



Minimização do Consumo Hídrico através da Metodologia do Diagrama de Fontes de Água (DFA): Aplicação em Processos Batelada

Pedro Palhano de Oliveira

Monografia em Engenharia Química

Orientadores

D. Sc. Eduardo Mach Queiroz
D. Sc. Flávio da Silva Francisco

Rio de Janeiro
Fevereiro de 2019

MINIMIZAÇÃO DO CONSUMO HÍDRICO ATRAVÉS DA METODOLOGIA DO DIAGRAMA DE FONTES DE ÁGUA (DFA): APLICAÇÃO EM PROCESSOS BATELADA

Pedro Palhano de Oliveira

Monografia em Engenharia Química submetida ao Corpo Docente da Escola de Química, como parte dos requisitos necessários à obtenção do grau de Engenheiro Químico.

Aprovado por:

André Ferreira Young, D. Sc

Kese Pontes Freitas Alberton, D. Sc

Lídia Yokoyama, D. Sc

Orientado por:

Eduardo Mach Queiroz, D. Sc.

Flávio da Silva Francisco, D. Sc.

Rio de Janeiro, RJ – Brasil
Fevereiro de 2019

CIP - Catalogação na Publicação

O48m Oliveira, Pedro Palhano de
Minimização do consumo hídrico através da
Metodologia do Diagrama de Fontes de Água (DFA):
aplicação em processos batelada / Pedro Palhano de
Oliveira. -- Rio de Janeiro, 2019.
69 f.

Orientador: Eduardo Mach Queiroz.
Coorientador: Flávio da Silva Francisco.
Trabalho de conclusão de curso (graduação) -
Universidade Federal do Rio de Janeiro, Escola de
Química, Bacharel em Engenharia Química, 2019.

1. Diagrama de Fontes de Água. 2. Processos
Batelada. 3. Minimização de Consumo de Água. 4.
Integração de Processos. 5. Engenharia de Processos.
I. Queiroz, Eduardo Mach, orient. II. Francisco,
Flávio da Silva, coorient. III. Título.

Elaborado pelo Sistema de Geração Automática da UFRJ com os dados fornecidos
pelo(a) autor(a), sob a responsabilidade de Miguel Romeu Amorim Neto - CRB-7/6283.

Dedicatória

Esta Monografia é dedicada especialmente aos meus pais, Marta e Alexandre, por terem possibilitado o percurso de uma nova faculdade através da doação de um dos bens mais escassos dos dias modernos. Tempo.

Citação

*"Diante da vastidão do tempo e da imensidão do universo, é um imenso prazer para mim
dividir um planeta e uma época com você."*

Carl Sagan

AGRADECIMENTOS

Agradeço aos meus pais, Marta e Alexandre, por terem me apoiado e incentivado, desde o início, na empreitada de uma segunda faculdade. Reconheço que todo este percurso foi possível, em sua maior parte, pela estrutura afetuosa e saudável que temos uns pelos outros.

Agradeço à minha companheira, Cláudia, pelo amor, carinho, amizade e imenso prazer na partilha dos momentos de nossas vidas. Sou grato pela compreensão e paciência diante do tempo que tivemos que abdicar para o desenvolvimento deste trabalho.

Ao meu amigo irmão, Karl, que por quase trinta anos me acompanha nos pequenos e grandes aprendizados da vida, fazendo desta experiência algo mais frutífero e enriquecedor.

Ao meu amigo irmão mais novo, Caio, pela confiança, trocas de ideias, reflexões, estudos em conjunto e trabalhos desenvolvidos ao longo destes seis anos de graduação na Engenharia Química.

A todos os familiares e amigos que me incentivaram, ajudaram e sempre acreditaram que eu poderia me tornar um engenheiro.

Agradeço ao Prof. Dr. Eduardo Mach Queiroz, pela capacidade de discussão e constante motivação com o meu trabalho, pelos ensinamentos, por suas críticas e sugestões valiosas que contribuíram significativamente para este trabalho. Fico feliz por ter aceitado a empreitada de me orientar.

Ao Dr. Flávio da Silva Francisco, pela disponibilidade, conversas, ensinamentos, críticas e pela confiança. Todo este suporte foi fundamental para o desenvolvimento deste trabalho. Sou grato por ter concordado em acompanhar este meu trajeto com sua orientação.

Ao Prof. Dr. Fernando Luiz Pellegrini Pessoa, por ter lecionado a matéria de Integração de Processos e contribuir para o despertar da curiosidade que me fez explorar mais a fundo este campo do conhecimento.

Agradeço aos professores da banca Dr. André Ferreira Young (DEQ/UFRJ), Dra. Kese Pontes Freitas Alberton (DEQ/UFRJ), Dra. Lídia Yokoyama (DPI/UFRJ) e a suplente Dra. Raquel Massad Cavalcante (DEQ/UFRJ) pelas valiosas contribuições prestadas na Defesa de Projeto Final.

Agradeço ainda à UFRJ por todo apoio que me foi concedido no período de graduação. Especialmente aos professores e funcionários da Escola de Química da UFRJ, pelos conhecimentos e convívio harmonioso ao longo desses seis anos, que contribuíram para a minha formação como profissional.

Resumo da Monografia apresentada à Escola de Química como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Engenheiro Químico.

MINIMIZAÇÃO DO CONSUMO DE ÁGUA ATRAVÉS DA METODOLOGIA DO DIAGRAMA DE FONTES DE ÁGUA (DFA): APLICAÇÃO EM PROCESSOS BATELADA

Pedro Palhano de Oliveira

Fevereiro, 2019

Orientadores: D. Sc. Eduardo Mach Queiroz

D. Sc. Flávio da Silva Francisco

A questão hídrica é uma preocupação ascendente que não se aplica a regiões específicas do planeta. Perante esta conscientização, entidades internacionais e/ou relacionadas a condições hídricas/ambientais têm se debruçado sobre o desafio de solucionar este problema e prevenir crises hídricas mais agudas no futuro. Soma-se a isso, a existência de uma lacuna nas pesquisas relacionadas à minimização do consumo de água em processos com operações batelada, tanto na literatura quanto dentro do Grupo de Integração de Processos Químicos da UFRJ. Neste contexto, o presente trabalho apresenta uma proposta inicial de aplicação da Metodologia Diagrama de Fontes de Água (DFA) para processos batelada onde a experiência de aplicação da metodologia em processos contínuos é adaptada para a presença de operações batelada. Ao processo, foram consideradas características de modo que se possa partir de um modelo mais simples para expansões capazes de resolver problemas mais complexos. O DFA proposto adota o diagrama de Gantt para indicar as ligações entre operações no momento exato de possibilidade de reúso e mantém a simplicidade típica do método, permitindo ainda gerar ou avaliar diversas opções de solução (rede de água que satisfaz o preceito de mínimo consumo de água primária), além de poder considerar restrições de processo. O procedimento é prático, de fácil aplicação e todos os cálculos podem ser feitos manualmente. Quatro exemplos foram analisados e o algoritmo criado mostra capacidade de chegar a resultados de consumo de água satisfatórios, sendo, em alguns casos, superiores apenas em relação aos estudos da literatura cujas considerações possibilitam maiores oportunidade de reúso de água.

ÍNDICE

Capítulo 1	1
1.1 Introdução	1
1.2 Motivação	2
1.3 Objetivo	5
1.4 Estrutura do Trabalho	5
Capítulo 2 Metodologias de Integração para Processos Batelada	7
2.1 Introdução	7
2.2 Análise geral	13
2.2.1 Métodos Heurísticos	14
2.2.2 Métodos de Programação Matemática	16
2.2.3 Métodos Híbridos	19
Capítulo 3 Proposta de DFA para Processos Batelada	20
3.1 Introdução	20
3.2 Procedimento	21
Capítulo 4 Resultados e Discussões	39
4.1 Estudo de Caso 1	39
4.2 Estudo de Caso 2	43
4.3 Estudo de Caso 3	48
Capítulo 5 Conclusões	53
Referências	55

LISTA DE FIGURAS

Figura 2-1 - Ilustração das restrições de tempo e concentração em um processo batelada entre duas operações fictícias A e B. Adaptado de Majozzi, Brouckaert e Buckley (2006).....	8
Figura 2-2 - Tipos de processo batelada que fazem uso de água. (a) completamente batelada; (b) semibatelada. Retirado do estudo de Gouws et al. (2010).	9
Figura 2-3 - Casos de perda (a; c) e ganho de água (b; d) em operações completamente batelada (operação 1) e semibatelada (operação 2), respectivamente. Adaptado do estudo de Gouws et al. (2010).	10
Figura 2-5 – Fluxograma ilustrativo de plantas Multiproduto (a) e Multipropósito (b). Adaptado do trabalho de Majozzi (2010).	12
Figura 2-6 - Fluxograma ilustrativo de reúso, reciclo e regeneração. Modificado a partir do fluxograma de Klemes (2012). Legenda: OP - operação.	13
Figura 3-1 - Construção do diagrama de Gantt - Passo 3.i – Exemplo Ilustrativo.....	23
Figura 3-2 - Construção do diagrama de Gantt - Passo 3.ii – Exemplo ilustrativo.	23
Figura 3-3 - Construção do diagrama de Gantt - Passo 3.iii – Exemplo Ilustrativo.....	23
Figura 3-4 - Estrutura do DFA - Passo 4.i – Exemplo Ilustrativo.	26
Figura 3-5 - Estrutura do DFA - Passo 4.ii – Exemplo Ilustrativo.....	26
Figura 3-6- Estrutura do DFA - Passo 4.iii – Exemplo Ilustrativo.....	27
Figura 3-7- Estrutura do DFA finalizada - Passo 4.iv – Exemplo Ilustrativo.	27
Figura 3-8 - Síntese parcial do DFA - OP1 completa – Exemplo Ilustrativo.....	30
Figura 3-9 - Síntese parcial do DFA - OP1 e OP4 completas – Exemplo Ilustrativo.	31
Figura 3-10 - Síntese parcial do DFA - OP1, OP4 completas e OP2 com reúso – Exemplo Ilustrativo.....	33
Figura 3-11 - Síntese parcial do DFA - OP1, OP4 completas e OP2 sem reúso – Exemplo Ilustrativo. Observa-se que a quantidade de água limpa usada na OP2 som reúso é igual a necessária para a mesma operação com reúso (Figura 3-10).	34
Figura 3-12 - Síntese parcial do DFA - OP1, OP4, OP2 completas e OP3 com reúso – Exemplo Ilustrativo.	35

Figura 3-13 - Síntese parcial do DFA - OP1, OP4, OP2 completas e OP3 sem reúso - DFA Final – Exemplo Ilustrativo. Observa-se que a operação 3 requer a mesma quantidade de água da fonte externa do que quando faz reúso do efluente da operação 4 (Figura 3-12).....	35
Figura 3-14 - Resumo do algoritmo DFA para processos batelada – completamente batelada. Legendas: OP - operação; S - Sim; N - não.....	36
Figura 3-15 – Representação dos elementos da planta batelada. Fonte: Adaptado de Gomes, Queiroz e Pessoa (2007).	37
Figura 3-16 - Rede de água final - Estudo de Caso 3.....	37
Figura 4-1 – Diagrama de Gantt - Estudo de Caso 1.....	40
Figura 4-2 - DFA sem reúso - Estudo de Caso 1.....	41
Figura 4-3 - DFA para visualizar reúso na operação 3 - Estudo de Caso 1. Observa-se que o valor de água limpa nesta operação é igual à condição do DFA sem reúso (Figura 4-2).	41
Figura 4-4 - DFA final - Estudo de Caso 1.....	42
Figura 4-5 - Rede de água final - Estudo de Caso 1.....	42
Figura 4-6 – Diagrama de Gantt - Estudo de Caso 2.....	44
Figura 4-7 - DFA sem reúso - Estudo de Caso 2.....	45
Figura 4-8 – DFA com escolha de reúso da OP1 na OP1’ (para ilustrar a quebra da regra de alocação 5.iii e 5.ii) - Estudo de Caso 2.	46
Figura 4-9 – DFA final - Estudo de Caso 2.....	46
Figura 4-10 - Rede de água – baseado no DFA com escolha de reúso da OP1 na OP1’(para ilustrar a quebra da regra de alocação 5.iii e 5.ii) - Estudo de Caso 2.....	47
Figura 4-11 – Rede de água – baseado no DFA final - Estudo de Caso 2.	47
Figura 4-12 – Diagrama de Gantt - Estudo de Caso 3.....	49
Figura 4-13 - DFA sem reúso - Estudo de Caso 3.....	50
Figura 4-14 - DFA final - Estudo de Caso 3.....	51
Figura 4-15 - Rede de água - Estudo de Caso 3.	52

LISTA DE TABELAS

Tabela 2-1 - Diferença entre processo batelada e processo contínuo. Adaptado do trabalho de Korovessi e Linninger (2006).....	7
Tabela 2-2 - Distinção entre operações de carga fixa e vazão fixa. Fonte: Fan et al. (2012)...	11
Tabela 3-1 - Tabela de oportunidades. Fonte: Adaptado de Kim e Smith (2004).....	22
Tabela 4-1 – Tabela de oportunidades – Estudo de Caso 1. Fonte: (WANG; SMITH, 1995a).	39
Tabela 4-2 – Tabela de oportunidades - Dados limites rearranjados com a inserção da massa de água de cada operação (M) – Estudo de Caso 1.	39
Tabela 4-3 - Tabela de oportunidades - Estudo de Caso 2. Fonte: (KIM; SMITH, 2004).....	44
Tabela 4-4 - Tabela de Oportunidades - Estudo de Caso 3. Fonte: (MAJOZI, 2005a).....	49

Capítulo 1

1.1 Introdução

Inicialmente, entende-se que seja interessante esclarecer sobre a relação da tríade: Engenharia Química, Engenharia de Processos (EP), Integração de Processos (IP).

A Engenharia de Processos (EP), segundo Perlingeiro (2005), contempla três grandes áreas de conhecimento sucessivamente agregadas à formação da engenharia química. Num primeiro nível estão localizadas as ciências básicas que abrangem os fenômenos naturais, usando como forma de descrição e quantificação a linguagem matemática (ex. Biologia, Química, Física). Em seguida, encontra-se os fundamentos que tratam tanto do entendimento quanto da modelagem matemática dos fenômenos físico-químicos presentes ao redor e dentro dos equipamentos (ex. Termodinâmica, Cinética, Fenômenos de Transporte). A última área é correspondente à engenharia de equipamentos, onde compreende-se o projeto de cada equipamento de forma isolada, com o viés de dimensionar, otimizar, simular e/ou automatizar (ex. Controle, Operações Unitárias, Mecânica do Fluidos).

Com este balizamento, a EP trata da concepção de processos integrados onde são necessárias a incorporação de outras áreas de conhecimento. Neste contexto, o engenheiro de processos está familiarizado com a Integração de Processos, que pode ser vista como um conjunto de metodologias que associam partes ou a totalidade de um ou mais processos para reduzir o consumo de recursos ou emissões nocivas ao meio ambiente (KLEMEŠ; VARBANOV; KRAVANJA, 2013). De forma mais ampla, segundo El-Halwagi (1998), é uma abordagem holística para o projeto, reestruturação e operação do processo, que enfatiza sua unidade. Ou seja, a integração de processos oferece uma estrutura abrangente para entender fundamentalmente às percepções do processo como um todo, determinar metas de desempenho e tomar decisões sistemáticas que levem à realização destas.

Sendo assim, existe uma contribuição significativa da engenharia química, segundo Klemes (2012), na minimização do uso da água e geração de efluente, por meio de: implementação de boas práticas (melhores tecnologias disponíveis e controle de processos) e administração eficiente; aplicação de técnicas de IP baseadas na Análise Pinch¹; otimização de processo baseada em balanços de energia e massa adaptadas à estratégias avançadas focadas na redução de resíduos e efluentes, como a otimização multiobjetivo baseada em programação matemática; integração entre otimização e técnicas de planejamento produtivo concomitante

¹ Análise Pinch de Água é uma técnica sistemática para análise de redes de água e redução de consumo em diferentes processos dependentes deste recurso (KLEMEŠ et al., 2018).

com medidas em tempo real da planta, controle de qualidade do produto e minimização de perdas; implementação de procedimentos de inteligência avançada, com capacidade de tomada de decisão balizada no conhecimento, para dar suporte aos operadores a selecionar as ações que melhor protegem o ambiente.

Vale iluminar que, a consciência e busca por minimizar consumo ou melhorar a gestão de recursos hídrico é relativamente recente, incorporando uma das motivações a serem apresentadas em maiores detalhes a seguir.

1.2 Motivação

De acordo com o Relatório Mundial das Nações Unidas (ONU - da qual o Brasil é signatário) sobre Desenvolvimento dos Recursos Hídricos, UN-Water (2018), a demanda global de água tem aumentado numa taxa de 1% ao ano nas últimas décadas, estando estreitamente relacionada, entre outros fatores, com o crescimento populacional, desenvolvimento econômico e mudanças no padrão de consumo. Sendo assim, este quadro estará mais perceptível nos países em desenvolvimento ou de economias emergentes. Por exemplo, aponta-se que tanto a demanda doméstica quanto a industrial - que, segundo a FAO (2014), representavam respectivamente 12 e 19% da retirada² mundial - irão crescer mais rapidamente do que a demanda da agricultura, embora esta última ainda se manterá com a maior fatia. Aliado a isso, estima-se que 3,6 bilhões de pessoas (com previsão de tornarem-se entre 4,8-5,7 bilhões por volta de 2050) habitam áreas com escassez de água pelo menos um mês ao ano.

Com base neste panorama, constata-se uma mobilização relevante de instituições internacionais com o intuito de solucionar estas condições e prevenir crises hídricas mais agudas no futuro. O sexto objetivo definido no *Sustainable Development Goal 6* (UN, 2018) - fruto da Agenda 2030 de Desenvolvimento Sustentável, votada por unanimidade pelos 193 países membros - aborda, entre outras metas, uma que tange o objetivo deste trabalho (meta 6.4). Nela, busca-se incrementar o uso eficiente da água (ainda em desenvolvimento quanto a formulação do indicador), assegurando o consumo e o abastecimento sustentáveis com o intuito de reduzir substancialmente número de vítimas da escassez de água. O documento ainda aponta que, 171 países apresentam estresse hídrico³ e, embora a média global seja de 11%, há 31 países

² A retirada refere-se à água total captada para um uso (ANA, 2018).

³ Estresse hídrico é definido como uma razão, expressa em porcentagem, entre o consumo de água de todos os principais setores (incluindo também demanda do meio-ambiente) e o total de fontes renováveis de água (UN, 2018).

entre 25-70%, 22 acima de 70% e 11 superam os 100% (Líbia, Arábia Saudita, Emirados Árabes e Kuwait, por exemplo). Estipula-se que, em 2030, haverá um déficit de 40% entre a procura e a disponibilidade de água (UN-WATER, 2016).

No Brasil, país reconhecido pela rica rede hidrográfica com abundantes volumes de águas fluviais não está imune ao que se percebe no resto do mundo. Nota-se uma tendência de intensificação das condições climáticas características (UN-WATER, 2018), sendo registrados vários recordes de seca nas Regiões Hidrográficas (RHs) do São Francisco, Parnaíba, Tocantins-Araguaia, Atlântico Leste, Atlântico Nordeste Oriental e Atlântico Sudeste, simultâneos a aumentos significativos dos índices pluviométricos no RH do Uruguai, por exemplo (ANA, 2018).

Segundo o relatório anual de Conjuntura dos Recursos Hídricos, ANA (2018), em 2017 cerca de 38 milhões de pessoas foram afetadas por secas ou estiagens (13 vezes mais que por cheias), com danos humanos aproximadamente quatro vezes maiores que as cheias, gerando também impactos negativos na economia. A redução dos níveis dos reservatórios na Bacia do São Francisco, por exemplo, gerou a Resolução nº 1.043/2017, com medidas de interrupção de consumo de água às quartas-feiras, exceto consumo humano, dessedentação de animais e indústrias com operação contínua acima de 13h/dia (com a condição de redução de volume captado mensal de 14%). Somado a isto, desde 2014 que condições hidrológicas severas vêm impactando o volume armazenado nos reservatórios da RH do Paraná, afetando não só as atividades da Hidrovia Tietê-Paraná (uma das hidrovias mais importantes, em termos de valores e volumes transportados, do país) como também no abastecimento elétrico de quase metade da Região Metropolitana de São Paulo (RMSP – maior aglomeração populacional do Brasil) afetando o Sistema Cantareira. A escassez de água pode ter efeitos bastante graves em alguns dos principais setores industriais, como apresentado pela organização *Carbon Disclosure Project* (CDP) onde 53% dos entrevistados do setor industrial relataram riscos de escassez de água nas operações diretas, e 26% na cadeia de valor (CDP, 2014).

Neste cenário, a discussão sobre reúso de água nacional está sendo impulsionada (principalmente no Nordeste e grandes centros urbanos), considerando-se o fato de que o reúso de efluente sanitário tratado como uma alternativa e já em andamento. Por exemplo, a Aquapolo é o maior empreendimento para a produção de água de reúso industrial na América do Sul - fruto da parceria entre a BRK Ambiental e a Companhia de Saneamento Básico do Estado de São Paulo (SABESP) – fornecendo, por contrato, 650 L/s de água de reúso para o Polo

Petroquímico da Região do ABC Paulista (equivalente ao abastecimento de uma cidade de 500 mil habitantes).

Dentro deste contexto, o Diagrama de Fontes de Água (DFA) surgiu como uma ferramenta, inteiramente nacional, voltada para o desenvolvimento sustentável, atuando tanto na redução do consumo de água primária quanto na geração de efluentes em processos industriais, ao mesmo tempo que gera ganhos financeiros e ambientais. Sendo assim, é um importante instrumento na gestão hídrica para instituições que buscam aprimoramentos e processos mais sustentáveis.

Essa ferramenta surgiu e é desenvolvida na Universidade Federal do Rio de Janeiro (UFRJ) pelo Grupo de Integração de Processos Químicos (GIPQ) da Escola de Química (EQ). O DFA está inserido dentro do grupo dos procedimentos heurísticos e foi originado como uma evolução dos trabalhos de Castro et al. (1999) e Wang e Smith (1994, 1995) e uma melhor apresentação histórica pode ser vista na tese de Francisco (2017). Dentro do GIPQ, apenas dois estudos aplicam o diagrama de fontes para redução do consumo e geração de efluentes aquosos em processos batelada (IMMICH et al., 2007; MIRRE et al., 2012).

