
Destilação 85% vol. recuperado, máx. (°C)	-	360	370
Destilação 90% vol. recuperado, máx. (°C)	360	-	-

Capítulo 3

Processo de Mistura em Linha de Diesel

3.1 Unidade de Produção

O processo estudado consiste em um misturador em linha que é alimentado por sete correntes, nas quais seis são provenientes de tanques de nível, cada um contendo um dos seguintes componentes: diesel externo, querosene, diesel pesado, diesel HDT (hidrotratado) e duas com nafta pesada e uma corrente de diesel leve que é proveniente da unidade de obtenção de diesel leve. Após o misturador em linha ser alimentado pelas sete correntes, o produto deste misturador segue para um tanque de produto final. O processo pode ser ilustrado através da Figura 3.1.

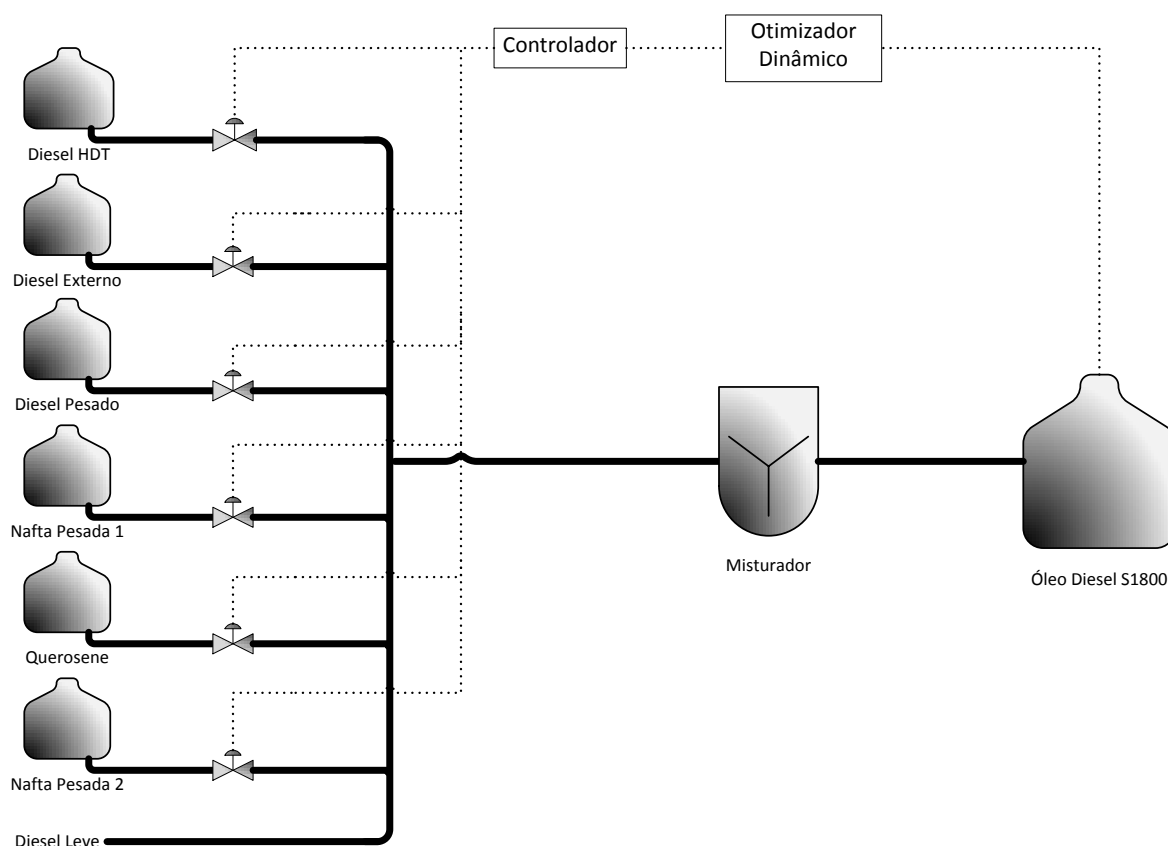


Figura 3.1 – Unidade de Mistura em Linha de Diesel.

Os componentes que alimentam o MLD (Misturador em Linha de Diesel) são produtos intermediários oriundos de unidades de processo (destilação atmosférica e a vácuo, hidrotratamento, craqueamento catalítico e coqueamento retardado). A nafta pesada, o querosene, o diesel leve e o diesel pesado são produtos da unidade de destilação atmosférica. O diesel HDT é oriundo da unidade de hidrotratamento de diesel através do processamento de parte do diesel pesado e produtos das unidades de craqueamento catalítico e de coqueamento retardado. Já o diesel externo não provém de nenhuma unidade da refinaria onde é realizado o *blend*, esse diesel é importado.

As vazões das correntes de insumos serão manipuladas pelo otimizador dinâmico, com exceção da corrente de diesel leve, sendo esta considerada corrente selvagem, ou seja, uma corrente que não é controlada, podendo ser considerada uma perturbação no processo. O otimizador dinâmico fornecerá a trajetória ótima das vazões de cada componente como *set-points*, para um controlador PI, a fim de minimizar o custo de produção e obter o óleo diesel S1800 dentro das especificações impostas pela ANP.

Analísadores estarão presentes no tanque final, a fim de monitorar as qualificações do diesel. As propriedades físico-químicas do produto que serão monitoradas são: teor de enxofre, massa específica, ponto de fulgor, viscosidade, número de cetano, ponto de entupimento, destilação 50% vol. recuperados, destilação 85% vol. recuperados, destilação 90% vol. recuperados.

As propriedades dos componentes de cada tanque e da corrente de diesel leve, junto com as especificações do óleo diesel S1800, segundo a Resolução ANP N° 42, são mostradas respectivamente nas Tabelas 3.1 e 3.2.

Tabela 3.1 – Propriedades dos componentes dos tanques

Tanque	Propriedades									
	S	T50R	T85R	T90R	ρ	PF	μ	PE	NC	PA
Diesel HDT	143	308,8	376,7	377,8	876,1	40	2	8	43	58
Diesel Externo	1576	0	367,5	377,8	848,2	41,5	2	6	43	65,4
Diesel Pesado	4251	350,2	392,2	397,8	892,7	40	2	10	41	60
Nafta Pesada 1	484	181,6	200,7	377,8	794,9	45	2	10	43	60,7
Querosene	1077	280	246,1	264,5	811,3	53,5	2	-10	47	59,1
Nafta Pesada 2	406	147,7	192,5	216,8	772,8	41	2	10	43	48
Diesel Leve	1500	300	340	377,8	820	10	2	10	43	60

Tabela 3.2 – Especificações do Diesel S1800

Propriedade	Diesel S1800	
	mín	máx
Teor de Enxofre, S (ppm)	-	1800
50% vol. Recuperados, T50% (°C)	245	310
85% vol. Recuperados, T85% (°C)	-	370
90% vol. Recuperados, T90% (°C)	-	-
massa específica, ρ (kg/m ³)	820	880
ponto de fulgor, PF (°C)	38	-
viscosidade, μ (mm ² /s)	2	5
ponto de entupimento, PE (°C)	-	10
número de cetano, NC	42	-

A Tabela 3.1 contém as propriedades dos componentes de cada tanque. Os valores das propriedades em vermelho são os valores que não atendem as restrições impostas pela ANP.

Pode ser observado pela Tabela 3.2 que a restrição de máximo do ponto de entupimento foi considerada como sendo 10°C, pois essa restrição na Resolução ANP N° 42 varia ao longo do ano, como pode ser visto na Tabela 2.1.

Os preços de cada componente presente em cada tanque, para o cálculo do custo, estão apresentados na Tabela 3.3.

Tabela 3.3 – Preços dos componentes dos Tanques

Tanque	Diesel HDT	Diesel Externo	Diesel Pesado	Nafta Pesada 1	Querosene	Nafta Pesada 2	Diesel Leve
Preço (R\$/m ³)	345,73	500,29	379,22	368	493,42	368,67	438,48

3.2 Modelagem do Processo de MLD

A seguir será apresentada a modelagem do processo de mistura em linha de diesel, contendo as equações que calcularão as propriedades e outros parâmetros do processo em cada equipamento, como também algumas considerações que foram feitas no andamento do projeto.

O índice i se refere aos componentes, diesel hidrotratado, diesel externo, diesel pesado, nafta pesada 1, querosene, nafta pesada 2 e diesel leve, cujas notações são respectivamente, $i = DH, DE, DP, NP1, Q, NP2, DL$.

3.2.1 Válvulas e Tanques Iniciais

Os tanques iniciais são tanques de níveis, não alimentados e não pressurizados, ou seja, à pressão atmosférica. Cada um desses tanques possuirá um dos componentes que contribuirão para a mistura. Foram utilizadas válvulas com dinâmica linear em cada um desses tanques. As equações do modelo de cada um desses equipamentos se encontram abaixo.

$$\text{Nível do Tanque:} \quad \frac{d(A_{T,i} \cdot h_{T,i})}{dt} = -F_i \quad (3.1)$$

$$\text{Eq. Válvula:} \quad F_i = fc_i \cdot cv_i \cdot \sqrt{\frac{P_{q,i} \cdot \rho_{ref}}{\rho_i}} \quad (3.2)$$

$$fc_i = x \quad (3.3)$$

$$\text{Pressão:} \quad P_{i,s,v} = P_e + \rho_i \cdot g \cdot h_{T,i} - P_{q,i} \quad (3.4)$$

- Onde:
- $P_{i,s,v}$ - Pressão na saída da válvula da corrente do componente i
 - P_e - Pressão na superfície do tanque
 - $P_{q,i}$ - Queda de pressão na válvula do componente i
 - $A_{T,i}$ - Área da seção transversal do tanque contendo o componente i
 - $h_{T,i}$ - Nível do componente i no tanque

- F_i - Vazão volumétrica do componente i
- fc_i - Função de abertura da válvula da corrente do componente i
- cv_i - Coeficiente da válvula da corrente do componente i
- ρ_i - Massa específica do componente i
- ρ_{ref} - Densidade de referência
- g - Aceleração da gravidade

Na Tabela 3.4, são apresentados os valores dos parâmetros utilizados.

Tabela 3.4 - Parâmetros de modelo do tanque e da válvula

$cv_i = 38 \text{ m}^3/\text{h}/\text{kPa}^{0,5}$, $\rho_{ref} = 999 \text{ kg}/\text{m}^3$ $g = 9,8 \text{ m}/\text{s}^2$ $P_e = 1 \text{ atm}$ $P_{i,s,v} = 1 \text{ atm}$	para todo i, com exceção de DL.
---	---------------------------------

Vale ressaltar que a presença ou a ausência de diesel leve não provocará alteração no modelo do tanque e da válvula, já que o diesel leve é proveniente diretamente da unidade e não de um tanque, como os outros componentes, como pode ser visto na Figura 3.1.

3.2.2 Misturador

No misturador não há reação química e também não há acúmulo, logo no balanço material, os termos de geração, consumo e acúmulo são iguais a zero. Não há dinâmica no misturador. As equações do modelo para o cálculo da vazão que sai do misturador e de outras propriedades são apresentadas abaixo.

Os líquidos presentes na mistura foram considerados incompressíveis.

A massa específica e o teor de enxofre, por serem propriedades aditivas, são calculados diretamente por uma média ponderada, na qual os pesos são as frações volumétricas de cada componente, já as outras propriedades, por serem não aditivas, são calculadas de forma indireta utilizando o conceito de índice de mistura. Esta metodologia de cálculo consiste em: (1) obter o índice de mistura da propriedade para cada componente (IPi) a partir da propriedade de cada componente; (2) obter o índice

de mistura da propriedade para o produto (IPM), através de uma média ponderada dos índices dos componentes e, finalmente, (3) obter a propriedade da mistura (PM), a partir da inversa da função utilizada para calcular os índices de mistura dos componentes. O método utilizado para o cálculo dessas propriedades se encontra nas equações abaixo.

