

Simulação e Optimização de Processos Químicos com Considerações Ambientais e de Robustez

Florinda Figueiredo Martins
(Mestre em Engenharia do Ambiente pela FEUP)

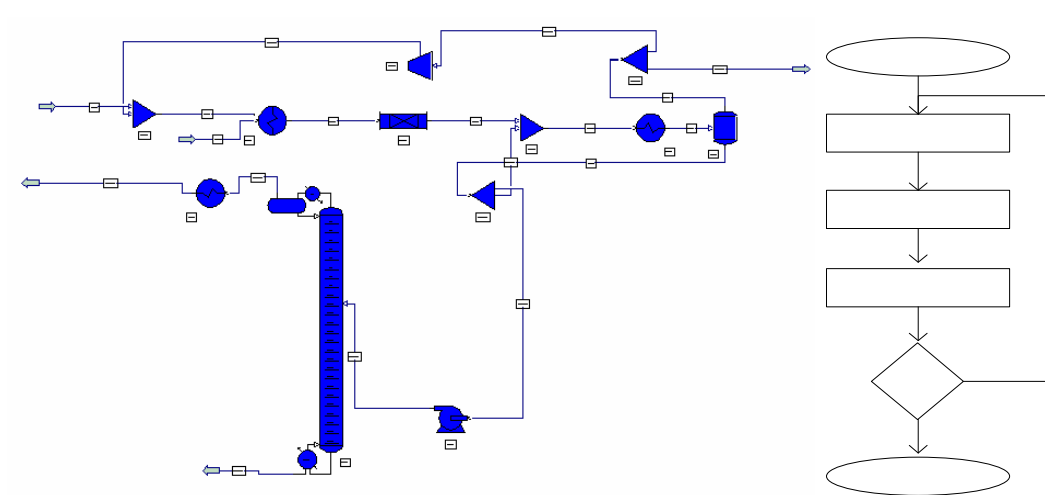
Dissertação para a obtenção do grau de Doutor
em Engenharia Química pela Universidade do Porto

Tese realizada sob a orientação de:

Professor Doutor Carlos Albino da Veiga Costa
(Professor Catedrático, FEUP)

2007

Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto



Para os meus Pais

Agradeço ao Programa PRODEP III – Medida 5 /
Acção 5.3 que permitiu que a autora beneficiasse
de dispensa de serviço docente no Instituto
Superior de Engenharia do Porto.

Agradecimentos

Agradeço ao Professor Doutor Carlos Costa toda a orientação científica, a disponibilidade e o interesse demonstrados. Agradeço ainda o incentivo e confiança incutidos ao longo da realização deste trabalho.

Ao Professor Doutor Cardia Lopes agradeço ter aceite ser co-orientador durante parte deste trabalho.

Ao Professor Doutor Fernando Martins agradeço ter fornecido o manual do PRO/II e ter efectuado as renovações das licenças do PRO/II.

Ao Professor Jorge Martins agradeço a disponibilidade demonstrada.

Ao Professor Manuel Leão agradeço a disponibilização de dados e preços de matérias-primas, produtos e utilidades.

Agradeço ainda a todos os colegas do ISEP que demonstraram interesse pelo meu trabalho e me incentivaram.

Aos meus amigos agradeço a amizade e deixo o meu abraço de sempre.

Aos meus pais, para os quais não tenho palavras para expressar a minha gratidão, quero agradecer o apoio constante ao longo da realização deste trabalho.

Resumo

O objectivo deste trabalho foi o desenvolvimento de uma metodologia que permita a resolução dos problemas MINLP gerados na síntese e projecto em engenharia química incluindo objectivos económicos, ambientais e uma análise de robustez. Nas várias etapas são utilizados métodos que poderão ser aplicados para resolver problemas parcelares, como por exemplo a selecção de alternativas na integração energética, a minimização de impactos ambientais, etc.

A primeira etapa consiste na resolução aproximada do problema inteiro em optimização sequencial de processos, através do desenvolvimento de um algoritmo que usa a hiperestrutura do sistema, heurísticas e desenho estatístico incluindo selecção de configurações por aplicação de critérios económicos, ambientais ou mistos. O desempenho deste algoritmo foi bom. A aplicação ao caso de estudo, hidrodealquilação do tolueno (HDA), permitiu a obtenção de um conjunto de 30 configurações (10 comuns a Douglas (1988)). A aplicação do desenho estatístico a este conjunto, utilizando requisitos de qualidade permitiu a eliminação de 6 configurações. O desenho estatístico foi também usado para ordenar as configurações que cumpriram o requisito de qualidade, usando critérios económicos (Valor Actualizado Líquido), ambientais (Impacto Ambiental Potencial Global e Impacto Ambiental Potencial Global determinado segundo metodologia EPS - *Environmental Priority Strategies*) e mistos (Valor Actualizado Líquido com inclusão dos custos dos impactos ambientais). Para isso foi desenvolvida uma metodologia para determinar o impacto ambiental potencial global. Foram seleccionadas 5 configurações (uma comum a Douglas (1988)).

A segunda etapa consistiu na análise de algoritmos de optimização monobjectivo usando meta-heurísticas do tipo recozimento simulado e pesquisa Tabu e utilizando funções objectivo económicas, ambientais ou mistas. O desempenho dos dois algoritmos para três das cinco configurações analisadas pode ser considerado bom, para outra das configurações variou entre o razoável e o fraco e foi fraco para a outra. Para três das configurações, as soluções encontradas demonstraram ser pouco interessantes económica e ambientalmente. Concluiu-se que as metodologias usadas para determinar o impacto ambiental potencial global podem conduzir a soluções óptimas diferentes. Verificou-se também que os objectivos económicos e ambientais não são muito divergentes quando se considera a metodologia EPS.

A terceira etapa consistiu no desenvolvimento de um algoritmo de optimização multi-objectivo baseado no recozimento simulado, considerando objectivos económicos e ambientais, que foi aplicado a três das configurações anteriormente referidas. Com este algoritmo foi possível obter várias soluções não dominadas para duas das configurações (para a restante apenas foram obtidas duas). O desempenho do algoritmo foi razoável para uma das configurações e fraco para as outras duas. Comparando com os resultados da optimização monobjectivo, função objectivo Valor Actualizado Líquido com inclusão dos custos dos impactos ambientais (critério misto) concluiu-se que usando esta função objectivo mista é possível obter algumas soluções melhores do que as obtidas pelas optimizações multi-objectivo.

Na quarta etapa procedeu-se à análise da robustez das diferentes configurações e condições operatórias resultantes do processo de optimização monobjectivo, incluindo nessa análise a flexibilidade, critérios operacionais, critérios económicos e ambientais. Para as melhores soluções da optimização monobjectivo das três configurações consideradas na etapa anterior analisou-se a robustez, determinando a flexibilidade e a variação registada em alguns indicadores operacionais (caudal e pureza da corrente de benzeno), económicos (Valor Actualizado Líquido) e ambientais (Impacto Ambiental Potencial Global segundo as duas metodologias). Concluiu-se que as configurações que conduziram às melhores soluções na optimização monobjectivo são as mais interessantes sob este ponto de vista.

Abstract

The purpose of this work was the development of a methodology to solve MINLP problems in the synthesis and design of chemical processes including economic and environmental objectives and also a robustness analysis. The methods used in the various steps can also be used to solve partial problems like, for example, the selection of configurations in energetic integration, the minimisation of environmental impacts, etc.

The first step was the development of a procedure for the approximate solution of the integer problem in sequential optimisation, through an algorithm that uses system hyperstructure, heuristics and experimental design, including the selection of configurations by economic, environmental and mix criteria. The performance of this algorithm was good. The application to the case study, toluene hydrodealkylation (HDA), led to a group of 30 configurations (10 common to Douglas (1988)). The application of experimental design using quality specifications eliminated 6 configurations. This technique was also applied to order the remaining configurations, using economic (Net Present Value), environmental (Global Potential Environmental Impact and Global Potential Environmental Impact according to *Environmental Priority Strategies* - EPS - methodology) and mix criteria (Net Present Value with environmental costs). To accomplish this a methodology was developed to determine the global potential environmental impact. 5 configurations were selected, one of them also proposed by Douglas (1988).

The next step was the application of mono-objective optimisation to the remaining problem using algorithms based on simulated annealing and Tabu search, with economic, environmental and mixed objective functions. The performance of the two algorithms was good for three of the five configurations, fair to poor to another configuration and poor for the remaining one. Economically and environmentally the solutions of three configurations are not very interesting. It was possible to conclude that the methodologies used to determine the global potential environmental impact can lead to different optimal solutions and that economic and environmental objectives aren't very conflicting when considering the EPS methodology.

The third step was the development of multi-objective optimisation algorithm based on simulated annealing that was applied to three of the configurations mentioned above. Several non-dominated solutions for two of the configurations were obtained (for the other configuration only two solutions were obtained). The algorithm performance was reasonable for one configuration and poor for the other two. By comparing with the results obtained by mono objective optimisation using a mixed criteria objective function, it was possible to verify that the use of this objective function leads to some solutions that are better than those obtained through multi-objective optimisation.

Finally a robustness analysis was performed on the different configurations and operating conditions obtained by mono objective optimisation, using flexibility, operability, economic and environmental criteria. Flexibility and the variation of the operational (purity and flow of the benzene stream), economic (Net Present Value) and environmental (Global Potential Environmental Impact and Global Potential Environmental Impact according to *Environmental Priority Strategies* - EPS - methodology) indicators were calculated and analysed. The configurations that led to the best solutions in mono objective optimisation proved to be the more interesting ones from a robustness point of view.

Résumé

Le but de ce travail a été le développement d'une méthodologie qui permet la résolution des problèmes MINLP gérés par la synthèse et projet en génie chimique avec l'inclusion des objectives économiques, environnementaux et l'analyse de la robustesse.

Les différents étapes utilisent des méthodes qui pourront être appliqués pour résoudre problèmes parcellaires, comme par exemple la sélection d'alternatives dans l'intégration énergétique, la minimisation des impacts sur l'environnement, etc.

La première étape a consisté dans la résolution approximée du problème entière en optimisation séquentiel de procès, en développant un algorithme qui utilise la hyperstruture du système, heuristiques et planification des expériences et aussi la sélection de configurations pour critères économiques, environnementaux et mixtes. La performance de cet algorithme a été bonne. L'application au cas d'étude, du toluène au benzène par hydrodésalkylation (HDA), a permis la formation d'un bloc de 30 configurations. L'application de la planification des expériences en utilisant des exigences de qualité a éliminé 6 configurations. La planification des expériences a été aussi utilisée pour mettre en ordre et sélectionner les autres configurations en considérant critères économiques (Valeur Actuelle), environnementaux (l'Impact Environnemental Potentiel Global et l'Impact Environnemental Potentiel Global EPS - *Environmental Priority Strategies*) et mixtes (Valeur Actuelle avec l'inclusion des charges environnementaux). Pour cela on a développé une méthodologie qui permet calculer l'impact environnemental potentiel global. On a sélectionné 5 configurations (une qui est commun a Douglas (1988)).

La deuxième étape compris l'optimisation monobjectif des 5 configurations en utilisant meta-heuristiques, Recuit Simulé et Recherche Tabou avec fonctions objectif économiques, environnementaux et mixtes. La performance des algorithmes a été bonne pour trois configurations, raisonnable-faible pour autre configuration et faible pour le restant. Les solutions de trois configurations ne sont pas très intéressantes économiquement et pour l'environnement. On a conclu que les méthodologies utilisées pour déterminer l'impact environnemental potentiel global peuvent conduire à solutions optimaux différentes. On a aussi conclu que les objectives économiques et environnementaux ne sont pas très contradictoires, lorsqu' on considère la méthodologie EPS.