Também é interessante observar que, na literatura, a minimização de água em processos contínuos foi e permanece sendo amplamente estudada, podendo ser conferido nas revisões de Bagajewicz (2000), Foo (2009), Klemes (2012) e Klemeš et al. (2018). Os principais motivos pela predileção por processos contínuos podem ser identificados como a geração de maior volume de água residual (conferindo maior potencial de redução), assim como a menor complexidade na otimização do processo, já que não há a dimensão de tempo somada à restrição de contaminantes. Por outro lado, em processos batelada esta abordagem foi ignorada no passado, mas vem ganhando significativa atenção. Gouws et al. (2010) justifica esta mudança de interesse com os seguintes fatos:

- i. Processos batelada sempre foram mal desenvolvidos devido a carência de métodos, vide que as engenharias conceituais são, em maioria, para processos contínuos;
- ii. Ascensão de vários produtos relacionados à produção de pouco volume e alto valor agregado, como os farmacêuticos e químicos especiais; e
- iii. Em geral, as águas residuais provenientes de processos batelada são mais tóxicas do que as geradas nos processos contínuos.

Tendo em vista a ampliação da consciência em relação às condições hídricas globais, a relevância da indústria para este quadro e a evidente lacuna de pesquisa no campo de

minimização do uso de água, tanto na literatura quanto dentro do GIPQ, faz-se pertinente desenvolver uma linha de pesquisa onde o DFA evolua e fundamente sua inserção nos processos batelada.

1.3 Objetivo

O presente trabalho tem por objetivo expandir o horizonte do DFA aos processos batelada através do registro inicial e descrição de uma metodologia com as seguintes características, que serão abordadas nos capítulos posteriores:

- a) Processos completamente batelada;
- b) Operações de carga fixa;
- c) Operações sem perda/ganho de água;
- d) *Schedule* fixo;
- e) Único contaminante;
- f) Única fonte externa;
- g) Sem regeneração
- h) Sem reciclo;
- i) Sem tanque de estocagem; e
- j) Horizonte de tempo curto.

1.4 Estrutura do Trabalho

Este texto está dividido em cinco capítulos. O presente capítulo, fornece uma noção geral do que é o DFA e em qual contexto está inserido. De forma sucinta relaciona-se a engenharia química, engenharia de processos e integração de processos, expõe as motivações correlacionadas às condições hídricas do planeta, breve panorama sobre estudos em processos batelada comparativamente aos processos contínuos, deixando também explícito os objetivos deste trabalho.

Já o Capítulo 2 apresenta, inicialmente, alguns conceitos relevantes para processos batelada, discorrendo sobre as características das metodologias de integração de processos, aplicadas aos processos batelada, pertencentes aos três grandes grupos (heurístico, programação matemática e híbridos) existentes na literatura através de um levantamento bibliográfico.

Em seguida, o Capítulo 3 enfoca na apresentação da proposta metodológica heurística do DFA em processos batelada usando, para isso, um exemplo da literatura com explicação do passo-a-passo criado.

O Capítulo 4 exibe três estudos de caso, baseados em problemas clássicos da literatura, cujas resoluções seguem o proposto no Capítulo 3 . Os resultados são discutidos e avaliados fazendo uso dos resultados existentes na literatura sobre os mesmos problemas.

No Capítulo 5 são postas as observações finais sobre o trabalho, clareando as conclusões gerais e definindo sugestões de investigações em trabalhos futuros. Por fim, no Capítulo 6 estão organizadas todas as referências utilizadas neste trabalho.

Capítulo 2 Metodologias de Integração para Processos Batelada

2.1 Introdução

Dentro deste universo, é interessante observar as distinções básicas entre processos contínuos e os batelada (resumidos na Tabela 2-1). De modo geral, processos batelada são aplicados em casos em que a flexibilidade é relevante tanto na taxa de produção quanto na diversidade de matéria-prima, quando a produtividade é pequena e o nível de integridade do produto final deve ser elevado (principalmente indústria de agroquímicos, farmacêutica, de alimentos e química fina). Alguns produtos têm oscilações sazonais ou uma demanda variável ao longo do tempo, sendo interessante a possibilidade de ajuste da produção em pequenos turnos ou de alterar o tipo de produto para um com maior demanda, o que é de mais fácil implementação em plantas batelada (HALIM; SRINIVASAN, 2011).

Tabela 2-1 - Diferença entre processo batelada e processo contínuo. Adaptado do trabalho de Korovessi e Linninger (2006).

<i>Processo Batelada</i>	<i>Processo Contínuo</i>
Pequeno volume de produção	Grande volume de produção
Variabilidade na taxa de produção	Taxa de produção estável
Equipamentos mistos (compartilhados)	Equipamentos dedicados
Processos multiproduto	Processos de único produto
Variáveis de processo sujeitas à ajustes (incertezas na reatividade ou potência das matérias-primas)	Condições invariáveis de processo (incertezas insignificantes na reatividade ou processos suficientemente robustos)
Muitas etapas de purificação	Poucas etapas de purificação
Necessidade de integridade no lote produzido	Integridade do lote é arbitrária ou não necessária

Ademais, produtos que apresentam etapas de processos repetidas podem requerer menos equipamentos em uma planta batelada, em contraste a um processo contínuo onde, normalmente, os equipamentos são dedicados à cada etapa. Ainda, certos processos químicos são sensíveis a condições que não estão sob controle total do operador, como incertezas na reatividade que demandariam ajustes de tempo da reação. Estes tipos de ajustes temporais são menos onerosos em batelada, tendo em vista que nos processos contínuos esta alteração seria mais restrita e com maior impacto nas etapas subsequentes do *downstream*. Além disso, plantas

com elevado número de etapas de separação costumam ser mais dispendiosas financeiramente em sistemas contínuos, ao mesmo tempo que um maior controle de qualidade é favorecido ao se estabelecer avaliações de lotes de produção como nos sistemas batelada (KOROVESSEI; LINNINGER, 2006).

Dito isso, a principal distinção na minimização do uso de água nos processos batelada recai sobre a descontinuidade ou o fator temporal inerente a cada etapa. Portanto, cada etapa tem um tempo definido de início e fim (MAJOZI; SEID; LEE, 2017). Em decorrência disso, as operações não estão sempre em funcionamento durante todo o horizonte de tempo⁴ da produção, ou seja, água não é demandada ou gerada continuamente neste intervalo. Com isso, além da restrição de concentração de contaminantes, única restrição nos sistemas contínuos quando em estado estacionário, há a simultaneidade da restrição temporal. A Figura 2-1 exibe como a concentração e o tempo se complementam na restrição do reaproveitamento hídrico de uma planta batelada. Nota-se que, para que haja potencial de reúso de água de uma operação A para uma operação B, sem diluição de corrente, a primeira deve não somente ter uma concentração de contaminante inferior, na sua corrente de saída, como não deve estar localizada temporalmente após a operação B.

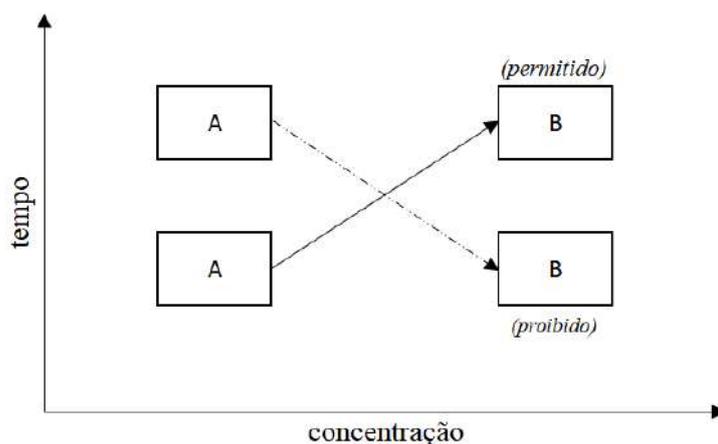


Figura 2-1 - Ilustração das restrições de tempo e concentração em um processo batelada entre duas operações fictícias A e B. Adaptado de Majozzi, Brouckaert e Buckley (2006).

Outra condição pertinente aos processos batelada que utilizam água é a possível classificação entre operações semicontínua/semibatelada e verdadeiramente / completamente / pseudo batelada (*truly / completely / pseudo batch*) (JEŻOWSKI, 2010; MAJOZI, 2010). Como

⁴ Horizonte de tempo se refere à duração total de operação de um processo.

pode ser visto na Figura 2-2, em operações completamente batelada a água é inserida e descartada em um intervalo de tempo anterior e posterior à operação. Já as operações semibatelada tem a inserção e a descarga de água ao longo do tempo de operação, normalmente atribuídas aos processos de lavagem onde, segundo Gouws et al. (2010), se considerados insignificantes os comportamentos dinâmicos, assume-se o comportamento de estado estacionário de processo contínuo. Torna-se relevante atentar-se para o fato de o presente trabalho focar nos processos cujas operações são completamente batelada, deixando uma análise mais profunda dos semibatelada para etapas posteriores de pesquisa.

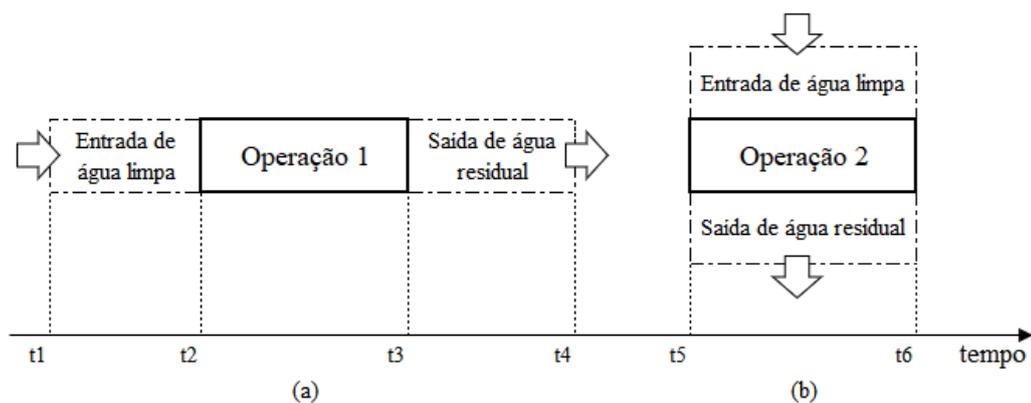


Figura 2-2 - Tipos de processo batelada que fazem uso de água. (a) completamente batelada; (b) semibatelada.

Retirado do estudo de Gouws et al. (2010).

Ainda nestes dois casos, podem haver situações tanto de perda quanto de ganho de água, exemplificados na Figura 2-3. Nota-se que, não são mostradas a saída de água nos processos com perda, pois, de acordo com Gouws et al. (2010), considerou-se esta corrente com quantidade de água desprezível. Em contrapartida, representou-se o processo com ganho de água (típico de reações que tem a água como subproduto ou produto) apenas com a corrente de saída representando já o saldo total de água pronta para o reúso. Tais características não são abordadas neste trabalho, sendo interessantes para uma expansão em estudos futuros.

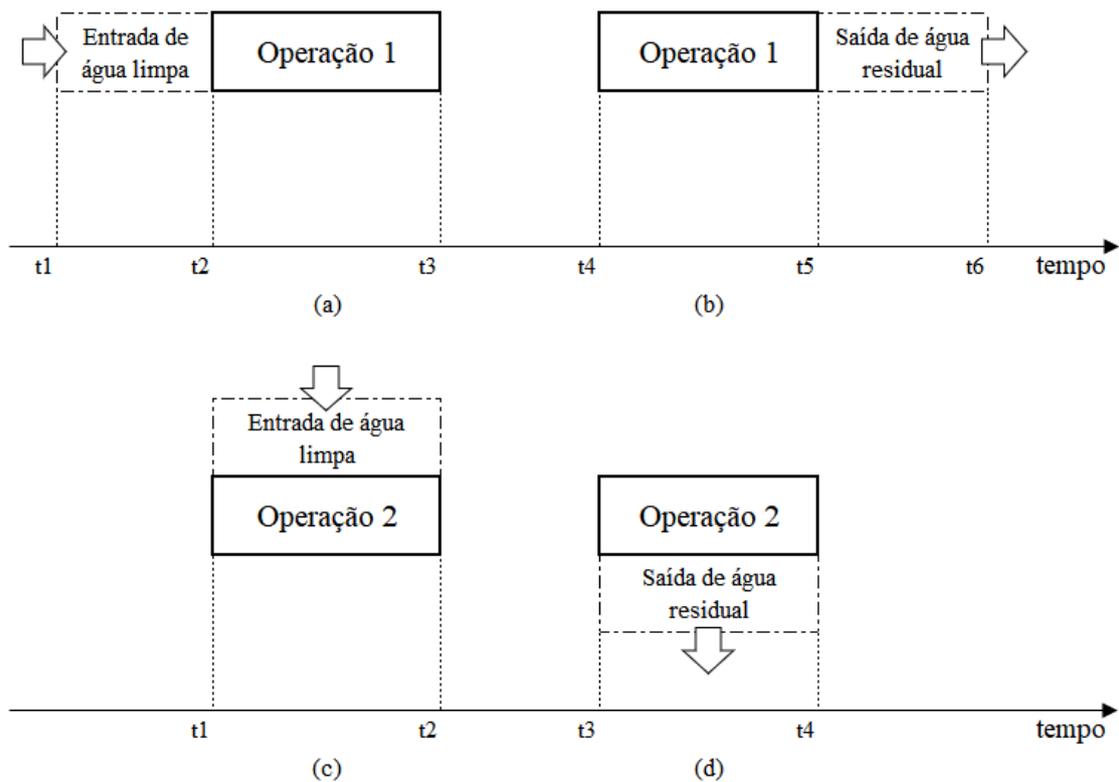


Figura 2-3 - Casos de perda (a; c) e ganho de água (b; d) em operações completamente batelada (operação 1) e semibatelada (operação 2), respectivamente. Adaptado do estudo de Gouws et al. (2010).

Ainda em relação às operações, pode-se observar dois tipos de abordagem nos processos batelada: carga fixa (controladas pela qualidade) e vazão fixa (controladas pela quantidade) (PRAKASH; SHENOY, 2005). No primeiro, a água é usada como agente de separação de massa para remoção parcial de uma quantia fixa de contaminante, sendo a perda ou ganho considerados desprezíveis tanto para água quanto para os contaminantes. Como consequência as correntes de entrada e saída de água da operação são tratadas como iguais em termos de massa de água. No entanto, para operações de vazão fixa, o principal objetivo é a exigência de fluxo de água nas operações, podendo não envolver transferência de massa (FAN et al., 2012). Vale destacar que, segundo Teles, Castro e Novais (2009), quando um certo contaminante entra em uma operação de vazão fixa, independente se sua concentração de entrada estar igual ou menor que a limite, a concentração de saída deve sempre estar no valor limite. Uma comparação entre estes dois tipos de abordagens pode ser vista na Tabela 2-2. Cada uma é explicada com maiores detalhes no trabalho de Foo (2009), que também afirma que ambas as abordagens são compatíveis em casos onde se tem um único contaminante (foco deste trabalho), diferentemente quando se tem múltiplos contaminantes (expansão relevante para pesquisas futuras).

Tabela 2-2 - Distinção entre operações de carga fixa e vazão fixa. Fonte: Fan et al. (2012).

	Carga fixa	Vazão fixa
Controlada pela	Qualidade	Quantidade
Baseada na	Transferência de massa	Não transferência de massa
Concentração de entrada/inicial	\leq valor máximo permitido	\leq valor máximo permitido
Concentração de saída/final	\leq valor máximo permitido	= ao máximo permitido (fixo)
Vazão	Valor de entrada = saída, sendo \leq aos valores limites	Pode haver valores de entrada \neq saída, mas são = aos valores limites
Exemplos	Lavagem, limpeza e extração.	Aquecedor, torre de resfriamento e reator.

Voltando a atenção para as plantas batelada, elas podem ser divididas em dois grandes grupos, plantas multiproduto e plantas multipropósito. Em uma planta multiproduto, cada batelada produzida segue a mesma sequência de operações desde a matéria-prima até o produto final, embora o produto e o tempo de cada unidade possam variar. Por conseguinte, este tipo de fábrica é ideal para produtos com receitas (ordem e sequência das operações) iguais e fixas. Já as plantas multipropósito são mais complexas, pois são adequadas nas ocasiões onde a produção é caracterizada pela variação nas receitas. Importante ressaltar que a variação destas, para diferentes bateladas, não necessariamente significa a variação do produto final (MAJOZI, 2010). Um fluxograma ilustrativo da distinção entre estas plantas batelada pode ser visto na Figura 2-4.

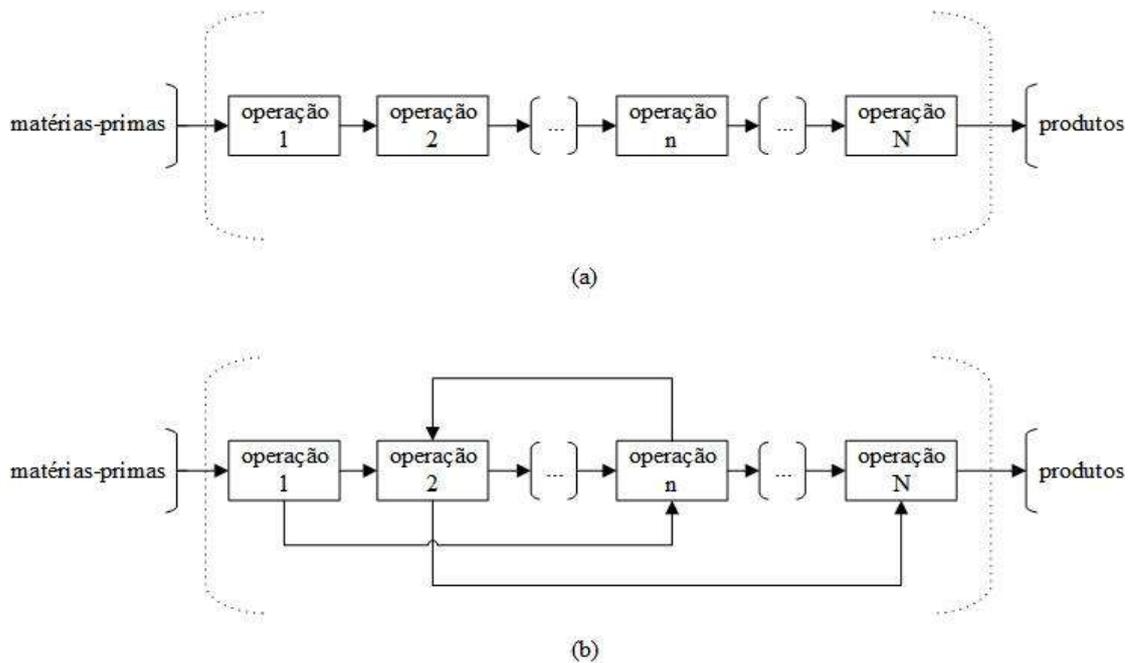


Figura 2-4 – Fluxograma ilustrativo de plantas Multiproduto (a) e Multipropósito (b). Adaptado do trabalho de Majozi (2010).

Como já dito, a regulamentação mais restrita e a crescente consciência pública sobre a questão hídrica planetária exerce uma pressão para que as fábricas tomem medidas direcionadas ao racionamento da água ao longo de suas operações. Segundo Jeżowski (2010), nas plantas batelada a água é gerada principalmente durante a limpeza de equipamentos multipropósito e quando a água tem a função de solvente. Ainda acrescenta que, neste panorama, muitos pesquisadores desenvolveram metodologias para o uso mais eficiente de água através do reúso direto, indireto e a regeneração da água residual (Figura 2-5), embora esta última não seja tão comum, se comparada às pesquisas feitas em processos contínuos. Enquanto o reúso direto abrange o reciclo (utilização da corrente de saída de água de uma operação na entrada da mesma) e o reúso (aplicação da corrente de saída de água de uma operação em outra distinta), o reúso indireto é relativo à estocagem da água residual de uma operação, em um tanque, para que a alocação seja feita posteriormente e em outra operação (MAJOZI; SEID; LEE, 2017). As possibilidades tanto de reciclo, regeneração e tanque de estocagem não são abordadas neste estudo, sendo assim, comportam potenciais passos futuros na fundamentação do DFA nos processos batelada.

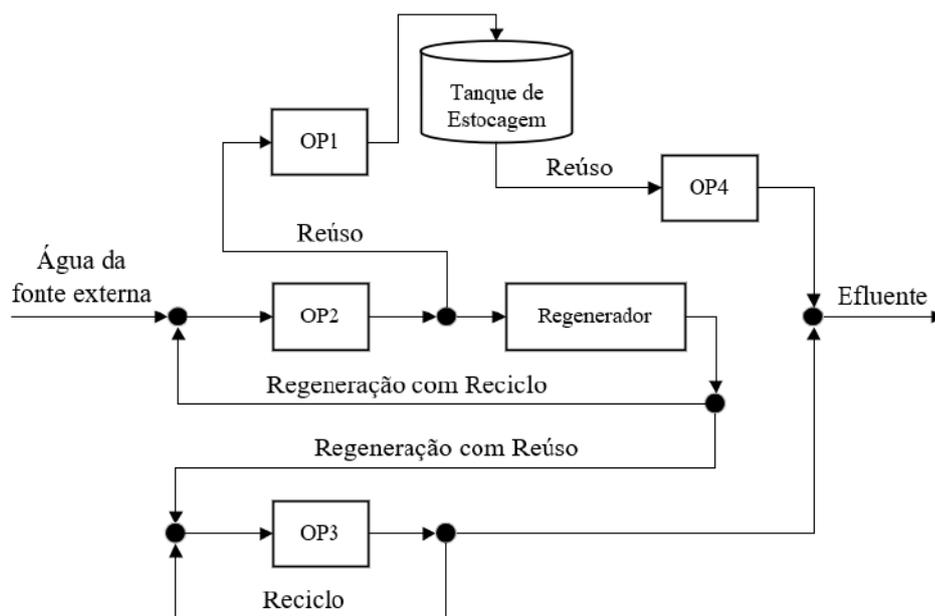


Figura 2-5 - Fluxograma ilustrativo de reúso, reciclo e regeneração. Modificado a partir do fluxograma de Klemes (2012). Legenda: OP - operação.

2.2 Análise geral

De acordo com Jezowski (2010), a restrição temporal soma uma nova dimensão ao problema e acresce a dificuldade envolvida na sua resolução. Nesse contexto, é relevante perceber alguns marcos iniciais, que podem ser pontuados, no desenvolvimento dos trabalhos com batelada. Esta investigação se iniciou em Wang e Smith (1995a), onde trata-se redes de água e de calor em uma única estrutura através de uma técnica gráfica. Em 1997 (ALMATÓ et al., 1997), abordagens matemáticas começaram a surgir, embora o método só conseguisse otimizar parâmetros e não solucionar os problemas padrões, apenas solucionados por Kim e Smith (2004). O modo de operação completamente batelada foi abordado pela primeira vez em Majozzi (2005a), conseguindo otimizar a rede de água concomitantemente ao *schedule*. Ademais, no mesmo ano, o trabalho de Foo, Manan e Tan (2005) foi o primeiro a abordar problemas com processos de vazão fixa.