Vazão de saída do misturador:
$$F_M = \sum_i F_i \quad (3.5)$$

Massa Específica:
$$\rho_M = \frac{\sum_i \rho_i \cdot F_i}{F_M} \quad (3.6)$$

Teor de Enxofre:
$$S_M = \frac{\sum_i S_i \cdot \rho_i \cdot F_i}{\rho_M \cdot F_M} \quad (3.7)$$

Ponto de Fulgor:
$$PF - Ra_i = 1.8 \cdot (PF_i + 273.15) \quad (3.8)$$

(Método de Hu-Burns)
$$IPF_i = 10000 \cdot \left(\frac{PF - Ra_i}{459.67} \right)^{-1/0.038} \quad (3.9)$$

$$IPF_M = \frac{\sum_i IPF_i \cdot F_i}{F_M} \quad (3.10)$$

$$PF - Ra_M = 459.67 \cdot \left(\frac{IPF_M}{10000} \right)^{-0.038} \quad (3.11)$$

$$PF_M = \frac{PF - Ra_M}{1.8} - 273.15 \quad (3.12)$$

Viscosidade: (Método de Chevron)
$$I\mu_i = \frac{\ln(\mu_i)}{\ln(1000 \cdot \mu_i)} \quad (3.13)$$

$$I\mu_M = \frac{\sum_i I\mu_i \cdot F_i}{F_M} \quad (3.14)$$

$$\mu_M = 1000^{\left(\frac{I\mu_M}{1 - I\mu_M} \right)} \quad (3.15)$$

Destilação 50% vol.:
$$IT50R_i = \frac{1.8 \cdot T50R_i + 32}{546.1} \quad (3.16)$$

(Método Direto
Linear por Partes)

$$IT50R_M = \frac{\sum_i IT50R_i \cdot F_i}{F_M} \quad (3.17)$$

$$T50R_M = \frac{546.1 \cdot IT50R_M - 32}{1.8} \quad (3.18)$$

Destilação 85%
vol.:

(Método Direto
Linear por Partes)

$$IT85R_i = \left(\frac{1.8 \cdot T85R_i + 32}{546.1} \right)^{7.8} \quad (3.19)$$

$$IT85R_M = \frac{\sum_i IT85R_i \cdot F_i}{F_M} \quad (3.20)$$

$$T85R_M = \frac{546.1 \cdot (IT85R_M)^{1/7.8} - 32}{1.8} \quad (3.21)$$

Destilação 90%
vol.:

(Método Direto
Linear por Partes)

$$IT90R_i = \left(\frac{1.8 \cdot T90R_i + 32}{546.1} \right)^{7.8} \quad (3.22)$$

$$IT90R_M = \frac{\sum_i IT90R_i \cdot F_i}{F_M} \quad (3.23)$$

$$T90R_M = \frac{546.1 \cdot (IT90R_M)^{1/7.8} - 32}{1.8} \quad (3.24)$$

Número de
Cetano:

(Método Replan)

$$IPA_i = \exp(-0.011 \cdot (1.8 \cdot PA_i + 32)) \quad (3.25)$$

$$IPA_M = \frac{\sum_i IPA_i \cdot F_i}{F_M} \quad (3.26)$$

$$PA_M = \frac{\left(\frac{-\ln(IPA_M)}{0.011} - 32 \right)}{1.8} \quad (3.27)$$

$$NC_M = \left(\frac{-0.2}{0.011} \right) \cdot \ln(IPA_M) - 17,39 \cdot \left(\frac{\rho_M}{1000} \right) + 45.354 \quad (3.28)$$

Ponto de
Entupimento:

(Método de
Chevron)

$$PE_{-F_i} = 1.8 \cdot PE_i + 32 \quad (3.29)$$

$$IPE_i = \exp(0.035 \cdot PE_{-F_i}) \quad (3.30)$$

$$IPE_M = \frac{\sum_i IPE_i \cdot F_i}{F_M} \quad (3.31)$$

$$PE_{-F_M} = \frac{\ln(IPE_M)}{0.035} \quad (3.32)$$

$$PE_M = \frac{PE - F_M - 32}{1.8} \quad (3.33)$$

O cálculo do número de cetano é um caso particular, pois é necessário calcular o ponto de anilina, que é uma propriedade auxiliar, para obter seu valor.

A descrição das variáveis do modelo do misturador é visualizada na Tabela 3.5.

Tabela 3.5 – Variáveis do modelo do misturador

Simbologia	Descrição
F_M	Vazão de saída do misturador
ρ_M	Massa específica da mistura que sai do misturador
S_i	Teor de enxofre do componente i
S_M	Teor de enxofre da mistura que sai do misturador
PF_i	Ponto de fulgor do componente i
$PF - Ra_i$	Ponto de fulgor do componente i em rankine
$PF - Ra_M$	Ponto de fulgor da mistura que sai do misturador em rankine
PF_M	Ponto de fulgor da mistura que sai do misturador em graus celsius
IPF_i	Índice do ponto de fulgor do componente i
IPF_M	Índice do ponto de fulgor da mistura que sai do misturador
μ_i	Viscosidade cinemática do componente i
μ_M	Viscosidade cinemática da mistura que sai do misturador
$I\mu_i$	Índice da Viscosidade cinemática do componente i
$I\mu_M$	Índice da viscosidade cinemática da mistura que sai do misturador
$T50R_i$	Temperatura na qual se tem 50% vol. do componente i recuperado
$T50R_M$	Temperatura na qual se tem 50% vol. da mistura recuperada
$IT50R_i$	Índice da temperatura para 50% vol. do componente i recuperado
$IT50R_M$	Índice da temperatura na qual se tem 50% vol. da mistura recuperada
$T85R_i$	Temperatura na qual se tem 85% vol. do componente i recuperado
$T85R_M$	Temperatura na qual se tem 85% vol. da mistura recuperada
$IT85R_i$	Índice da temperatura para 85% vol. do componente i recuperado
$IT85R_M$	Índice da temperatura na qual se tem 85% vol. da mistura recuperada
$T90R_i$	Temperatura na qual se tem 90% vol. do componente i recuperado
$T90R_M$	Temperatura na qual se tem 90% vol. da mistura recuperada
$IT90R_i$	Índice da temperatura para 90% vol. do componente i recuperado
$IT90R_M$	Índice da temperatura na qual se tem 90% vol. da mistura recuperada
PA_i	Ponto de anilina do componente i
PA_M	Ponto de anilina da mistura que sai do misturador
IPA_i	Índice do Ponto de anilina do componente i

IPA_M	Índice do Ponto de anilina da mistura que sai do misturador
NC_M	Número de cetano da mistura que sai do misturador
PE_i	Ponto de entupimento do componente i
PE_{-F_i}	Ponto de entupimento do componente i em fahrenheit
PE_{-F_M}	Ponto de entupimento da mistura que sai do misturador em fahrenheit
PE_M	Ponto de entupimento da mistura que sai do misturador em celsius
IPE_i	Índice do Ponto de entupimento do componente i
IPE_M	Índice do Ponto de entupimento da mistura que sai do misturador

3.2.3 Tanque Final

O tanque final armazena o produto final, que é o óleo diesel S1800, proveniente do misturador. Diferentemente do que ocorre no misturador, no tanque final há acúmulo, logo há dinâmica no nível, como também nas propriedades, já que a participação de cada componente na mistura varia com o tempo. As equações do modelo do tanque se encontram abaixo.

$$\text{Nível do Tanque: } \frac{dh_{Tf}}{dt} = F_M / A_{Tf} \quad (3.34)$$

$$\text{Volume do Tanque Final: } V_{Tf} = h_{Tf} \cdot A_{Tf} \quad (3.35)$$

$$\text{Massa Específica: } \frac{d(\rho_{Tf} \cdot V_{Tf})}{dt} = \rho_M \cdot F_M \quad (3.36)$$

$$\text{Teor de Enxofre: } \frac{d(S_{Tf} \cdot \rho_{Tf} \cdot V_{Tf})}{dt} = \rho_M \cdot F_M \cdot S_M \quad (3.37)$$

$$\text{Ponto de Fulgor: } PF_{-Ra_M} = 1.8 \cdot (PF_M + 273.15) \quad (3.38)$$

$$IPF_M = 10000 \cdot \left(\frac{PF_{-Ra_M}}{459.67} \right)^{-1/0.038} \quad (3.39)$$

$$\frac{d(IPF_{Tf} \cdot V_{Tf})}{dt} = F_M \cdot IPF_M \quad (3.40)$$

$$PF_{-Ra_{Tf}} = 459.67 \cdot \left(\frac{IPF_{Tf}}{10000} \right)^{-0.038} \quad (3.41)$$

$$PF_{Tf} = \frac{PF - Ra_{Tf}}{1.8} - 273.15 \quad (3.42)$$

Viscosidade:

$$I\mu_M = \frac{\ln(\mu_M)}{\ln(1000 \cdot \mu_M)} \quad (3.43)$$

$$\frac{d(I\mu_{Tf} \cdot V_{Tf})}{dt} = F_M \cdot I\mu_M \quad (3.44)$$

$$\mu_{Tf} = 1000^{\left(\frac{I\mu_{Tf}}{1-I\mu_{Tf}}\right)} \quad (3.45)$$

Destilação 50%
vol.:

$$IT50R_M = \frac{1.8 \cdot T50R_M + 32}{546.1} \quad (3.46)$$

$$\frac{d(IT50R_{Tf} \cdot V_{Tf})}{dt} = F_M \cdot IT50R_M \quad (3.47)$$

$$T50R_{Tf} = \frac{546.1 \cdot IT50R_{Tf} - 32}{1.8} \quad (3.48)$$

Destilação 85%
vol.:

$$IT85R_M = \left(\frac{1.8 \cdot T85R_M + 32}{546.1}\right)^{7.8} \quad (3.49)$$

$$\frac{d(IT85R_{Tf} \cdot V_{Tf})}{dt} = F_M \cdot IT85R_M \quad (3.50)$$

$$T85R_{Tf} = \frac{546.1 \cdot (IT85R_{Tf})^{1/7.8} - 32}{1.8} \quad (3.51)$$

Destilação 90%
vol.:

$$IT90R_M = \left(\frac{1.8 \cdot T90R_M + 32}{546.1}\right)^{7.8} \quad (3.52)$$

$$\frac{d(IT90R_{Tf} \cdot V_{Tf})}{dt} = F_M \cdot IT90R_M \quad (3.53)$$

$$T90R_{Tf} = \frac{546.1 \cdot (IT90R_{Tf})^{1/7.8} - 32}{1.8} \quad (3.54)$$

Número de
Cetano:

$$IPA_M = \exp(-0.011 \cdot (1.8 \cdot PA_M + 32)) \quad (3.55)$$

$$\frac{d(IPA_{Tf} \cdot V_{Tf})}{dt} = F_M \cdot IPA_M \quad (3.56)$$

$$PA_{Tf} = \frac{\left(\frac{-\ln(IPA_{Tf})}{0.011} - 32\right)}{1.8} \quad (3.57)$$

$$NC_{Tf} = \left(\frac{-0.2}{0.011}\right) \cdot \ln(IPA_{Tf}) - 17.39 \cdot \left(\frac{\rho_M}{1000}\right) + 45.354 \quad (3.58)$$

Ponto de Entupimento: $PE_{F_M} = 1.8 \cdot PE_M + 32$ (3.59)

$$IPE_M = \exp(0.035 \cdot PE_{F_M}) \quad (3.60)$$

$$\frac{d(IPE_{Tf} \cdot V_{Tf})}{dt} = F_M \cdot IPE_M \quad (3.61)$$

$$PE_{F_{Tf}} = \frac{\ln(IPE_{Tf})}{0.035} \quad (3.62)$$

$$PE_{Tf} = \frac{PE_{F_{Tf}} - 32}{1.8} \quad (3.63)$$

Da mesma forma que no misturador, é utilizado o ponto de anilina como propriedade auxiliar, para o cálculo do número de cetano.

A descrição das variáveis do modelo do tanque final é visualizada na Tabela 3.6. Vale lembrar que algumas variáveis utilizadas no modelo do tanque final, já foram apresentadas no modelo do misturador, na Tabela 3.5.

Tabela 3.6 – Variáveis do modelo do tanque final

Simbologia	Descrição
h_{Tf}	Nível do tanque final
A_{Tf}	Área da seção transversal do tanque final
V_{Tf}	Volume do tanque final
ρ_{Tf}	Massa específica do produto final
S_{Tf}	Teor de enxofre do produto final
$PF_{Ra_{Tf}}$	Ponto de fulgor do produto final em rankine
PF_{Tf}	Ponto de fulgor do produto final em graus celsius
IPF_{Tf}	Índice do ponto de fulgor do produto final
μ_{Tf}	Viscosidade cinemática do produto final
$I\mu_{Tf}$	Índice da Viscosidade cinemática do tanque final
$T50R_{Tf}$	Temperatura na qual se tem 50% vol. do produto final recuperado
$IT50R_{Tf}$	Índice da temperatura na qual se tem 50% vol. do produto final recuperado
$T85R_{Tf}$	Temperatura na qual se tem 85% vol. do produto final recuperado
$IT85R_{Tf}$	Índice da temperatura na qual se tem 85% vol. do produto final recuperado
$T90R_{Tf}$	Temperatura na qual se tem 90% vol. do produto final recuperado
$IT90R_{Tf}$	Índice da temperatura na qual se tem 90% vol. do produto final recuperado

PA_{Tf}	Ponto de anilina do produto final
IPA_{Tf}	Índice do Ponto de anilina do produto final
NC_{Tf}	Número de cetano do produto final
PE_{Tf}	Ponto de entupimento do tanque final
$PE - F_{Tf}$	Ponto de entupimento do produto final em fahrenheit
IPE_{Tf}	Índice do Ponto de entupimento do produto final

3.3 Formulação do DAOP do Problema de Mistura em Linha de Diesel

Para a formulação do DAOP do processo de mistura em linha de diesel, algumas observações devem ser feitas.

Primeiramente, o problema de otimização dinâmica de mistura em linha de diesel em linha consiste em um problema de otimização multivariável, no qual as variáveis de controle do problema, que são as variáveis de decisão do problema de otimização, são as vazões de saída dos tanques, cada um contendo, um desses componentes: diesel HDT, diesel externo, diesel pesado, querosene, nafta pesada 1 e nafta pesada 2. Essas variáveis serão manipuladas pelo otimizador, a fim de buscar o perfil de vazões que minimize o custo de produção, obtendo óleo diesel S1800 dentro das especificações segundo a Tabela 3.2.

Todas as restrições de desigualdade nas propriedades monitoradas são restrições de tempo final.