Dans la troisième étape on a développé un algorithme d'optimisation multi-objectif basé sur Recuit simulé avec des objectives économiques et environnementaux, qui a été appliqué à trois configurations. Avec cet algorithme on a obtenu quelques solutions non dominées pour deux configurations (pour l'autre on a obtenu seulement deux solutions). La performance de l'algorithme a été raisonnable pour une configuration et faible pour les autres. La comparaison des résultats avec ceux de l'optimisation monobjectif, fonction objectif Valeur Actuelle avec l'inclusion des charges environnementaux (critère mixte) permis de conclure que la utilisation de cette fonction objectif conduit a quelques solutions meilleures que les optimisations multi-objectif. Dans la quatrième étape on a fait l'analyse de la robustesse des différentes configurations et conditions d'opération, en utilisant la flexibilité, critères d'opération, économiques et environnementaux. Pour les meilleures solutions des trois configurations utilisées dans l'étape antérieure, obtenues avec l'optimisation monobjectif, on a déterminé la flexibilité et la variation des indicateurs d'opération (pureté et débit de la courant de benzène), économiques (Valeur Actuelle) et environnementaux (l'Impact Environnemental Potentiel Global et l'Impact Environnemental Potentiel Global EPS - *Environmental Priority Strategies*). On a conclu que les configurations qui ont obtenu des meilleures solutions à l'optimisation monobjectif sont les plus intéressantes.

Índice

Capítulo 1

Optimização de processos químicos

1	Introdução	1.1
2	Optimização	1.3
2.1	Importância da optimização de processos	1.3
2.2	Tipos de problemas	1.3
2.3	Metodologias e algoritmos gerais	1.4
3	Tipos de funções objectivo	1.9
3.1	Económica	1.9
3.2	Ambiental	1.9
3.3	Robustez	1.10
4	Objectivos da tese	1.11
5	Bibliografia	1.13

Capítulo 2

Resolução Aproximada do Problema Inteiro em Optimização Sequencial de Processos: Aplicação do Desenho Factorial

1	Introdução	2.1
2	Metodologia/algoritmo	2.7
2.1	Hiperestrutura e regras heurísticas	2.8
2.2	Escolha e descrição sucinta da ferramenta de desenho estatístico	2.10
2.2.1	Aplicação do desenho estatístico	2.11
2.2.1.1	Características de qualidade	2.12
2.2.1.2	Avaliação económica	2.12
2.2.1.3	Avaliação ambiental	2.12
2.2.1.4	Avaliação mista: económica e ambiental	2.16
3	Caso de estudo	2.17
3.1	Escolha e descrição do simulador	2.17
3.2	Hiperestrutura e regras heurísticas	2.17
3.3	Desenho estatístico	2.25
3.3.1	Variáveis não consideradas para os planos	2.26
3.3.2	Variáveis consideradas para os planos	2.26
3.3.3	Níveis para as variáveis seleccionadas	2.27
3.4	Resolução aproximada do problema inteiro	2.30
3.4.1	Característica de qualidade	2.30
3.4.1.1	Ensaio	2.30
3.4.1.2	Resultados e discussão	2.31
3.4.2	Critérios económicos, ambientais ou mistos	2.34
3.4.2.1	Ensaio	2.35
3.4.2.2	Resultados e discussão	2.36
4	Conclusões	2.39
5	Bibliografia	2.41
APÊNDICES		
A1.	Experimentação factorial	CD
A2.	Caso de estudo	CD

A3. Avaliação económica	CD
A4. Avaliação ambiental	CD
A5. Resultados	CD

Capítulo 3

Optimização de processos químicos usando meta-heurísticas

1	Introdução	3.1
2	Optimização monobjectivo	3.3
2.1	Introdução	3.3
2.2	Metodologia/algoritmos	3.4
2.2.1	Interface simulador / programa	3.4
2.2.2	Recozimento simulado	3.4
2.2.3	Pesquisa Tabu	3.10
2.3	Sintonização do algoritmo com SA e funções objectivo	3.14
2.4	Sintonização do algoritmo com TS e funções objectivo	3.16
2.5	Resultados e discussão	3.18
2.5.1	Recozimento simulado (SA)	3.18
2.5.2	Pesquisa tabu (TS)	3.31
3	Optimização multi-objectivo – recozimento simulado modificado	3.45
3.1	Introdução	3.45
3.2	Problema de optimização multi-objectivo	3.49
3.2.1	Formulação	3.49
3.2.2	Características	3.49
3.2.3	Soluções óptimas de Pareto e dominância	3.49
3.3	Algoritmo SA proposto	3.51
3.4	Resultados e discussão	3.53
4	Conclusões	3.61
4.1	Optimização monobjectivo	3.61
4.2	Optimização multi-objectivo	3.62
5	Bibliografia	3.63
APÊNDICES		
B1.	Resultados Recozimento Simulado	CD
B2.	Resultados Pesquisa Tabu	CD
B3.	Resultados Multi-objectivo Recozimento Simulado	CD

Capítulo 4

Robustez e Operabilidade: análise de soluções resultantes da optimização de processos químicos

1	Introdução	4.1
2	Análise da robustez	4.7
2.1	Critérios propostos	4.7
2.2	Soluções a analisar	4.8
3	Aplicação às diferentes configurações e condições operatórias do caso de estudo	4.9
3.1	Critérios usados	4.9
3.2	Soluções analisadas	4.9
3.3	Resultados e discussão	4.10
4	Conclusões	4.17

5	Bibliografia	4.19
APÊNDICES		
C1.	Resultados Análise da Robustez	CD
Capítulo 5		
Conclusões e trabalho futuro		
1	Conclusões	5.1
2	Trabalho futuro	5.3

Índice de figuras

Figura 2.1 Algoritmo para resolução do problema de concepção e optimização de processos	2.7
Figura 2. 2 Aplicação do desenho estatístico na resolução do problema de concepção e optimização de processos	2.8
Figura 2.3 Hiperestrutura: representação STN para a produção de benzeno por hidrodealquilação do tolueno	2.21
Figura 3. 1 Ligação entre optimização e simulação	3.4
Figura 3. 2 Algoritmo do recozimento simulado aplicado à Simulação / Optimização	3.9
Figura 3. 3 Algoritmo da pesquisa Tabu aplicado à Simulação/Optimização	3.13
Figura 3.4 Evolução da primeira optimização A/VAL1/SA	3.19
Figura 3.5 Evolução da quarta optimização Ee/VAL1/SA	3.19
Figura 3.6 Evolução das diferentes grandezas avaliadas para a melhor solução obtida na optimização de VAL1 (pureza >0.,990) – GrTBe	3.24
Figura 3.7 Evolução das diferentes grandezas avaliadas para a melhor solução obtida na optimização de VAL2 (pureza>0,990) – GrTBe	3.25
Figura 3.8 Evolução das diferentes grandezas avaliadas para a melhor solução obtida na optimização de IAPG (pureza>0,990) – E	3.27
Figura 3.9 Evolução das diferentes grandezas avaliadas para a melhor solução obtida na optimização de IAPG-EPS (pureza>0,990) – GrTBe	3.28
Figura 3.10 Impactos ambientais potenciais globais – Função objectivo IAPG – Configuração E	3.29
Figura 3.11 Impactos ambientais potenciais globais – Função objectivo IAPG-EPS – Configuração GrTBe	3.30
Figura 3.12 Evolução da optimização E/VAL1/TS	3.32
Figura 3.13 Evolução da optimização Ee/IAPG-EPS/TS	3.33
Figura 3.14 Evolução das diferentes grandezas avaliadas para a melhor solução obtida na optimização de VAL1 (pureza>0,990) – GrTBe	3.37
Figura 3.15 Evolução das diferentes grandezas avaliadas para a melhor solução obtida na optimização de VAL2 (pureza>0,990) – GrTBe	3.38
Figura 3.16 Evolução das diferentes grandezas avaliadas para a melhor solução obtida na optimização de IAPG (pureza>0,990) –E	3.40
Figura 3.17 Evolução das diferentes grandezas avaliadas para a melhor solução obtida na optimização de IAPG-EPS (pureza>0,990) – GrTBe	3.41
Figura 3.18 Detalhe do critério de aceitação no SA multi-objectivo	3.52
Figura 4.1 Desvio VAL1 versus a flexibilidade para a configuração E	4.12
Figura 4.2 Desvio VAL1 versus a flexibilidade para a configuração GrTBe	4.12
Figura 4.3 Desvio IAPG versus a flexibilidade para a configuração E	4.13
Figura 4.4 Desvio IAPG versus a flexibilidade para a configuração GrTBe	4.13
Figura 4.5 Desvio IAPG-EPS versus a flexibilidade para a configuração E	4.13
Figura 4.6 Desvio IAPG-EPS versus a flexibilidade para a configuração GrTBe	4.14
Figura 4.7 Desvio QBenzeno versus a flexibilidade para a configuração E	4.14
Figura 4. 8 Desvio QBenzeno versus a flexibilidade para a configuração GrTBe	4.14
Figura 4.9 Desvio pureza da corrente de benzeno versus a flexibilidade para a configuração GrTBe	4.15

Índice de tabelas

Tabela 2.1 Lista de equipamento e características das configurações para a aplicação do desenho estatístico	2.23
Tabela 2.2 Integração energética efectuada nas diferentes configurações	2.24
Tabela 2.3 Variáveis consideradas para as diferentes configurações	2.27
Tabela 2. 4 Número de variáveis para cada configuração e plano utilizado	2.28
Tabela 2. 5 Níveis considerados para cada variável	2.29
Tabela 2.6 Séries de ensaios que utilizam fracções	2.31
Tabela 2.7 Séries de ensaios que utilizam recuperações	2.31
Tabela 2. 8 Selecção de configurações	2.32
Tabela 2. 9 Número de sucessos obtidos em cada série	2.33
Tabela 2.10 Categorias de impactos, modelos e indicadores	2.35
Tabela 2.11 Quadro resumo das configurações e especificações usadas	2.36
Tabela 2.12 Valores médios das várias grandezas para cada configuração	2.36
Tabela 2.13 Hierarquização mediante critérios ambientais e/ou económicos	2.37
Tabela 2.14 Percentagem de ensaios contidos no primeiro intervalo	2.38
Tabela 3.1 Precisão nas optimizações efectuadas com SA	3.21
Tabela 3.2 Análise da aplicação de um critério de convergência (SA)	3.22
Tabela 3.3 Resultados para VAL1 (SA)	3.23
Tabela 3.4 Resultados para VAL2 (SA)	3.23
Tabela 3.5 Resultados para IAPG (SA)	3.26
Tabela 3.6 Resultados para IAPG-EPS (SA)	3.26
Tabela 3.7 Precisão nas optimizações efectuadas e dependência relativamente à solução inicial (TS)	3.34
Tabela 3.8 Análise da aplicação de um critério de convergência (TS)	3.35
Tabela 3.9 Resultados para VAL1 (TS)	3.36
Tabela 3.10 Resultados para VAL2 (TS)	3.36
Tabela 3.11 Resultados para IAPG (TS)	3.39
Tabela 3.12 Resultados para IAPG-EPS (TS)	3.39
Tabela 3.13 Soluções não dominadas obtidas nas optimizações multi-objectivo	3.53
Tabela 3.14 Resultados das cinco optimizações multi-objectivo considerando VAL1 como a primeira função objectivo – Configuração E	3.55
Tabela 3.15 Desempenho do algoritmo multi-objectivo SA – Configuração E	3.56
Tabela 3.16 Desempenho do algoritmo multi-objectivo SA – Configuração Ee	3.56
Tabela 3.17 Desempenho do algoritmo multi-objectivo SA – Configuração GrTBe	3.57
Tabela 4.1 Variação dos parâmetros incertos	4.9
Tabela 4.2 Avaliação da robustez: parâmetros incertos	4.10
Tabela 4.3 Resultados para análise da robustez da solução E – IAPG-EPS (SA)	4.10
Tabela 4.4 Resultados para análise da robustez da solução GrTBe – VAL1 (TS)	4.11