Para a pesquisa do presente trabalho, encontrou-se apenas quatro revisões que apresentam metodologias ou técnicas de minimização de água em processos batelada, sendo eles: Gouws et al. (2010), Jezowski (2010), Klemeš (2012) e Klemeš et al. (2018). Destes, o primeiro é o único que enfoca nos processos batelada, enquanto o segundo e o último reservam uma pequena seção e o terceiro apenas tangencia o assunto abordando majoritariamente os

processos contínuos. De modo geral, divide-se os métodos entre: de *insight* (heurístico) – onde o DFA se enquadra –, de programação matemática e híbridos, cada qual com suas especificidades, cuja visão geral será dada adiante.

2.2.1 Métodos Heurísticos

Os métodos heurísticos para processos batelada têm suas bases fundamentadas nos processos contínuos, levando em conta, no entanto, a restrição temporal exigida nestes tipos de problemas. Vale ressaltar que, dentro deste grupo, ainda é possível classificar os métodos como gráficos e algébricos, sendo desenvolvidos tanto para operações de carga fixa quanto para vazão fixa. Nota-se que, a principal hipótese presente neste grupo é que, partindo do conhecimento prévio do *schedule*⁵ do processo é possível determinar o mínimo consumo de água no horizonte de tempo de interesse da operação.

A primeira extensão de estudo baseado nos métodos heurísticos foi proposta por Wang e Smith (1995a) por meio de uma técnica gráfica. Fundamentado em um modelo de problemas de carga fixa dos processos contínuos, assume que cada operação opera em modo semibatelada, hierarquizando as dimensões de modo que as concentrações ficam alocadas dentro dos intervalos de tempo, não se aprofunda no desenvolvimento do algoritmo de projeto (*desing*) da rede de água, não aborda casos de repetição da batelada e nem perda e ganho de água (sendo as vazões de entrada das operações iguais as da saída) (GOUWS et al., 2010).

Embasando-se no primeiro estudo, Majazi, Brouckaert, Buckley (2006) desenvolveram outro método gráfico, considerando também problemas de carga fixa e sem ganhos ou perdas. No entanto, assumem todas as operações como completamente batelada e demonstram que tanto o tempo quanto a concentração podem ser as restrições primárias. Ademais, o estudo propõe uma maneira de reduzir a estocagem requerida para o reúso da água através do aproveitamento de operações ociosas.

Em 2005, desenvolveu-se o primeiro estudo baseado em um problema de vazão fixa por Foo, Manan e Tan (2005), tratando as operações como fontes e demandas (*source and sink*) e expandindo a aplicação tanto para processos completamente batelada quanto semibatelada com possibilidade de perdas e ganhos de água. Por meio de estudos anteriores (FOO et al., 2004, 2005; MANAN; TAN; FOO, 2004) e, seguindo a prática convencional da técnica de análise de *pinch*, estabeleceu as metas a serem atingidas através do método algébrico, análise de cascata

⁵ *Schedule* é a forma de se organizar as alternativas de rotas de produção de cada produto, podendo combiná-las com campanhas de um ou mais produtos, levando em conta a receita, operações disponíveis e suas capacidades, assim como a capacidade de estocagem de cada material dentro do horizonte de tempo de interesse.

de água (ACA) - *water cascade analysis*, WCA. Devido à natureza algébrica da metodologia, não apresenta as limitações da plotagem gráfica dos métodos anteriores (baixa acurácia e prolongado tempo de execução).

Outro método algébrico foi desenvolvido por Liu, Yuan, Luo (2007), chamado de análise de intervalo de concentração (AIC) - *concentration interval analysis*, CIA -, baseado em seus estudos anteriores, abordando também problemas de vazão fixa e fazendo a separação das operações em fontes e demandas. Ademais, aplicou o método a uma gama variada de processos (única batelada com/sem estocagem de água e bateladas em série com estocagem) sempre considerando as operações como semibatelada (sendo esta metodologia aplicada em processos completamente batelada, conforme observado na revisão de Gouws et al. (2010)).

Apenas em 2008, Chen e Lee (2008), desenvolveram o primeiro método gráfico aplicável a problemas de vazão fixa (também dividindo as operações entre fonte e demanda), conseguindo resultar na capacidade de estocagem mínima ao mesmo tempo que simplifica a complexidade da rede. Interessante notar que analisaram casos de um único ciclo de batelada com e sem estocagem, assim como ciclos repetidos com estocagem.

De acordo com Gouws et al. (2010), os métodos heurísticos são úteis em situações quando o *schedule* da produção raramente sofre variações. Promovem *insights* sobre a síntese do problema e identificação dos gargalos operacionais, não exigindo conhecimentos de otimização matemática para se encontrar uma solução factível. Entretanto, aponta que são restritas aos casos de único contaminante (não tratando problemas de múltiplos contaminantes de modo eficiente, além de se tornar muito complexa), e difícil de lidar com restrições complexas de processos (como combinações temporárias ou proibidas, máximo número de conexões de tubulações, elevado número de restrições de tempo e concentração), principalmente na etapa de definição das metas. Majozzi (2010) indica que a principal desvantagem dos métodos heurísticos é a necessidade de lidar com duas dimensões, fazendo com que o tempo seja um parâmetro (*schedule* previamente definido), tal característica culmina na obtenção de soluções subótimas, uma vez que reduz o grau de liberdade da otimização.

Para maiores aprofundamentos e atualizações dos trabalhos com método heurístico, sugere-se as leituras: Kim (2011), Li, Liu e Liu (2018) e Li, Liang e Chang (2013).

Por fim, dentro deste grupo heurístico, encontram-se apenas dois estudos que abordam, de modo insipiente, processos batelada através da metodologia DFA, não havendo ainda uma definição do passo-a-passo algorítmico para processos batelada. O primeiro é o trabalho de Immich et al. (2007), que leva em consideração um único contaminante e avalia quatro cenários

(propostos em Majozzi (2005)): concentrações fixas de saída sem tanque de estocagem, vazões fixas de entrada sem tanque de estocagem, concentrações fixas de saída com tanque de estocagem, vazões fixas de entrada com tanque de estocagem.

Baseando-se neste primeiro trabalho, o estudo de Mirre et al. (2012) aplica o DFA seguindo os passos de três trabalhos distintos: caso de exemplo do método, relativo ao estudo de Foo, Manan e Tan (2005); caso 1, referente a uma unidade hipotética apresentada por Chen e Lee (2008); e caso 2, relativo ao setor de produção de cerveja estudado por Tokos e Pintarič, (2009). Os cenários avaliados, em geral, abordam problemas de único contaminante, com e sem tanque de estocagem (único ou múltiplos tanques) e casos tanto de carga quanto de vazão fixa. No entanto, como dito anteriormente, nenhum destes dois trabalhos do GIPQ definiu passo-a-passo algorítmico para processos batelada, tornando-se uma lacuna para o aprofundamento do método DFA a ser, inicialmente, preenchida neste trabalho.

2.2.2 Métodos de Programação Matemática

Os métodos de programação matemática, segundo Gouws et al. (2010) em geral, seguem uma superestrutura⁶, aplicando fórmulas que comportam inúmeras restrições que descrevem o balanço de água, balanços de contaminante através do processo, operações, capacidade e dimensão temporal, além de conter uma função objetivo⁷. Assim como os métodos heurísticos, podem também ser categorizados de acordo com o modelo de operação que se trabalha (carga fixa e vazão fixa), assim como podem ser voltados para processos semibatelada, completamente batelada ou ambos. Sabendo disso, este grupo metodológico pode ser dividido em duas categorias: uma que minimiza o consumo de água a partir do *schedule* fixo (dimensão de tempo como um parâmetro), cujo foco será maior na exposição dos exemplos da literatura a seguir; e outro que minimiza o consumo de água e determina o *schedule* para as metas de minimização (dimensão de tempo como uma variável).

Almató et al. (1997) e Almató, Espuña, Puigjaner (1999), desenvolveram, nestes dois trabalhos, a primeira metodologia com uso de programação matemática. De modo geral empregam funções diferenciais e derivadas (mais complexas que as mais modernas), com superestrutura permitindo o uso de tanque de estocagem, rede de água sem restrições especificadas, aplicando a problemas de carga fixa e único contaminante, através de quatro

⁶ A superestrutura representa todas as possíveis soluções para o processo a ser analisado.

⁷ As funções objetivo variam de acordo com a abordagem do problema, enfatizando certos aspectos. Na maioria dos casos, elas estão relacionadas a minimização dos custos (de operação, fixos e/ou custos totais), consumo de água, capacidade de estocagem e conexões da rede de água (GOUWS et al., 2010).

funções objetivo (minimização da demanda por água, do custo com água, do custo de utilidades, e custos totais). Ambos têm o procedimento de solução juntando uma etapa heurística e outra de programação não linear (PNL) – *non-linear programming*, NLP. Posteriormente, um *software* foi criado por Puigjaner, Espuña, Almató (2000) fundamentando nestes dois trabalhos.

Com uma superestrutura mais genérica (possibilitando tanto reúso direto quanto indireto), Kim e Smith (2004) desenvolveram um método para processos semibatelada, utilizando restrições na rede de água limitando o número de correntes de saída e entrada (em cada operação), e abordando problemas de vazão fixa com possibilidade de lidar com múltiplos contaminantes. Implementa também uma função objetivo que minimiza o custo total do sistema de recuperação de água – da mesma forma que se encontra em Almató et al. (1997), Almató, Espuña, Puigjaner (1999), Li e Chang (2006), Rabie, El-Halwagi (2008) –, além de utilizar uma técnica não convencional de solução chamada de programação linear inteira mista-programação linear (PLIM-PL) (*mixed inter linear programming-linear programming*, MILP-LP), que auxilia na resolução da programação original programação não linear inteira mista (PNLIM) (*mixed inter non-linear programming*, MINLP), podendo resultar em longo tempo de resolução.

No trabalho de Tokos e Pintaric (2009), que se fundamenta nos estudos de Kim e Smith (2004), são incorporadas operações de regeneração operadas tanto em modo completamente batelada quanto em semibatelada. O estudo se restringe a um único ciclo e um único tanque de estocagem e, para isso, usa apenas uma função objetivo de redução de custo total (levando em conta custos de: consumo de água, tanque de estocagem, rede de tubulações e custo de regeneração).

Em 2005, Majozzi (2005b) desenvolveu uma metodologia voltada para problemas de vazão fixa em processos completamente batelada de um único contaminante. A superestrutura não considera a existência de estocagem intermediária entre as operações (não apresentando restrições na rede de água), enquanto a função objetivo considera a minimização do consumo de água ou geração de efluente e a solução se dá através da programação MINLP.

No método proposto por Li e Chang (2006), permite-se o reúso e reciclo dos estoques no mesmo ciclo da batelada através de uma superestrutura que possibilita o reúso de água somente via tanques de estocagens. Ainda, são propostas restrições que reduzem a complexidade da rede de água criada, podendo também resolver tanto problemas de vazão fixa quanto de carga fixa e múltiplos contaminantes. No entanto, a metodologia se limita apenas a um ciclo de batelada e, por abordar um estilo de solução onde são feitas múltiplas opções com

pontos iniciais escolhidos randomicamente, acaba por demandar maior tempo de cálculos computacionais.

Não menos interessante, observa-se que Shoaib et al. (2008) e Rabie e El-Halwagi (2008) desenvolveram e aplicaram uma metodologia em problemas de vazão fixa, cuja superestrutura se assemelha à de Li e Chang (2006). Em ambos, são utilizadas três funções objetivo: minimização de água – usando programação LP -, minimização de tanques de estocagem e de interconexões na rede – através da MINLP -, para o primeiro; e minimização de água – pelo uso da programação NLP -, de tanques de estocagem – com MINLP - e de interconexões na rede – através de método iterativo entre NLP e MINLP. Enquanto Shoaib et al. (2008) tem capacidade de lidar com apenas um contaminante, Rabie e El-Halwagi (2008) conseguem resolver problemas de múltiplos contaminantes através do estabelecimento de um contaminante chave.

Chen, Chang e Lee (2008), também abordando problemas de vazão fixa, se fundamentam na superestrutura de Majoji (2005b), porém com a possibilidade de uso de estocagem para reúso indireto. Além disso, assumem uma série de funções objetivos incluindo a minimização do consumo de água, capacidade dos tanques de estocagem e conexões entre correntes, utilizando programações do tipo NLP e MINPL para as soluções. Em Chen et al. (2009), expande-se para problemas com ganho e perda de água, reduz-se o número de funções objetivo almejando minimização do consumo de água e a capacidade da estocagem. Ambos são capazes de tratar problemas com múltiplos contaminantes.

Para maior aprofundamento nas metodologias de programação matemática com *schedule* fixo, sugere-se as seguintes leituras: Chaturvedi e Bandyopadhyay (2012), Dogaru e Lavric (2011), Foo (2010), Lee et al. (2013), Liu et al. (2009); Ng et al. (2008) e Tokos, Novak Pintarič e Yang (2013).

Vale iluminar que todos os estudos anteriores têm como princípio a fixação do *schedule* preliminarmente à otimização. Deste modo, dando uma breve atenção à segunda classe de métodos de programação matemática, percebe-se que determinar o *schedule* ótimo que atingirá a maior redução de consumo de água contém maiores dificuldades. Ao mesmo tempo que determinar novas redes de água para cada *schedule* tem algumas limitações práticas - devido ao longo tempo de solução -, esta opção se torna atrativa na medida que o mínimo global de quantidade de água e/ou custo pode ser determinado para uma gama de restrições operacionais. Para melhor compreensão sobre os métodos de programação matemática com otimização do *schedule* simultânea, sugere-se os seguintes trabalhos: Cheng e Chang (2007), Gouws e Majoji

(2008), Lee e Foo (2017), Li, Zhou e Dong (2010), Majozi (2005a, 2006), Nonyane e Majozi (2012), Pulluru e Akkerman (2018), Sotelo-Pichardo et al. (2011) e Zhou et al. (2009).

Sendo assim, quando se trata de métodos de programação matemática de *schedule* fixo, este aspecto torna-se sua maior limitação. Do mesmo modo, como observado nos métodos heurísticos, esta primeira categoria é uma boa opção quando o *schedule* da planta sofre pouca alteração ao longo do tempo, o que termina por reduzir a flexibilidade da planta. No entanto, devido ao fato dos métodos de programação matemática (de ambas as classificações) apresentarem diferentes modelos com distintas funções objetivo, a comparação das soluções obtidas é difícil. Além disso, Gouws et al. (2010) sinaliza que, ainda que a mesma função objetivo seja usada, possivelmente a solução atingida com cada método será diferente em decorrência das várias considerações feitas na formulação de cada modelo.

2.2.3 Métodos Híbridos

A metodologia híbrida, segundo Francisco (2017), busca aliar as potências dos outros grupos de metodologia, ou seja, a facilidade de uso dos métodos heurísticos com o potencial dos métodos de programação matemática. Ademais, o uso conjunto é sequencial, se baseando na geração de condições iniciais via *insights* para facilitar e poupar tempo de execução dos métodos matemáticos. Apenas um exemplo (OLIVER; RODRÍGUEZ; UDAQUIOLA, 2008) foi encontrado com este método.

Capítulo 3 Proposta de DFA para Processos Batelada

3.1 Introdução

A metodologia DFA já foi bem estudada dentro dos processos contínuos, tendo sido registrada de forma consistente na dissertação de Gomes (2002). Para maiores detalhes e uma visão geral do desenvolvimento da metodologia é sugerida a leitura dos trabalhos de Gomes (2002), Gomes, Queiroz e Pessoa (2007), Gomes et al. (2013) e a tese de Francisco (2017). No entanto, para processos batelada somente dois artigos (IMMICH et al., 2007; MIRRE et al., 2012) foram escritos, com a água sendo o solvente, porém não havendo um aprofundamento do assunto e consolidação de algoritmos, no escopo do DFA, para este tipo de processo.

Vale lembrar que o presente trabalho tem por objetivo iniciar, de forma consistente, a expansão do DFA aos processos batelada, assumindo: (a) todas as operações sendo completamente batelada; (b) todas as operações com carga fixa; (c) nenhuma operação com perda ou ganho de água; (d) *schedule* definido previamente e fixo; (e) um único contaminante; (f) uma única fonte externa de água a 0 ppm; (g) sem possibilidade de regeneração; (h) sem possibilidade de reciclo; (i) sem a presença de tanque de estocagem; e (j) apenas um ciclo de batelada.

O procedimento aqui proposto pode ser dividido nos seguintes passos:

1. Dados do Processo;
2. Tabela de Oportunidades;
3. Diagrama de Gantt do Processo;
4. Estrutura do DFA;
5. Síntese do DFA; e
6. Rede de Água.

Para explicar as etapas do algoritmo, utiliza-se como base o exemplo dois de Kim e Smith (2004), sem levar em conta, entretanto, a possibilidade de divisão das operações 2 e 3. Tal opção deu-se por dois motivos: (i) a metodologia de Kim e Smith (2004) é voltada para processos semibatelada, permitindo alocação de água entre operações de mesmo intervalo de tempo, ou seja, dentro do intervalo de tempo de andamento da operação. Esta possibilidade é uma maneira de representar oportunidades extras de reúso dentro da planta, que não é viável em processos completamente batelada, que são o foco do presente trabalho; (ii) outros estudos usam este mesmo exemplo, entretanto sem adotar a divisão inicial destas operações (FOO; MANAN; TAN, 2005; MIRRE et al., 2012). Nesses casos, torna-se possível a comparação de

resultados. Além disto, este exemplo tem características que possibilitam uma melhor apresentação e justificativa de algumas etapas do algorítmico aqui proposto.

3.2 Procedimento

PASSO 1 – Dados de Processo

O algoritmo depende da disponibilidade de algumas informações básicas do processo inerentes ao estudo a ser realizado. São elas: concentrações máximas do contaminante na entrada (C_i) e na saída (C_f) das operações; tempo de início (t_0) e fim (t_f) das operações e; quantidade máxima de água que pode ser utilizada em cada operação, aqui denominada massa limite máxima de água na operação (M).

Caso seja disponibilizado o valor de “vazão limite” (f) de cada operação, o que ocorre em alguns exemplos na literatura, deve-se calcular a massa limite através da equação:

$$M_k = f_k \cdot (t_{f,k} - t_{0,k}) \quad (1)$$

sendo M_k a massa limite de água na operação k ; f_k a vazão limite da operação k ; $t_{f,k}$ e $t_{0,k}$ os tempos final e inicial, respectivamente, relativos à operação k ; $k = 1, \dots, N_{op}$; com N_{op} representando o número de operações do processo.

Vale ressaltar que este termo “vazão limite” da operação é recorrente nos estudos de otimização de redes em processos batelada, sendo um provável resquício das origens nas metodologias de sistemas contínuos (KIM; SMITH, 2004; MAJOZI, 2005a; WANG; SMITH, 1995a). Embora esta vazão apareça como dado inicial em estudos de caso e exemplos da literatura, é reconhecida a necessidade de se lidar com quantidades de água (M) nas operações batelada, que resultam do produto entre “vazão limite” (f) e a diferença entre os tempos final (t_f) e inicial (t_0), como mostrado na Equação (1). Sendo assim, como essa vazão não tem um significado físico real nos processos batelada, a partir deste ponto adota-se no presente trabalho o uso do termo “vazão média equivalente” ao se referir à vazão limite das operações batelada.

PASSO 2 – Tabela de Oportunidades

Montar a tabela de oportunidades, onde todos os dados recolhidos e/ou inicialmente calculados são organizados. Como pode-se observar na Tabela 3-1, os dados de cada operação são devidamente ordenados de modo a facilitar as etapas subsequentes do procedimento. Em geral, os artigos da literatura deixam a informação de vazão média equivalente na tabela de oportunidades, embora este valor não seja utilizado posteriormente.

Tabela 3-1 - Tabela de oportunidades. Fonte: Adaptado de Kim e Smith (2004).

Operação	C_i (ppm)	C_f (ppm)	f (t/h)	t_0 (h)	t_f (h)	M (t)
OP1	0	100	20	0,0	1,0	20
OP2	50	100	100	1,0	3,5	250
OP3	50	800	40	3,0	5,0	80
OP4	400	800	10	1,0	3,0	20

PASSO 3 – Diagrama de Gantt do Processo

Recomenda-se montar um diagrama de Gantt do processo, no qual as atividades, operações neste caso, são organizadas pelo eixo vertical e os respectivos inícios e durações no eixo horizontal. Sua construção pode ser efetuada com o procedimento descrito a seguir:

- 3.i. Inserir os tempos (tanto de início quanto de término) das operações em ordem crescente no eixo horizontal (direita para a esquerda), no topo do diagrama. Assim, criam-se os intervalos de tempo;
- 3.ii. Organizar as operações em ordem crescente (cima para baixo) de tempo de término no eixo vertical, à esquerda do diagrama. Portanto, obtém-se um campo para relacionar as operações e o tempo;
- 3.iii. Traçar linhas nos intervalos pertinentes à duração de cada operação (t_0 ao t_f). Completando assim o diagrama relativo ao *schedule* do processo.

Portanto, para o exemplo ilustrativo (Tabela 3-1), têm-se os seguintes tempos iniciais e finais {0; 1; 3; 3,5; 5}, cujos valores são inseridos no topo do diagrama, delimitando os intervalos temporais de todas as operações pertencentes ao processo (Figura 3-1). Já para as operações, colocando-as em ordem crescente em função do tempo de término, encontra-se o conjunto {OP1; OP4; OP2; OP3}, fato que auxilia na ordenação da disponibilidade de água conforme o tempo do processo avança (Figura 3-2). Por fim, os instantes de início e fim de cada operação são conectados, gerando a representação das operações no diagrama, como pode ser visto na Figura 3-3. Esse é o diagrama de Gantt do processo em estudo.

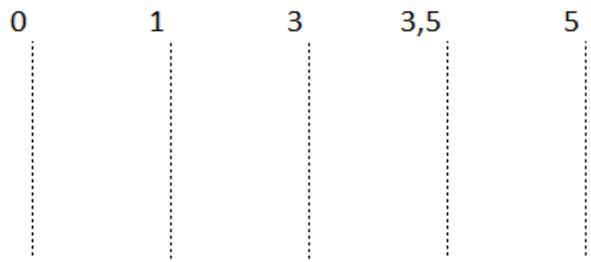


Figura 3-1 - Construção do diagrama de Gantt - Passo 3.i – Exemplo Ilustrativo.