Adaptando a formulação geral dada pela equação 2.1, ao modelo do processo de MLD descrito na seção 3.2, tem-se:

Minimizar:
$$C(t) = \int_0^{tf} (F_{DH} \cdot P_{DH} + F_{DE} \cdot P_{DE} + F_{DP} \cdot P_{DP} + F_{NP1} \cdot P_{NP1} + F_Q \cdot P_Q + F_{NP2} \cdot P_{NP2} + F_{DL} \cdot P_{DL}) \cdot dt$$

Sujeito a:

Restrições de Igualdade:
$$\frac{d(A_{T,i} \cdot h_{T,i})}{dt} = -F_i$$

$$\frac{dh_{Tf}}{dt} = F_M / A_{Tf}$$

$$\frac{d(\rho_{Tf} \cdot V_{Tf})}{dt} = \rho_M \cdot F_M$$

$$\frac{d(S_{Tf} \cdot \rho_{Tf} \cdot V_{Tf})}{dt} = \rho_M \cdot F_M \cdot S_M$$

$$\frac{d(IPF_{Tf} \cdot V_{Tf})}{dt} = F_M \cdot IPF_M$$

$$\frac{d(I\mu_{Tf} \cdot V_{Tf})}{dt} = F_M \cdot I\mu_M$$

$$\frac{d(IT50R_{Tf} \cdot V_{Tf})}{dt} = F_M \cdot IT50R_M$$

$$\frac{d(IT85R_{Tf} \cdot V_{Tf})}{dt} = F_M \cdot IT85R_M$$

$$\frac{d(IT90R_{Tf} \cdot V_{Tf})}{dt} = F_M \cdot IT90R_M$$

$$\frac{d(IPA_{Tf} \cdot V_{Tf})}{dt} = F_M \cdot IPA_M$$

$$\frac{d(IPE_{Tf} \cdot V_{Tf})}{dt} = F_M \cdot IPE_M$$

$$F_i = fc_i \cdot cv_i \cdot \sqrt{\frac{P_{q,i} \cdot \rho_{ref}}{\rho_i}}$$

$$fc_i = x$$

$$P_{i,s,v} = P_e + \rho_i \cdot g \cdot h_{T,i} - P_{q,i}$$

$$F_M = \sum_i F_i$$

$$\rho_M = \frac{\sum_i \rho_i \cdot F_i}{F_M}$$

$$S_M = \frac{\sum_i S_i \cdot \rho_i \cdot F_i}{\rho_M \cdot F_M}$$

$$PF_Ra_i = 1.8 \cdot (PF_i + 273.15)$$

$$IPF_i = 10000 \cdot \left(\frac{PF_Ra_i}{459.67} \right)^{-1/0.038}$$

$$IPF_M = \frac{\sum_i IPF_i \cdot F_i}{F_M}$$

$$PF_Ra_M = 459.67 \cdot \left(\frac{IPF_M}{10000} \right)^{-0.038}$$

$$PF_M = \frac{PF - Ra_M}{1.8} - 273.15$$

$$I\mu_i = \frac{\ln(\mu_i)}{\ln(1000 \cdot \mu_i)}$$

$$I\mu_M = \frac{\sum_i I\mu_i \cdot F_i}{F_M}$$

$$\mu_M = 1000^{\left(\frac{I\mu_M}{1-I\mu_M}\right)}$$

$$IT50R_i = \frac{1.8 \cdot T50R_i + 32}{546.1}$$

$$IT50R_M = \frac{\sum_i IT50R_i \cdot F_i}{F_M}$$

$$T50R_M = \frac{546.1 \cdot IT50R_M - 32}{1.8}$$

$$IT85R_i = \left(\frac{1.8 \cdot T85R_i + 32}{546.1}\right)^{7.8}$$

$$IT85R_M = \frac{\sum_i IT85R_i \cdot F_i}{F_M}$$

$$T85R_M = \frac{546.1 \cdot (IT85R_M)^{1/7.8} - 32}{1.8}$$

$$IT90R_i = \left(\frac{1.8 \cdot T90R_i + 32}{546.1}\right)^{7.8}$$

$$IT90R_M = \frac{\sum_i IT90R_i \cdot F_i}{F_M}$$

$$T90R_M = \frac{546.1 \cdot (IT90R_M)^{1/7.8} - 32}{1.8}$$

$$IPA_i = \exp(-0.011 \cdot (1.8 \cdot PA_i + 32))$$

$$IPA_M = \frac{\sum_i IPA_i \cdot F_i}{F_M}$$

$$PA_M = \frac{\left(\frac{-\ln(IPA_M)}{0.011} - 32\right)}{1.8}$$

$$NC_M = \left(\frac{-0.2}{0.011}\right) \cdot \ln(IPA_M) - 1000 \cdot 0.01739 \cdot \left(\frac{\rho_M}{1000}\right) + 45.354$$

$$PE_{-F_i} = 1.8 \cdot PE_i + 32$$

$$IPE_i = \exp(0.035 \cdot PE_{-F_i})$$

$$IPE_M = \frac{\sum_i IPE_i \cdot F_i}{F_M}$$

$$PE_{-F_M} = \frac{\ln(IPE_M)}{0.035}$$

$$PE_M = \frac{PE_{-F_M} - 32}{1.8}$$

$$V_{Tf} = h_{Tf} \cdot A_{Tf}$$

$$PF_{-Ra_M} = 1.8 \cdot (PF_M + 273.15)$$

$$IPF_M = 10000 \cdot \left(\frac{PF_{-Ra_M}}{459.67} \right)^{-1/0.038}$$

$$PF_{-Ra_{Tf}} = 459.67 \cdot \left(\frac{IPF_{Tf}}{10000} \right)^{-0.038}$$

$$PF_{Tf} = \frac{PF_{-Ra_{Tf}}}{1.8} - 273.15$$

$$I\mu_M = \frac{\ln(\mu_M)}{\ln(1000 \cdot \mu_M)}$$

$$\mu_{Tf} = 1000 \cdot \left(\frac{I\mu_{Tf}}{1 - I\mu_{Tf}} \right)$$

$$IT50R_M = \frac{1.8 \cdot T50R_M + 32}{546.1}$$

$$T50R_{Tf} = \frac{546.1 \cdot IT50R_{Tf} - 32}{1.8}$$

$$IT85R_M = \left(\frac{1.8 \cdot T85R_M + 32}{546.1} \right)^{7.8}$$

$$T85R_{Tf} = \frac{546.1 \cdot (IT85R_{Tf})^{1/7.8} - 32}{1.8}$$

$$IT90R_M = \left(\frac{1.8 \cdot T90R_M + 32}{546.1} \right)^{7.8}$$

$$T90R_{Tf} = \frac{546.1 \cdot (IT90R_{Tf})^{1/7.8} - 32}{1.8}$$

$$IPA_M = \exp(-0.011 \cdot (1.8 \cdot PA_M + 32))$$

$$PA_{Tf} = \frac{\left(\frac{-\ln(IPA_{Tf})}{0.011} - 32 \right)}{1.8}$$

$$NC_{Tf} = \left(\frac{-0.2}{0.011} \right) \cdot \ln(IPA_{Tf}) - 1000 \cdot 0.01739 \cdot \left(\frac{\rho_M}{1000} \right) + 45.354$$

$$PE_{-F_M} = 1.8 \cdot PE_M + 32$$

Restrições de
Desigualdade:

$$\begin{aligned}
 IPE_M &= \exp(0.035 \cdot PE_{-F_M}) \\
 PE_{-F_{Tf}} &= \frac{\ln(IPE_{Tf})}{0.035} \\
 PE_{Tf} &= \frac{PE_{-F_{Tf}} - 32}{1.8} \\
 F_{\min} &\leq F(t) \leq F_{\max} \\
 820 &\leq \rho_{Tf}(t_f) \leq 880 \\
 S_{Tf}(t_f) &\leq 1800 \\
 PF_{Tf}(t_f) &\geq 38 \\
 2 &\leq \mu_{Tf}(t_f) \leq 5 \\
 245 &\leq T50R_{Tf}(t_f) \leq 310 \\
 T85R_{Tf}(t_f) &\leq 370 \\
 NC_{Tf}(t_f) &\geq 42 \\
 PE_{Tf}(t_f) &\leq 10
 \end{aligned}
 \tag{3.64}$$

Na formulação acima, a função objetivo custo $C(t)$ a ser minimizada, é uma integral da soma dos produtos entre a vazão do componente i , F_i , e seu respectivo preço P_i , onde $i = DH, DE, DP, NP1, Q, NP2, DL$ que são respectivamente, diesel hidrotratado, diesel externo, diesel pesado, nafta pesada 1, querosene, nafta pesada 2 e diesel leve.

3.4 Metodologia de Resolução do DAOP de Mistura em Linha de Diesel

Para resolver o problema de otimização dinâmica (*off-line*) de mistura em linha de diesel para produção do diesel S1800 dentro das restrições e com custo mínimo, foram utilizados dois softwares, o *EMSO* e o *MATLAB*.

O método de resolução de otimização dinâmica utilizado foi o método single-shooting que é um método direto sequencial, que se baseia na discretização apenas das variáveis de controle, e cujo funcionamento foi descrito de forma resumida na seção 2.1.3. A Figura 3.2 ilustra o funcionamento do método direto sequencial single-shooting.

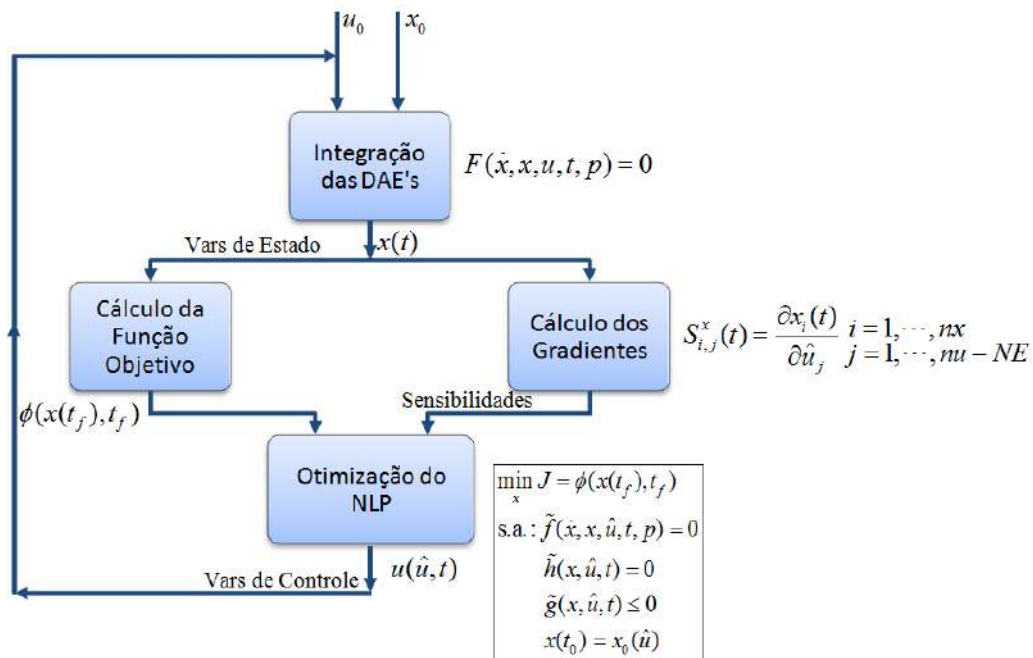


Figura 3.2 – Método single-shooting (Fonte: Magalhães, 2010).

As variáveis de controle foram discretizadas usando 20 pontos ao longo do horizonte de tempo. Dentro desses subintervalos de tempo gerados pela discretização, as variáveis de controle foram aproximadas por funções constantes por partes:

$$u_k(t) = u_k \tag{3.65}$$

onde k é o subintervalo.

O perfil da função constante por partes, pode ser visto na Figura 2.2.

O problema NLP gerado é resolvido pelo algoritmo de otimização SQP (*Sequential Quadratic Programming*), utilizando o solver *fmincon* do MATLAB R2010a. BIEGLER (1984) e BIEGLER *et al.* (1997) citam as principais características do SQP, que inclusive justificam o seu uso neste trabalho:

- Converte rapidamente e requer poucas avaliações da função objetivo e do gradiente;
- Próximo da solução, o código pode ser inicializado mais precisamente devido às taxas de convergência local.

Como já foi dito anteriormente, nos métodos diretos sequenciais apenas as variáveis de controle são discretizadas, sendo as variáveis de estado integradas. A integração do sistema DAEs foi realizada pelo EMSO e o algoritmo utilizado foi o DASSLC. O EMSO (*Environment for Modeling, Simulation and Optimization*) é um simulador de processos capaz de simular processos estacionários e dinâmicos e que fornece um ambiente de modelagem onde o usuário pode desenvolver seu próprio modelo.

A comunicação entre o EMSO e o MATLAB é feita de forma cíclica por uma interface EMSO-MATLAB que intermediará essa conexão, fazendo o transporte das variáveis. As variáveis de estado obtidas pela integração do sistema DAEs no EMSO são transportadas para o MATLAB, para o cálculo dos gradientes e verificação das restrições, já as trajetórias das variáveis de controle obtidas pelo algoritmo de otimização no MATLAB são transportadas para o EMSO, para a execução da simulação. A Figura 3.3 ilustra como funciona esta comunicação.

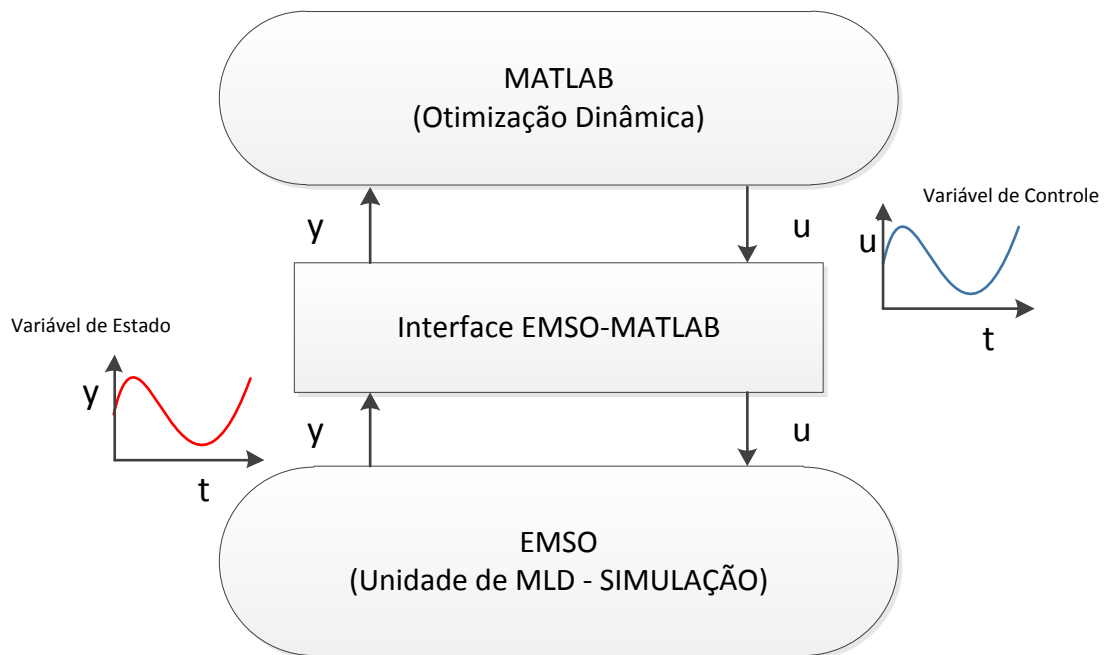


Figura 3.3 – Estrutura de comunicação EMSO-MATLAB.