Capítulo 1

Optimização de Processos Químicos

Nomenclatura

Acrónimos

AO	aproximação externa
BB	método da bifurcação e limite
BIP	problemas inteiros binários
DAE	equações diferenciais algébricas
ELU	<i>environmental load unit</i>
EPS	<i>environmental priority strategies</i>
GRG	gradiente reduzido generalizado
IChemE	institution of chemical engineers
ILP	problemas inteiros lineares
INLP	problemas inteiros não lineares
IP	problemas inteiros
KKT	condições de primeira ordem de Karush-Kuhn-Tucker
LP	problemas lineares
MILP	problemas inteiros mistos lineares
MINLP	problemas inteiros mistos não lineares
MIP	problemas inteiros mistos
NLP	problemas não lineares
SLP	programação linear sucessiva
SQP	programação quadrática sequencial
VBA	<i>visual basic for applications</i>
WAR	<i>waste reduction</i>

ÍNDICE

1	Introdução	1
2	Optimização	3
2.1	Importância da optimização de processos.....	3
2.2	Tipos de problemas	3
2.3	Metodologias e algoritmos gerais	4
3	Tipos de funções objectivo.....	9
3.1	Económica.....	9
3.2	Ambiental	9
3.3	Robustez.....	10
4	Objectivos da tese	11
5	Bibliografia	13

1 Introdução

A necessidade de modificar processos e as condições de operação da indústria química para torná-la mais eficiente em termos económicos, energéticos e ambientais tem tido como consequência a utilização da optimização. O conceito de optimização encontra-se hoje associado a muitos sistemas complexos, incluindo processos químicos e produtos, contribuindo muitas vezes de forma decisiva para a tomada de decisões.

O aumento do custo da energia e a regulamentação ambiental cada vez mais restritiva contribuem decisivamente para a utilização da optimização como uma das ferramentas de engenharia. O desenvolvimento dos computadores permitiu a sua aplicação a problemas maiores e mais complexos (Edgar et al., 2001). Na realidade os computadores foram decisivos no desenvolvimento dos métodos de optimização e em toda a análise numérica (Fletcher, 2000).

O objectivo da optimização é encontrar valores para as variáveis do processo (temperaturas, pressões, dimensões do equipamento) que conduzam ao melhor valor para o critério considerado, isto é para a função objectivo, que muitas das vezes é do tipo económico, ambiental e/ou de produção. O(s) critério(s) de desempenho (função objectivo), o modelo do processo (ligações, que incluem balanços mássicos, energéticos, etc.) assim como as limitações existentes (ex.: valores máximos das variáveis de operação), constituem e são parte integrante do problema de optimização. A solução de um problema de optimização é um conjunto de valores das variáveis para os quais a função objectivo atinge um valor óptimo. Em termos matemáticos, a optimização envolve geralmente a maximização ou a minimização (Gill et al., 1981). Os problemas típicos de engenharia química, nomeadamente o projecto e operação de unidades industriais têm muitas, e possivelmente um número infinito de soluções. A optimização selecciona as melhores de todo o conjunto, através de métodos quantitativos eficientes.

Geralmente a optimização envolve várias etapas, nomeadamente, a definição do problema, a construção de um modelo, a formulação matemática da(s) função(ões) objectivo, a escolha do algoritmo de optimização, a determinação da solução óptima, a análise de sensibilidade e a implementação da solução óptima.

A optimização é aplicada em muitos domínios como a Engenharia, a Matemática, a Economia, a Medicina, etc. No caso particular da Engenharia Química pode ser usada nas seguintes tarefas:

- determinação da melhor localização para unidades industriais, com ou sem considerações ambientais ou outras (ex.: segurança);
- projecto de unidades industriais com ou sem considerações ambientais ou outras;
- projecto de equipamentos;
- operação de unidades industriais;
- operação de equipamentos;
- determinação de percursos para problemas de distribuição;
- projecto de redes de distribuição de produtos químicos;
- elaboração de planos de manutenção e substituição de equipamento;
- minimização de emissões para o ambiente;
- integração energética em processos;
- análise de dados para construção de um modelo processual;
- planeamento e faseamento dos trabalhos de construção;
- alocação de recursos e/ou serviços entre vários processos
- etc..

2 Optimização

2.1 Importância da optimização de processos

O principal objectivo da optimização de processos é encontrar soluções óptimas que melhorem o desempenho produtivo, económico, ambiental e/ou de outros critérios como a robustez, a segurança de um complexo industrial, de uma unidade industrial ou de um simples equipamento. A optimização pode ser aplicada numa fase inicial, nomeadamente no projecto de novas unidades industriais e/ou novos equipamentos ou na melhoria de instalações/equipamentos já existentes. Num processo produtivo existem inúmeras oportunidades que são susceptíveis de aplicação da optimização, algumas relacionadas com o desempenho produtivo como melhorar a qualidade do produto, outras relacionadas com a melhoria do desempenho económico, tais como a redução de custos de produção por optimização da utilização de matérias-primas e utilidades com o consequente aumento da eficiência e da produtividade, outras ainda relacionadas com o desempenho ambiental como a minimização dos impactes ambientais por optimização do processo produtivo (que pode também ter benefícios económicos).

No contexto actual, a satisfação de várias valências em simultâneo (económicas, ambientais, de flexibilidade, de operacionalidade, de robustez e de segurança) reveste-se de particular importância pois torna os processos mais eficientes e produtivos, adquirindo a optimização multi-objectivo um papel preponderante. Um problema de optimização implica, portanto, a escolha de uma solução óptima de entre um conjunto de alternativas, onde a optimalidade se refere a certos critérios, mediante os quais a qualidade das alternativas é medida (Ehrgott, 2000).

2.2 Tipos de problemas

A solução de problemas de optimização envolve geralmente a matemática, embora existam problemas que não são susceptíveis de formulação e análise matemática. Assim, para a formulação da maior parte dos problemas são necessárias expressões matemáticas que contemplam três categorias: a função objectivo, as igualdades (ligações) e as desigualdades (restrições). Esta estrutura é comum para um grande número de problemas o que permitiu o progresso das técnicas de optimização.

Uma solução possível do problema de optimização é um conjunto de variáveis que satisfaz as igualdades e desigualdades com um determinado grau de precisão. Uma solução óptima é um conjunto de variáveis que satisfaz as igualdades e desigualdades e simultaneamente apresenta um valor óptimo para a função objectivo, ou no caso de optimização multi-objectivo para as funções objectivo. Em muitos casos a solução óptima é única, especialmente no caso de optimização monobjectivo.

Se o problema for formulado de modo a que não haja graus de liberdade, isto é, se o número de variáveis a especificar for igual ao número de equações independentes, a optimização não é necessária para obter uma solução para um problema. Neste caso existe pelo menos uma solução independentemente do critério de optimização (podem existir múltiplas soluções se as equações forem não lineares). Se existir uma única solução basta resolver um conjunto de equações, a única solução possível é por definição a solução óptima. Por outro lado, se o modelo processual for indeterminado, o número de variáveis é superior ao número de equações, então o modelo tem um número infinito de soluções possíveis pelo que a função objectivo é o critério adicional usado para reduzir o número de soluções a uma, especificando, portanto a melhor solução. Finalmente se existem mais equações independentes do que variáveis para

as quais os valores são desconhecidos, então o modelo processual é sobredeterminado e não existe uma solução que satisfaça todas as restrições exactamente. Para resolver é necessário, por vezes, relaxar algumas ou todas as restrições. A optimização pelo método dos mínimos quadrados ou um critério semelhante pode ser usado para obter os valores para as variáveis não conhecidas (Edgar et al., 2001).

Os problemas de optimização podem ser classificados considerando em primeiro lugar o tipo de variáveis envolvidas, contínuas ou discretas e o tipo de equações do problema (função objectivo, ligações e restrições). Os principais tipos de problemas de optimização contínua (contêm apenas variáveis contínuas) incluem a programação linear (LP) em que todas as equações são lineares e a programação não linear (NLP) se existir pelo menos uma equação não linear. Os problemas em que as variáveis são todas inteiras são designados por problemas inteiros (IP), de que é exemplo o problema do caixeiro viajante. Existe ainda um caso particular que são os problemas em que as variáveis inteiras ou são 0 ou 1 e que são designados por problemas inteiros binários (BIP). Os problemas inteiros podem ainda ser divididos em duas classes, lineares (ILP) e não lineares (INLP), dependendo do tipo de equações envolvidas. Os problemas com variáveis contínuas e discretas são designados por problemas inteiros mistos (MIP) e correspondem a problemas inteiros mistos não lineares (MINLP) se alguma das equações envolvidas é não linear. Se todas as funções são lineares correspondem a problemas lineares inteiros mistos (MILP).

Os problemas que têm variáveis discretas são também designados de problemas combinatórios (Papadimitriou e Steiglitz, 1982), embora esta designação apareça geralmente associada à dimensão do problema.

Outra característica que muitas das vezes serve para classificar os problemas de optimização é a existência ou não de restrições o que contribui decisivamente para a escolha do método usado para resolver o problema de optimização.

Os modelos dinâmicos originam a optimização dinâmica e envolvem geralmente equações diferenciais algébricas (DAE), que reflectem a variação das variáveis dependentes com o tempo.

Outra extensão relevante inclui os problemas que se debruçam sobre a incerteza e que originam problemas de optimização estocástica (Biegler e Grossmann, 2004).

Em engenharia química os problemas de concepção e projecto originam geralmente problemas NLP e MINLP, embora possam também ser considerados problemas LP e MILP quando se consideram modelos com objectivos mais simples. Os problemas a nível operacional, como por exemplo o planeamento de operações, originam frequentemente modelos lineares, LP ou MILP. No entanto, na optimização em tempo-real os problemas NLP são importantes (Biegler e Grossmann, 2004).

Os problemas de optimização podem ser convexos ou não convexos, o que determina em muitos casos a qualidade da solução obtida. Existem métodos que garantem a obtenção do óptimo global caso o problema seja convexo. Contudo, nem sempre é possível determinar se o problema é ou não convexo, particularmente em problemas de elevada dimensão.

2.3 Metodologias e algoritmos gerais

Não existe um único método ou algoritmo de optimização que possa ser eficientemente usado para todos os problemas. O método escolhido para um determinado problema depende de vários factores, nomeadamente se a função objectivo é ou não conhecida explicitamente, da natureza das restrições, do tipo e do número de variáveis.