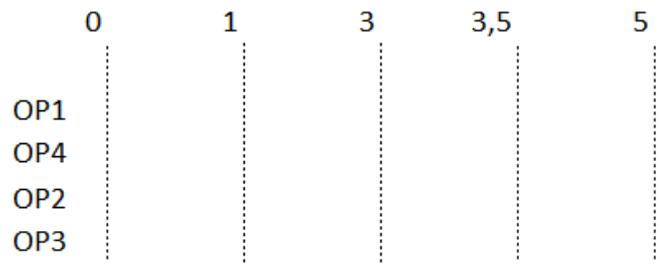


Figura 3-2 - Construção do diagrama de Gantt - Passo 3.ii – Exemplo ilustrativo.

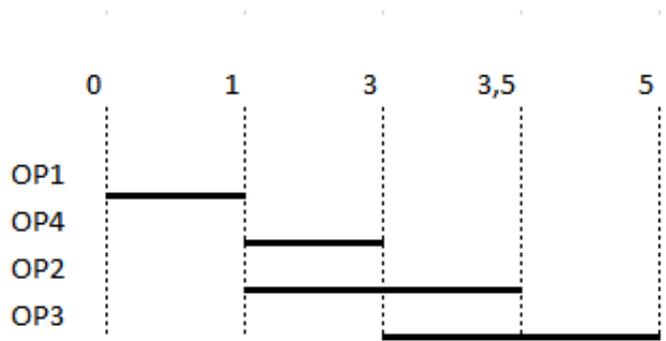


Figura 3-3 - Construção do diagrama de Gantt - Passo 3.iii – Exemplo Ilustrativo.

Findado o diagrama de Gantt, consegue-se avaliar as oportunidades de reúso. Em uma planta completamente batelada, toda operação cujo tempo de término coincide com o tempo de início de outra, é uma fonte de água em potencial para reúso. Dentro desta lógica, nota-se que o efluente que sai da operação 1 tem possibilidade de ser reusado tanto da operação 4 quanto na operação 2 e, a água residual da operação 4 é passível de ser alocada na operação 3. De forma análoga, toda a operação cujo início coincide com o término de outra operação é candidata a receber seu efluente. Desta forma, também se constata as mesmas relações descritas anteriormente.

Note que quando não há coincidência, ou seja, há um intervalo entre o término de uma operação e o início de outra, o reúso somente será possível se houver um tanque de armazenamento intermediário (tanque de estocagem/pulmão). Essa característica será abordada em trabalho futuro.

PASSO 4 – Estrutura do DFA

Seguindo a metodologia DFA, deve-se organizar um diagrama cujo eixo horizontal apresente os intervalos de concentração e cujo eixo vertical ordene as operações. No entanto, para o caso batelada, as operações devem estar acompanhadas de suas respectivas massas limite de água, e não das vazões mássicas (conforme já explicado). Essas massas são utilizadas para o cálculo das cargas de contaminante que ficam destacadas em cada intervalo de concentração. Ademais, como o tempo passa a ser uma dimensão determinante para a alocação de água, sugere-se que este seja priorizado na ordenação das operações de modo a manter-se a sequência estabelecida no diagrama de Gantt (Figura 3-3), inserindo também uma nova simbologia para aprimorar a visualização das restrições temporais (trazendo as informações do diagrama de Gantt para o DFA). Desta maneira, pode-se definir o seguinte passo-a-passo para a estruturação do DFA em processos batelada:

- 4.i. Inserir as concentrações (tanto de início quanto de término das operações e das fontes externas) em ordem crescente no eixo horizontal (direita para a esquerda), no topo do diagrama. Assim, criam-se os intervalos de concentração;
- 4.ii. Organizar as massas limites de água no eixo vertical à direita (na mesma ordem definida no diagrama de Gantt), inserindo as operações entre as suas respectivas concentrações iniciais e finais, através de sua representação por um traço. Assim, obtém-se o diagrama relacionando as operações com seus respectivos limites de concentração e de massa de água;
- 4.iii. Calcular, inserindo entre parênteses acima da linha da operação, a carga mássica (massa) de contaminante transferida em cada operação k no intervalo de concentração j , ($\Delta m_{k,j}$), através do produto entre a massa limite de água da respectiva operação k (M_k) e a diferença entre as concentrações final e inicial relativas ao intervalo j ($C_{f,j}$ e $C_{i,j}$, respectivamente), conforme observado na Equação (2):

$$\Delta m_{k,j} = M_k \cdot (C_{f,j} - C_{i,j}) \quad (2)$$

sendo $k = 1, \dots, N_{op}$ e $j = 1, \dots, N_{int}$; com N_{op} representando o número de operações presentes na tabela de oportunidades e N_{int} o número de intervalos de concentrações do DFA.

- 4.iv. Orientado pelo diagrama de Gantt, inserir no DFA: (i) figuras cheias (cor de livre escolha) ao lado direito da concentração final de cada operação geradora de efluente passível de alocação em outra operação - é importante que as figuras sejam distintas entre si; e (ii) figuras vazias (sem preenchimento) ao lado esquerdo da identificação das operações passíveis de receberem água para reúso da operação que tem a mesma forma cheia. Desta forma, insere-se a informação restrição temporal, do diagrama de Gantt, no DFA.

Sendo assim, para o exemplo ilustrativo, tem-se o conjunto de concentrações iniciais, finais e da fonte externa (fonte primária a 0 ppm), que em ordem crescente tem a forma {0; 50; 100; 400; 800}, cujos valores são inseridos no topo do diagrama delimitando os intervalos de concentração de todas as operações pertencentes ao processo (Figura 3-4). As operações, na ordem do respectivo diagrama de Gantt, - conjunto {OP1; OP4; OP2; OP3} - são então inseridas conforme pode ser visto na Figura 3-5. Após o cálculo das cargas de contaminantes em cada intervalo de concentração (Figura 3-6), faz-se a fusão entre o diagrama de Gantt e o DFA, através da inserção dos símbolos, obtendo a estrutura demonstrada na Figura 3-7. Observa-se que, para diferenciar as oportunidades de reúso dos efluentes das operações, escolheu-se um triângulo para representar a disponibilidade do efluente da operação 1 e um quadrado para a operação 4. E como as possibilidades de reúso da operação 1 se restringem às operações 4 e 2, um triângulo vazado foi disposto ao lado esquerdo destas duas últimas, enquanto um quadrado vazado foi posto ao lado esquerdo da operação 3 representando a única possibilidade de alocação de efluente da operação 4.

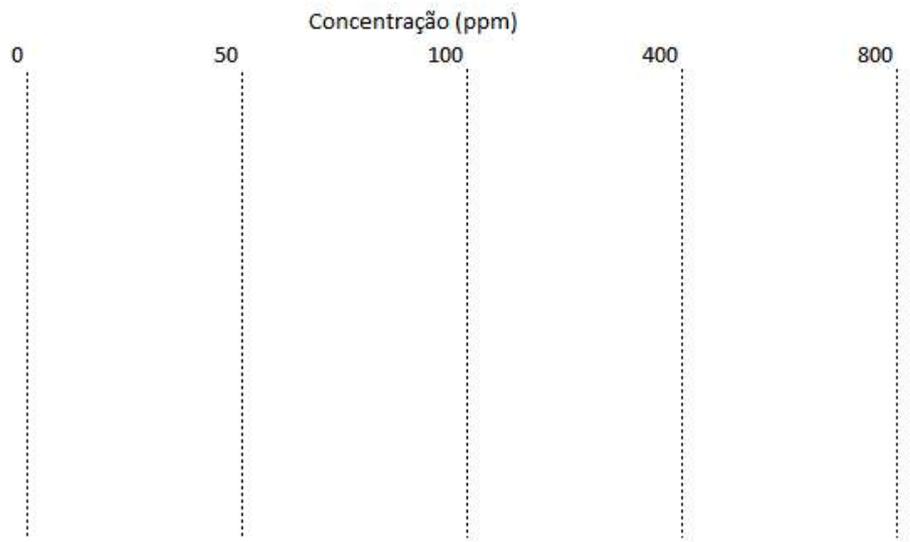


Figura 3-4 - Estrutura do DFA - Passo 4.i – Exemplo Ilustrativo.

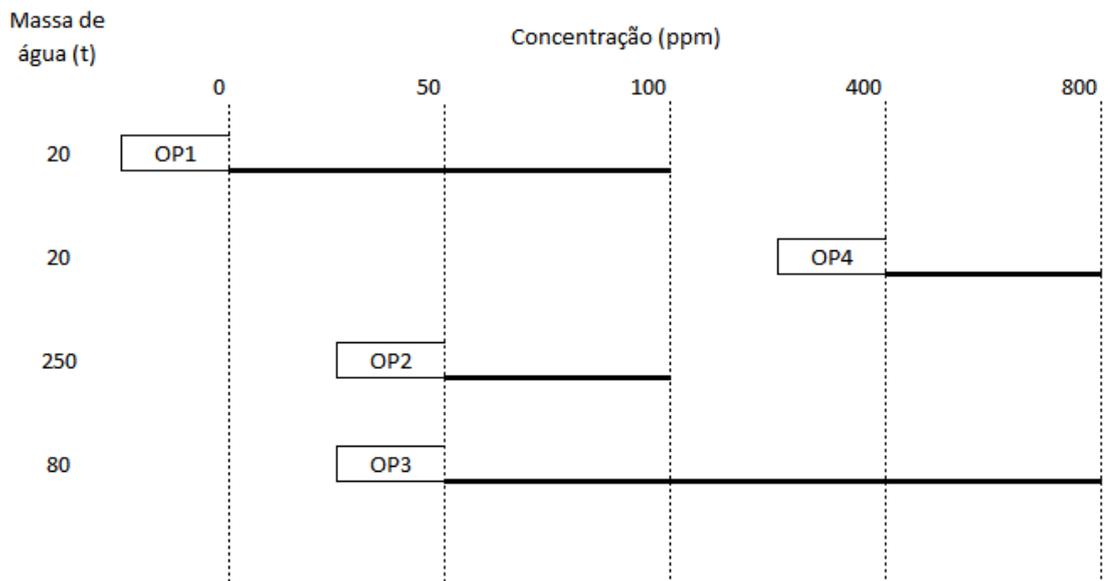


Figura 3-5 - Estrutura do DFA - Passo 4.ii – Exemplo Ilustrativo.

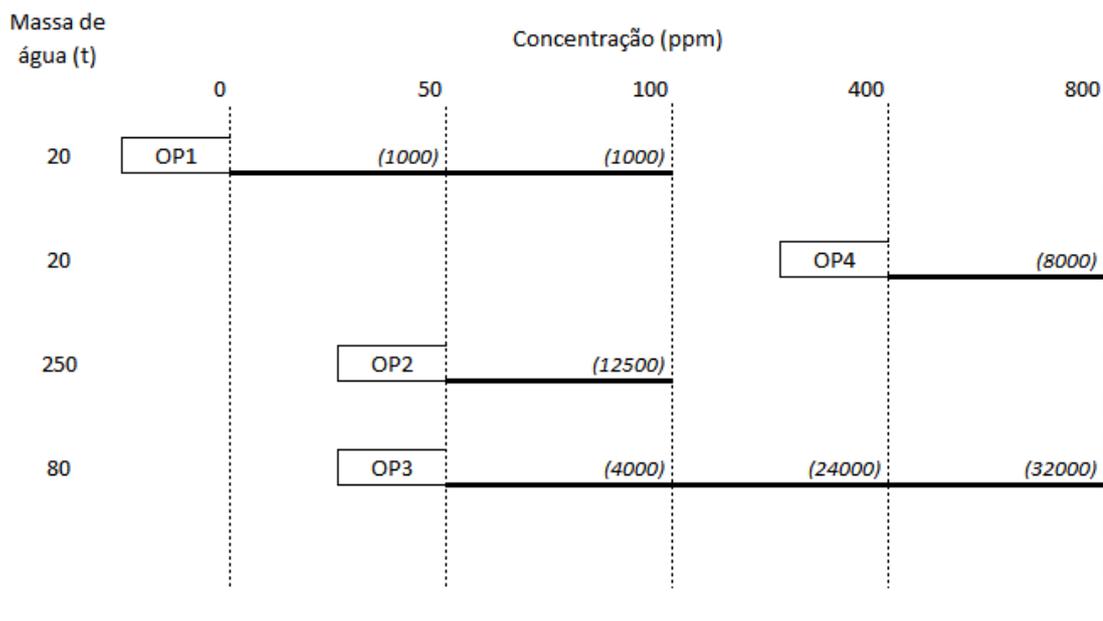


Figura 3-6- Estrutura do DFA - Passo 4.iii – Exemplo Ilustrativo.

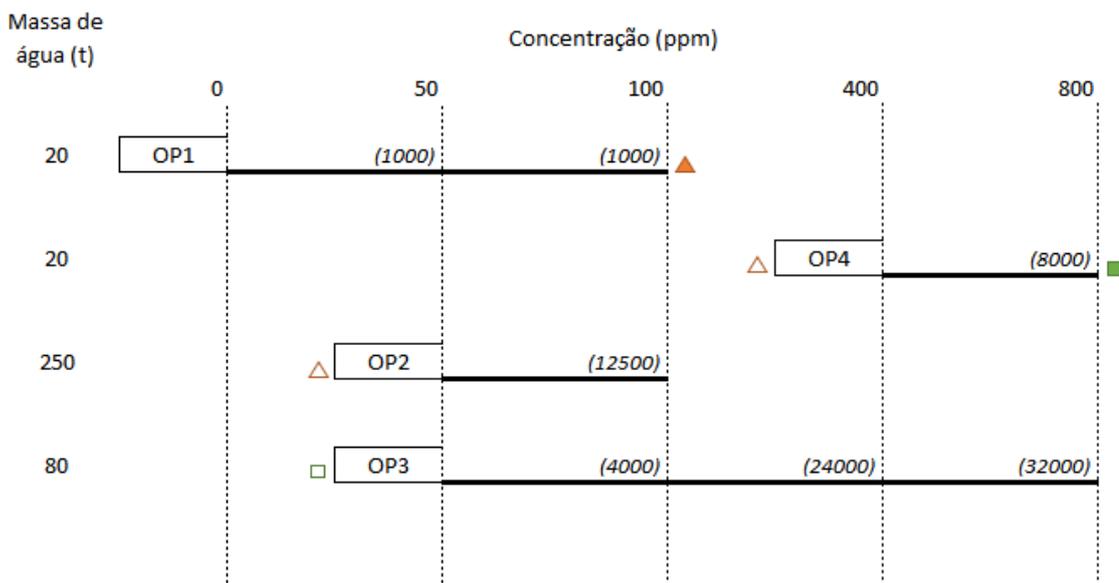


Figura 3-7- Estrutura do DFA finalizada - Passo 4.iv – Exemplo Ilustrativo.

PASSO 5 – Síntese do DFA

Para garantir o mínimo consumo de água primária em processos de uma forma geral, o estudo de Gomes, Queiroz e Pessoa (2007), referenciado e utilizado na recente tese de Francisco (2017), propõem três regras que serão mantidas no presente trabalho:

- 5.I. Usar fontes de água externa somente quando as fontes internas não estão disponíveis.

- 5.II. Transferir toda a carga de contaminante pertencente ao intervalo de concentração.
- 5.III. Para as operações presentes em mais de um intervalo, a corrente do intervalo anterior deve prosseguir pela mesma operação até o final (garantindo que não haja divisão da operação).

Entretanto, deve-se atentar ao fato da primeira regra se aplicar às fontes internas cujas concentrações sejam iguais ou menores do que a da operação a ser feita a alocação, conforme procedimento padrão DFA em processos contínuos. Em circunstâncias onde a concentração da fonte interna estiver acima da operação de alocação, que devem ser consideradas em conjuntos de operações em batelada, deve-se fazer uma análise mais minuciosa desta possível alocação. Esta atenção é relevante, pois em alguns casos o reúso de água nestas circunstâncias, em uma determinada operação, não reduz o consumo de água se comparado ao panorama sem reúso nesta mesma operação. Esta situação estará ilustrada mais adiante no exemplo tratado no presente capítulo.

Com a regra 5.I flexibilizada e as 5.II e 5.III mantidas, deve-se agora propor regras para alocação dos reúsos. É interessante atentar para o fato de, na descrição a seguir, o termo “figuras cheias” (posicionadas ao final do traço demarcador da operação, ou seja, a direita da operação) referir-se às fontes internas passíveis de reúso (operações que geram água suja/efluente) e “figuras vazias” (posicionadas ao lado direito da identificação das operações) representarem as operações passíveis de receber água suja/efluente de outras operações com a mesma figura cheia (nunca serão preenchidas). Com as identificações anteriores, cabe agora marcar os locais onde efetivamente há reúso. Assim, ao se fazer a alocação de água vinda de uma figura cheia numa certa operação (figura vazia), esta alocação é indicada através da inserção de uma mesma figura cheia no início do intervalo de alocação, ao lado da seta que acompanha a massa de água reusada. Portanto, a figura cheia à esquerda da seta que acompanha a massa de água reusada, apenas indica aplicação de reúso de um efluente nesta operação. Em resumo, figuras cheias (de mesma forma) à direita da operação fonte e ao lado de uma seta (que acompanha a massa de água) de uma ou mais diferentes operações receptoras representam o reúso do efluente da fonte nas receptoras.

As regras de alocação são:

- 5.i. Efetuar o reúso preferencialmente nas figuras vazias com maior concentração de entrada.

- 5.ii. Havendo figuras cheias com concentrações de saída diferentes para serem alocadas em uma figura vazia cuja concentração de entrada seja inferior, escolher a figura cheia com menor concentração para ser a fonte.
- 5.iii. Havendo mais de uma figura vazia com concentração de entrada iguais entre si e menores que a concentração de saída da figura cheia, dar preferência por alocar água de fonte interna naquela que apresente oportunidade de reúso no tempo futuro (figura cheia em sua direita) e que tenha a menor concentração de saída.

Quando o reúso implica na necessidade de uma diluição anterior, calcular, com base no balanço de massa, a quantidade de água de fonte limpa e de fonte suja necessária na mistura para se alcançar a restrição de carga de contaminante e de concentração de entrada, podendo resultar em duas situações:

- 5.a) Se a quantidade de água suja da mistura, requerida para atingir a concentração de entrada limite da operação, estiver disponível, utilizá-la;
- 5.b) Se a quantidade de água suja da mistura, requerida para atingir a concentração de entrada limite da operação, não estiver disponível, será preciso fazer duas misturas consecutivas. Na primeira utiliza-se o máximo de água suja disponível somada à água limpa para que se chegue na concentração de entrada da operação. Na segunda, acrescenta-se à primeira mistura (com concentração de entrada da operação) mais uma quantidade de água limpa para que seja satisfeita a condição de carga de contaminante do intervalo de concentração.

É importante observar que, em ambas as possibilidades, 5.a) e 5.b), deve-se verificar:

v.1) Se a quantidade necessária de fonte limpa, nesta operação, for maior ou igual do que a quantidade necessária na rede sem reúso, apenas manter o reúso caso esta operação gere redução de consumo de água com a alocação em uma terceira operação (com saldo total inferior à rede sem reúso);

v.2) Se a quantidade necessária de fonte limpa para mistura for menor do que a quantidade necessária na rede sem reúso, fazer a mistura e reúso nesta operação.

As situações 5.a) e 5.b), assim como estas últimas verificações estarão descritas nos exemplos a seguir.

Passando para o exemplo ilustrativo, partindo da estrutura do DFA montada (Figura 3-7), pode-se perceber que, a operação 1 tem apenas a possibilidade de receber água da fonte externa a 0 ppm. Sendo assim, para atender à regra II, deve-se calcular a massa de água

necessária para a retirada da carga de contaminante no primeiro intervalo de concentração desta operação, usando-se a seguinte equação:

$$M_{ext,k,j} = \frac{\Delta m_{k,j}}{(C_{f,j} - C_{ext})} \quad (3)$$

sendo $M_{ext,k,j}$ a massa de água da fonte externa, na operação k , no intervalo j ; $\Delta m_{k,j}$ a massa de contaminante na operação k , no intervalo j , já calculada anteriormente no passo de Estrutura do DFA;; $C_{f,j}$ a concentração final do intervalo j ; e C_{ext} a concentração da fonte externa. Com isso, encontra-se que $M_{ext,1,1} = 20$ t. Seguindo para o intervalo 2, conforme a regra III do algoritmo, 20 t de água do intervalo anterior são transferidas para este ($M_{1,2} = 20$ t) a uma concentração de 50 ppm ($C_{i,2}$), o que já transfere os 1000 g ($\Delta m_{1,2}$) de contaminante exigidos neste intervalo que vai até 100 ppm ($C_{f,2}$) - este cálculo é feito conforme a Equação (4). O resultado parcial do DFA pode ser visto na Figura 3-8.

$$\Delta m_{k,j} = M_{k,j} \cdot (C_{f,j} - C_{i,j}) \quad (4)$$

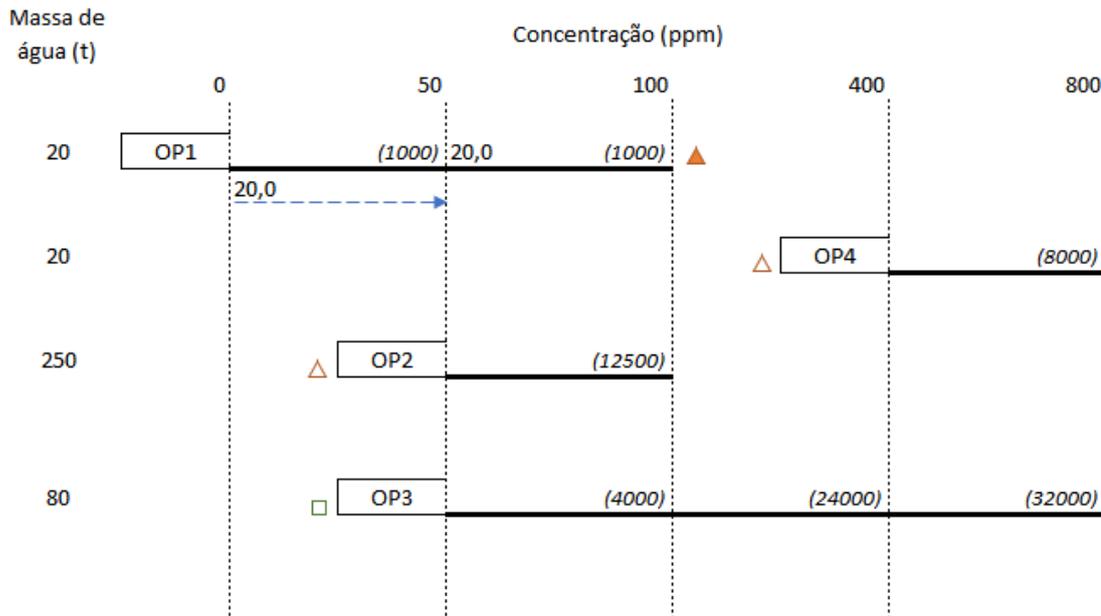


Figura 3-8 - Síntese parcial do DFA - OP1 completa – Exemplo Ilustrativo.