A cada iteração do código de otimização, a função objetivo é avaliada. Cada avaliação da função objetivo corresponde a um ciclo na estrutura de comunicação, apresentada na Figura 3.3.

Capítulo 4

Resultados e Discussões

Os resultados foram gerados considerando dois cenários. No primeiro cenário, foi feita a otimização dinâmica, utilizando como componentes participantes da mistura apenas os presentes nos tanques, ou seja, não foi considerada a corrente selvagem de diesel leve como perturbação. Já no segundo cenário, foi utilizada a corrente de diesel leve na mistura.

Em ambos os cenários, os resultados foram analisados e discutidos explicando as trajetórias das vazões de cada componente, ou seja, sua participação na mistura, de acordo com suas propriedades, especificações do óleo diesel e seus preços, presentes respectivamente nas Tabelas 3.1, 3.2 e 3.3. Foram comparadas, para cada cenário, a solução obtida pela otimização com uma solução viável obtida por uma simulação utilizando valores constantes ao longo do horizonte de tempo, para as vazões de saída dos tanques na simulação. Também foi feita uma comparação entre a solução ótima com uma solução viável de uma simulação utilizando, como valores das vazões de saída dos tanques na simulação, a trajetória ótima das vazões com uma perturbação presente em cada uma delas. Essas comparações foram feitas, principalmente, com respeito ao valor do custo de produção.

Para cada cenário, foi feita a produção de óleo diesel S1800, a fim de obter um volume de produto de 200 m^3 em um tempo fixo de 16 minutos.

4.1 Sem Corrente Selvagem

Na Tabela 3.1 contendo as propriedades dos componentes de cada tanque, os valores das propriedades em vermelho são os valores que não atendem as restrições impostas pela ANP. Como a corrente de diesel leve não participa da mistura, pode-se perceber que as propriedades T50R e ρ têm apenas dois componentes atendendo às especificações. No caso da T50R, os tanques contendo diesel HDT e querosene e na ρ , os tanques contendo diesel HDT e diesel externo, possuem estas propriedades dentro das especificações. Logo, essas propriedades são críticas em relação às outras,

merecendo muita atenção para que essas propriedades do produto final de óleo diesel consigam estar dentro das especificações.

A seguir, são apresentadas as trajetórias das vazões de saída de cada tanque.

Na Figura 4.1 pode ser observado que a vazão de diesel HDT é alta em todo o horizonte de tempo, indicando uma contribuição significativa de diesel HDT na mistura. Este comportamento pode ser explicado pelo fato de que o diesel HDT é o produto que possui menor preço, dentre todos os participantes da mistura, como pode ser observado na Tabela 3.3. Além disso, o diesel HDT possui todas as propriedades dentro das especificações, com exceção do T85R, que apesar de estar fora da especificação, não apresenta um distanciamento grande em relação à faixa viável. O diesel HDT possui o T50R e o ρ , que são propriedades críticas, dentro das especificações, logo os altos valores de vazão também são para contribuir para essas propriedades no produto final, a fim de deixar as mesmas dentro da especificação.

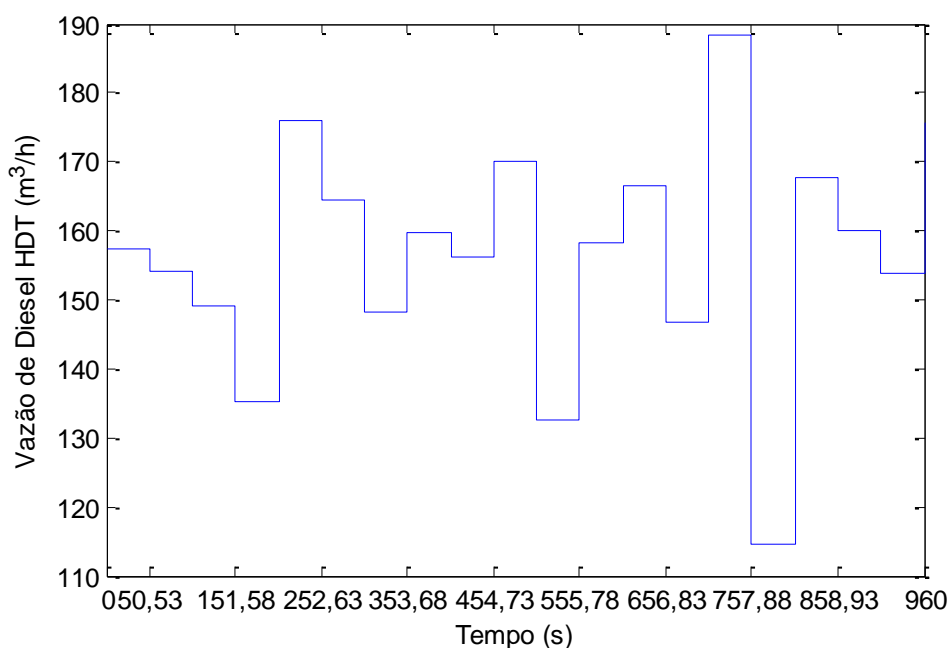


Figura 4.1 – Vazão de Diesel HDT sem a Presença de Corrente Selvagem na Mistura.

O tanque contendo diesel externo, como pode ser visto na Figura 4.2, contribui durante quase todo o horizonte de tempo com vazão baixa, pelo fato de ter o componente mais caro. A trajetória apresenta um pico que pode ser explicado pelo fato deste componente ter maior ponto de anilina do que os outros, contribuindo para um maior número de cetano e também pelo fato da sua massa específica estar dentro da especificação. O fato dele possuir baixa contribuição, pode ser também explicado pelo fato de seu T50R ser 0, estando muito distante da faixa viável para o produto final de óleo diesel que é de 245°C à 310°C.

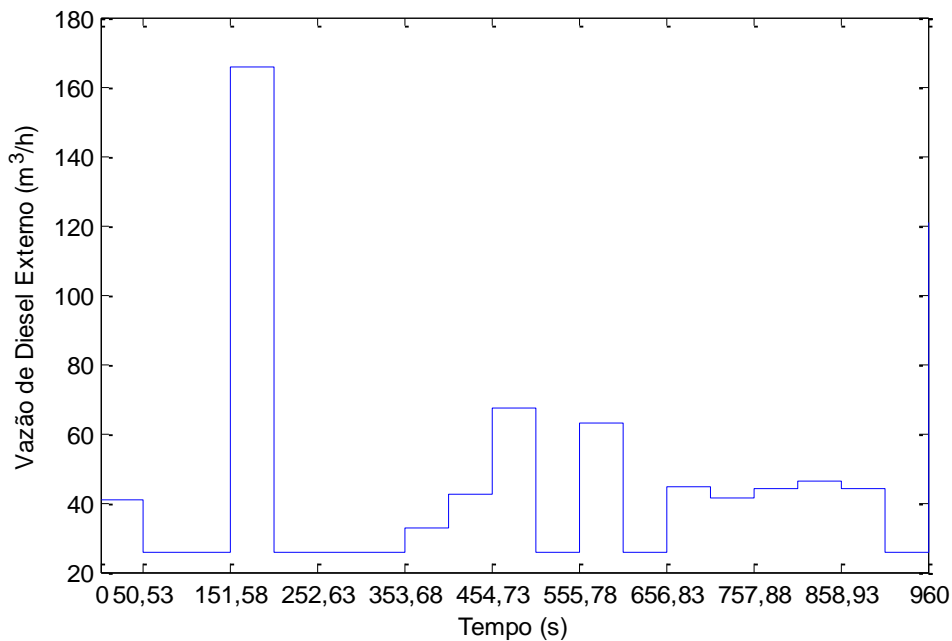


Figura 4.2 – Vazão de Diesel Externo sem a Presença de Corrente Selvagem na Mistura.

O Diesel Pesado apresenta o teor de enxofre, T50R, massa específica (ρ), que são propriedades críticas e o T85% fora das especificações. Apesar disso, sua vazão, apresentada na Figura 4.3, é alta em quase todo o horizonte de tempo em comparação com a vazão dos outros tanques, que pode ser explicado pela massa específica (ρ) e o T50R. Como os únicos produtos que têm a massa específica dentro da especificação são diesel externo e o diesel HDT e o diesel externo contribui pouco, pois sua vazão é baixa em quase todo o horizonte devido ao seu T50R (bem longe da faixa aceitável), isto faz com que o diesel HDT contribua mais. A nafta pesada 1, o querosene e a nafta pesada 2, apresentam massa específica abaixo do limite mínimo da especificação, já o diesel pesado é o único que apresenta massa específica acima do limite máximo da faixa, contrabalanceando a massa específica da mistura para que esta fique dentro da especificação e isso explica o fato da sua vazão ser alta. Da mesma forma acontece com a T50R, pois os únicos componentes que têm essa propriedade dentro da especificação são o diesel HDT e o querosene, logo o T50R do diesel pesado é importante para que essa propriedade seja atendida no produto final.

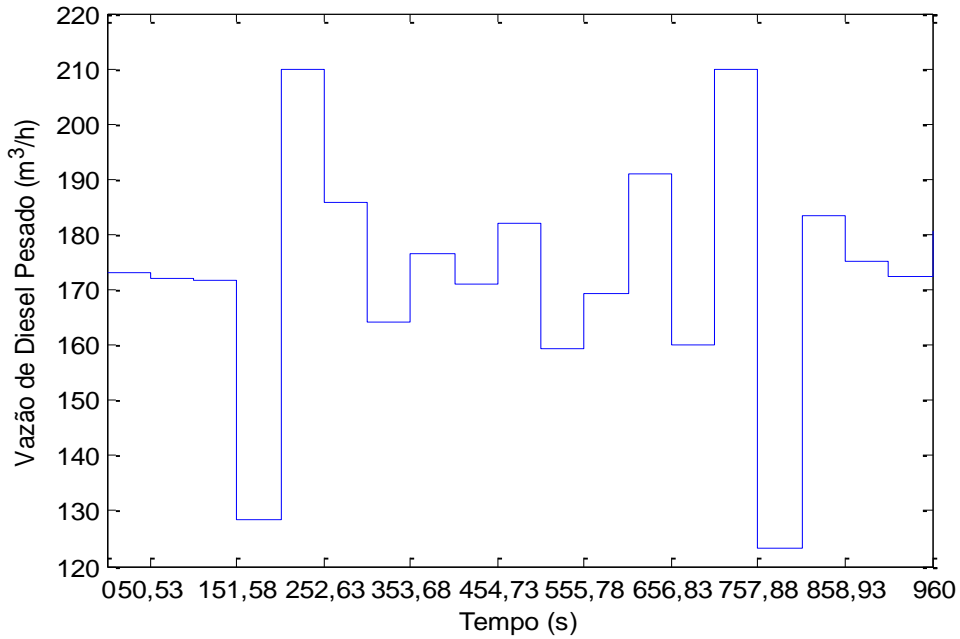


Figura 4.3 – Vazão de Diesel Pesado sem a Presença de Corrente Selvagem na Mistura.

A nafta pesada 1 apresenta as duas propriedades críticas fora das especificações, já as outras propriedades estão dentro. O preço da nafta pesada 1 é um dos menores, junto com o preço do diesel HDT. Essas duas características da nafta pesada 1 podem explicar de uma certa forma o porquê da vazão da nafta pesada permanecer oscilando em uma determinada faixa, não apresentando uma tendência, conforme ilustra a Figura 4.4.

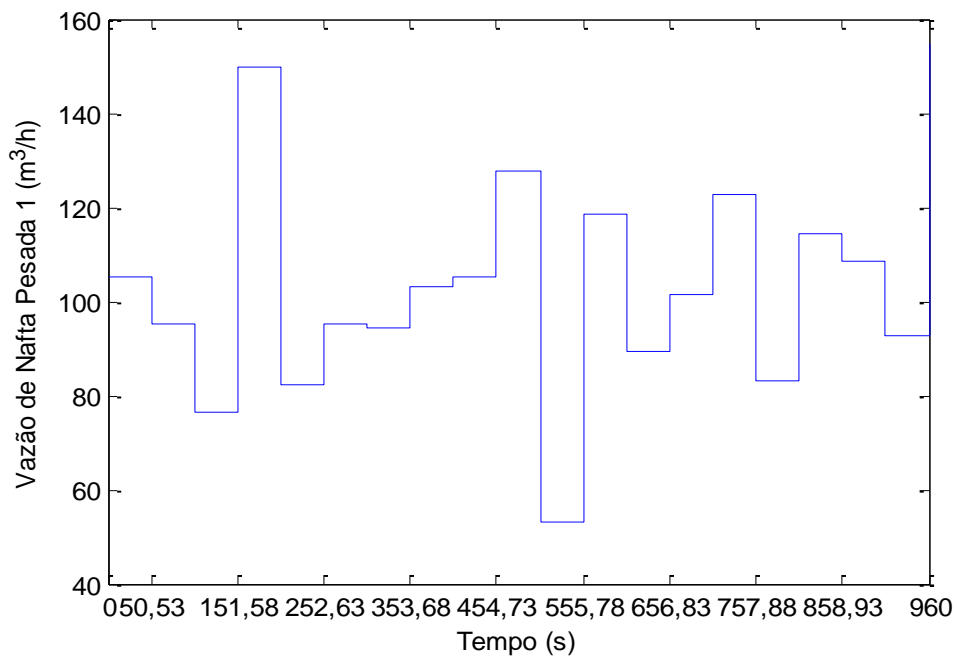


Figura 4.4 – Vazão de Nafta Pesada 1 sem a Presença de Corrente Selvagem na Mistura.