A programação linear aplica-se a problemas em que a função objectivo e as restrições do problema são lineares. Os métodos utilizados para resolver este tipo de problemas são o método Simplex e os métodos barreira. O método Simplex é um procedimento com duas fases para encontrar a solução óptima. Na primeira fase encontra uma solução básica viável, se existir, ou dá a indicação que essa solução não existe (o que significa que as restrições são inconsistentes e o problema não tem solução). Na segunda fase usa a solução anterior como ponto de partida e ou encontra uma solução minimizadora ou maximizadora (consoante se pretende minimizar ou maximizar) ou dá a indicação de que o mínimo ou máximo não é limitado (isto é, $-\infty$ ou $+\infty$). Os métodos de barreira geram uma sequência de pontos que podem não satisfazer todas as restrições até que o método convirja e em que nenhum dos pontos precisa de ser um extremo. Isto permite-lhes moverem-se através da região viável em vez de se moverem de um ponto extremo para outro como faz o simplex. Precisam, portanto de um menor número de iterações que o simplex embora cada iteração possa levar mais tempo.

Um problema MILP é um problema LP em que uma ou mais variáveis de decisão são inteiras pelo que quase todos os programas que resolvem problemas LP têm a capacidade de resolver problemas MILP, recorrendo também a métodos de bifurcação e limite para além dos métodos anteriormente referidos. A dificuldade de resolver os problemas é em primeiro lugar determinada pelo número de variáveis inteiras e só depois pelo número de variáveis contínuas.

No entanto, a optimização de problemas relacionados com processos químicos envolve geralmente sistemas de equações não lineares e não convexidades quer na função objectivo quer nas restrições do processo. Para resolver os problemas NLP podem ser usados métodos baseados em funções de penalização, na função Langrangeana aumentada e nos métodos de barreira (os métodos barreira não são directamente aplicáveis a problemas com igualdades mas estas podem ser incorporadas usando um termo de penalização enquanto para as desigualdades são usados termos barreira, originando assim um método misto, penalização-barreira). Existem outros métodos para resolver os problemas NLP, nomeadamente o método de programação linear sucessiva, SLP (*sucessive linear programming*) que é um algoritmo iterativo sequencial com aproximações lineares à função objectivo e às restrições do problema, sendo resolvidos sucessivos problemas LP; se o novo ponto é melhor que o anterior torna-se o ponto actual, se não é melhor é porque se está suficientemente próximo do óptimo ou é necessário reduzir o intervalo de variação das variáveis. As vantagens deste método de acordo com Edgar et al. (2001) são a rápida convergência quando o óptimo se situa num vértice e serem capazes de resolver problemas de elevada dimensão. Como desvantagem pode referir-se a lenta convergência caso o óptimo não se situe num vértice. No entanto, os métodos actualmente mais utilizados para resolução dos problemas NLP são os métodos baseados na programação quadrática sequencial, SQP (*sequential quadratic programming*) e no gradiente reduzido generalizado, GRG (*generalized reduced gradient*). Os métodos SQP resolvem uma sequência de aproximações quadráticas ao problema NLP. Estes métodos procuram soluções que satisfaçam as condições de primeira ordem de Karush-Kuhn-Tucker (KKT). Tal como no método SLP as restrições lineares são linearizações no ponto seleccionado e o objectivo é uma aproximação quadrática à função Langrangeana, sendo o método de Newton aplicado ao sistema de equações definido pelas condições KKT do problema NLP original. Estes métodos evidenciaram necessitar do menor número de avaliações da função para resolver os problemas NLP (Biegler e Grossmann, 2004) e podem ser adaptadas para uma gama alargada de problemas processuais com diferentes estruturas. Um dos métodos baseados em SQP e implementado numa plataforma modelizadora, GAMS, é o MINOS (Murtagh e Saunders, 1987).

Nos métodos do gradiente reduzido generalizado (GRG) é seleccionado um conjunto activo de variáveis e com base nesse conjunto é determinado um gradiente reduzido,

sendo, portanto, efectuada uma decomposição reduzida do espaço. Este conjunto activo pode sofrer alterações ao longo da execução do algoritmo. Como métodos baseados no GRG podem citar-se o GRG2 (Lasdon et al., 1978), CONOPT (Drud, 1985; Drud, 1994) implementado na GAMS e o SOLVER (Excel) (Biegler e Grossmann, 2004). Estes métodos, SQP e GRG, são designados de métodos de procura local uma vez que privilegiam a qualidade de óptimo local da solução encontrada, devido ao facto de se basearem em informação sobre o gradiente e pontos estacionários.

Existem outros métodos, de optimização global e designados por estocásticos ou probabilísticos, como a procura aleatória adaptativa (Luus e Jaakola, 1973), o recozimento simulado (Metropolis et al., 1953; Kirkpatrick et al., 1983; Laarhoven e Aarts, 1987), a pesquisa tabu (Glover, 1986), os algoritmos genéticos (Holland, 1975), colónias de formigas (Wodrich e Bilchev, 1997) alguns deles aplicados quer a problemas combinatórios NLP ou MINLP com restrições. Estes métodos podem também ser classificados como directos dado que na progressão do algoritmo só utilizam avaliações da função objectivo, não utilizando, portanto, derivadas.

Na optimização discreta e para problemas MILP os métodos utilizados baseiam-se essencialmente no algoritmo de bifurcação e limite, BB, (Land e Doig, 1960).

Os principais métodos para problemas MINLP incluem o método de bifurcação e limite (BB) (Gupta e Ravindran, 1985; Leyffer, 2001), decomposição generalizada de Benders (Geoffrion, 1972) e aproximação externa (OA) (Duran e Grossmann, 1986). Os problemas MINLP também podem ser resolvidos usando os métodos estocásticos já anteriormente referidos. Por oposição a estes métodos um método como o de bifurcação e limite é designado de algoritmo determinístico, isto é, utiliza passos que não dependem da geração ou da escolha estocástica de vectores-soluções. Envolve uma descrição matemática exaustiva e são bastante adequados para a resolução de problemas convexos.

De salientar que na resolução dos problemas MINLP são muitas vezes considerados subproblemas do tipo NLP, pelo que a resolução destes problemas é também importante em problemas MINLP.

Os métodos estocásticos apresentam algumas vantagens, das quais se destaca a maior facilidade em resolver problemas não convexos ou de difícil convexificação, característica de muitos problemas de engenharia química. Muitos destes métodos baseiam-se em observações de fenómenos naturais e procuram incorporar nos algoritmos os mecanismos por detrás desses fenómenos. Apresentam ainda uma outra vantagem que é o de permitirem uma ligação fácil com simuladores modulares, como por exemplo o PROII. No entanto, exigem algum cuidado para evitar a convergência para óptimos locais e para assegurar a proximidade da solução encontrada ao óptimo global, nomeadamente na escolha dos parâmetros e no critério de convergência. Contudo, ainda não se descobriram propriedades de convergência rigorosa para o óptimo global.

O recozimento simulado surge da analogia entre um processo de optimização e um processo físico. Este algoritmo foi proposto por Kirkpatrick (1983) que estabeleceu uma analogia entre o arrefecimento de um líquido e a optimização de um sistema complexo. Para se obter um cristal perfeito ou quase perfeito a partir de uma substância pura tem que se proceder à sua fusão e depois arrefecer muito lentamente. Este é o princípio básico de funcionamento deste método. O recozimento simulado é muito utilizado em problemas relacionados com a minimização em problemas combinatórios sendo também aplicado na optimização de problemas com variáveis contínuas. No capítulo 3 são referidos alguns trabalhos desenvolvidos na área da engenharia química e que utilizam o recozimento simulado, dos quais se destacam o de Dolan et al., 1990 em redes de permutadores, Das et al (1990), Ku e Karimi (1991), Patel et al. (1991) em escalonamento da produção em instalações de funcionamento não contínuo e Cardoso et al. (1997) na resolução de problemas MINLP.

A pesquisa tabu foi desenvolvida por Glover (1986) e o seu princípio de funcionamento baseia-se nos mecanismos associados à memória, criando listas de curta memória que condicionam a procura em áreas consideradas tabu e listas de média e longa memória que servem geralmente de base a estratégias de intensificação e diversificação. Podem-se referir os trabalhos de Wang et al. (1999), Lin e Miler (2004) e Cavin et al. (2005).

Os algoritmos evolucionários procuram incorporar os princípios evolucionários na optimização. Podem-se dividir em quatro categorias principais: estratégias de evolução desenvolvidas por Rechenberg (1994) e Schwefel (1995), algoritmos genéticos (Holland, 1975), programação evolucionária inicialmente desenvolvida por Fogel et al. (1966) e evolução diferencial (Price et al., 2005). Os algoritmos genéticos, por exemplo, baseiam-se na genética e evolução natural, utilizando a selecção, o cruzamento e a mutação com o objectivo de melhorar a população e encontrar a solução. Estes métodos têm como característica a utilização de populações, pelo que a progressão do processo de optimização não se baseia somente na actualização de um vector solução. Este facto pode constituir uma vantagem no caso da optimização multi-objectivo, em que não exista uma solução óptima comum a todos os objectivos. Referem-se de seguida alguns trabalhos que utilizaram estes métodos na área da engenharia química: Schütz e Schwefel (2000), Angira e Babu (2006) na síntese de unidades industriais químicas e Halsall-Whitney e Thibault (2006).

As colónias de formigas (Dorigo et al., 1996) baseiam-se no comportamento das formigas, nomeadamente para encontrar o caminho mais curto na procura de alimentos, sendo o caminho indicado através de rastos de feromonas. Na optimização e por analogia rastos de maior intensidade de feromonas corresponderão a soluções mais eficientes.

3 Tipos de funções objectivo

As indústrias face às actuais tendências dos mercados, nomeadamente às suas crescentes volatilidade e competição, a par de outros factores como, por exemplo, a legislação ambiental, são obrigadas a preocupações acrescidas que visam melhorar a eficiência, o desempenho económico, o desempenho ambiental, o desempenho energético, a segurança, a sustentabilidade, a flexibilidade, a operabilidade, a robustez e também os produtos produzidos. Todas estas pressões levam a novos desafios uma vez que as indústrias terão de manter um elevado nível de desempenho em várias vertentes ao longo do seu ciclo de vida, apesar de serem cada vez mais complexas, com um maior número de ligações quer internas quer externas (partilha de utilidades, tratamento de resíduos, etc.). Estes complexos integrados são mais difíceis de dirigir e a manutenção do seu desempenho em níveis óptimos requer uma maior formação e ajuda operacional. Esta ajuda poderá ser feita utilizando ferramentas de modelação, simulação, controlo e de optimização. Uma abordagem que considere várias destas valências numa fase inicial (tecnologia processual, desenvolvimento do processo, projecto) permitirá encontrar soluções mais económicas, mais limpas e mais robustas. Neste contexto torna-se importante, portanto, a definição de critérios e de funções objectivo que contemplem vários aspectos do desempenho de uma unidade industrial.

3.1 Económica

Uma função objectivo de carácter económico pode reduzir-se a um somatório de custos de operação e/ou custos de investimento ou considerar expressões que consideram o valor temporal do dinheiro. No caso de um novo projecto é necessário efectuar uma avaliação económica, que fornecerá informação essencial para a tomada de decisões. Existem vários métodos que permitem determinar a rentabilidade de um projecto ou o seu valor económico. Alguns não consideram o valor temporal do dinheiro tal como a taxa de retorno do investimento e o período simples de recuperação. Outros são baseados na actualização destacando-se o valor actualizado líquido, a taxa interna de rentabilidade e o tempo de recuperação do capital com actualização.

O valor actualizado líquido é o método que deve ser escolhido para uma avaliação final, uma vez que é o que melhor reflecte a influência dos factores que afectam a rentabilidade (Peters et al., 2003).