Findada a operação 1, nota-se que esta tem a figura preenchida (triângulo, neste caso) ao final do traço demarcador da operação. Isto significa que ela pode reusar água nas operações 4 e 2, que tem o triângulo vazio, identificando que estas são candidatas a receber efluente da

operação 1. Neste caso, aplicando a regra de alocação 5.i, opta-se inicialmente em reusar água da operação 1 na operação 4. Das 20 t de água disponíveis na operação 1, apenas 11,4 t são necessárias para se atender à transferência de carga de contaminante do intervalo de concentração da operação 4. Este cálculo é efetuado pela seguinte equação:

$$M_{int,k,j} = \frac{\Delta m_{k,j}}{(C_{f,j} - C_{int})} \quad (5)$$

sendo, $M_{int,k,j}$ a massa de água da fonte interna, na operação k , no intervalo j ; $\Delta m_{k,j}$ é a massa de contaminante na operação k , no intervalo j ; $C_{f,j}$ é a concentração final do intervalo j ; e C_{int} é a concentração da fonte interna. Como a operação 4 tem apenas um intervalo de concentração e a massa de contaminante retirada já foi atingida, a operação é dada como finalizada (Figura 3-9).

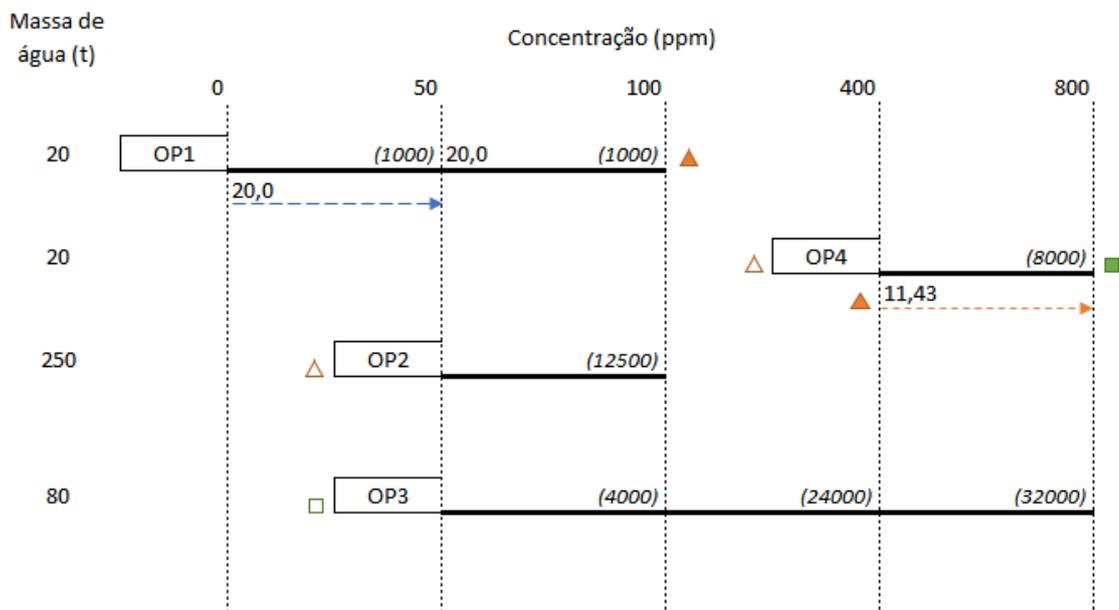


Figura 3-9 - Síntese parcial do DFA - OP1 e OP4 completas – Exemplo Ilustrativo.

Na sequência, tem-se a operação 2 com possibilidade de receber efluente da operação 1. Este caso pode originar nas situações 5.a) e 5.b) – anteriormente explicadas -, sendo assim, para calcular a quantidade de água de fonte limpa e de fonte suja necessária na mistura para se alcançar a restrição de carga de contaminante e de concentração de entrada, usa-se dois balanços de massa. O primeiro é o balanço de massa de contaminante no intervalo de concentração da

operação (BMC_{op} – Equação (6 e, o segundo, balanço de massa de contaminante no misturador (BMC_{mist} – Equação (7.

$$\Delta m_{k,j} = (M_{int} + M_{ext}) \cdot (C_{f,j} - C_{i,j}) \quad (6)$$

$$M_{int} \cdot C_{int} + M_{ext} \cdot C_{ext} = (M_{int} + M_{ext}) \cdot C_{i,k} \quad (7)$$

$$C_{i,k} = C_{i,j} \quad (8)$$

sendo $\Delta m_{k,j}$ a carga de contaminante a ser transferida na operação k no intervalo j ; M_{int} e M_{ext} , respectivamente, as massas de água da fonte interna e externa usada para a mistura; C_{int} e C_{ext} as concentrações da fonte interna e externa usadas para a mistura; $C_{i,k}$ a concentração de inicial da operação k cuja mistura irá ser alocada; e $C_{f,k,j}$ e $C_{i,k,j}$ são as concentrações finais e iniciais da operação k no intervalo j . A Equação (9) implica que a concentração de saída do misturador é fixada como a concentração de entrada da operação k que se inicia no intervalo j .

Como $C_{i,2,2} = 50$ ppm, $C_{f,2,2} = 100$ ppm e $\Delta m_{2,2} = 12500$ g, utilizando a Equação (6, encontra-se que $(M_{int} + M_{ext}) = 250$ t. Usando este resultado na Equação (7 e sabendo que $C_{ext} = 0$ ppm e $C_{int} = 100$ ppm, se obtém que $M_{int} = 125$ t. No entanto, há apenas 8,57 t de água provindas da operação 1 para a alocação na operação 2, ou seja, há menos água disponível do que as 125 t necessárias. Neste momento, depara-se com o a situação 29, sendo preciso realizar duas misturas. Na primeira, através do BMC_{mist} - Equação (7 -, usando o máximo disponível de água da fonte interna ($M_{int} = 8,57$ t), $C_{i,2} = 50$ ppm e $C_{ext} = 0$ ppm, tem-se que $M_{ext} = 8,57$ t, somando uma corrente total de 17,14 t ($M_{1^a mist}$) a 50 ppm ($C_{1^a mist}$). Para a segunda, resta saber quanto de água da fonte externa será necessário adicionar a esta primeira mistura, para carregar a massa de contaminante exigida neste intervalo da operação.

$$\Delta m_{k,j} = M_{1^a mist} \cdot (C_{f,k,j} - C_{1^a mist}) + M_{ext} \cdot (C_{f,k,j} - C_{ext}) \quad (9)$$

Para isso, usa-se o BMC_{op} da Equação (9), aplicando $\Delta m_{2,2} = 12500$ g, $M_{1^a mist} = 17,14$ t, $C_{1^a mist} = 50$ ppm, $C_{f,2,2} = 100$ ppm e $C_{ext} = 0$ ppm, obtendo o resultado de $M_{ext} = 116,43$ t. Entretanto, valendo-se da observação subsequente as descrições das situações 5.a) e 5.b), presentes nas regras de alocação, encontra-se que a mesma quantidade de água da limpa é

necessária para a operação 2, tanto nas condições com reúso quanto sem reúso. Neste caso, a quantidade necessária de fonte limpa, nesta operação, é igual do que a quantidade necessária na rede sem reúso. Sendo assim, não há redução no consumo de água, devendo ser evitado o reúso na operação 2 proveniente da operação 1, pois este acarretará em mais uma ligação na rede (derivações), gerando um aumento do custo de bombeamento e tubulações. Um comparativo do mencionado pode ser visualizado nos diagramas das Figura 3-10 e Figura 3-11.

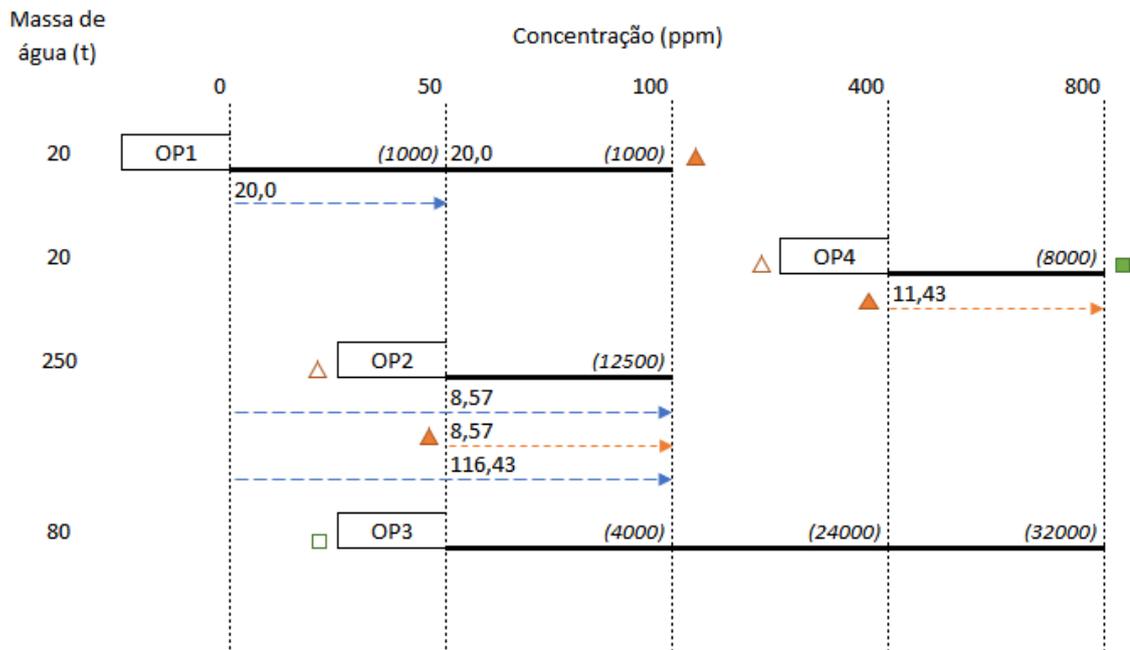


Figura 3-10 - Síntese parcial do DFA - OP1, OP4 completas e OP2 com reúso – Exemplo Ilustrativo.

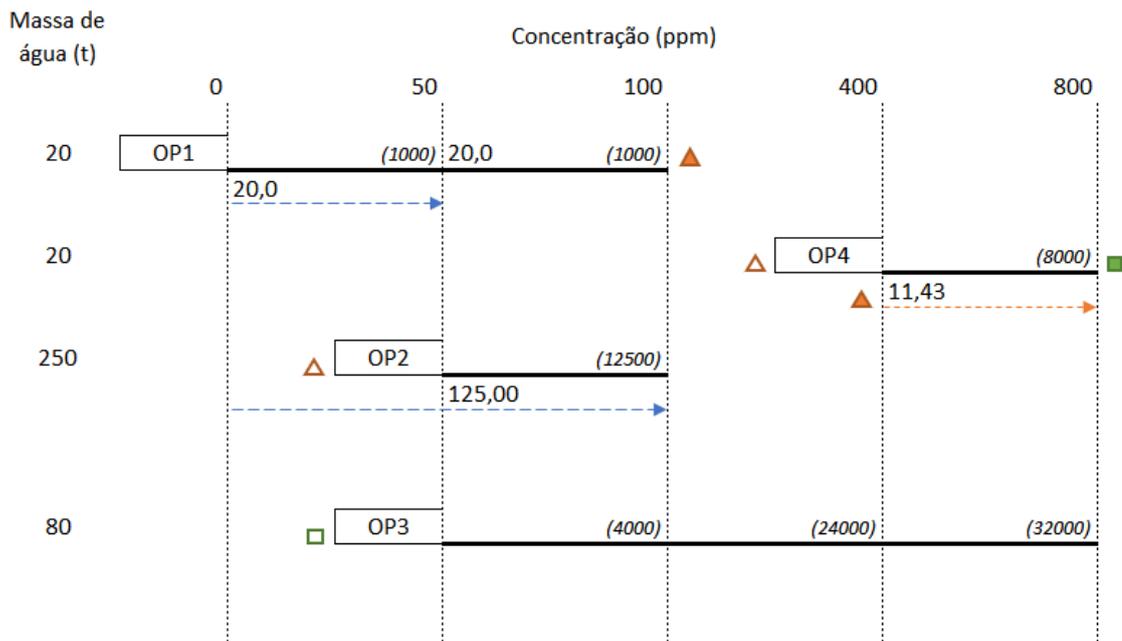


Figura 3-11 - Síntese parcial do DFA - OP1, OP4 completas e OP2 sem reúso – Exemplo Ilustrativo. Observa-se que a quantidade de água limpa usada na OP2 som reúso é igual a necessária para a mesma operação com reúso (Figura 3-10).

Restando apenas a operação 3, nota-se que a única opção de reúso é do efluente proveniente da operação 4. Dentro do procedimento de diluição, com auxílio da Equação (6), encontra-se que $(M_{int} + M_{ext}) = 80$ t. Usando este valor na Equação (7), chega-se a $M_{int} = 5$ t. Percebe-se agora que, diferentemente do caso de alocação da operação 1 na operação 2, 5 t estão disponíveis pela operação 4 (cuja massa de água na saída é de 11,43 t). Sendo assim, usa-se 5 t a 800 ppm da operação 4 com 75 t da fonte externa a 0 ppm para se obter 80 t a 50 ppm. Passando as 80 t para os intervalos seguintes e, avaliando a transferência de massa através da Equação (5), percebe-se que todos os intervalos seguintes da operação 3 são satisfeitos. Todavia, ao se comparar com quantidade de água limpa necessária para esta operação numa opção sem reúso, nota-se, novamente, a manutenção dessa massa de água, fazendo com que a opção de reúso não seja vantajosa, conforme mencionado anteriormente. Esta ocorrência está melhor ilustrada observando as Figura 3-12 e Figura 3-13.

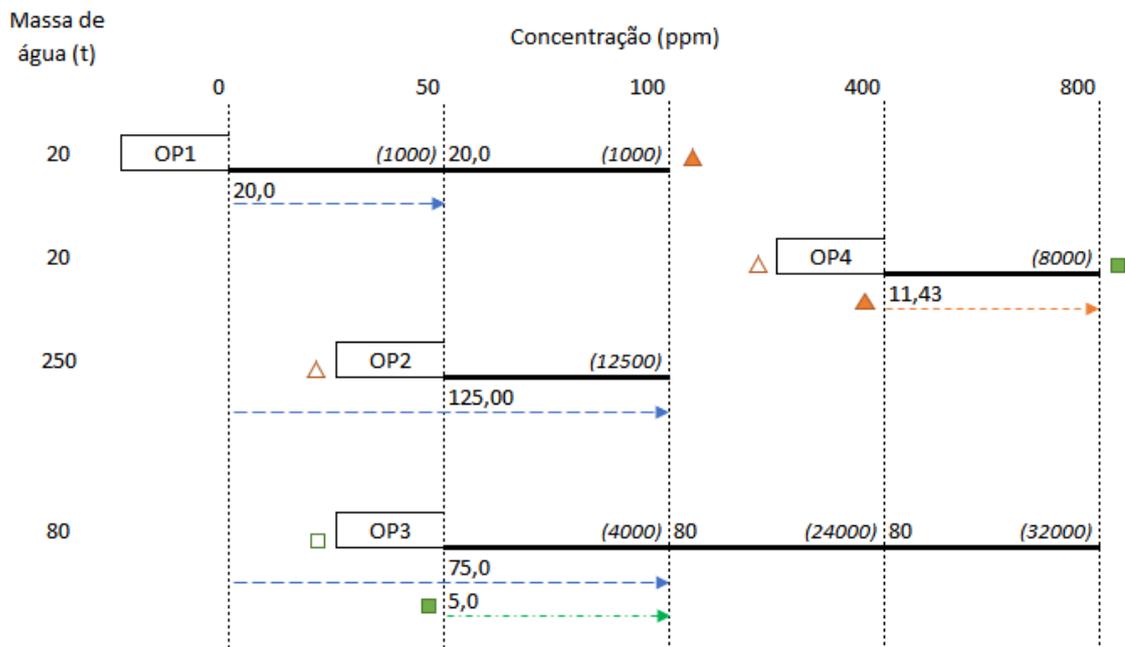


Figura 3-12 - Síntese parcial do DFA - OP1, OP4, OP2 completas e OP3 com reúso – Exemplo Ilustrativo.

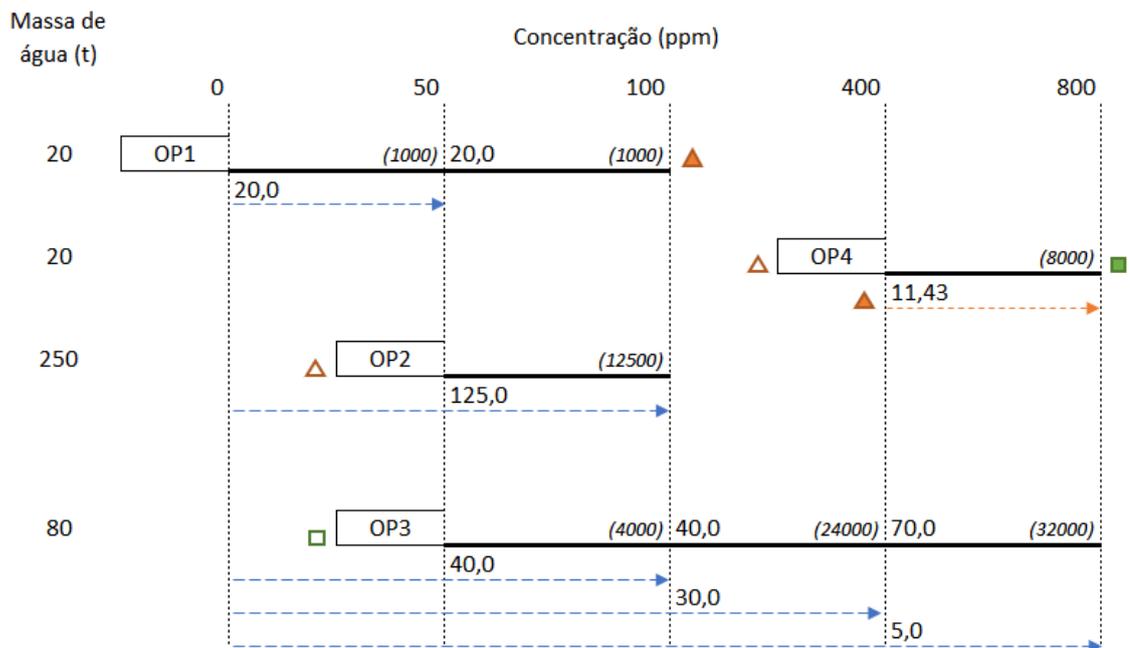


Figura 3-13 - Síntese parcial do DFA - OP1, OP4, OP2 completas e OP3 sem reúso - DFA Final – Exemplo Ilustrativo. Observa-se que a operação 3 requer a mesma quantidade de água da fonte externa do que quando faz reúso do efluente da operação 4 (Figura 3-12).

Como apresentado na Figura 3-13, o DFA final apenas faz reúso da operação 1 na 4, sendo os reúsos, tanto da operação 1 na 2 quanto o da operação 4 na 3, não sendo interessante

em termos econômicos. É importante notar que, para completar as exigências de cada intervalo da operação 3, respeitou-se as regras gerais da metodologia DFA (5.I e 5.II).

Com o intuito de possibilitar uma visão mais geral e resumida, de modo a facilitar a compreensão e o entendimento da aplicação do DFA em processos batelada, foi elaborado o fluxograma ilustrado na Figura 3-14.

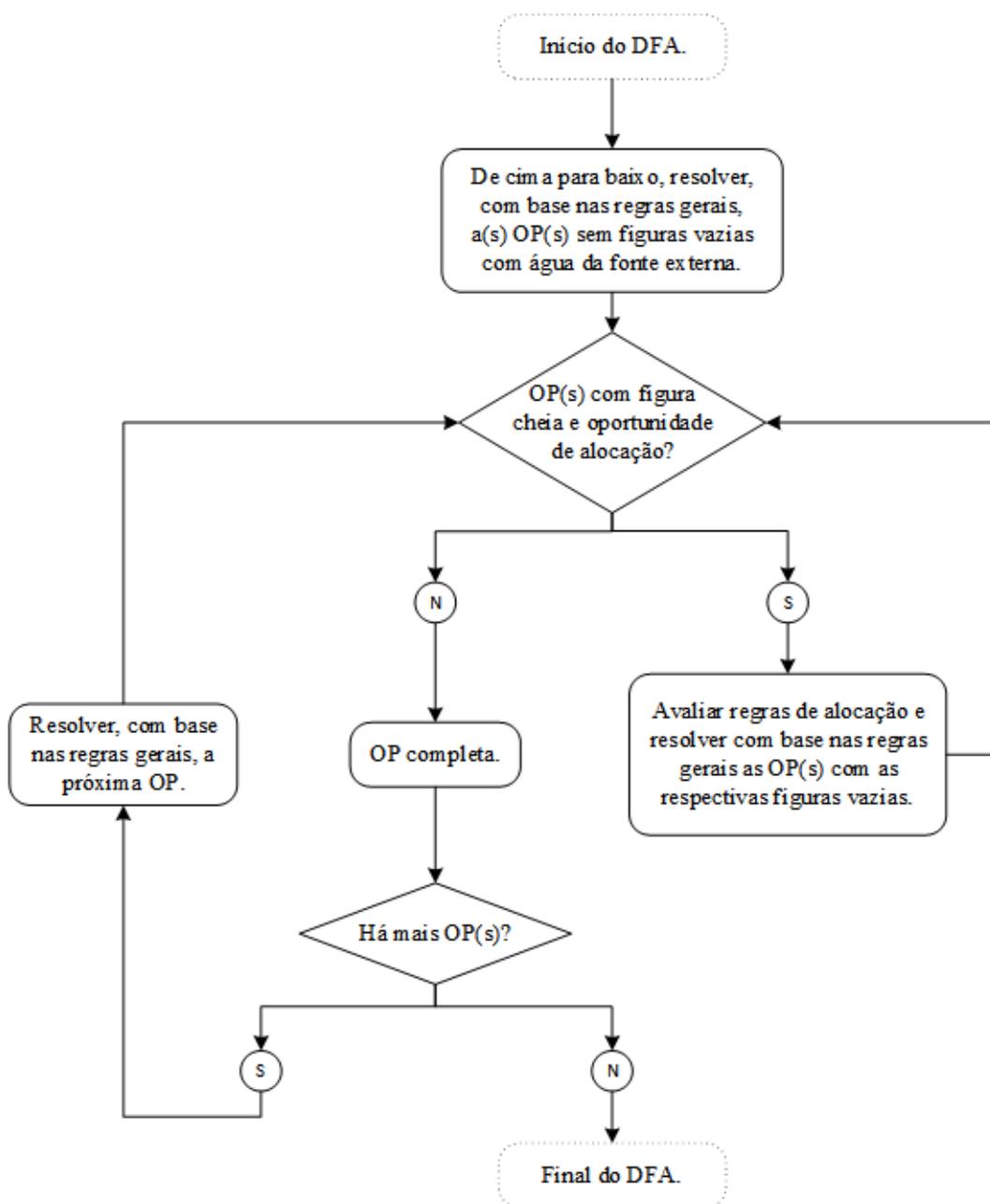


Figura 3-14 - Resumo do algoritmo DFA para processos batelada – completamente batelada. Legenda: OP - operação; S - Sim; N - não.