O querosene apresenta quase todas as propriedades dentro da especificação do óleo diesel, com exceção apenas da massa específica. Apesar de ser um dos componentes mais caros, apresenta uma trajetória de vazão com valores altos, Figura 4.5. Isso pode ser explicado pelo fato do querosene, junto com o diesel HDT, serem os únicos componentes com a propriedade T50R, que é uma propriedade crítica, dentro da especificação, logo esse aumento é para contribuir para essa propriedade no produto final.

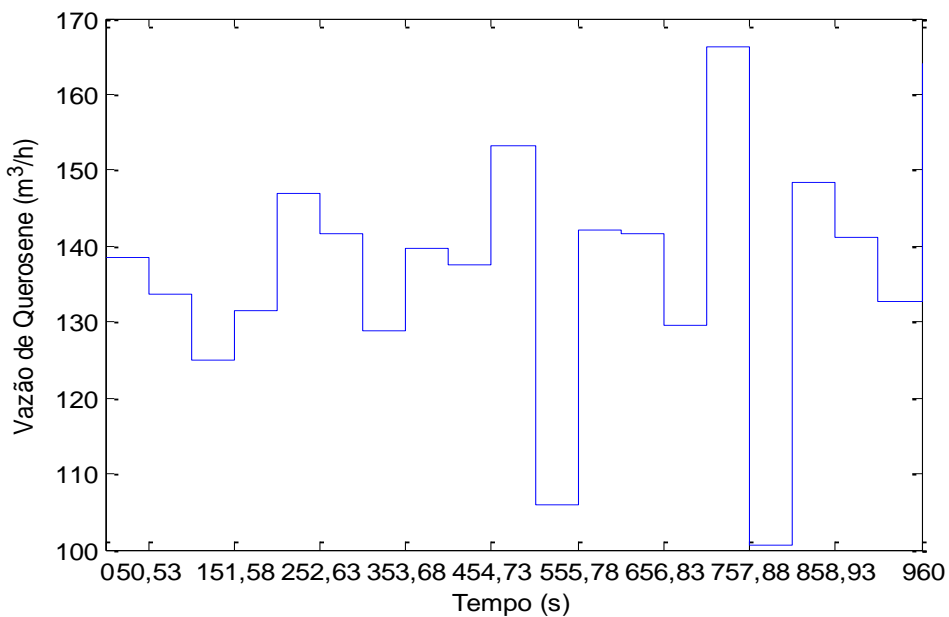


Figura 4.5 – Vazão de Querosene sem a Presença de Corrente Selvagem na Mistura.

A trajetória da vazão de nafta pesada 2, Figura 4.6, é bem parecida com a trajetória da vazão de nafta pesada 1. Assim como a nafta pesada 1, a nafta pesada 2 apresenta as duas propriedades críticas fora das especificações, já as outras propriedades estão dentro. O preço da nafta pesada 2 é o terceiro menor preço e bem próximo ao da nafta pesada 1. Essas duas características da nafta pesada 2 podem explicar de certa forma o porquê do perfil de vazão da nafta pesada 2 ser semelhante ao da nafta pesada 1, oscilando em uma determinada faixa, não apresentando uma tendência.

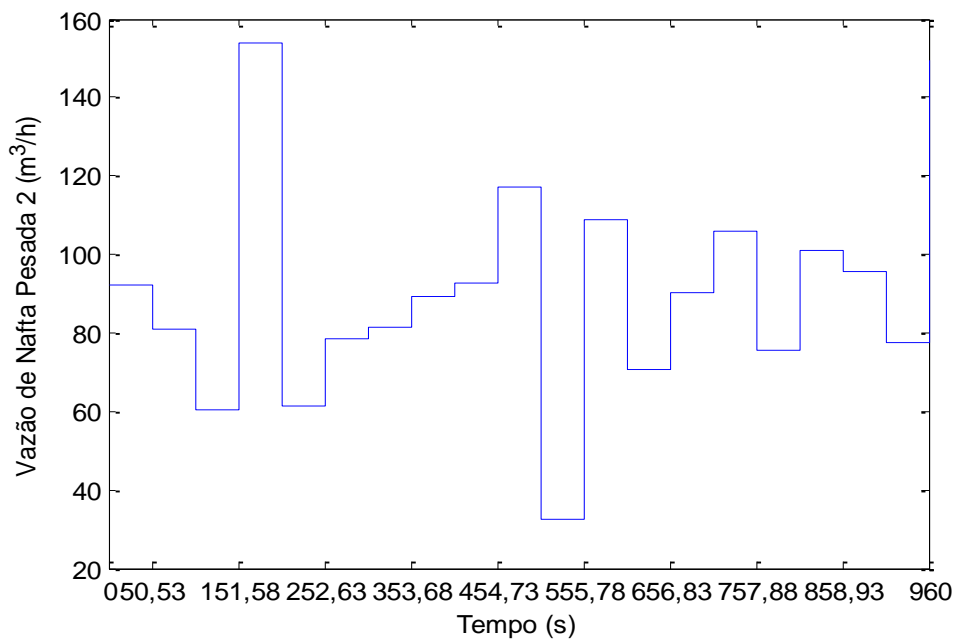


Figura 4.6 – Vazão de Nafta Pesada 2 sem a Presença de Corrente Selvagem na Mistura.

As trajetórias das propriedades do produto final de óleo diesel S1800 durante o tempo de otimização se encontram nas Figuras 4.7 a 4.15.

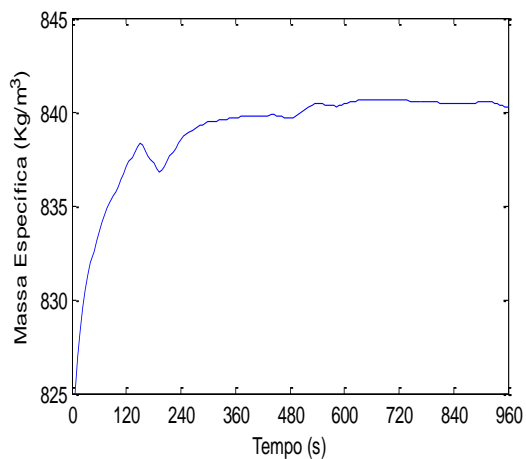


Figura 4.7 – Massa Específica do Óleo Diesel S1800 sem a Presença de Corrente Selvagem na Mistura.

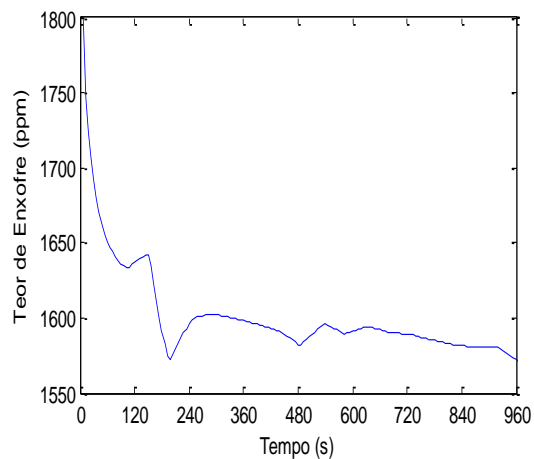


Figura 4.8 – Teor de Enxofre do Óleo Diesel S1800 sem a Presença de Corrente Selvagem na Mistura.

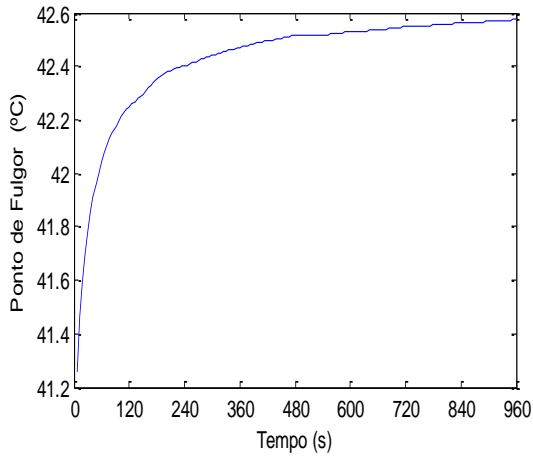


Figura 4.9 – Ponto de Fulgor do Óleo Diesel S1800 sem a Presença de Corrente Selvagem na Mistura.

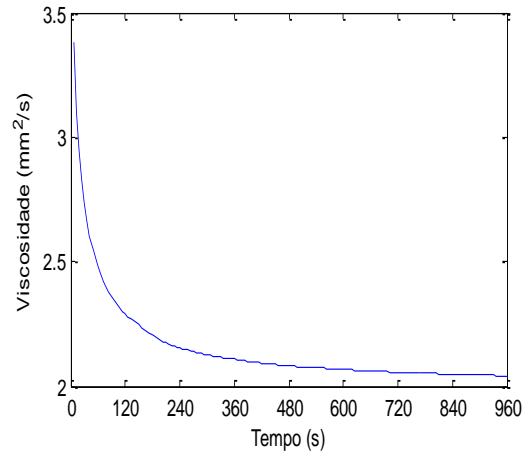


Figura 4.10 – Viscosidade do Óleo Diesel S1800 sem a Presença de Corrente Selvagem na Mistura.

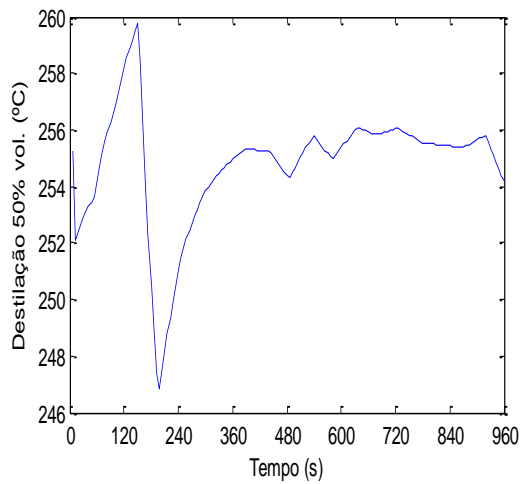


Figura 4.11 – Destilação 50% vol. do Óleo Diesel S1800 sem a Presença de Corrente Selvagem na Mistura.

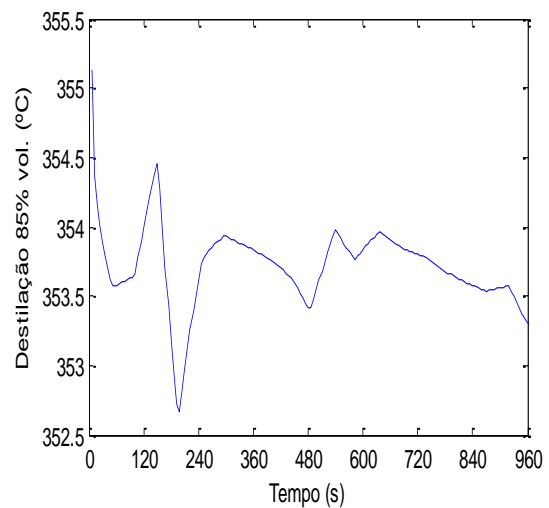


Figura 4.12 – Destilação 85% vol. do Óleo Diesel S1800 sem a Presença de Corrente Selvagem na Mistura.

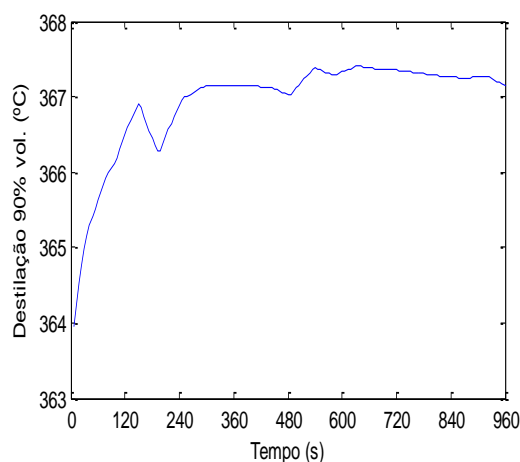


Figura 4.13 – Destilação 90% vol. do Óleo Diesel S1800 sem a Presença de Corrente Selvagem na Mistura.

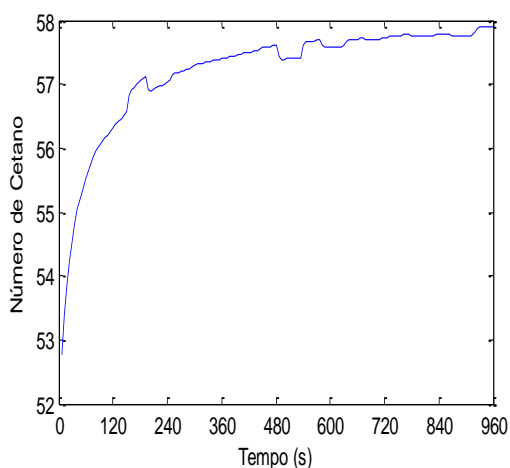


Figura 4.14 – Número de Cetano do Óleo Diesel S1800 sem a Presença de Corrente Selvagem na Mistura.

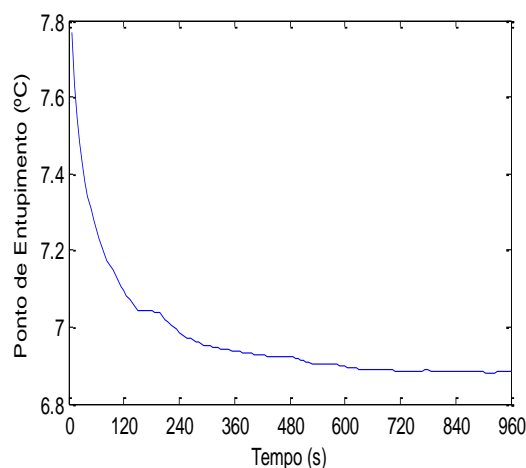


Figura 4.15 – Ponto de Entupimento do Óleo Diesel S1800 sem a Presença de Corrente Selvagem na Mistura.