3.2 Ambiental

Existem várias metodologias para avaliar o desempenho ambiental, algumas destas metodologias propõem como critério a massa de resíduos gerados, outras contabilizam a emissão de determinados compostos (mais poluentes ou que contribuem para um dado problema ambiental) e outras que calculam os impactos ambientais. As metodologias que permitem minimizar a massa de resíduos emitida são pouco específicas, pois não consideram as características de cada resíduo, por outro lado as metodologias que consideram a minimização de determinados poluentes ou compostos que contribuem para um dado problema particular são parcelares não permitindo a consideração de emissões de outros compostos que também contribuem para o desempenho ambiental. A avaliação dos diferentes impactos revela-se assim um caminho promissor para a realização da avaliação do desempenho ambiental. Contudo, a avaliação dos impactos é por natureza multi-objectivo pelo que é importante o cálculo de um indicador agregado. A metodologia WAR (*Waste Reduction*) desenvolvida por Cabezas et al. (1999) e Young e Cabezas (1999), a

metodologia publicada pelo Institution of Chemical Engineers (IChemE, Janeiro/2007) e a metodologia EPS (*Environmental Priority Strategies*) entre outras podem ser utilizadas para a obtenção de um indicador agregado. Os dois primeiros métodos consideram várias categorias de impactos e dentro de cada categoria existem vários compostos que contribuem para essa categoria. A caracterização, normalização e o estabelecimento de pesos são os passos essenciais para se obter um indicador agregado. A metodologia EPS introduz um novo conceito, nomeadamente a “vontade de pagar” (*willingness to pay* – WTP). Para cada composto existe um índice que quando multiplicado pelo caudal mássico permite obter a denominada carga ambiental (expressa em ELU - *Environmental Load Unit*). Esta abordagem económica traduz uma escolha no sentido de obter um valor facilmente compreendido pelos projectistas e pela sociedade em geral.

3.3 Robustez

A formulação de uma função que represente a robustez é difícil pois neste critério poderão estar incluídas várias características, tais como a operabilidade, a flexibilidade, a capacidade de trabalhar dentro dos limites eventualmente estabelecidos por outros critérios, nomeadamente económicos, ambientais ou mistos, etc. A dificuldade na formulação de uma função objectivo complica, portanto, a consideração deste critério em fases iniciais de concepção e projecto, sendo por isso mais fácil a sua avaliação para as soluções óptimas obtidas. A análise dos resultados para essas soluções poderá conduzir a uma avaliação da sua robustez, determinando qual delas é mais flexível e mais operável, permitindo dessa forma a consideração da robustez como critério para encontrar a melhor solução. A solução final será não só uma solução óptima segundo critérios económicos e ambientais mas também uma solução robusta. Podem ainda ser consideradas outras funções objectivo relacionadas, por exemplo, com a segurança e sustentabilidade.

4 Objectivos da tese

A síntese e o projecto em engenharia química conduzem muitas vezes a problemas MINLP. O objectivo deste trabalho foi o desenvolvimento de uma metodologia que permita a resolução desses problemas com recurso a ferramentas usuais na indústria, nomeadamente o VBA (*Visual Basic for Applications* - Excel), os simuladores modulares (no caso deste trabalho o PRO II) e o desenho estatístico. A aplicação de algoritmos de optimização monobjectivo e o desenvolvimento de um algoritmo multi-objectivo constituiu também uma meta a atingir. Nas várias etapas são utilizados métodos que poderão ser aplicados para resolver problemas parcelares, como por exemplo a selecção de alternativas na integração energética, a optimização de uma dada configuração, a minimização de impactos ambientais, etc. Os objectivos parcelares foram:

- Resolução aproximada do problema inteiro em optimização sequencial de processos, com aplicação do desenho factorial (**Capítulo 2**):
 - desenvolvimento de um algoritmo para resolução aproximada do problema inteiro usando a hiperestrutura do sistema, heurísticas e desenho estatístico incluindo selecção de configurações por aplicação de critérios económicos, ambientais ou mistos, enquadrado numa metodologia sequencial de optimização de processos;
 - validação por aplicação a um caso de estudo;
- optimização de processos usando meta-heurísticas do tipo recozimento simulado e pesquisa tabu (**Capítulo 3**):
 - optimização monobjectivo:
 - aplicação de algoritmos de optimização de processos usando meta-heurísticas do tipo recozimento simulado e pesquisa tabu;
 - utilização de funções objectivo do tipo económico, ambiental ou misto;
 - comparação do desempenho dos algoritmos para as mesmas funções objectivo;
 - comparação dos resultados de optimização face às funções objectivo;
 - optimização multi-objectivo
 - desenvolvimento de um algoritmo de optimização multi-objectivo baseado no recozimento simulado, considerando objectivos económicos e ambientais;
 - comparação dos resultados obtidos pela optimização multi-objectivo com os resultados obtidos pela optimização monobjectivo.
- análise da robustez das diferentes configurações e condições operatórias resultantes de um processo de optimização, incluindo nessa análise a flexibilidade, questões de operabilidade e critérios económicos e ambientais (**Capítulo 4**).

5 Bibliografia

Angira, R. e Babu, B. V. (2006). "Optimization of process synthesis and design problems: A modified differential evolution approach." *Chem. Eng. Sci.* **61**: 4707-4721.

Biegler, L. T. e Grossmann, I. E. (2004). "Retrospective on optimization." *Computers & Chemical Engineering* **28**: 1169-1192.

Cabezas, H., Bare, J. C. e Mallick, S. K. (1999). "Pollution prevention with chemical process simulators: the generalized waste reduction (WAR) algorithm-full version." *Computers and Chemical Engineering* **23**: 623-634.

Cardoso, M. F., Salcedo, R. L., Azevedo, S. F. d. e Barbosa, D. (1997). "A simulated annealing approach to the solution of minlp problems." *Computers and Chemical Engineering* **21**: 1349-1364.

Cavin, L., Fischer, U., Mosat, A. e Hungerbuhler, K. (2005). "Batch process optimization in a multipurpose plant using Tabu Search with a design-space diversification." *Computers and Chemical Engineering* **29**: 1770-1786.

Das, H., Cummings, P. T. e LeVan, M. D. (1990). "Scheduling of serial multiproduct batch processes via simulated annealing." *Computers and Chemical Engineering* **14**: 1351-1362.

Dolan, W. B., Cummings, P. T. e Van, M. D. L. (1990). "Algorithmic efficiency of simulated annealing for heat exchanger network design." *Computers and Chemical Engineering* **14**: 1039-1050.

Dorigo, M., Maniezzo, V. e Coloni, A. (1996). "Ant System: Optimization by a Colony of Cooperating Agents." *IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics-Part B: Cybernetics* **26**: 29-41.

Drud, A. (1985). "CONOPT: A GRG code for large sparse dynamic nonlinear optimization problems." *Mathematical Programming* **31**: 153-191.

Drud, A. (1994). "CONOPT - A Large Scale GRG Code." *ORSA Journal on cComputing* **6**: 207-216.

Duran, M. A. e Grossmann, I. E. (1986). "An outer-approximation algorithm for a class of mixed-integer nonlinear programs." *Mathematical Programming* **36**: 307-339.

Edgar, T. F., Himmelblau, D. M. e Lasdon, L. S. (2001). *Optimization of chemical processes*. New York, McGraw-Hill, Inc.

Ehrgott, M. (2000). *Multicriteria Optimization*. Berlin, Springer.

Fletcher, R. (2000). *Practical Methods of Optimization*. Chichester, John Wiley & Sons.

Geoffrion, A. M. (1972). "Generalized benders decomposition." *Journal of Optimization Theory and Applications* **10**: 237-260.

Gill, P. E., Murray, W. e Wright, M. H. (1981). *Practical Optimization*. San Diego, Academic Press, Inc.

Glover, F. (1986). "Future paths for integer programming and links to artificial

intelligence." *Computers and Operations Research* **13**: 533-549.

Gupta, O. K. e Ravindran, V. (1985). "Branch and bound experiments in convex nonlinear integer programming." *Management Science* **31**: 1533-1546.

Halsall-Whitney, H. e Thibault, J. (2006). "Multi-objective optimization for chemical processes and controller design: Approximating and classifying the Pareto domain." *Computers & Chemical Engineering* **30**: 1155-1168.

Holland, J. (1975). *Adaptation in Natural and Artificial Systems*. Ann Arbor, University of Michigan Press.

ICHEME. (Janeiro/2007). "The Sustainability Metrics." www.icheme.org.

Kirkpatrick, S., C. D. Gelatt, J. e Vecchi, M. P. (1983). "Optimization by simulated annealing." *Science* **220**: 671-680.

Ku, H. e Karimi, I. (1991). "An evaluation of simulated annealing for batch process scheduling." *Ind. Eng. Chem. Res.* **30**: 163-169.

Laarhoven, P. J. M. v. e Aarts, E. H. L. (1987). *Simulated Annealing: Theory and Applications*. Dordrecht D Reidel Publishing Company.

Land, A. H. e Doig, A. (1960). "An Automatic Method of Solving Discrete Programming Problems." *Econometrica* **28**: 497-520.

Lasdon, L. S., Waren, A. D., Jain, A. e Ratner, M. (1978). "Design and testing of a generalized reduced gradient code for nonlinear programming." *ACM Trans. Math. Software* **4**: 34-50.

Leyffer, S. (2001). "Integrating SQP and branch and bound for mixed-integer nonlinear programming." *Computational Optimization and Applications* **18**: 295-309.

Lin, B. e Miller, D. C. (2004). "Tabu search algorithm for chemical process optimization." *Computers and Chemical Engineering* **28**: 2287-2306.

Luus, R. e Jaakola, T. H. I. (1973). "Direct search for complex systems." *AIChE Journal* **19**: 645-646.

Metropolis, N., Rosenbluth, A., Rosenbluth, M., Teller, A. e Teller, E. (1953). "Equation of state calculations by fast computing machines." *J. Chem. Phys.* **21**: 1087-1092.

Murtagh, B. A. e Saunders, M. A. (1987). *MINOS 5.1 user's guide*. Technical Report SOL 83-20R, Stanford University.

Papadimitriou, C. H. e Steiglitz, K. (1982). *Combinatorial Optimization, Algorithms and Complexity*. New Jersey, Prentice-Hall, Inc.

Patel, A. N., Mah, R. S. H. e I.A.Karimi (1991). "Preliminary design of multiproduct noncontinuous plants using simulated annealing." *Computers and Chemical Engineering* **15**: 451-469.

Peters, M. S., Timmerhaus, K. D. e West, R. E. (2003). *Plant Design and Economics for Chemical Engineers*. Boston, McGraw-Hill.

Price, K. V., Storn, R. M. e Lampinen, J. A. (2005). Differential Evolution, A Pratical Approach to Global Optimization, Springer.

Rechenberg, I. (1994). Evolutions strategie'94, Werkstatt Bionik und Evolutionstechnik Stuttgart, Frommann-Holzboog.

Schütz, M. e Schwefel, H.-P. (2000). "Evolutionary approaches to solve three challenging engineering tasks." Comput. Methods Appl. Mech. Engrg **186**: 141-170.

Schwefel, H. P. (1995). Evolution and Optimum Seeking Sixth-Generation Computer Technology Series. New York, Wiley & Sons, Ltd.

Wang, C., Quan, H. e Xu, X. (1999). "Optimal design of multiproduct batch chemical process using tabu search." Computers and Chemical Engineering **23**: 427-437.