PASSO 6 – Rede de Água

Após a síntese do DFA, faz-se necessário o esboço da rede de água (fluxograma do processo batelada), identificando a massa de água e a concentração de cada corrente, cada operação, misturadores e divisores de correntes. A Figura 3-15 mostra como cada um desses elementos é representado.

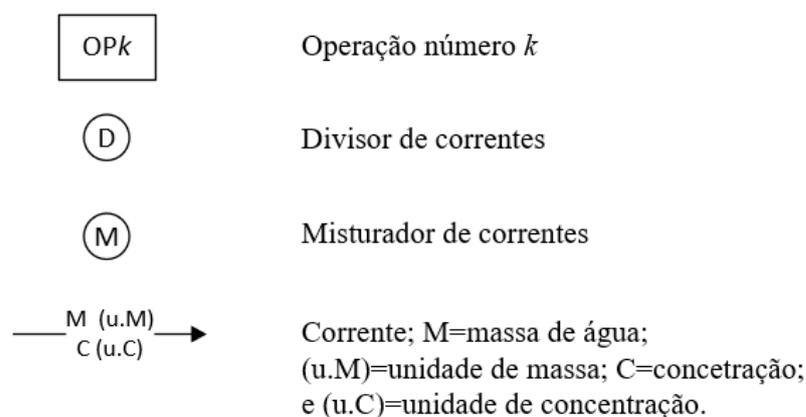


Figura 3-15 – Representação dos elementos da planta batelada. Fonte: Adaptado de Gomes, Queiroz e Pessoa (2007).

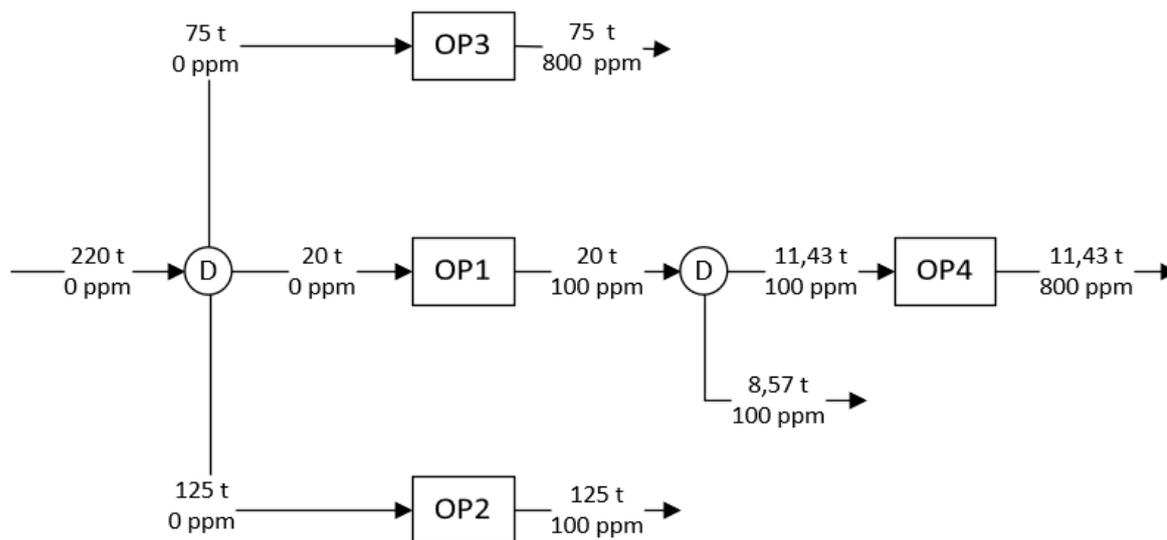


Figura 3-16 - Rede de água final - Estudo de Caso 3.

Avaliando a rede de água final (Figura 3-16), observa-se que todas as saídas das operações se encontram nas concentrações limites, enquanto que apenas a concentração de entrada de operação 4 alcançou o limite permitido (em todas as outras operações a concentração

de entrada foi de 0 ppm). Ademais, as operações 2, 3 e 4 têm as vazões de entrada inferiores às vazões limites (11,43 t, 75 t e 125 t, respectivamente).

Constata-se também, que o consumo foi de 220 t da fonte externa (0 ppm), dentro do horizonte de tempo de 5 h deste processo. Tal resultado representa uma redução de, aproximadamente, 41% em relação ao somatório dos limites de massa de água de cada operação (370 t). No estudo de Kim e Smith (2004) - cuja resolução do problema se dá através de uma programação matemática MILP-LP), capaz de se fazer avaliação econômica considerando custo de água limpa, tanque de estocagem, e tubulações – o consumo de água obtido ficou entre 185 e 190,62 toneladas. No entanto, utiliza tanques de estocagem (30 e 40 t respectivamente) e, por servir para problemas semibatelada, divide as operações 2 e 3 para aumentar a oportunidade de reúso (como mencionado no início do capítulo).

Não menos interessante, é a existência de um artigo (MIRRE et al., 2012) dentro do GIPQ que estuda este mesmo exemplo (adaptado por Foo, Manan e Tan (2005)), encontrando um valor de consumo de água de 60 t, significativamente discrepante com os outros resultados da literatura. Tal diferença deve estar atrelada ao fato do estudo trabalhar com as vazões médias equivalentes das operações ao invés da massa de água e ainda quebrar algumas das restrições de tempo, permitindo alocação de água da operação 2 nas operações 3 e 4. Importante salientar que não é discutido o caráter de semibatelada, que permitiria reúso entre operações presentes no mesmo intervalo de tempo.

Em Foo, Manan e Tan (2005), através de um procedimento de dois estágios e separando as operações em fontes e demanda (*source and sink*), conseguiu-se obter o consumo de água de 211,25 t, o que representa uma redução de 4% comparado ao encontrado neste estudo. No entanto, vale ressaltar que Foo, Manan e Tan (2005) levam em consideração a possibilidade de reciclo e de reúso em operações presentes no mesmo intervalo de tempo (semibatelada), expandindo ainda mais as oportunidades de reúso.

Capítulo 4 Resultados e Discussões

Neste capítulo, serão abordados três estudos de caso de artigos relevantes na literatura para que se compare os resultados gerados com o algoritmo elaborado neste trabalho. O primeiro estudo de caso se baseia no artigo de Wang e Smith (1995a), pioneiro na minimização do uso de água em processos batelada, enquanto o segundo se fundamenta numa evolução de Kim e Smith (2004) e o último segue o estudo de Majozzi (2005), autor que abordou processos completamente batelada pela primeira vez.

4.1 Estudo de Caso 1

O primeiro estudo de caso tem como alicerce o exemplo três do estudo de Wang e Smith (1995a), o qual se baseia na metodologia de minimização de uso de água em processo contínuos elaborada em Wang e Smith (1994), estendendo para processos batelada pela primeira vez. O artigo se utiliza do método gráfico e tem como ponto de partida os dados de limites de vazão, concentrações de entrada e saída, assim como os tempos de início e término respectivos à cada operação, conforme Tabela 4-1. É considerada também uma única fonte externa com concentração de 0 ppm. Ademais, como este exemplo apenas informa o valor da vazão média equivalente, torna-se necessário o cálculo da massa de água de cada operação (Tabela 4-2).

Tabela 4-1 – Tabela de oportunidades – Estudo de Caso 1. Fonte: (WANG; SMITH, 1995a).

Operação	f (t/h)	C_i (ppm)	C_f (ppm)	t_0 (h)	t_f (h)
OP1	100	100	400	0,5	1,5
OP2	80	0	200	0	0,5
OP3	50	100	200	0,5	1

Tabela 4-2 – Tabela de oportunidades - Dados limites rearranjados com a inserção da massa de água de cada operação (M) – Estudo de Caso 1.

Operação	f (t/h)	C_i (ppm)	C_f (ppm)	t_0 (h)	t_f (h)	M (t)
OP1	100	100	400	0,5	1,5	100
OP2	80	0	200	0	0,5	40
OP3	50	100	200	0,5	1	25

Através do diagrama de Gantt, representado na Figura 4-1, organizado em ordem crescente (de cima para baixo) de tempo de término de cada operação, as oportunidades de reúso tornam-se mais evidentes. Usando os princípios de processos completamente batelada, como a operação 2 é a única cujo tempo de término (0,5 h) coincide com o início de outras

operações (3 e 1), ela é a única capaz de dispor efluente para alocação. De forma análoga, como as operações 3 e 1 se iniciam exatamente no tempo de término da operação 2, elas são as candidatas a receberem água contaminada da operação 1.

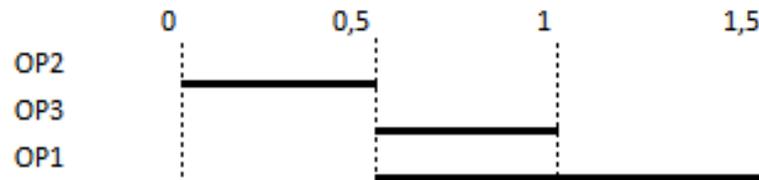


Figura 4-1 – Diagrama de Gantt - Estudo de Caso 1.

Tendo avaliado as restrições temporais, passa-se para a análise das concentrações e alocações de água com o auxílio do DFA. Como a operação 2 é a primeira a começar e tem concentração inicial de 0 ppm, a única fonte de água disponível é a água limpa (0 ppm), sendo demandadas 40 t de água para atender as suas restrições de carga de contaminante. Findada esta operação, 40 t de água a 200 ppm tornam-se disponíveis para o reúso. Em seguida, nota-se que tanto a operação 3 como a 1 tem concentrações de entrada (100 ppm) inferiores à concentração de saída da operação 2 (200 ppm). Sendo assim, inicialmente, tenta-se fazer alocação na operação 3 através da mistura de efluente da operação 2 com água da fonte externa para se alcançar 100 ppm, encontrando 12,5 t de água da operação 2 com 12,5 t de água limpa. No entanto, comparando este valor com a quantidade de água limpa necessária em uma condição sem reúso na operação 3, observa-se as mesmas quantias (12,5 t), tornando a opção de reúso dispensável, conforme discutido no capítulo anterior. Tal comparação pode ser melhor observada nas Figura 4-2 e Figura 4-3.

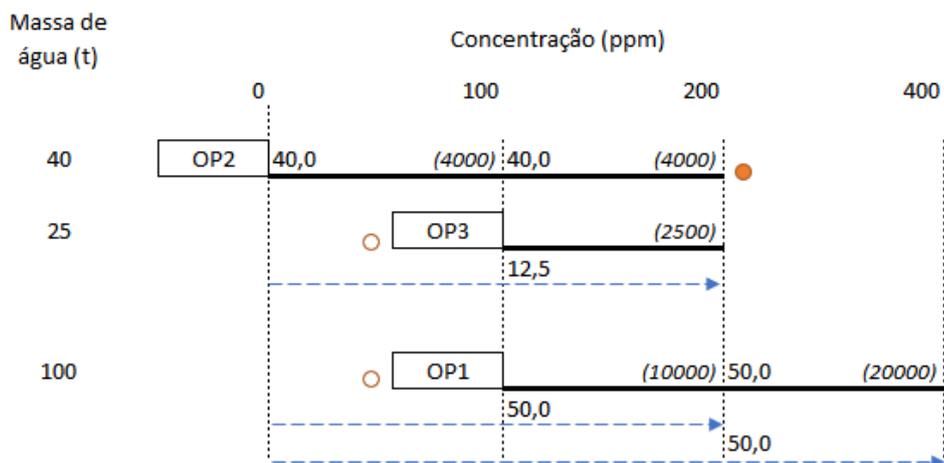


Figura 4-2 - DFA sem reúso - Estudo de Caso 1.

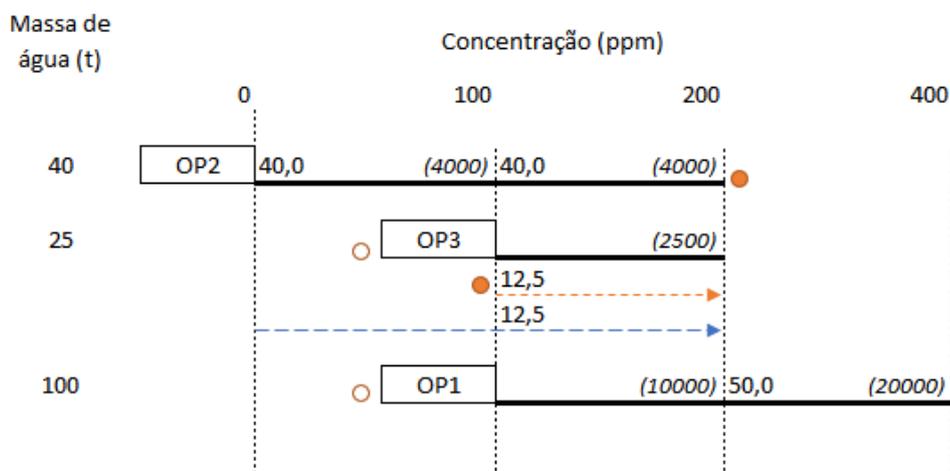


Figura 4-3 - DFA para visualizar reúso na operação 3 - Estudo de Caso 1. Observa-se que o valor de água limpa nesta operação é igual à condição do DFA sem reúso (Figura 4-2).

Após esta decisão, as 40 t derivadas da operação 2 ainda estão disponíveis para reúso na operação 1. A alocação, nesta operação, coincide com o explicado na situação 5.a) e verificação v.1 do exemplo descritivo da proposta metodológica. Efetuado o passo-a-passo dos cálculos (Passo 5), encontra-se a necessidade de 50 t de água a 0 ppm com 40 t de água a 200 ppm no primeiro intervalo de concentração (100-200 ppm), enquanto que no segundo intervalo (200-400 ppm) exige-se um acréscimo de 5 t de água a 0 ppm às 90 t de água a 200 ppm, conforme pode ser observado na Figura 4-4.

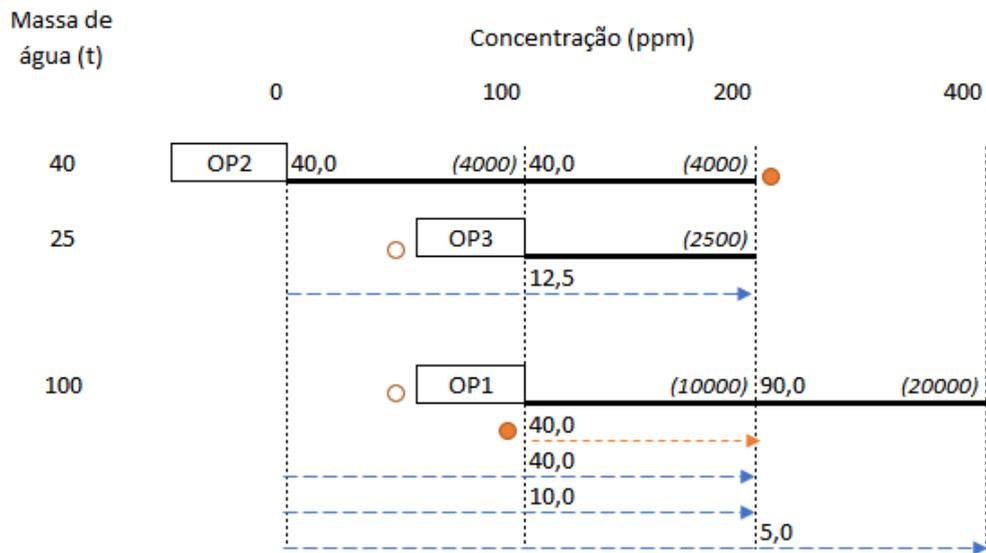


Figura 4-4 - DFA final - Estudo de Caso 1.

Após terminado o DFA, passasse para montagem do fluxograma de rede de água (Figura 4-5), nota-se que nenhuma restrição foi violada, confirmando o DFA como final (Figura 4-4). Todas as concentrações de saída das operações estão iguais aos limites e todas as concentrações de entrada estão menores ou iguais aos seus limites (apenas a operação 1 apresenta concentração - 84,21 ppm - inferior a seu limite - 100 ppm).

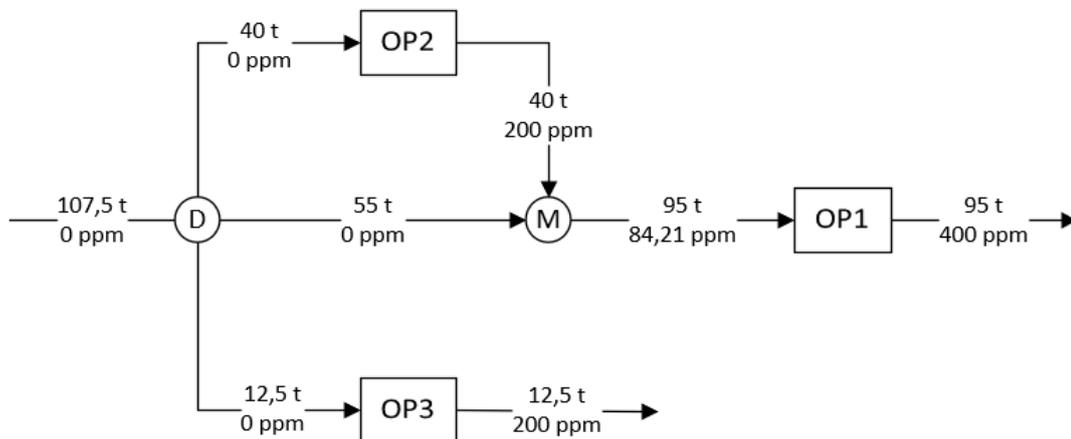


Figura 4-5 - Rede de água final - Estudo de Caso 1.

O desenvolvimento do DFA deste processo encontrou um consumo de água equivalente a 107,5 t para um horizonte de tempo de 1,5 h, representando uma redução de quase 35% em comparação ao máximo de água permitida no processo, ou seja, ao somatório das massas de

água limite de cada operação (165 t). Interessante ressaltar que, Wang e Smith (1995a) alcança um consumo inferior, de 102,5 t de água. No entanto, neste estudo pioneiro de 1995, admite-se a divisão da operação 1 em duas partes, o que, segundo a literatura atual, configuraria assumir o processo como semibatelada (sendo este aspecto não mencionado no texto original) e ainda lançaram mão do uso de um tanque de armazenamento intermediário para estocar o efluente proveniente de uma operação finalizada para ser utilizado em outra operação de tempo futuro, ampliando, dessa forma, a oportunidade de reúso de água da operação 2 na segunda parte da operação 1 (período de tempo entre 1-1,5 h).

Uma melhor comparação pode ser feita com o resultado alcançado no trabalho de Majozí (2005). Ele também se baseia no mesmo exemplo de Wang e Smith (1995a) e, através de um método matemático e considerando características iguais ao do presente trabalho, encontra o mesmo consumo (107,5 t) e a mesma rede de água final, corroborando para a confirmação do método DFA proposto em aplicação de processos batelada.

4.2 Estudo de Caso 2

O segundo estudo de caso se fundamenta no exemplo um do artigo de Kim e Smith (2004), cuja resolução do problema se deu através de programação matemática MILP-LP, capaz de fazer avaliação econômica considerando custo de água limpa, tanque de estocagem, e tubulações. A escolha deste exemplo se torna interessante tanto pela reconhecida representatividade do artigo na literatura quanto pelo fato dos autores se basearem no exemplo três de Wang e Smith (1995a) (mesmo do Estudo de Caso 1). A continuidade é dada, no entanto, partindo do princípio de que a operação 1 é dividida em duas etapas (1 e 1'), gerando uma nova oportunidade para comparação de resultados. É interessante frisar que ao dividir estas operações, Kim e Smith (2004), mesmo sem mencionar, trata as operações dentro do conceito de semibatelada, permitindo reúso entre operações que ocorrem no mesmo intervalo de tempo. No entanto, para o presente estudo, assume-se que as operações 1 e 1' são distintas entre si e leva-se em consideração que todas as operações são completamente batelada. Já organizados na Tabela 4-3, estão todos os dados limites de concentração e tempo inicial e final, vazão média equivalente e, inclusive, de massa de água por operação.

Tabela 4-3 - Tabela de oportunidades - Estudo de Caso 2. Fonte: (KIM; SMITH, 2004).

Operação	C_i (ppm)	C_f (ppm)	f (t/h)	M (t)	t_o (h)	t_f (h)
OP2	0	200	80	40	0	0,5
OP3	100	200	50	25	0,5	1
OP1	100	400	100	50	0,5	1
OP1'	100	400	100	50	1	1,5

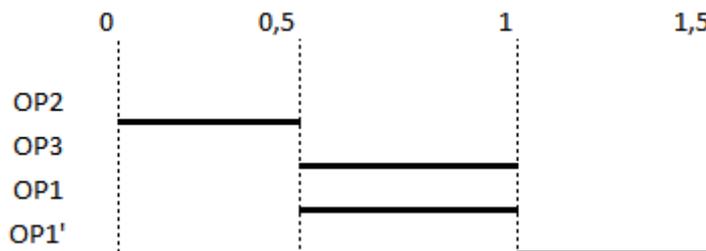


Figura 4-6 – Diagrama de Gantt - Estudo de Caso 2.