Para fins de comparação foi feita uma simulação com vazões constantes de diesel HDT, diesel externo, diesel pesado, nafta pesada 1, querosene e nafta pesada 2, respectivamente iguais a: 180 m³/h, 50 m³/h, 220 m³/h, 100 m³/h, 100 m³/h, 100 m³/h. Com o mesmo fim, também foi feita uma simulação utilizando as trajetórias ótimas das vazões dos componentes obtidas pela otimização dinâmica, mas com uma perturbação de +1m³/h nas vazões de nafta pesada 1, querosene e nafta pesada 2 e uma perturbação de -1m³/h nas vazões de diesel HDT, diesel externo e diesel pesado, mantendo assim o volume final do tanque inalterado. Nas duas simulações, o volume produzido foi de 200 m³ de diesel S1800, da mesma forma que na otimização dinâmica, para que a comparação seja válida. Os resultados são apresentados na Tabela 4.1.

Tabela 4.1 – Resultados da otimização e simulação sem corrente selvagem

Propriedade	Diesel S1800 (Restrições)		Otimização Dinâmica (sem corrente selvagem)	Simulação (com perturbação do perfil ótimo)	Simulação (com vazões constantes)
	mín	máx			
Teor de Enxofre, S (ppm)	-	1800	1570,90	1559,63	1705,74
50% vol. Recuperados, T50R (°C)	245	310	253,93	253,13	257,73
85% vol. Recuperados, T85R (°C)	-	370	353,26	352,13	358,84
90% vol. Recuperados, T90R (°C)	-	-	367,13	366,83	371,22
massa específica, ρ (kg/m ³)	820	880	840,18	839,61	844,98
ponto de fulgor, PF (°C)	38	-	42,57	42,6	41,96
viscosidade, μ (mm ² /s)	2	5	2,04	2,04	2,04
ponto de entupimento, PE (°C)	-	10	6,88	6,88	7,63
número de cetano, NC	42	-	57,90	57,90	57,72
Função Custo (R\$)	-	-	75523	75525	78315,55

Como pode ser visto na Tabela 4.1, em todos os casos, os valores das propriedades estão obedecendo às restrições. Também pode ser notado a eficácia da otimização dinâmica por obter óleo diesel S1800 dentro das especificações com o menor custo, como pode ser observado através da comparação do valor do custo na otimização dinâmica com o valor do custo nas simulações.

4.2 Com Corrente Selvagem

Com a presença da corrente selvagem de diesel leve, ou seja, corrente sobre a qual não há controle, haverá três componentes atendendo às propriedades críticas T50R e ρ , já que o diesel leve possui essas duas propriedades dentro das especificações. O diesel leve possui somente o ponto de fulgor fora da especificação como pode ser visto na Tabela 3.1. A vazão utilizada de diesel leve foi de 150 m³/h, ao longo de todo o horizonte de otimização.

As mesmas análises e comparações que foram feitas para o caso sem corrente selvagem foram feitas para este caso, com corrente selvagem.

A seguir, são apresentadas as trajetórias das vazões de saída de cada tanque.

Da mesma forma que no caso sem corrente selvagem, a vazão de diesel HDT, apresentada na Figura 4.16, é elevada, possuindo uma participação significativa na mistura. Isto pode ser explicado pelo preço baixo do diesel HDT em comparação com os outros componentes, como também das propriedades do diesel HDT que estão, com exceção do T85R, dentro das especificações, principalmente as propriedades T50R e ρ , que são propriedades críticas.

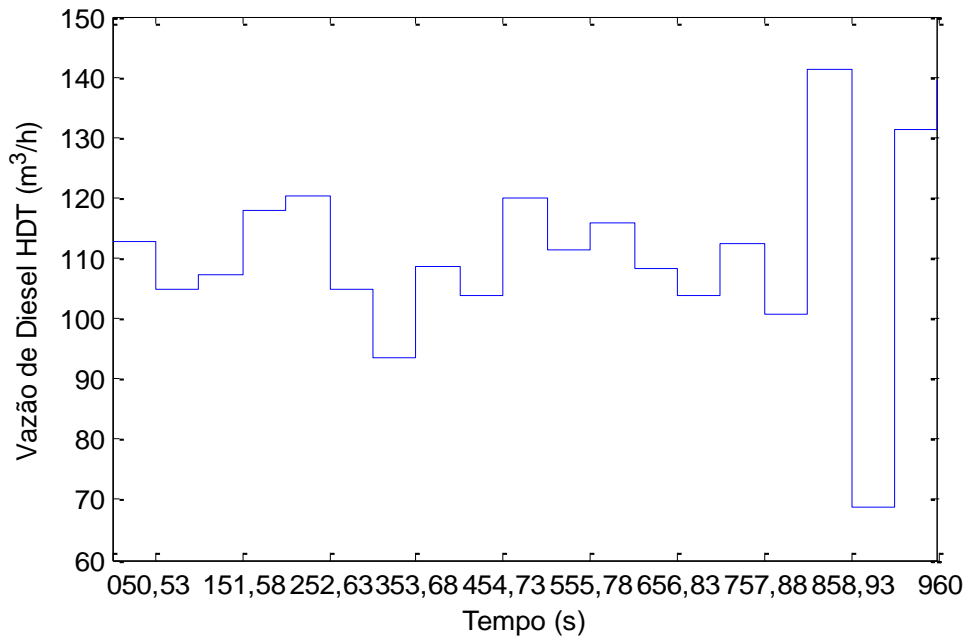


Figura 4.16 – Vazão de Diesel HDT com a Presença de Corrente Selvagem na Mistura.

Comparando a trajetória da vazão de diesel HDT, Figura 4.16 com aquela do caso sem corrente selvagem, Figura 4.1, pode-se perceber que a participação de diesel HDT é menor com a presença da corrente selvagem. Esta redução da participação de diesel HDT na mistura pode ser explicada pela presença de mais uma corrente (Diesel Leve) participando da mistura, como também pelas qualidades desta corrente, pois a mesma possui T50R e ρ , dentro das especificações, já que sem a presença da corrente selvagem de diesel leve, apenas o diesel HDT e o querosene possuem estas propriedades dentro das especificações.

O tanque contendo diesel externo possui uma contribuição menor do que os outros componentes, conforme pode ser visto na Figura 4.17, e isto pode ser explicado por dois fatores. Primeiro, o diesel externo é o componente mais caro entre todos e o segundo motivo é pelo fato de seu T50R ser 0, estando muito distante da faixa viável para o produto final de óleo diesel que é de 245°C a 310°C.

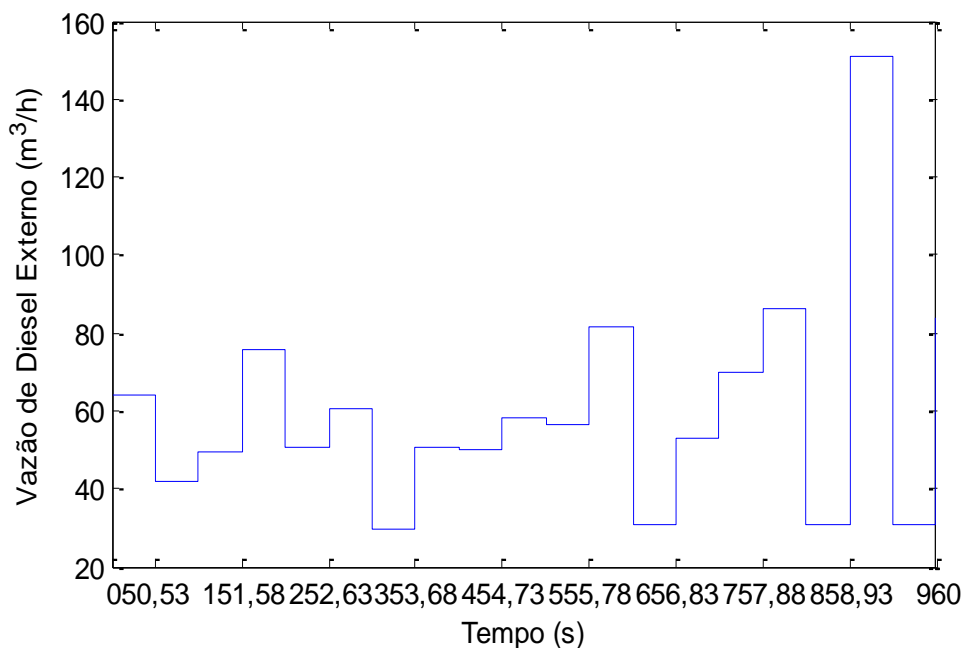


Figura 4.17 – Vazão de Diesel Externo com a Presença de Corrente Selvagem na Mistura.

Fazendo uma comparação visual entre as trajetórias da vazão de diesel externo com e sem a presença de diesel leve, apresentadas respectivamente nas Figuras 4.17 e 4.2, percebe-se que na presença de diesel leve (corrente selvagem), a contribuição de diesel externo é maior. A explicação disso está na propriedade T50R que possui um valor muito bom para a corrente de diesel leve e bem próxima do limite máximo da especificação para essa propriedade, o que possibilita uma contribuição maior de diesel externo que possui propriedades muito boas, apesar do seu T50R ser baixo.

O Diesel Pesado apresenta o teor de enxofre, T50R, massa específica (ρ), que são propriedades críticas e o T85% fora das especificações. Apesar disso, possui boa contribuição em quase todo o horizonte de tempo, como pode ser visto na Figura 4.18. O que pode explicar isso é a massa específica (ρ) e o T50R. Pois os únicos produtos que têm a massa específica dentro da especificação são, o diesel HDT e o diesel externo. A nafta pesada 1, o querosene e a nafta pesada 2, apresentam massa específica abaixo do limite mínimo da especificação, já o diesel pesado é o único que apresenta massa específica acima do limite máximo da faixa, contrabalanceando a massa específica da mistura para que esta fique dentro da especificação. Da mesma forma acontece com a T50R, pois os únicos componentes que têm essa propriedade dentro da especificação são o diesel HDT, querosene e o diesel leve, os restantes estão abaixo do limite mínimo da especificação, logo o T50R do diesel pesado é importante para que essa propriedade seja atendida no produto final.

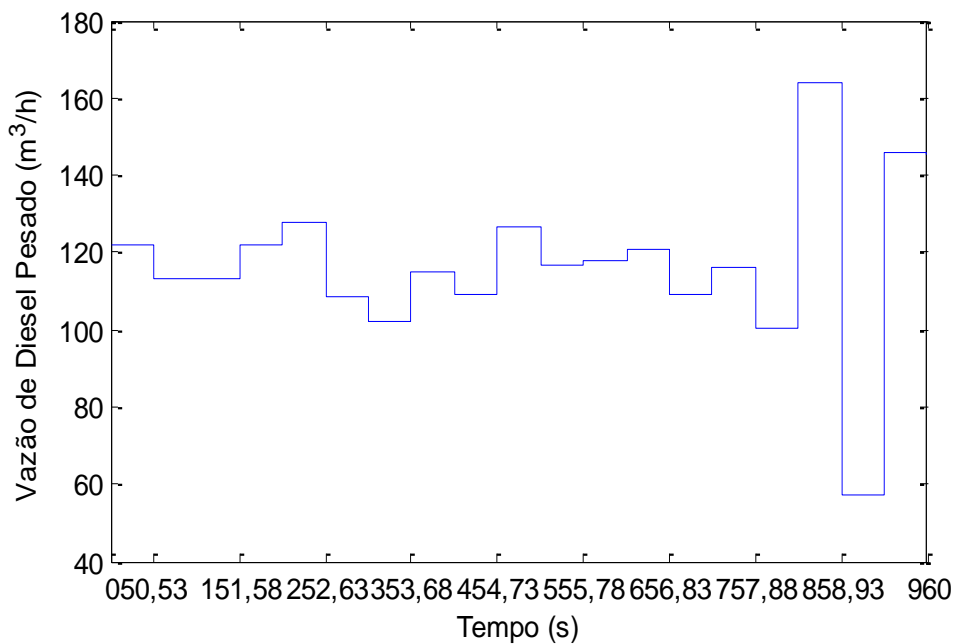


Figura 4.18 – Vazão de Diesel Pesado com a Presença de Corrente Selvagem na Mistura.

Como pode ser visto nas Figuras 4.18 e 4.3, a contribuição de diesel pesado é menor na presença de diesel leve, pois o diesel leve possui essas propriedades dentro das especificações.

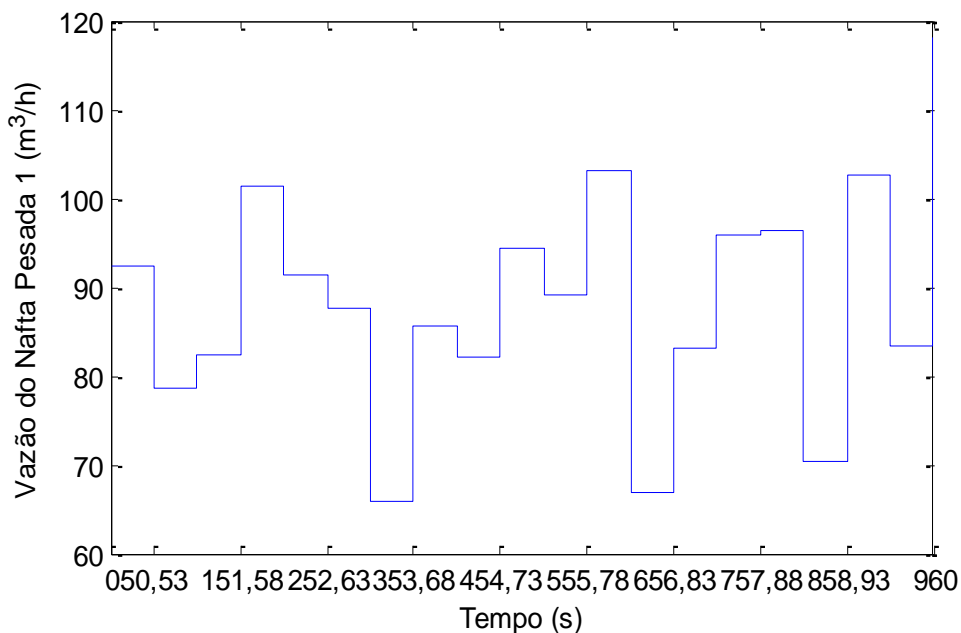


Figura 4.19 – Vazão de Nafta Pesada 1 com a Presença de Corrente Selvagem na Mistura.