Wodrich, M. e Bilchev, G. (1997). "Cooperative Distributed Search: the ants' way." Control and Cybernetics **26**: 413-446.

Young, D. M. e Cabezas, H. (1999). "Designing sustainable processes with simulation: the waste reduction (WAR) algorithm." Computers and Chemical Engineering **23**: 1477-1491.

Capítulo 2

Resolução Aproximada do Problema Inteiro em Optimização Sequencial de Processos: Aplicação do Desenho Factorial

Nomenclatura

C	custo anual total	[€/ano]
CA	custo do impacto ambiental potencial global	[€/ano]
d	depreciação linear anual	[€/ano]
F	factor ambiental	[teq / t]
g	funções restrição	
h	funções ligação	
i	taxa de actualização anual do dinheiro (constante)	
I	investimento total, realizado integralmente no ano zero	[€]
IA	impacto ambiental para uma categoria	[teq /ano]
IAPG	impacto ambiental potencial global	
IAPG-EPS	impacto ambiental potencial global (metodologia EPS)	[ELU/ano]
Ind	índice EPS	[ELU/kg]
M	caudal mássico relativo a correntes	[kg/ano ou t/ano]
Mc	caudal mássico relativo a compostos	[kg/ano ou t/ano]
P	pressão	[Pa]
T	temperatura	[K]
V	receitas	[€/ano]
VAL1	valor actualizado líquido sem inclusão dos custos dos impactos ambientais EPS	[€]
VAL2	valor actualizado líquido com inclusão dos custos dos impactos ambientais EPS	[€]
x	variáveis contínuas	
y	variáveis discretas	
Z	função objectivo	
z	fracção mássica	

Letras gregas

α	peso relativo para uma categoria de impacto	
Φ	taxa de impostos	
Ψ	impacto ambiental potencial total	
Ψ^s	impacto ambiental potencial específico	[PEI/kg do composto k]

Índices

i	categoria de impacto
j	corrente
k	composto
l	ano
n	número de anos

Acrónimos

A	grupo de configurações, constituído por As, Ae, ArTB e ArTBe
Ae	configuração do grupo A sem recirculação da corrente de tolueno e bifenilo e com reaproveitamento energético
ANOVA	análise da variância
AO/ER	aproximação externa/relaxação das igualdades
ArTB	configuração do grupo A com recirculação da corrente de tolueno e bifenilo e sem reaproveitamento energético

ArTBe	configuração do grupo A com recirculação da corrente de tolueno e bifenilo e com reaproveitamento energético
As	configuração do grupo A sem recirculação da corrente de tolueno e bifenilo e sem reaproveitamento energético
B	benzeno
C	grupo de configurações, constituído por Cs, Ce, CrTB e CrTBe
Ce	configuração do grupo C sem recirculação da corrente de tolueno e bifenilo e com reaproveitamento energético
CeR	configuração do grupo CR sem recirculação da corrente de tolueno e bifenilo e com reaproveitamento energético
CR	grupo de configurações, constituído por CsR, CeR, CrTBR e CrTBeR
CrTB	configuração do grupo C com recirculação da corrente de tolueno e bifenilo e sem reaproveitamento energético
CrTBe	configuração do grupo C com recirculação da corrente de tolueno e bifenilo e com reaproveitamento energético
CrTBeR	configuração do grupo CR com recirculação da corrente de tolueno e bifenilo e com reaproveitamento energético
CrTBR	configuração do grupo CR com recirculação da corrente de tolueno e bifenilo e sem reaproveitamento energético
Cs	configuração do grupo C sem recirculação da corrente de tolueno e bifenilo e sem reaproveitamento energético
CsR	configuração do grupo CR sem recirculação da corrente de tolueno e bifenilo e sem reaproveitamento energético
D	bifenilo
DC	grupo de configurações, constituído por DrTB e DrTBe
DrTB	configuração do grupo DC com recirculação da corrente de tolueno e sem reaproveitamento energético
DrTBe	configuração do grupo DC com recirculação da corrente de tolueno e com reaproveitamento energético
E	grupo de configurações, constituído por Es, Ee, ErTB, ErTBe, ErTBe2, ErTBe3, ErTBe4 e ErTBe5
Ee	configuração do grupo E sem recirculação da corrente de tolueno e bifenilo e com reaproveitamento energético
ELU	<i>Environmental Load Unit</i>
ErTB	configuração do grupo E com recirculação da corrente de tolueno e bifenilo e sem reaproveitamento energético
ErTBe	configuração do grupo E com recirculação da corrente de tolueno e bifenilo e com reaproveitamento energético opção 1
ErTBe2	configuração do grupo E com recirculação da corrente de tolueno e bifenilo e com reaproveitamento energético opção 2
ErTBe3	configuração do grupo E com recirculação da corrente de tolueno e bifenilo e com reaproveitamento energético opção 3
ErTBe4	configuração do grupo E com recirculação da corrente de tolueno e bifenilo e com reaproveitamento energético opção 4
ErTBe5	configuração do grupo E com recirculação da corrente de tolueno e bifenilo e com reaproveitamento energético opção 5
Es	configuração do grupo E sem recirculação da corrente de tolueno e bifenilo e sem reaproveitamento energético
G	grupo de configurações, constituído por GrTB, GrTBe, GrTBe2, GrTBe3, GrTBe4, GrTBe5, GrTBe6 e GrTBe7
GrTB	configuração do grupo G com recirculação da corrente de tolueno e sem reaproveitamento energético
GrTBe	configuração do grupo G com recirculação da corrente de tolueno e com reaproveitamento energético opção 1

GrTBe2	configuração do grupo G com recirculação da corrente de tolueno e com reaproveitamento energético opção 2
GrTBe3	configuração do grupo G com recirculação da corrente de tolueno e com reaproveitamento energético opção 3
GrTBe4	configuração do grupo G com recirculação da corrente de tolueno e com reaproveitamento energético opção 4
GrTBe5	configuração do grupo G com recirculação da corrente de tolueno e com reaproveitamento energético opção 5
GrTBe6	configuração do grupo G com recirculação da corrente de tolueno e com reaproveitamento energético opção 6
GrTBe7	configuração do grupo G com recirculação da corrente de tolueno e com reaproveitamento energético opção 7
H	hidrogénio
ICChemE	<i>Institution of Chemical Engineers</i>
LP	problema linear
M	metano
MILP	problema misto inteiro linear
MINLP	problema misto inteiro não linear
NLP	problema não linear
OTOE	método uma operação/um equipamento
PEI	<i>Potential Enviromental Impact</i>
SEN	rede equipamento/estado
STN	rede operação/estado
To	tolueno
VBA	<i>visual basic for applications</i>
VTE	método operação/equipamento variável
WAR	<i>waste reduction</i>

ÍNDICE

1	Introdução	1
2	Metodologia/algoritmo	7
2.1	Hiperestrutura e regras heurísticas	8
2.2	Escolha e descrição sucinta da ferramenta de desenho estatístico.	10
2.2.1	Aplicação do desenho estatístico	11
2.2.1.1	Características de qualidade	12
2.2.1.2	Avaliação económica	12
2.2.1.3	Avaliação ambiental	12
2.2.1.4	Avaliação mista: económica e ambiental	16
3	Caso de estudo	17
3.1	Escolha e descrição do simulador	17
3.2	Hiperestrutura e regras heurísticas	17
3.3	Desenho estatístico	25
3.3.1	Variáveis não consideradas para os planos	26
3.3.2	Variáveis consideradas para os planos	26
3.3.3	Níveis para as variáveis seleccionadas	27
3.4	Resolução aproximada do problema inteiro	30
3.4.1	Característica de qualidade	30
3.4.1.1	Ensaaios	30
3.4.1.2	Resultados e discussão	31
3.4.2	Critérios económicos, ambientais ou mistos	34
3.4.2.1	Ensaaios	35
3.4.2.2	Resultados e discussão	36
4	Conclusões	39
5	Bibliografia	41
APÊNDICES		
A1. Experimentação factorial		
A2. Caso de estudo		
A3. Avaliação económica		
A4. Avaliação ambiental		
A5. Resultados		

Índice de figuras

Figura 2.1 Algoritmo para resolução do problema de concepção e optimização de processos	7
Figura 2. 2 Aplicação do desenho estatístico na resolução do problema de concepção e optimização de processos.....	8
Figura 2.3 Hiperestrutura: representação STN para a produção de benzeno por hidrodealquilação do tolueno	21

Índice de tabelas

Tabela 2.1 Lista de equipamento e características das configurações para a aplicação do desenho estatístico	23
Tabela 2.2 Integração energética efectuada nas diferentes configurações	24
Tabela 2.3 Variáveis consideradas para as diferentes configurações	27
Tabela 2. 4 Número de variáveis para cada configuração e plano utilizado	28
Tabela 2. 5 Níveis considerados para cada variável	29
Tabela 2.6 Séries de ensaios que utilizam fracções	31
Tabela 2.7 Séries de ensaios que utilizam recuperações	31
Tabela 2. 8 Selecção de configurações	32
Tabela 2. 9 Número de sucessos obtidos em cada série	33
Tabela 2.10 Categorias de impactos, modelos e indicadores	35
Tabela 2.11 Quadro resumo das configurações e especificações usadas	36
Tabela 2.12 Valores médios das várias grandezas para cada configuração	36
Tabela 2.13 Hierarquização mediante critérios ambientais e/ou económicos	37
Tabela 2.14 Percentagem de ensaios contidos no primeiro intervalo.....	38

1 Introdução

A concepção e projecto de processos químicos conduzem na maior parte dos casos a problemas de optimização que envolvem variáveis discretas (y), que reflectem a escolha do equipamento e da topologia e variáveis contínuas (x), constituindo um problema misto inteiro linear (MILP) ou misto inteiro não linear (MINLP).

As equações que descrevem o equipamento, suas ligações (h) e restrições (g) são incorporadas num problema de optimização cuja função objectivo (Z) pode ser, por exemplo, a minimização de custos, a maximização do valor actualizado líquido, etc., podendo ser representado da seguinte forma:

$$\min: Z = f(x, y) \quad (2.1)$$

$$\text{s.a. } h(x, y) = 0 \quad (2.2)$$

$$g(x, y) \leq 0 \quad (2.3)$$

$$x \in X \quad y = (0 \vee 1)$$

Na estratégia proposta por Yeomans e Grossmann (1999) a optimização é realizada de uma só vez. Esta abordagem, que usa a programação matemática, requer a utilização de uma hiperestrutura, que inclui uma representação dos elementos estruturais e suas ligações, a partir da qual cada configuração é construída. O conjunto das diferentes configurações, definido por uma topologia única, constitui a hiperestrutura, que por sua vez caracteriza o problema MINLP. O modelo GDP (*Generalized Disjunctive Programming*) e a metodologia apresentada por aqueles autores enquadra-se nesta abordagem.

A maior parte dos trabalhos referidos na bibliografia que utilizam a programação matemática para a síntese de processos dizem respeito ao desenvolvimento de modelos *ad hoc* para problemas específicos. Por exemplo, Andreovich e Westerberg, (1985) propuseram modelos para seleccionar sequências de destilação.