Através dos limites temporais, observa-se que a operação 2 tem o tempo de término coincidindo com o início (0,5 h) das operações 3 e 1, enquanto que estas duas últimas tem o tempo final no mesmo momento que se inicia a operação 1' (1 h). Sendo assim, a operação 2 é a única que pode alocar água residual nas operações 3 e 1, ao passo que o reúso de água na operação 1' só pode ser oriundo das operações 3 e 1. Verifica-se que, neste novo cenário, as oportunidades são similares ao estudo de caso 1, exceto pela possibilidade de alocação de água de saída tanto da operação 3 quanto da 1 na nova operação 1'. Tais constatações podem ser melhores visualizadas no diagrama de Gantt apresentado na Figura 4-6.

Seguindo para a etapa de avaliação das concentrações e alocação de água nas operações (Passo 5), observa-se que, para o primeiro intervalo de concentração (0-100 ppm), apenas a operação 2 está em funcionamento. Sendo assim, a única fonte de água disponível é a externa, sendo necessárias 40 t. No segundo intervalo de concentração (100-400 ppm), a operação 2 ainda está em curso, sendo necessário dar sequência às 40 t do intervalo anterior, que atendem à retirada de contaminante exigida nesta operação. Além disso, as operações 3 e 1 estão iniciando, representando uma oportunidade de reúso conforme já constatado anteriormente pelo diagrama de Gantt.

Neste momento, tanto a operação 3 quanto a operação 1 tem as mesmas concentrações de entrada (100 ppm) e podem receber água da operação 1 (cuja concentração de saída está acima – 200 ppm). Desta forma, será necessário diluir a corrente de saída da operação 1 com água limpa para sua alocação, mas fica a dúvida em qual operação, 3 ou 1, representaria a maior

redução de água do processo. Segundo a regra de alocação 5.iii, numa situação como esta, deve-se dar preferência pela alocação em uma operação cuja concentração de saída seja menor e cujo tempo de término possibilite reúso em uma operação futura. Como ambas as correntes de água residual oriundas da operação 3 e 1 têm a possibilidade de serem realocadas na operação 1', cabe recorrer à distinção entre as concentrações de saída (400 e 200 ppm, respectivamente), optando pela operação 3.

Avaliando esta oportunidade de reúso, percebe-se que realocando 12,5 t de água a 200 ppm da operação 2, na operação 3, em uma mistura com 12,5 t de água a 0 ppm, não garante redução de uso de água limpa, nesta operação, quando comparado ao DFA sem reúso (exatamente 12,5 t, conforme mostra a Figura 4-7). No entanto, (como descrito na regra de alocação v.1) ao optar-se pela realocação do efluente da operação 2 na operação 3, é possível disponibilizar, em um momento futuro, uma maior quantidade de água a 200 ppm que, por sua vez, necessita de uma menor quantidade de água limpa (se comparado com a mistura de água limpa com água suja a 400 ppm da operação 1) para ser misturada e reusada na operação 1'. Tal comparação pode ser acompanhada com o auxílio dos DFAs (ver operações 3 e 1 na Figura 4-8 e Figura 4-9).

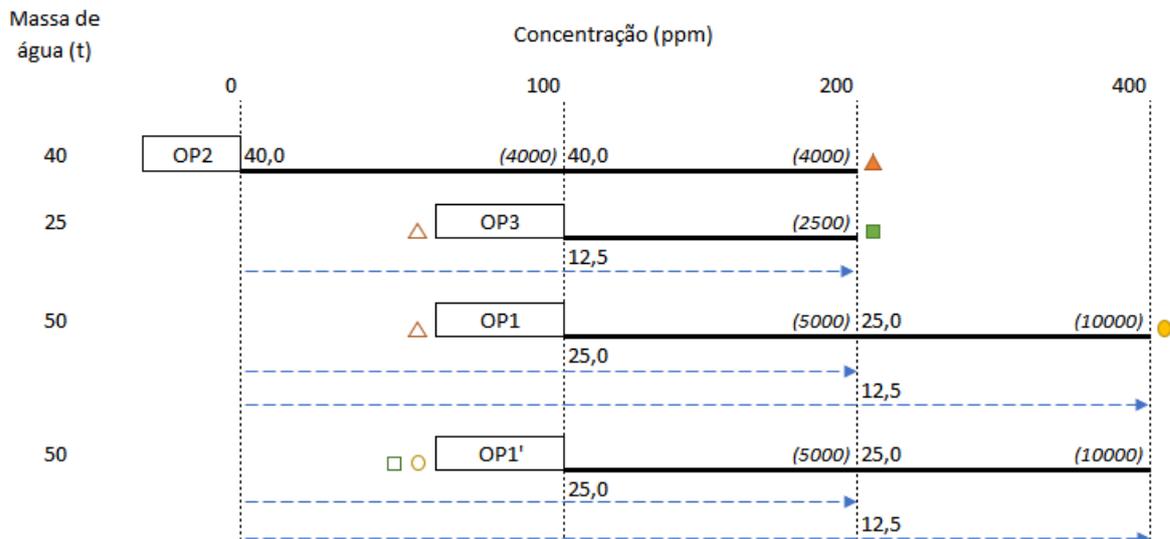


Figura 4-7 - DFA sem reúso - Estudo de Caso 2.

Justificado o uso de 12,5 t da operação 2 na operação 3, ainda ficam disponíveis 27,5 t da operação 2 para alocação na operação 1. Como 25 t de água a 200 ppm são suficientes para se misturar a 25 t de água a 0 ppm, gerando 50 t à concentração limite de entrada da operação 1 e reduz-se o consumo de água limpa em 12,5 t nesta operação comparado ao DFA sem reúso (ver operação 1 na Figura 4-7 e Figura 4-9), esta alocação é mantida. Em seguida, a operação

1' se inicia e, diante da opção entre efluentes das operações 3 e 1 para o reúso, conforme a regra de alocação 5.ii, opta-se pela operação 3 que apresenta menor concentração de saída. Com isto, as 25 t a 200 ppm da operação 3 são redirecionadas e misturadas com água limpa para atender à demanda da operação 1'. O DFA final se encontra na Figura 4-9.

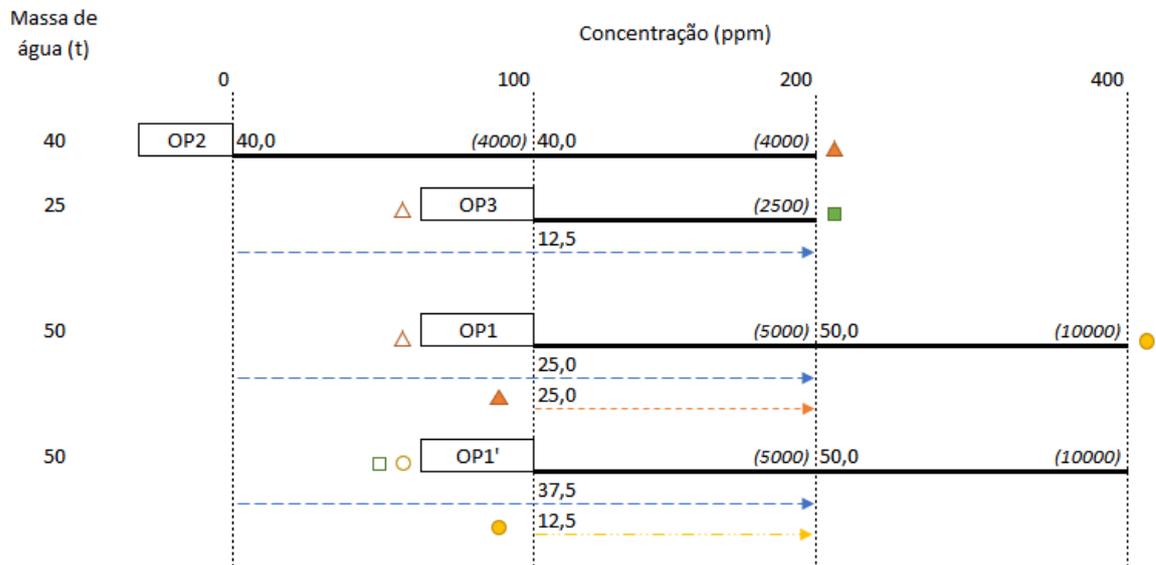


Figura 4-8 – DFA com escolha de reúso da OP1 na OP1' (para ilustrar a quebra da regra de alocação 5.iii e 5.ii) - Estudo de Caso 2.

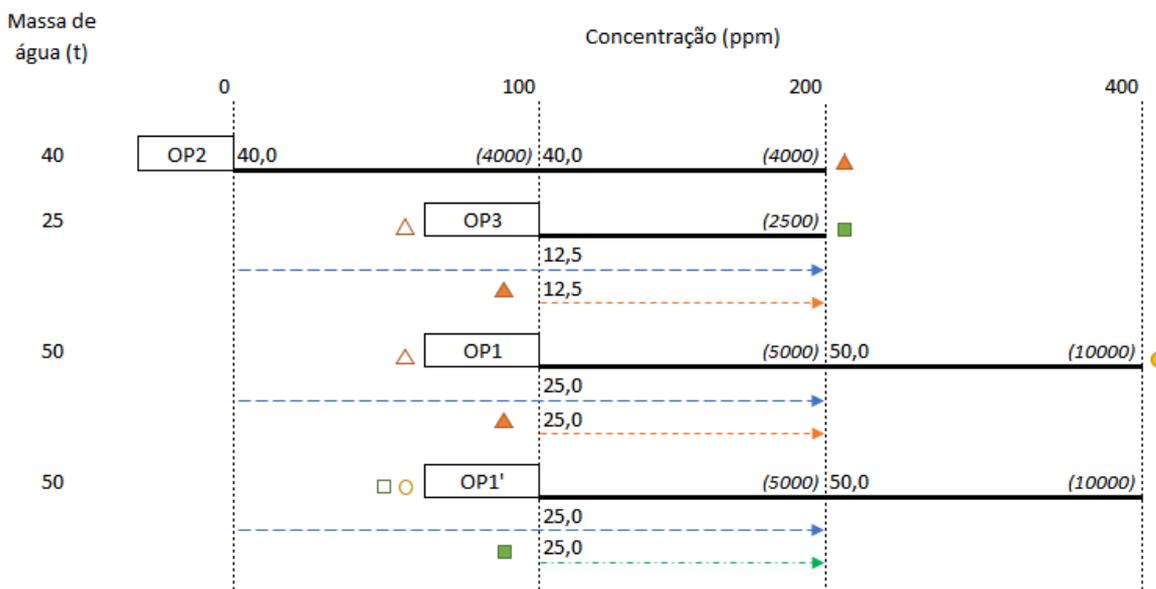


Figura 4-9 – DFA final - Estudo de Caso 2.

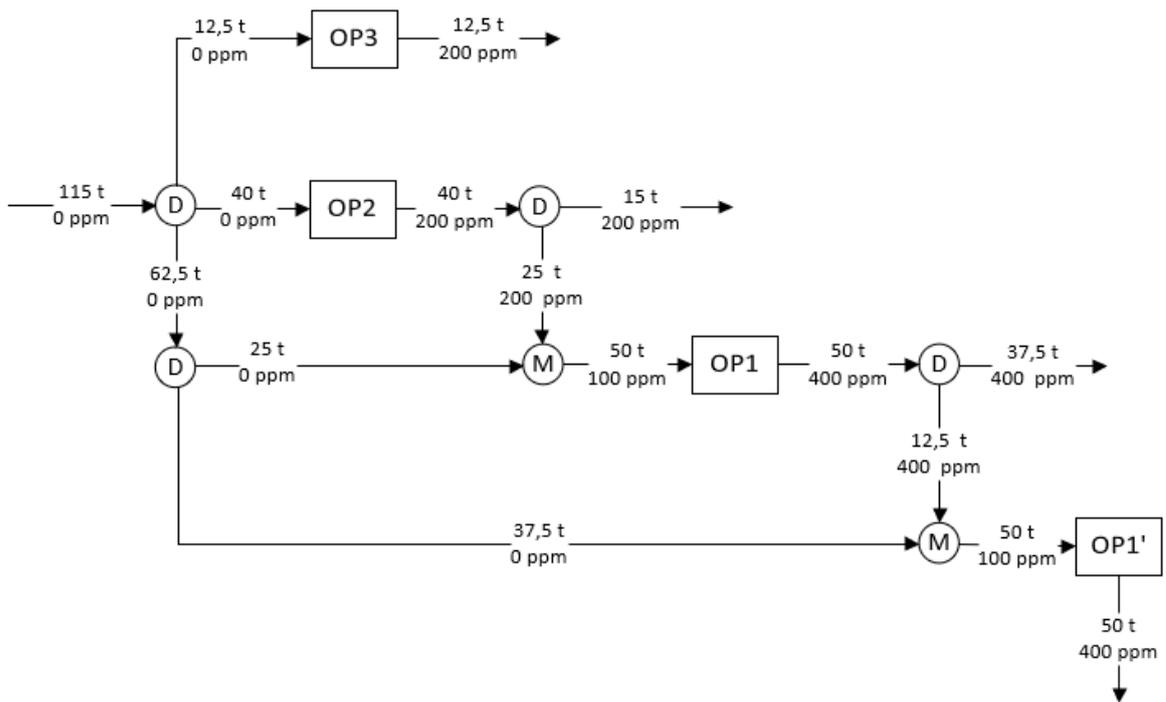


Figura 4-10 - Rede de água – baseado no DFA com escolha de reúso da OP1 na OP1'(para ilustrar a quebra da regra de alocação 5.iii e 5.ii) - Estudo de Caso 2.

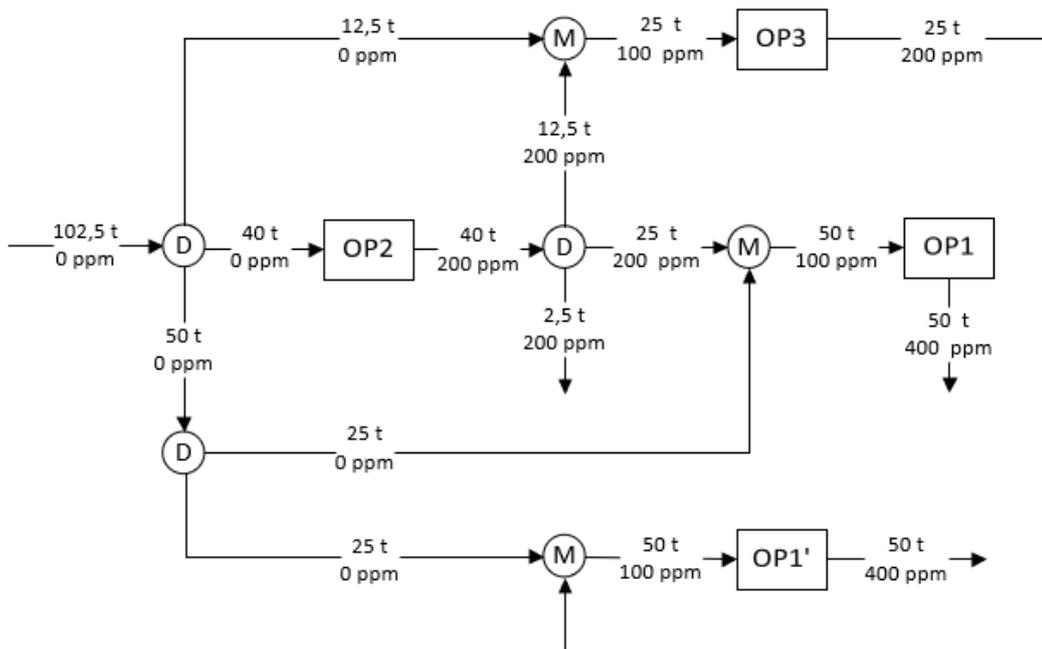


Figura 4-11 – Rede de água – baseado no DFA final - Estudo de Caso 2.

A Figura 4-10 representa a rede de água gerada pelo DFA da Figura 4-8, onde ilustra-se a quebra das regras de alocação 5.iii e 5.ii. Já a Figura 4-11 representa a rede de água gerada baseada no diagrama obtido na Figura 4-9, com melhor redução de consumo de água (115 t e 102,5 t, respectivamente). Portanto, na rede final (Figura 4-11) é possível observar que todas as operações atingem o limite de massa de água permitido e suas respectivas concentrações de entrada. Nesta configuração encontra-se um consumo total de 102,5 t de água limpa dentro do horizonte de tempo de 1,5 h, o que representa uma redução de aproximadamente 62% se comparado ao somatório dos limites de massa de água (165 t).

Vale ressaltar que mesmo com características menos restritivas de processo, Kim e Smith (2004) obtiveram resultado de consumo de água igualmente de 102,5 t, porém os autores lançaram mão do uso de um tanque de estocagem com capacidade de 37,5 t, minimizando o tamanho do tanque usado por Wang e Smith (1995a). Ademais, no trabalho de Gouws et al. (2010) executou-se o mesmo problema, considerando vazão fixa, com as técnicas desenvolvidas em Foo, Manan e Tan (2005), Liu, Yuan, Luo (2007) e Chen e Lee (2008) alcançando os mesmos resultados de Kim e Smith (2004) ao se considerar os processos com possibilidade de tanque de estocagem. Sendo assim, com a ressalva de não ter sido feita uma avaliação econômica, o algoritmo DFA parece ter chegado a uma melhor solução neste estudo de caso pois conseguiu o mesmo consumo de água dos outros estudos sem usar tanque de estocagem na rede gerada.

4.3 Estudo de Caso 3

O terceiro estudo de caso é baseado no artigo de Majozzi (2005). Nele, usa-se um método de programação matemática, com *schedule* fixo, aplicado a uma planta de agroquímicos onde o cloreto de sódio (NaCl) é gerado como subproduto, compondo o único contaminante. Nesta fábrica, o NaCl é removido de uma fase orgânica através de uma extração líquido-líquido na qual água limpa é introduzida para formar a fase aquosa. Sabe-se também que nas operações B e D a água é utilizada como solvente, enquanto nas operações C e E a água é utilizada apenas para polimento (justificando a ausência de variação de concentração nestas operações). A Tabela 4-4 representa a tabela de oportunidades para este estudo de caso.

Tabela 4-4 - Tabela de Oportunidades - Estudo de Caso 3. Fonte: (MAJOZI, 2005a).

Operação	M (kg)	C_i (kg _{sal} /kg _{água})	C_f (kg _{sal} /kg _{água})	t_0 (h)	t_f (h)
A	1000	0,00	0,10	0	3,0
B	280	0,25	0,51	0	4,0
C	400	0,10	0,10	4	5,5
D	280	0,25	0,51	2	6,0
E	400	0,10	0,10	6	7,5

Organizando cada operação em seu intervalo de tempo, no diagrama de Gantt (Figura 4-12), constata-se que neste processo há duas oportunidades de reúso. As únicas operações que coincidem tempo de término com tempo de início são os pares B-C (4 h) e D-E (6 h), respectivamente.

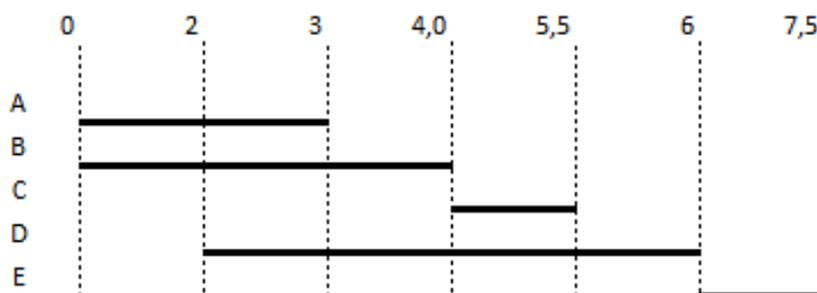


Figura 4-12 – Diagrama de Gantt - Estudo de Caso 3.

Tanto a operação A quanto a B e D não tem alternativa senão a de utilização de água da fonte externa a 0 kg/kg, sendo necessárias 1000 kg na primeira e 142,75 kg em cada uma das restantes para atender retirada de carga de contaminante. A partir deste momento, depara-se com um detalhe específico desta planta. Como as operações C e E são de polimento, não havendo carga de contaminante, as equações de balanço de massa resultariam em uma massa de água necessária igual a zero, o que é irreal. Assim sendo, para o reúso de água da operação B na C e da operação D na E, recorre-se ao dado da fábrica de que estas operações tem uma quantidade mínima de água requerida de 300 kg, ou seja, a minimização do consumo de água deve estar atrelada a este valor. Isto representa uma restrição de quantidade fixa de água a ser empregada em uma dada operação. Como as concentrações de saída das operações B e D são iguais, assim como as concentrações de entrada das operações C e E, uma mesma quantidade (58,82 kg) de efluente (0,51 kg/kg) é diluída em água limpa, resultando numa vazão de 300 kg a 0,1 kg/kg nas operações C e E. Como o consumo de água limpa nestas operações foi reduzido (situação 5.a) das regras de alocação) - 300 para 241,18 kg - em comparação com o DFA sem

reúso, mantêm-se as alocações efetuadas (observar operações C e E nas Figura 4-13 e Figura 4-14).

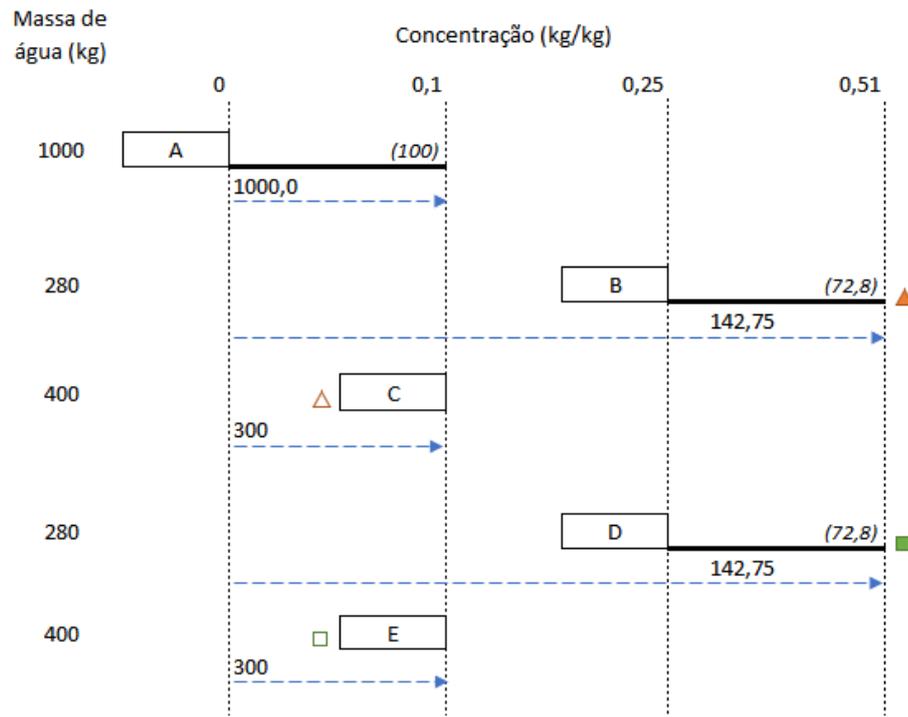


Figura 4-13 - DFA sem reúso - Estudo de Caso 3.