A nafta pesada 1 apresenta as duas propriedades críticas fora das especificações, já as outras propriedades estão dentro e também apresenta um dos menores preços, junto ao diesel HDT. Essas duas características da nafta pesada 1 podem explicar de certa forma o porquê da vazão da nafta pesada permanecer oscilando em uma determinada faixa, não apresentando uma tendência, conforme ilustra a Figura 4.19.

O querosene apresenta quase todas as propriedades dentro da especificação do óleo diesel, com exceção apenas da massa específica. Apesar de ser um dos componentes mais caros, apresenta uma trajetória de vazão significativa, Figura 4.20. Isso pode ser explicado pelo fato do querosene, junto com o diesel HDT e o diesel leve, serem os únicos componentes com a propriedade T50R, que é uma propriedade crítica, dentro da especificação, contribuindo para o atendimento desta propriedade no produto final.

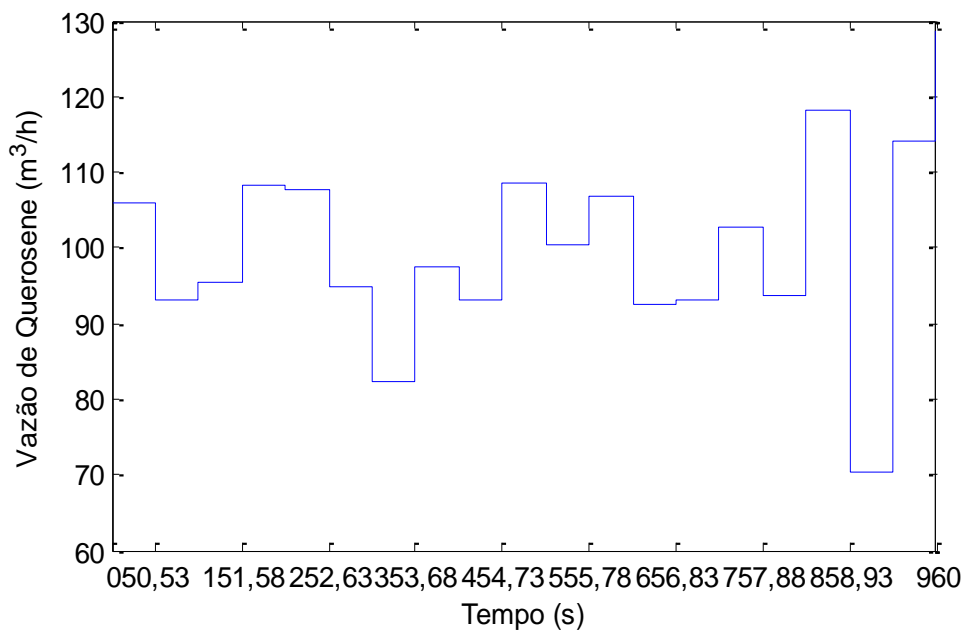


Figura 4.20 – Vazão de Querosene com a Presença de Corrente Selvagem na Mistura.

A trajetória da vazão de nafta pesada 2, Figura 4.21, é bem parecida com a trajetória da vazão de nafta pesada 1. Assim como a nafta pesada 1, a nafta pesada 2 apresenta as duas propriedades críticas fora das especificações, já as outras propriedades estão dentro. O preço da nafta pesada 2 é o terceiro menor preço e bem próximo ao da nafta pesada 1. Essas duas características da nafta pesada 2 podem explicar de certa forma o porquê da trajetória da vazão da nafta pesada 2 ser semelhante ao da nafta pesada 1, oscilando em uma determinada faixa, não apresentando uma tendência.

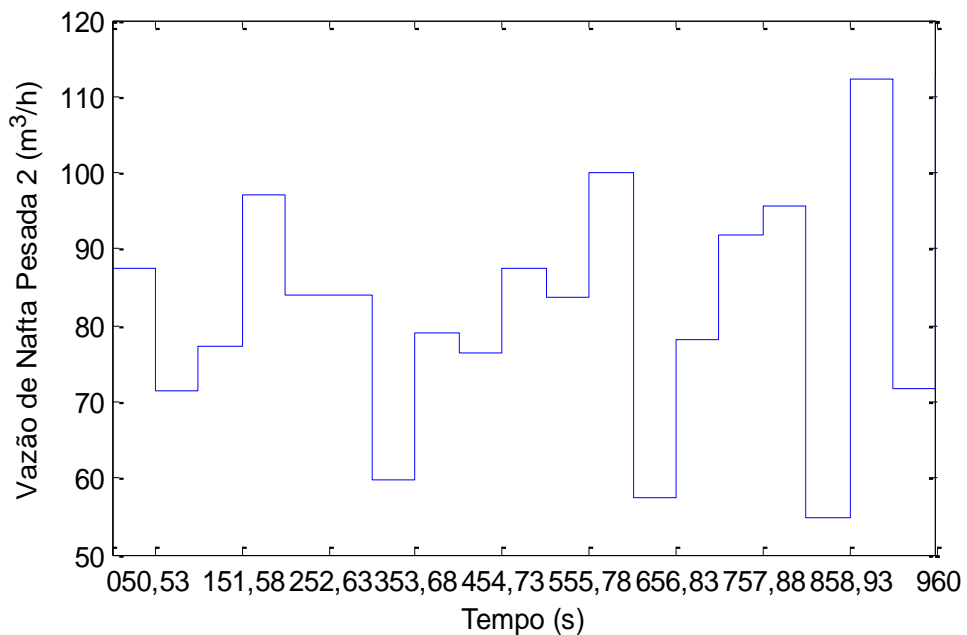


Figura 4.21 – Vazão de Nafta Pesada 2 com a Presença de Corrente Selvagem na Mistura.

As trajetórias das propriedades do produto final de óleo diesel S1800 durante o tempo de otimização se encontram nas Figuras 4.22 a 4.30.

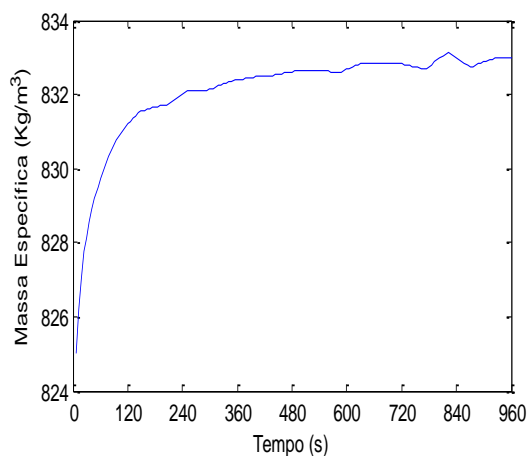


Figura 4.22 – Massa Específica do Óleo Diesel S1800 com a Presença de Corrente Selvagem na Mistura.

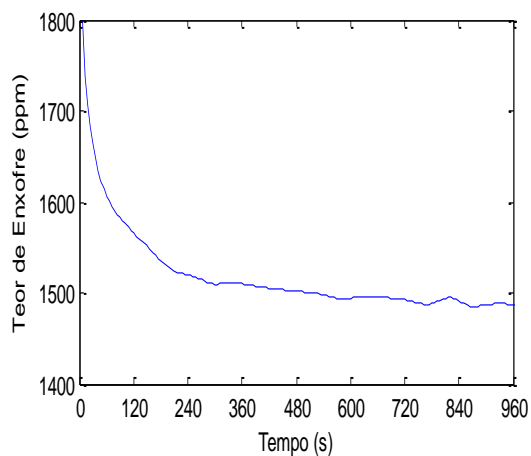


Figura 4.23 – Teor de Enxofre do Óleo Diesel S1800 com a Presença de Corrente Selvagem na Mistura.

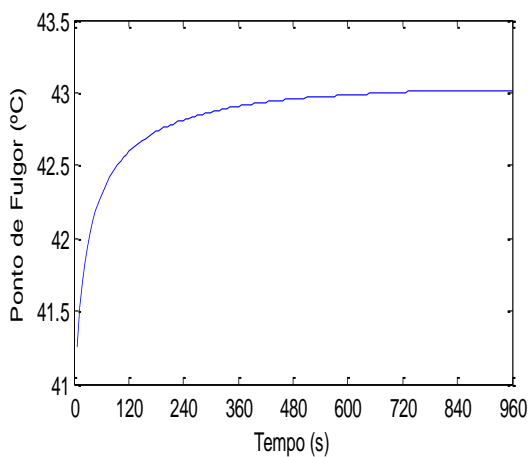


Figura 4.24 – Ponto de Fulgor do Óleo Diesel S1800 com a Presença de Corrente Selvagem na Mistura.

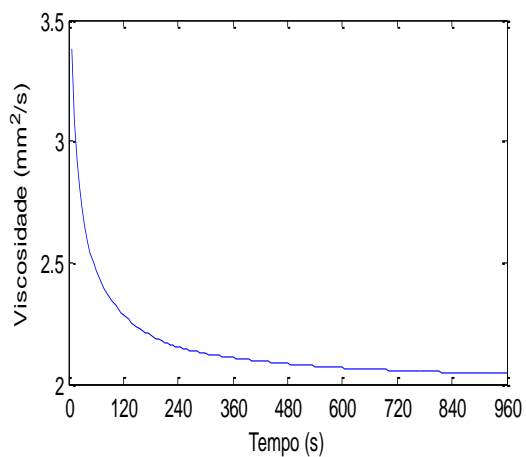


Figura 4.25 – Viscosidade do Óleo Diesel S1800 com a Presença de Corrente Selvagem na Mistura.

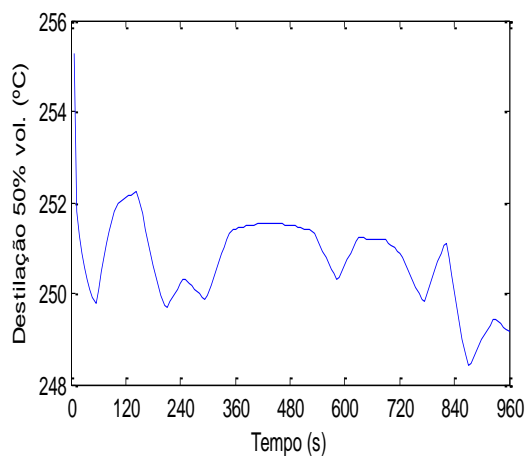


Figura 4.26 – Destilação 50% vol. do Óleo Diesel S1800 com a Presença de Corrente Selvagem na Mistura.

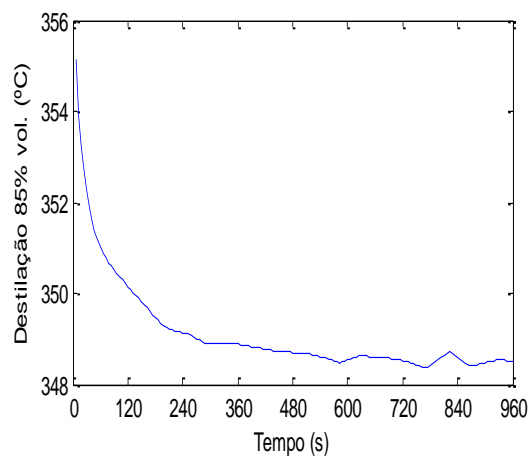


Figura 4.27 – Destilação 85% vol. do Óleo Diesel S1800 com a Presença de Corrente Selvagem na Mistura.

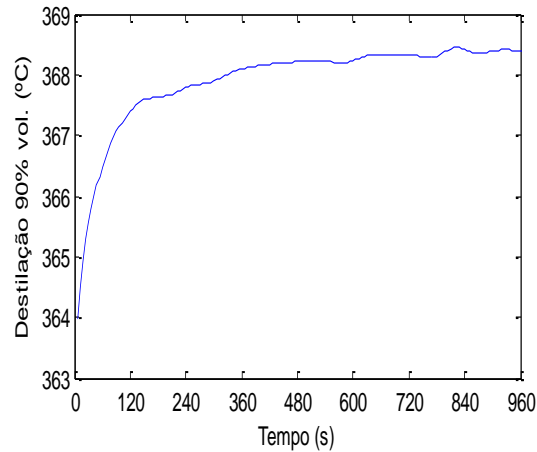


Figura 4.28 – Destilação 90% vol. do Óleo Diesel S1800 com a Presença de Corrente Selvagem na Mistura.

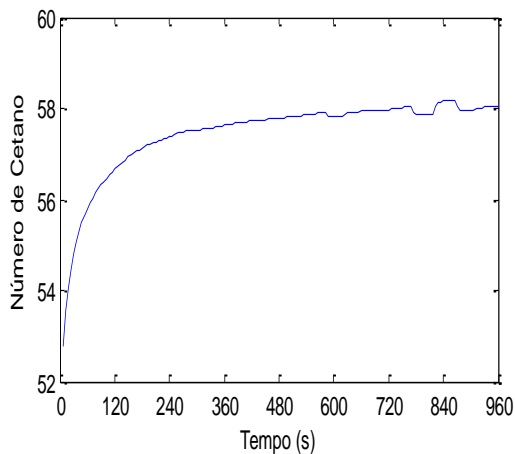


Figura 4.29 – Número de Cetano do Óleo Diesel S1800 com a Presença de Corrente Selvagem na Mistura.