Relativamente a técnicas matemáticas de modelização de hiperestruturas podem-se referir os trabalhos desenvolvidos por Kocis e Grossmann (1989) que propuseram uma estratégia de decomposição do modelo MINLP, em que o diagrama processual é dividido em unidades processuais e nodos de interligação e onde os subproblemas NLP (programação não linear) resultam da escolha das variáveis binárias e envolvem a optimização das variáveis contínuas. O algoritmo proposto AO/ER (*outer approximation/equality-relaxation*) resolve uma sequência alternada de problemas NLP e MILP. A resolução dos problemas NLP permite obter uma aproximação linear para as unidades consideradas e para as não consideradas, permitindo dessa forma a resolução do problema MILP seguinte. O problema MILP acumula as diferentes aproximações lineares das iterações anteriores de forma a conseguir uma melhor aproximação ao problema MINLP original. Outros métodos que permitem resolver o problema MINLP incluem a decomposição generalizada de Benders (Geoffrion, 1972), que utiliza um procedimento semelhante ao anterior diferindo somente na definição do problema MILP, e o método de bifurcação e limite (Land e Doig, 1960). No entanto, estes métodos para garantirem a obtenção do óptimo global assumem que existe convexidade o que não está garantido nos problemas deste tipo, o que motivou aliás o desenvolvimento do algoritmo de relaxação das igualdades de Kocis e Grossmann (1987) e da estratégia de modelação e decomposição dos mesmos autores, Kocis e Grossmann (1989) já referida anteriormente. Bagajewicz e Manousiouthakis (1992) apresentaram uma representação do espaço dos “estados” em analogia com os

sistemas dinâmicos, em que o diagrama processual é decomposto num bloco para distribuição da rede (mistura e divisão) e blocos para diferentes operadores (operações), nos quais as equações para as operações dos equipamentos são incluídas. Os operadores processuais são resolvidos, geralmente, por modelos de análise de ponto crítico (*pinch*) para redes de transferência de massa e calor. Papalexandri e Pistikopoulos (1996) apresentaram uma estratégia em que o diagrama processual é dividido em dois tipos de blocos: blocos de transferência de massa e calor e blocos dedicados à transferência de calor. Destilação, reacção, absorção e outras operações unitárias são então representadas por estes blocos. Segundo Yeomans e Grossmann (1999), Smith (1996) introduziu o operador de estado da rede onde considera a conectividade total entre o equipamento potencial num diagrama para o qual não existem operações pré-definidas. Esta estratégia é dificultada por problemas de convergência devido às não convexidades introduzidas pelas equações de interligação.

Contudo ainda que as dificuldades matemáticas possam ser resolvidas (como por exemplo os problemas de convexidade), a programação matemática requer a postulação de uma hiperestrutura, o que conduz a um problema inicial que é a definição do espaço de procura, tendo em atenção que para que o óptimo global seja encontrado é necessário que ele tenha sido incluído na hiperestrutura.

O objectivo da concepção e optimização de processos é encontrar a melhor configuração e respectivos valores das variáveis a ela associados para conseguir produzir um determinado produto. O espaço de procura de alternativas é por vezes desconhecido para além de não se saber com toda a certeza quais os objectivos a atingir e de que forma esses objectivos afectam a solução encontrada. Esses objectivos podem envolver a rentabilidade, preocupações ambientais, segurança, flexibilidade, controlabilidade entre outros, podendo no futuro incluir também preocupações sociais. Torna-se, portanto, necessário converter este problema num problema que se possa resolver, descobrindo como gerar configurações e verificar se satisfazem os objectivos.

Para tentar resolver estas dificuldades a concepção de processos químicos tem envolvido na sua génese um procedimento hierárquico que evita também o problema de lidar com um número elevadíssimo de possibilidades, isto é, de alternativas (Siirola et al., 1971; Douglas, 1988; Linnhoff et al., 1994; Daichenndt e Grossmann, 1997).

Só desta forma se conseguiu que o problema fosse tratável, baseando-se essa hierarquização na tomada de decisões em níveis superiores de abstracção, eliminando-se dessa forma grandes porções do espaço de procura prosseguindo depois para maiores níveis de detalhe. As decisões tomadas a um nível superior de abstracção, em que a informação disponível é menor, poderão ser mais significativas para os objectivos a atingir que as decisões tomadas a um nível inferior. Para além disso existem interacções entre os diferentes níveis pelo que estas devem ser tidas em consideração, ainda que isso implique em alguns casos um retorno aos níveis superiores de abstracção para uma reavaliação das decisões tomadas.

Os métodos sistemáticos de configurações enquadram-se numa estratégia de optimização sequencial hierárquica, isto é, decompõem o problema num conjunto de subproblemas, normalmente de grau crescente em pormenor com a vantagem de evitarem a necessidade de resolução de um problema de grande dimensão e de elevada dificuldade, geralmente um MINLP, através da resolução de problemas mais simples, embora sem a certeza de obter o óptimo global. Nesta área são de referir os trabalhos de:

- Siirola et al. (1971) que propôs a seguinte abordagem: reacção, alocação das espécies químicas, separação (selecção dos métodos de separação), sequência de separação e integração energética; a respectiva implementação computacional é o AIDES;

- Douglas (1988) que propôs a seguinte abordagem: descontínuo versus contínuo, estrutura entrada-saída, estrutura de recirculação, estrutura dos sistemas de separação e rede de transferência de energia; a respectiva implementação originou o denominado PIP. Esta metodologia utiliza heurísticas, procedimentos simples e avaliação físico-química para o desenvolvimento de um caso base. De referir que este método incorporou mais tarde preocupações ambientais (Douglas, 1992) no processo de concepção;
- Daichenndt e Grossmann (1997) desenvolveram estratégias de optimização, permitindo o estabelecimento de limites para efectuar as decisões para o método hierárquico de Douglas (1988); a ideia principal é a resolução do diagrama processual completo em cada nível de decomposição, utilizando modelos agregados e efectuando procura multinível em árvore.

São ainda de referir os seguintes programas de geração de configurações, também baseados numa abordagem hierárquica/heurística: PROSYN (<http://www.process-design-center.com>) e ICAS (<http://www.capec.kt.dtu.dk/>).

Por vezes a definição do espaço de procura é realizada de forma implícita considerando inicialmente um caso base, a partir do qual são geradas outras configurações. É uma técnica frequentemente usada numa área relativamente próxima da síntese de processos, a reconversão (*retrofit*) de unidades. Um exemplo de aplicação desta técnica é o trabalho desenvolvido por Uerdingen et al. (2003) que analisa o caso base, gera alternativas, utilizando grafos e avalia economicamente essas alternativas.

Uma outra forma de gerar implicitamente o espaço de procura, considerando um caso base, são os métodos baseados em princípios termodinâmicos, constituindo a designada integração de processos, muitas vezes associada à integração energética, que constituiu o ponto de partida e que utiliza o chamado ponto crítico.

A integração de processos utiliza, portanto, como fundamento científico o conceito de ponto crítico e contempla não só a integração energética mas também outras áreas, entre as quais a minimização do consumo e reutilização de água, redução de emissões líquidas e gasosas, etc. O estudo da Integração de Processos e a sua aplicação têm sido feitos através do desenvolvimento de várias metodologias que abrangem diferentes áreas, nomeadamente termodinâmica, heurística e optimização (Relvas et al., 2002).

Um procedimento hierárquico/heurístico que englobe conhecimentos de química (na escolha da reacção podem ser consideradas preocupações ambientais, nomeadamente por aplicação de conceitos da química verde, como por exemplo a substituição do catalisador por outro menos perigoso), de engenharia, heurísticas entre outros, constitui um método adequado para a construção da hiperestrutura, de particular importância por permitir uma representação efectiva e estruturada do espaço de procura. A hiperestrutura poderá ser gerada através da consideração de todas ou algumas das decisões alternativas mais promissoras em cada etapa do processo de geração. No entanto, caso o número de alternativas existentes na hiperestrutura seja considerado demasiado elevado poderão ser novamente aplicadas regras heurísticas para reduzir significativamente esse número. Torna-se, no entanto, importante a existência de um método adequado que permita uma avaliação multi-dimensional (ex.: de qualidade como por exemplo, a pureza do produto produzido, económica, ambiental, de segurança, de flexibilidade, etc.) das configurações incorporadas na hiperestrutura de forma a seleccionar as configurações mais promissoras, podendo o desenho estatístico ser esse método. Com a aplicação do desenho estatístico poder-se-á resolver, portanto, o problema inteiro. As configurações seleccionadas constituem problemas LP ou NLP que poderão seguidamente ser alvo de optimização.

Na optimização poderão ser consideradas funções objectivo económicas e/ou ambientais o que poderá levar à consideração da optimização multi-objectivo como uma estratégia adequada para a procura do óptimo.

O desenho estatístico é um procedimento eficiente para planear experiências, obtendo-se informação que pode ser analisada para retirar conclusões em função dos objectivos estabelecidos. Pode ser aplicado no desenvolvimento do processo, nomeadamente na melhoria do seu desempenho, na redução da variabilidade e na obtenção de maior conformidade com as características de qualidade estabelecidas, na redução do tempo de desenvolvimento e na redução dos custos totais. O desenho estatístico pode ainda ser aplicado em actividades de projecto de engenharia, nomeadamente na concepção de novos produtos e melhoria de produtos já existentes, através da avaliação e comparação de configurações básicas, avaliação de alternativas de materiais e selecção e determinação dos parâmetros chave de projecto que afectam o desempenho do produto (Montgomery, 2001).

A escolha do tipo de planos de desenho estatístico depende, portanto, dos objectivos que se pretendem atingir:

- para comparação de alternativas básicas usam-se planos completamente aleatórios e planos de blocos aleatórios (quadrados latino, greco-latino e hiper-greco-latino), aplicados quando existem factores, que não sendo principais afectam a resposta;
- para determinar quais os factores relevantes para o processo em causa (crivagem) usam-se planos completos, fraccionados ou de Plackett-Burman;
- para determinar as condições óptimas de operação (superfície de resposta) usam-se planos centrados e compostos ou de Box-Behnken. (Montgomery, 2001)

Existem ainda as matrizes ortogonais de Taguchi que permitem, através da análise da razão sinal/ruído, garantir que o processo é robusto em relação aos factores não controláveis (Roy, 2001).

Na geração e avaliação das alternativas muitas das vezes são apenas considerados critérios económicos, mas as indústrias químicas enfrentam agora desafios, relacionados com exigências, muitas das vezes, regulamentadas para produzir produtos mais benignos e utilizar processos mais limpos. Os aspectos ambientais estão no centro desta questão e são alvo de normas cada vez mais restritivas, que reflectem a preocupação da sociedade face a este assunto. Tradicionalmente a redução de emissões tem sido efectuada adicionando tecnologia de controlo de forma a garantir que o processo consiga cumprir os requisitos legais, nomeadamente os limites de descarga. Uma consequência desta estratégia tem sido a alocação de grandes investimentos para a instalação e operação de equipamento de controlo. Existe, portanto, uma necessidade de melhorar não só o desempenho económico mas também o desempenho ambiental, entre outros (poder-se-ia considerar também o desempenho a nível da segurança, por exemplo). A consideração dos aspectos ambientais na concepção de processo é primordial, uma vez que existem mais oportunidades de melhoria ambiental e envolvem geralmente custos menores. Estas preocupações ambientais podem ser levadas em conta logo na especificação do problema, ou seja, na geração de configurações e/ou na avaliação das configurações geradas, usando, portanto, não só indicadores económicos mas também indicadores ambientais. As alternativas serão assim ordenadas considerando o seu nível geral de desempenho e não somente o seu desempenho económico. Contudo, a definição dos indicadores de desempenho ambiental é uma tarefa difícil.