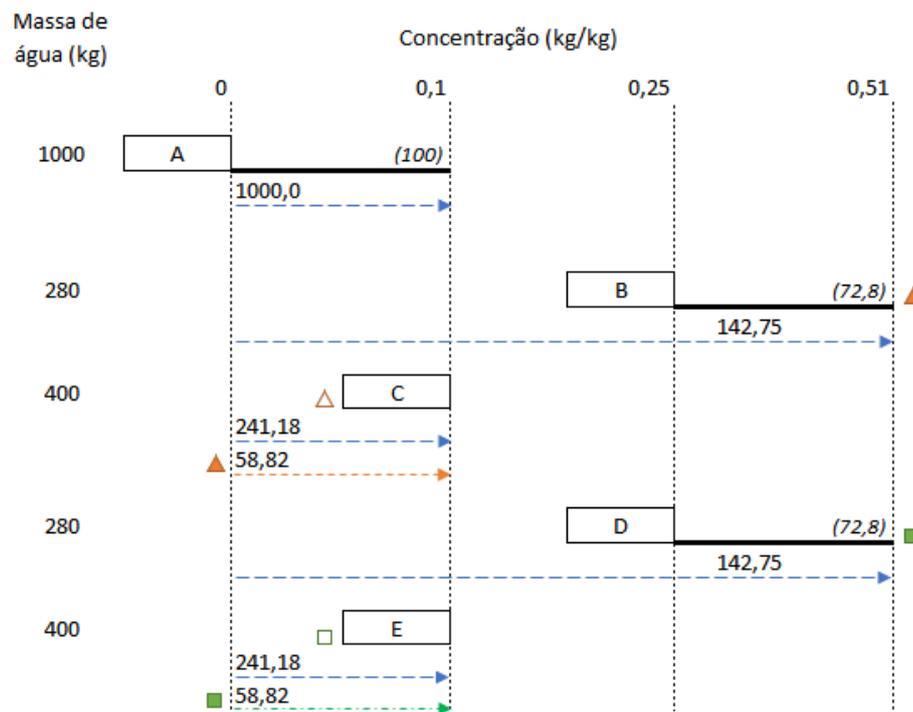


Figura 4-14 - DFA final - Estudo de Caso 3.

A Figura 4-15 representa a rede de água final obtido a partir do diagrama da Figura 4-14, onde observa-se que nenhuma restrição foi transgredida. Quanto ao consumo de água, houve uma redução de, praticamente, 25%, se comparado ao somatório dos limites de massa de água de cada operação (2360 kg), atingido o valor de 1767,84 kg.

Este mesmo valor foi reportado no trabalho de Majozzi (2005), utilizando programação matemática. Importante perceber que Immich et al. (2007), primeiro artigo que aplica do DFA em batelada, também atingiu o mesmo resultado se baseando nas restrições de Majozzi (2005) (embora sem um algoritmo definido que permita compreender os passos realizados). No estudo de Gouws et al. (2010) este problema foi avaliado sob a ótica de vários métodos heurísticos desenvolvidos por outros autores (CHEN; LEE, 2008; FOO; MANAN; TAN, 2005; LIU; YUAN; LUO, 2007; MAJOZI; BROUCKAERT; BUCKLEY, 2006). No entanto, atribui-se ao processo novas características que dificultam a comparação, como por exemplo, considerou-se todas as operações com vazões fixadas (que no caso batelada significa quantidade fixa de água para cada operação). Neste caso, os resultados encontrados foram de 2052,30 kg de água limpa consumida para todas as técnicas testadas, valor superior ao do presente trabalho.

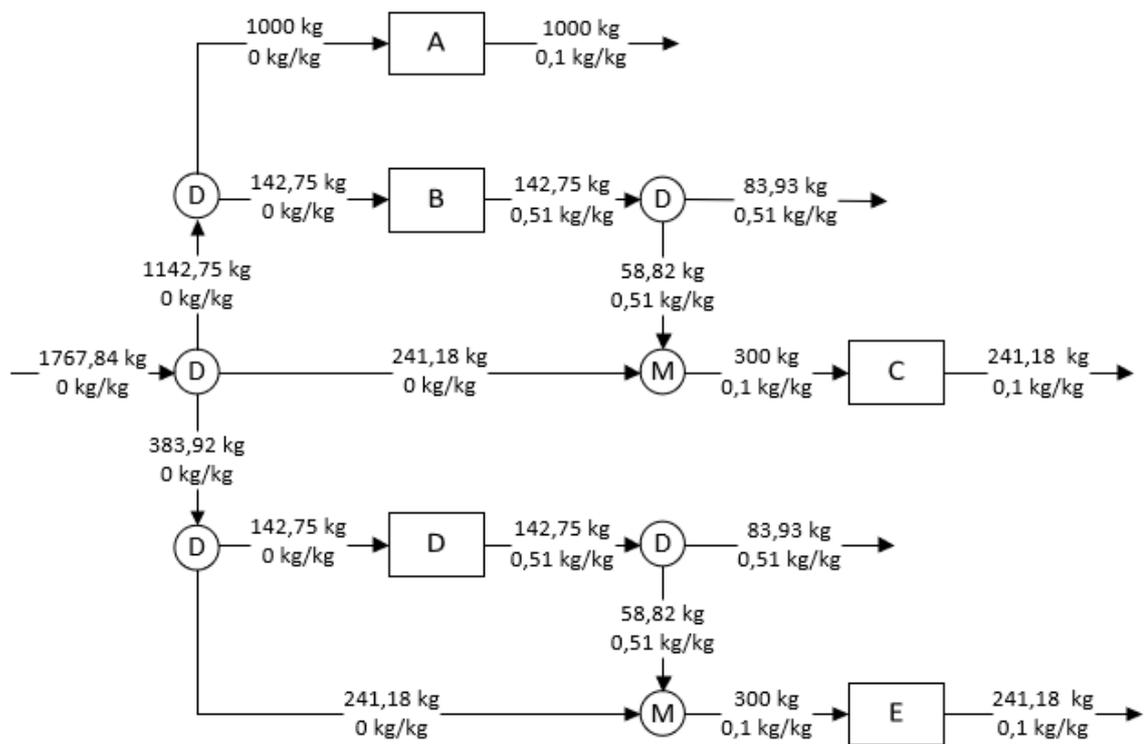


Figura 4-15 - Rede de água - Estudo de Caso 3.

Capítulo 5 Conclusões

O presente trabalho apresenta uma proposta inicial de aplicação da Metodologia DFA para processos com operações batelada. Onde a experiência de aplicação da metodologia em processos com operações contínuas é adaptada para a presença de operações batelada. O procedimento é prático, de fácil aplicação e todos os cálculos podem ser feitos manualmente.

O foco está em processos nos quais não são previstos tanques de estocagem/pulmões, assim toda a corrente disponibilizada em uma batelada deve ser utilizada imediatamente em outra, caso o seu reuso seja indicado. Convencionou-se chamar esse tipo de processo de processo completamente batelada.

O procedimento proposto considera ainda somente uma fonte externa com a concentração de contaminante igual a zero, porém a consideração de múltiplas fontes externas pode ser facilmente inserida no algoritmo, simplesmente se definindo uma hierarquia para uso destas fontes. Ademais, outras características são consideradas de modo a partir-se de um modelo mais simples para expansões capazes de resolver problemas mais complexos.

O DFA proposto adota o diagrama de Gantt para indicar essa ligação entre operações no momento exato e mantém a simplicidade típica do método, permitindo ainda gerar ou avaliar diversas opções de solução (rede de água que satisfaz o preceito de mínimo consumo de fonte externa primária de água), além de poder considerar restrições de processo (como a restrição de vazão).

Quatro exemplos foram analisados e o algoritmo criado mostra capacidade de chegar a resultados de consumo de água satisfatórios, sendo, em alguns casos, superiores apenas em relação aos estudos da literatura cujas considerações possibilitam maiores oportunidade de reúso de água.

Neste contexto, futuros trabalhos podem ser desenvolvidos complementando o algoritmo aqui proposto em relação há processos com:

- a) Operações de vazão fixa;
- b) Mistura de operações de carga fixa e de vazão fixa;
- c) Operações com perdas e ganhos de água;
- d) Capacidade de uso de regeneradores;
- e) Possibilidade de uso de mais de uma fonte de água externa (com e sem limitações);
- f) Bateladas em ciclos;

- g) Tanque de estocagem/pulmão. Note que quando não há coincidência, ou seja, há um intervalo entre o término de uma operação e o início de outra, o reúso somente será possível se houver um tanque de armazenamento intermediário (tanque de estocagem/pulmão);
- h) Características que misturam operações batelada e contínuas;
- i) Consideração semibatelada;
- j) Múltiplos contaminantes, sendo necessária a escolha de um contaminante chave.

Referências

- ALMATÓ, M. et al. Rationalizing the water use in the batch process industry. **Computers & Chemical Engineering**, v. 21, p. S971–S976, 1997.
- ALMATÓ, M.; ESPUÑA, A.; PUIGJANER, L. Optimisation of water use in batch process industries. **Computers and Chemical Engineering**, v. 23, n. 10, p. 1427–1437, 1999.
- ANA. **Conjuntura dos Recursos Hídricos do Brasil 2018**. [s.l: s.n.].
- BAGAJEWICZ, M. A review of recent design procedures for water networks in refineries and process plants. **Computers and Chemical Engineering**, v. 24, n. 9–10, p. 2093–2113, 2000.
- CASTRO, P. et al. Improvements for mass-exchange networks design. **Chemical Engineering Science**, v. 54, n. 11, p. 1649–1665, 1999.
- CDP. **From water risks to value creation: CDP global water report 2015**. [s.l: s.n.]. Disponível em: <<https://www.cdp.net/CDPResults/CDP-Global-Water-Report-2014.pdf>>.
- CHATURVEDI, N. D.; BANDYOPADHYAY, S. A Rigorous Targeting to Minimize Resource Requirement in Batch Processes. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 51, n. 23, p. 8015–8024, 13 jun. 2012.
- CHEN, C.-L. et al. A unified model of property integration for batch and continuous processes. **AIChE Journal**, v. 56, n. 7, p. 1845–1858, 17 nov. 2009.
- CHEN, C. L.; CHANG, C. Y.; LEE, J. Y. Continuous-time formulation for the synthesis of water-using networks in batch plants. **Industrial and Engineering Chemistry Research**, v. 47, n. 20, p. 7818–7832, 2008.
- CHEN, C. L.; LEE, J. Y. A graphical technique for the design of water-using networks in batch processes. **Chemical Engineering Science**, v. 63, n. 14, p. 3740–3754, 2008.
- CHENG, K. F.; CHANG, C. T. Integrated water network designs for batch processes. **Industrial and Engineering Chemistry Research**, v. 46, n. 4, p. 1241–1253, 2007.
- DOGARU, E.-L.; LAVRIC, V. Dynamic Water Network Topology Optimization of Batch Processes. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 50, n. 7, p. 3636–3652, 6 abr. 2011.
- EL-HALWAGI, M. M. Pollution prevention through process integration. **Clean**

Technologies and Environmental Policy, v. 1, n. 1, p. 5–19, 1998.

FAN, X.-Y. et al. A new design method for water-using networks of multiple contaminants with the concentration potential concepts. **Chemical Engineering Science**, v. 73, p. 345–353, 2012.

FAO. **Water factsheets. Prepared by AQUASTAT, FAO's global water information system**, 2014. Disponível em: <<http://www.fao.org/nr/aquastat>>

FOO, C. Y. et al. Synthesis of mass exchange network for batch processes - Part I: Utility targeting. **Chemical Engineering Science**, v. 59, p. 1009–1026, 2004.

FOO, C. Y. et al. Synthesis of mass exchange network for batch processes - Part II: Minimum units target and batch network design. **Chemical Engineering Science**, v. 60, n. 5, p. 1349–1362, 2005.

FOO, D. C. Y. State-of-the-art review of pinch analysis techniques for Water network synthesis. **Industrial and Engineering Chemistry Research**, v. 48, n. 11, p. 5125–5159, 2009.

FOO, D. C. Y. Automated Targeting Technique for Batch Process Integration. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 49, n. 20, p. 9899–9916, 20 out. 2010.

FOO, D. C. Y.; MANAN, Z. A.; TAN, Y. L. Synthesis of maximum water recovery network for batch process systems. **Journal of Cleaner Production**, v. 13, n. 15, p. 1381–1394, 2005.

FRANCISCO, F. DA S. **Aperfeiçoamento e Extensão do Diagrama de Fontes Visando a Sustentabilidade**. [s.l: s.n.].

GOMES, J. F. S. **Procedimento para Minimização de Efluentes Aquosos**. [s.l: s.n.].

GOMES, J. F. S. et al. Water sources diagram in multiple contaminant processes: Maximum reuse. **Industrial and Engineering Chemistry Research**, v. 52, n. 4, p. 1667–1677, 2013.

GOMES, J. F. S.; QUEIROZ, E. M.; PESSOA, F. L. P. Design procedure for water/wastewater minimization: single contaminant. **Journal of Cleaner Production**, v. 15, n. 5, p. 474–485, 2007.

GOUWS, J. F. et al. Water minimization techniques for batch processes. **Industrial and Engineering Chemistry Research**, v. 49, n. 19, p. 8877–8893, 2010.

GOUWS, J. F.; MAJOZI, T. Impact of multiple storage in wastewater minimization for multicontaminant batch plants: Toward zero effluent. **Industrial and Engineering Chemistry Research**, v. 47, n. 2, p. 369–379, 2008.

HALIM, I.; SRINIVASAN, R. Sequential methodology for integrated optimization of energy and water use during batch process scheduling. **Computers and Chemical Engineering**, v. 35, n. 8, p. 1575–1597, 2011.

IMMICH, A. P. S. et al. Application of the water source diagram (WSD) procedure to water use minimization in a batch process. **European Congress of Chemical Engineering**, v. 1, n. September, p. 16–20, 2007.

JEŻOWSKI, J. Review of Water Network Design Methods with Literature Annotations. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 49, n. 10, p. 4475–4516, 19 maio 2010.

KIM, J.-K. Design of discontinuous water-using systems with a graphical method. **Chemical Engineering Journal**, v. 172, n. 2–3, p. 799–810, ago. 2011.

KIM, J.-K.; SMITH, R. AUTOMATED DESIGN OF DISCONTINUOUS WATER SYSTEMS. **Process Safety and Environmental Protection**, v. 82 (B3), n. May, p. 238–248, 2004.

KLEMEŠ, J. J. Industrial water recycle/reuse. **Current Opinion in Chemical Engineering**, v. 1, n. 3, p. 238–245, ago. 2012.

KLEMEŠ, J. J. et al. New directions in the implementation of Pinch Methodology (PM). **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, v. 98, n. October, p. 439–468, 2018.

KLEMEŠ, J. J.; VARBANOV, P. S.; KRAVANJA, Z. Recent developments in Process Integration. **Chemical Engineering Research and Design**, v. 91, n. 10, p. 2037–2053, 2013.

KOROVESSI, E.; LINNINGER, A. A. **Batch Processes**. Boca Raton: CRC Press, 2006.

LEE, J. Y.; FOO, D. C. Y. Simultaneous Targeting and Scheduling for Batch Water Networks. **Industrial and Engineering Chemistry Research**, v. 56, n. 6, p. 1559–1569, 2017.

LEE, S. J. et al. Minimum water network design for fixed schedule and cyclic operation batch processes with minimum storage capacity and inter-connections. **Journal of Cleaner Production**, v. 77, p. 1–14, ago. 2013.

- LI, A.; LIU, C.; LIU, Z. A heuristic design method for batch water-using networks of multiple contaminants with regeneration unit. **Chinese Journal of Chemical Engineering**, p. #pagerange#, nov. 2018.
- LI, B. H.; CHANG, C. T. A mathematical programming model for discontinuous water-reuse system design. **Industrial and Engineering Chemistry Research**, v. 45, n. 14, p. 5027–5036, 2006.
- LI, B. H.; LIANG, Y. K.; CHANG, C. T. Manual design strategies for multicontaminant water-using networks in batch processes. **Industrial and Engineering Chemistry Research**, v. 52, n. 5, p. 1970–1981, 2013.
- LI, L. J.; ZHOU, R. J.; DONG, H. G. State-time-space superstructure-based MINLP formulation for batch water-allocation network design. **Industrial and Engineering Chemistry Research**, v. 49, n. 1, p. 236–251, 2010.
- LIU, Y. et al. Optimal design of an integrated discontinuous water-using network coordinating with a central continuous regeneration unit. **Industrial and Engineering Chemistry Research**, v. 48, n. 24, p. 10924–10940, 2009.
- LIU, Y.; YUAN, X.; LUO, Y. Synthesis of Water Utilization System Using Concentration Interval Analysis Method (II) Discontinuous Process. **Chin. J. Chem. Eng.**, v. 15, n. 3, p. 369–375, 2007.
- MAJOZI, T. Wastewater minimisation using central reusable water storage in batch plants. **Computers and Chemical Engineering**, v. 29, n. 7, p. 1631–1646, 2005a.
- MAJOZI, T. An effective technique for wastewater minimisation in batch processes. v. 13, p. 1374–1380, 2005b.
- MAJOZI, T. Storage design for maximum wastewater reuse in multipurpose batch plants. **Industrial and Engineering Chemistry Research**, v. 45, n. 17, p. 5936–5943, 2006.
- MAJOZI, T. **Batch Chemical Process Integration - Analysis, Synthesis and Optimization**. [s.l.] Springer, 2010.
- MAJOZI, T.; BROUCKAERT, C. J.; BUCKLEY, C. A. A graphical technique for wastewater minimization in batch processes. **Journal of Environmental Management**, v. 78, n. 4, p. 317–329, 2006.

MAJOZI, T.; SEID, E. R.; LEE, J.-Y. **Understanding batch chemical processes : modelling and case studies**. Boca Raton: CRC Press, 2017.

MANAN, Z. A.; TAN, Y. L.; FOO, D. C. Y. Targeting the minimum water flow rate using water cascade analysis technique. **AIChE Journal**, v. 50, n. 12, p. 3169–3183, 2004.

MIRRE, R. C. et al. Conservação e reúso de águas usando o método Diagrama de Fontes de Água para processos em batelada: estudo de casos. **Revista Ambiente & Água**, v. 7, n. 1, p. 182–203, 2012.

NG, D. K. S. et al. Simultaneous synthesis of property-based water reuse/recycle and interception networks for batch processes. **AIChE Journal**, v. 54, n. 10, p. 2624–2632, out. 2008.

NONYANE, D. R.; MAJOZI, T. Long term scheduling technique for wastewater minimisation in multipurpose batch processes. **Applied Mathematical Modelling**, v. 36, n. 5, p. 2142–2168, 2012.

OLIVER, P.; RODRÍGUEZ, R.; UDAQUIOLA, S. Water use optimization in batch process industries. Part 1: design of the water network. **Journal of Cleaner Production**, v. 16, n. 12, p. 1275–1286, 2008.

PERLINGEIRO, C. A. G. **Engenharia De Processos: análise, simulação, otimização e síntese de processos químicos**. São Paulo: Blucher, 2005.

PRAKASH, R.; SHENOY, U. V. Targeting and design of water networks for fixed flowrate and fixed contaminant load operations. **Chemical Engineering Science**, v. 60, n. 1, p. 255–268, 2005.

PUIGJANER, L.; ESPUÑA, A.; ALMATÓ, M. A software tool for helping in decision-making about water management in batch process industries. **Waste Management**, v. 20, n. 8, p. 645–649, 2000.

PULLURU, S. J.; AKKERMAN, R. Water-integrated scheduling of batch process plants: Modelling approach and application in technology selection. **European Journal of Operational Research**, v. 269, n. 1, p. 227–243, 2018.

RABIE, A. H.; EL-HALWAGI, M. M. Synthesis and Scheduling of Optimal Batch Water-recycle Networks. **International Journal of Science Education**, v. 16, n. 3, p. 474–479, 2008.

SHOAIB, A. M. et al. A hierarchical approach for the synthesis of batch water network. **Computers and Chemical Engineering**, v. 32, n. 3, p. 530–539, 2008.

SOTELO-PICHARDO, C. et al. Optimal retrofit of water conservation networks. **Journal of Cleaner Production**, v. 19, n. 14, p. 1560–1581, set. 2011.

TELES, J. P.; CASTRO, P. M.; NOVAIS, A. Q. MILP-based initialization strategies for the optimal design of water-using networks. **Chemical Engineering Science**, v. 64, n. 17, p. 3736–3752, 2009.

TOKOS, H.; NOVAK PINTARIČ, Z.; YANG, Y. Bi-objective optimization of a water network via benchmarking. **Journal of Cleaner Production**, v. 39, p. 168–179, 2013.

TOKOS, H.; PINTARIC, Z. N. Synthesis of batch water network for a brewery plant. **Journal of Cleaner Production**, v. 17, n. 16, p. 1465–1479, 2009.

UN-WATER. **The United Nations World Water Development Report 2016: Water and Jobs**. [s.l.: s.n.]. Disponível em: <<http://www.unesco.org/open-access/terms-use-ccbysa-en>>.

UN-WATER. **The United Nations World Water Development Report 2018: NATURE-BASED SOLUTIONS FOR WATER**. Paris: [s.n.]. Disponível em: <www.unesco.org/open-access/>.

UN. **Sustainable Development Goal 6: Synthesis Report on Water and Sanitation**. [s.l.: s.n.]. Disponível em: <<http://www.sciencemag.org/cgi/doi/10.1126/science.278.5339.827>>.

WANG, Y.-P.; SMITH, R. Time pinch analysis. **Trans. Inst. Chem. Eng.**, v. 73, n. A, p. 905–912, 1995a.

WANG, Y. P.; SMITH, R. Wastewater Minimisation. **Chemical Engineering Science**, v. 49, n. 7, p. 981–1006, 1994.

WANG, Y. P.; SMITH, R. Wastewater Minimization with Flowrate Constraints. **Chemical Engineering Research & Design**, v. 73, n. 8, p. 889–904, 1995b.

ZHOU, R.-J. et al. Simultaneous optimization of batch process schedules and water-allocation network. **Computers & Chemical Engineering**, v. 33, n. 6, p. 1153–1168, jun. 2009.