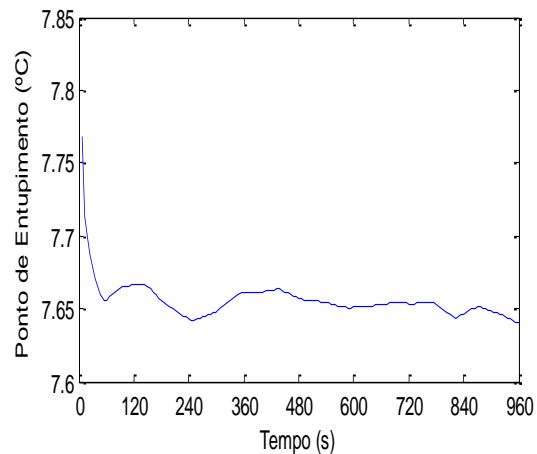


Figura 4.30 – Ponto de Entupimento do Óleo Diesel S1800 com a Presença de Corrente Selvagem na Mistura.

Da mesma forma que foi feito para o caso sem corrente selvagem, foi feita uma simulação com vazões constantes de diesel HDT, diesel externo, diesel pesado, nafta pesada 1, querosene, nafta pesada 2 e diesel leve, respectivamente iguais a: $150 \text{ m}^3/\text{h}$, $50 \text{ m}^3/\text{h}$, $200 \text{ m}^3/\text{h}$, $70 \text{ m}^3/\text{h}$, $80 \text{ m}^3/\text{h}$, $50 \text{ m}^3/\text{h}$ e $150 \text{ m}^3/\text{h}$. Com o mesmo fim, também foi feita uma simulação utilizando as trajetórias ótimas das vazões dos componentes obtidas pela otimização dinâmica, mas com uma perturbação de $+1 \text{ m}^3/\text{h}$ nas vazões de nafta pesada 1, querosene e nafta pesada 2 e uma perturbação de $-1 \text{ m}^3/\text{h}$ nas vazões de diesel HDT, diesel externo e diesel pesado. Nas duas simulações, o volume produzido foi de 200 m^3 de diesel S1800, da mesma forma que na otimização dinâmica, para que a comparação seja válida. Os resultados são apresentados na Tabela 4.2.

Tabela 4.2 – Resultados da otimização e simulação com corrente selvagem

Propriedade	Diesel S1800 (Restrições)		Otimização Dinâmica (com corrente selvagem)	Simulação (com perturbação do perfil ótimo)	Simulação (com vazões constantes)
	mín	máx			
Teor de Enxofre, S (ppm)	-	1800	1486,72	1485	1796,42
50% vol. Recuperados, T50R (°C)	245	310	249,12	249,8	270,92
85% vol. Recuperados, T85R (°C)	-	370	348,50	348,27	359,84
90% vol. Recuperados, T90R (°C)	-	-	368,38	368,25	375,3
massa específica, ρ (kg/m ³)	820	880	832,99	832,82	845,22
ponto de fulgor, PF (°C)	38	-	43,02	43,04	42,4
viscosidade, μ (mm ² /s)	2	5	2,04	2,04	2,04
ponto de entupimento, PE (°C)	-	10	7,64	7,63	8,05
número de cetano, NC	42	-	58,06	58,06	58,02
Função Custo (R\$)	-	-	77795	77798	80575,23

Como pode ser visto na Tabela 4.2, em todos os casos, os valores das propriedades estão obedecendo às restrições. Também pode ser notado a eficácia da otimização dinâmica na presença de uma perturbação (corrente de diesel leve), por obter óleo diesel S1800 dentro das especificações com o menor custo, como pode ser observado através da comparação do valor do custo na otimização dinâmica com o valor do custo nas simulações.

Capítulo 5

Conclusões

Com o objetivo e a motivação de minimizar o custo de produção de óleo diesel S1800, obtendo um produto final dentro das especificações, aliado as limitações da otimização estacionária, pode-se concluir, em comparação com soluções viáveis de simulações, que a otimização dinâmica da mistura em linha de diesel produziu resultados satisfatórios. Mesmo na presença de uma perturbação caracterizada por uma corrente selvagem de diesel leve, como também na presença de componentes, os quais possuindo algumas propriedades fora das especificações, o otimizador foi eficiente gerando resultados satisfatórios.

Como sugestão para trabalhos futuros, seria interessante utilizar wavelets na adaptação das malhas de controle. A fim de ter os perfis de controle mais fiéis possíveis, é necessário aumentar o nível de discretização. Contudo, este aumento gera um problema NLP de maior dimensão, aumentando o custo computacional. Logo, a adaptação das malhas de controle utilizando wavelets seria de grande potencial nesse caso, pois tornaria possível a obtenção de uma malha bem próxima da malha obtida pela solução analítica e com o menor número de pontos.

Outra sugestão seria a utilização de uma camada de controle avançado, junto com o otimizador dinâmico, a fim de ter um bom desempenho de controle e uma separação entre as camadas de controle e otimização com respeito às escalas de tempo e aos modelos. Neste caso as trajetórias ótimas das variáveis de controle, em vez de serem implementados nos controladores das unidades como *set-points*, seriam implantados como trajetórias de referência no sistema de controle avançado.

A eficiência do algoritmo de otimização SQP, que foi utilizado neste trabalho, depende da estimativa inicial fornecida, sendo necessário fazer várias otimizações com estimativas iniciais diferentes e comparar suas soluções a fim de obter a solução global do problema. Uma alternativa seria fazer uma otimização híbrida, utilizando um algoritmo não determinístico e utilizar sua solução como estimativa inicial para o problema de otimização usando o algoritmo SQP.

Referências Bibliográficas

- AGÊNCIA NACIONAL DO PETRÓLEO, GÁS NATURAL E BIOCOMBUSTÍVEIS – ANP. Resolução ANP Nº 42. Disponível em: [http://nxt.anp.gov.br/NXT/gateway.dll/leg/leis/1997/lei%209.478%20%201997.xml?f=templates\\$fn=default.htm&sync=1&vid=anp:10.1048/enu](http://nxt.anp.gov.br/NXT/gateway.dll/leg/leis/1997/lei%209.478%20%201997.xml?f=templates$fn=default.htm&sync=1&vid=anp:10.1048/enu). Acesso em: 16 de Maio de 2012.
- AGÊNCIA NACIONAL DO PETRÓLEO, GÁS NATURAL E BIOCOMBUSTÍVEIS – ANP. Disponível em: <http://www.anp.gov.br/?pg=60389&m=&t1=&t2=&t3=&t4=&ar=&ps=&cachebust=1344272541840>. Acesso em: 16 de Maio de 2012.
- ALMEIDA, Nt. E., SECCHI, A. R., 2006, **Dynamic Real-Time Optimization of a FCC Converter Unit**. In: ADCHEM 2006 – International Symposium on Advanced Control of Chemical Processes, Gramado, Brasil.
- ALMEIDA, Nt. E., 2011, **Otimização Dinâmica em Tempo Real: Arquitetura de Software, Diagnóstico e Análise de Inviabilidades**. Tese D.Sc., UFRGS, Porto Alegre, RS, Brasil.
- ALMEIDA, Nt. E., SECCHI, A. R., 2011, **Dynamic Optimization of a FCC Converter Unit Numerical Analysis**. Brazilian Journal of Chemical Engineering. 28(1). p. 117-136.
- BACKX, T., BOSGRA, D., MARQUARDT, W., 2000, Integration of Model Predictive Control and Optimization of Processes. In: **IFAC Symposium on Advanced Control of Chemical Processes**, v. 1, p. 249-260.
- BETTS, J. T., HUFFMAN, W. P., 1998, **Mesh refinement in direct transcription methods for optimal control**. Optim. Control Appl. Meth., 19, p.1-21.
- BIEGLER, L. T., 1984, “Solution of Dynamic Optimization Problems by Successive Quadratic Programming and Orthogonal Collocation”. **Computers and Chemical Engineering**, v. 8, n. 3/4, pp. 243-248.
- BIEGLER, L. T., GROSSMANN, I. E., WESTERBERG, A. W., 1997, **Systematic Methods of Chemical Process Design**, 1ª ed., Prentice Hall PTR, New Jersey, EUA.
- BINDER, T., CRUSE, A., VILLAS, C., MARQUARDT, W., 2000, **Dynamic Optimization Using a Wavelet Based Adaptive Control Vector Parameterization Strategy**. Computers and Chemical Engineering. 24, p. 1201-1207.

- BRYSON JR., A. E., 1999, **Dynamic Optimization**, Addison-Wesley Logman Inc., California, EUA.
- CANTO, E.B., BANGA, J.R., ALONSO, A.A., VASSILIADIS, V.S., 2001, "Dynamic Optimization of Chemical and Biochemical Processes using Restricted Second-Order Information". **Computers and Chemical Engineering**, v. 25, n. 4, pp. 539-546.
- CUTHRELL, J. E., BIEGLER, L. T., 1987, "On the Optimization of Differential-Algebraic Process Systems", **AIChE Journal**, v. 33, 8, pp. 1257-1270.
- CUTHRELL, J. E., BIEGLER, L. T., 1989, "Simultaneous Solution and Optimization of Process Flowsheets with Differential Equation Models". **Chem. Eng. Res. Des.**, v. 64, pp. 341-346.
- CUTHRELL, J. E., 1986, **On The Optimization of Differential- Algebraic Systems of Equations in Chemical Engineering**. Tese D.Sc., Carnegie Mellon University, Pittsburgh.
- DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA MECÂNICA. Disponível em: <http://www.demec.ufmg.br/disciplinas/ema003/liquidos/diesel/especifi.htm>. Acesso em: 6 de Agosto de 2012.
- EMPRESA DE PESQUISA ENERGÉTICA – EPE. Disponível em: <http://ben.epe.gov.br/BENResultadosPreliminares2012.aspx>. Acesso em: 10 de Setembro de 2012.
- FEEHERRY, W. F., 1998, **Dynamic Optimization with Path Constraints**, Doctor Philosophy in Chemical Engineering, Department of Chemical Engineering, Massachusetts Institute of Technology, Massachusetts, EUA.
- FEEHERRY, W. F., BARTON, P. I., 1998, "Dynamic Optimization with State Variable Path Constraints". **Computers and Chemical Engineering**, v. 22, n. 9, pp. 1241-1256.
- FERREIRA, A. C., 2008, **Modelos de Otimização na Produção de Óleo Diesel: Uma Aplicação Industrial**. Tese D.Sc., UNICAMP, Campinas, SP, Brasil.
- KADAM, J. V., SCHLEGEL, M., MARQUARDT, W., TOUSAIN, R. L., V. HESSEM, D. H., V. D. BERG, J., BOSGRA, O. H., 2002, "A Two-Level Strategy of Integrated Dynamic Optimization and Control of Industrial Processes" – a Case Study. In: **ESCAPE – 12 – European Symposium on Computer Aided Process Engineering – 12**, The Hague, The Netherlands, Elsevier, p. 511-516.

- LANG, Y.-D., BIEGLER, L. T., 2007, "A software environment for simultaneous dynamic optimization". **Computers and Chemical Engineering**. v. 31, pp. 931-942.
- LEFFLER, W. L., 2008, **Petroleum Refining in Nontechnical Language**. 4^o ed., Penn Well Corporation.
- MAGALHÃES, O. I. B., 2010, **Desenvolvimento de um Sistema de Otimização Dinâmica em Tempo Real**. Dissertação M.Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.
- MARCOVISTZ, I., 2011, **Otimização por Enxame de Partículas da Mistura em Linha para Óleo Diesel**. Projeto Final, UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.
- PETROBRAS. Biocombustíveis. Disponível em: <http://www.petrobras.com.br/pt/quem-somos/perfil/atividades/producao-biocombustiveis/downloads/pdf/Cartilha-Biocombustiveis-PORTUGUES.pdf>. Acesso em: 12 de Maio de 2012.
- PETROBRAS DISTRIBUIDORA. Disponível em: <http://www.br.com.br/wps/portal/portalconteudo/produtos/paraindustriasetermeletricas/oleodiesel>. Acesso em: 15 de Maio de 2012.
- QUINTO, T. C., 2010, **Abordagem Algébrico-Diferencial da Otimização Dinâmica de Processos com Índice Flutuante**. Dissertação M.Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.
- SANTOS, L. S., SECCHI, A. R., BISCAIA, E. C., 2012, "Wavelet-Threshold Influence in Optimal Control Problems". In: **22nd European Symposium on Computer Aided Process Engineering**, London, England.
- SCHLEGEL, M., 2004, **Adaptive Discretization Methods for the Efficient Solution of Dynamic Optimization Problems**, Ph.D., RWTH Aachen University, Aachen, Germany.
- SOUZA, D. F. S., 2007, **Abordagem Algébrico-Diferencial da Otimização Dinâmica de Processos**. Tese D.Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.
- TANARTKIT, P., BIEGLER, L.T., 1997, **A nested simultaneous approach for dynamic optimization problems II: the outer problem**, *Computers and Chemical Engineering*. 21(12), p.1365-1388.
- TOLSMA, J. E., BARTON, P. I., 1998, "On Computational Differentiation". **Computers and Chemical Engineering**, v. 22, n. 4/5, pp. 475-490.

- VASSILIADIS, V. S., SARGENT, R.W.H., PANTELIDES, C.C., 1994a, "Solution of a Class of Multistage Dynamic Optimization Problems. 1. Problems Without Path Constraints", **Ind. Eng. Chem. Res.**, v.33, n.9, pp. 2111-2122.
- VASSILIADIS, V. S., SARGENT, R.W.H., PANTELIDES, C.C., 1994b, "Solution of a Class of Multistage Dynamic Optimization Problems. 2. Problems With Path Constraints", **Ind. Eng. Chem. Res.**, v.33, n.9, pp. 2123-2133.
- VIEIRA, R. C., 2001, **Técnicas de Inicialização de Sistemas Algébrico-Diferenciais**. Tese D.Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.