De seguida são referidos alguns trabalhos que consideram os aspectos ambientais na geração de alternativas. Os trabalhos de Dantus e High (1996) , Mallick et al. (1996), Douglas (1992) e Rossiter et al. (1993) têm em vista a prevenção da poluição e

utilizam a metodologia do caso base (os dois primeiros autores) e procedimento hierárquico (os dois últimos autores). Na concepção segundo o método de análise do ponto crítico pode referir-se, em redes de transferência de massa, o trabalho de El-Halwagi e Hamad (1996) e em problemas de minimização de águas residuais o trabalho de Wang e Smith (1994). Na programação matemática existe um grande número de formulações matemáticas para resolver o problema de concepção das redes de reciclagem/reutilização para redução de resíduos, podendo referir-se os trabalhos de El-Halwagi e Manousiouthakis (1990) e Srinivas e El-Halwagi (1994).

A questão central na avaliação de um processo com preocupações ambientais é como avaliar as diferentes alternativas do ponto de vista do seu desempenho ambiental. Na avaliação económica existem indicadores, tal como o valor actualizado líquido, que é comumente aceite e para o qual existe informação ou é possível obtê-la facilmente. Na avaliação ambiental existem algumas dificuldades em obter informação, particularmente para os problemas ambientais específicos, isto é, para os que estão relacionados com a localização para além de a importância atribuída a cada impacto variar de pessoa para pessoa. Os indicadores ambientais desenvolvidos segundo Cano-Ruiz e McRae (1998) têm-se baseado, nomeadamente:

- Na minimização da emissão dos poluentes mais preocupantes;
- Na minimização da massa de resíduos gerados;
- Na minimização da contribuição para problemas específicos (ex.: depleção da camada de ozono);
- Na minimização de um indicador global dos impactos ambientais.

De referir, que têm sido desenvolvidos esforços para o desenvolvimento de um indicador global dos impactos ambientais para utilização na avaliação dos diagramas processuais de que são exemplo os trabalhos de Elliott et al. (1996), Mallick et al. (1996) e Cabezas et al. (1997), podendo ainda mencionar-se as aplicações do algoritmo WAR nos trabalhos de Cardona et al. (2004) e Smith et al. (2004). Existem ainda os sistemas Eco-Indicator 95 e EPS que também permitem o cálculo de um índice global. Contudo é necessário ter em atenção os juízos de valor considerados na elaboração destes indicadores globais.

A consideração de indicadores que permitam avaliar o desempenho não só económico mas também ambiental, quer separadamente quer conjuntamente, considerando neste caso indicadores mistos (ex.: valor actualizado líquido com incorporação dos custos ambientais) reveste-se de particular importância por permitir uma avaliação multidimensional das configurações.

Seguindo uma abordagem sequencial, pode conceber-se um algoritmo que resolva primeiro e de forma aproximada o subproblema associado às variáveis discretas, através da representação da hiperestrutura do sistema e aplicação de heurísticas, construindo dessa forma um grupo de configurações base a que será aplicado o desenho estatístico, para seleccionar as configurações capazes de potencialmente enquadrarem o óptimo.

Objectivo do capítulo:

- desenvolvimento de um algoritmo para resolução aproximada do problema inteiro usando a hiperestrutura do sistema, heurísticas e desenho estatístico incluindo selecção de configurações por aplicação de critérios económicos, ambientais ou mistos, enquadrado numa metodologia sequencial de optimização de processos;
- validação por aplicação a um caso de estudo.

2 Metodologia/algoritmo

A síntese de processos procura encontrar o melhor diagrama processual para produzir um produto a partir de matérias-primas, o que pressupõe a identificação de operações básicas, como reacção, separação e necessidades energéticas. O maior problema reside no facto de haver um número enorme de alternativas o que geralmente o torna extraordinariamente grande, muitas vezes do tipo combinatório.

O algoritmo do tipo sequencial que se propõe visa a resolução aproximada do problema inteiro, no sentido da obtenção de um pequeno número de alternativas interessantes, isto é, de transformar o MILP ou MILNP inicial num conjunto pelo menos enumerável de LPs ou NLPs. A cada um destes pode então ser aplicado um algoritmo de optimização por forma a determinar os valores das variáveis de projecto contínuas e a alternativa que proporcionam melhor valor para a função objectivo.

Esta metodologia propõe como primeira etapa um procedimento do tipo hierárquico/heurístico (Douglas, 1988; Smith, 1995) escolhendo em primeiro lugar a(s) reacção(ões) a considerar, sendo a partir daí analisados os débitos resultantes, as necessidades energéticas, as separações a efectuar, a necessidade de recirculações, etc. o que permitirá efectuar a etapa seguinte, a definição do espaço de procura, isto é, a construção da hiperestrutura. Esta etapa pode envolver também a recolha de informação sobre processos já existentes, o que permite verificar que tipo de soluções foram encontradas e quais os problemas existentes, podendo a partir daí serem propostas alternativas diferentes que possam melhorar o desempenho económico, ambiental, de operabilidade, de segurança, etc. A construção e a representação da hiperestrutura pode ser efectuada usando uma das metodologias apresentadas na bibliografia (Yeomans e Grossman, 1999) Esta hiperestrutura pode gerar um número considerável de configurações. Contudo, a utilização da hiperestrutura pressupõe que é possível ver as topologias possíveis o que significa que o seu número não poderá ser extraordinariamente elevado, isto é, situar-se-á na ordem das dezenas. Segue-se uma etapa de refinamento do espaço de procura, mediante a aplicação de regras heurísticas existentes na bibliografia (Douglas, 1988) e/ou decorrentes de conhecimentos de engenharia, com o objectivo de eliminar as configurações, que sob o aspecto técnico sejam inviáveis e/ou de difícil execução e/ou cujos resultados possam ser pouco interessantes. O conjunto de configurações resultante deverá ser enumerável e a definição desse número pode depender de várias condicionantes, como por exemplo o tempo disponível. Numa quarta etapa este conjunto de configurações base é depois alargado, para considerar alternativas que contemplem outros detalhes como p.ex. a integração energética. Tal como referido anteriormente é necessário tomar decisões nas várias etapas do processo de concepção, baseadas em níveis crescentes de informação, pelo que a informação tornada disponível numa etapa subsequente pode levar a uma reavaliação das decisões tomadas num nível superior de abstracção, pelo o processo de concepção é um processo dinâmico e iterativo. Este facto implica, por exemplo, que uma dada topologia eliminada por uma heurística pode vir a ser reintegrada após a incorporação da etapa da integração energética. A Figura 2.1 sintetiza o algoritmo atrás descrito.

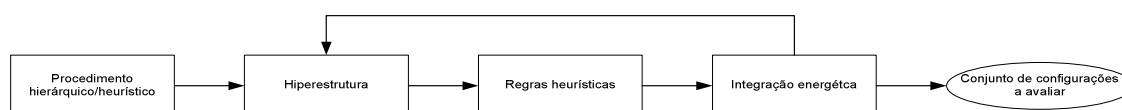


Figura 2.1 Algoritmo para resolução do problema de concepção e optimização de processos

Segue-se a aplicação do desenho estatístico com o objectivo de seleccionar, de entre as configurações que passaram as etapas anteriores, as que se encontram na zona de interesse, isto é, que satisfazem um ou mais requisitos (ex.: característica de qualidade, critério económico, critério ambiental). Para atingir este objectivo é necessário estabelecer uma característica de qualidade (menor, igual ou maior), como por exemplo, as restrições de âmbito operacional, tais como a pureza ou o caudal de uma corrente, que permitirão a selecção das configurações que não violam essas restrições e que, portanto, provavelmente enquadrarão o óptimo. Mediante a análise de cada configuração e considerando as diferentes operações necessárias para cada uma, são escolhidas as variáveis que poderão influenciar a resposta. Esta etapa para além de permitir verificar em que configurações a característica de qualidade foi satisfeita, poderá também determinar quais as variáveis significativas para a configuração em estudo, através da análise da variância (ANOVA).

Porém, após esta etapa, o número de configurações pode ainda ser significativo e/ou pode pretender-se reduzir ainda mais este número. Recorrendo mais uma vez ao desenho estatístico podem utilizar-se os referidos critérios, o valor actualizado líquido (que poderá incluir ou não os custos ambientais) ou o impacto ambiental potencial global, para seleccionar configurações por seriação. A partir do conjunto das respostas para cada configuração, é possível calcular o valor médio das respostas e, conjuntamente com a análise da distribuição das respostas, usar este valor para hierarquizar as configurações de acordo com o critério escolhido. Usando estes critérios poder-se-á chegar a um conjunto mais reduzido de configurações. A última etapa consiste na resolução de um problema de optimização linear ou não linear para cada uma das configurações pré – seleccionadas (Figura 2. 2). Por comparação dos vários sub-óptimos é então possível escolher o óptimo.

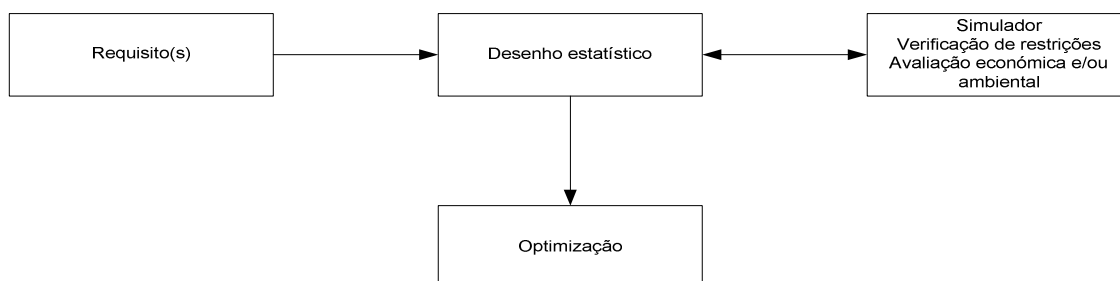


Figura 2. 2 Aplicação do desenho estatístico na resolução do problema de concepção e optimização de processos

2.1 Hiperestrutura e regras heurísticas

Para construir a hiperestrutura é necessário usar um procedimento hierárquico/heurístico definindo os componentes principais do processo. A primeira decisão a tomar é definir o que se pretende efectuar e identificar as operações a realizar. No caso da produção de um produto através de reacções químicas devem ser identificadas as operações principais (ex.: reacção, separação, recirculação, etc.), começando por escolher as matérias-primas e a reacção. A escolha efectuada pode ter em conta vários factores, entre os quais factores ambientais. A escolha da reacção, por sua vez, implica determinadas condições de operação (ex.: pressão, temperatura) o que condiciona, por exemplo, o tipo de separação a efectuar e pode obrigar à satisfação de determinadas necessidades energéticas (se a reacção for realizada a uma temperatura elevada isso pode obrigar ao aquecimento da alimentação ao

reactor). Existem basicamente dois tipos de operações estruturais, as operações facultativas (ex.: uma separação G/G) que podem ser seleccionadas ou rejeitadas (sujeitas a uma decisão discreta) e as fixas (ex.: reacção) que existirão sempre. As possíveis combinações das operações fixas e facultativas representam as diferentes configurações na hiperestrutura. A inclusão nesta de um número elevado de configurações aumenta a probabilidade de conter o óptimo absoluto, mas pode aumentar substancialmente a dimensão do problema, que se pode tornar difícil ou mesmo impossível de resolver. Através da experiência e de regras heurísticas, pode-se reduzir em muitos casos a complexidade do problema de optimização (Kravanja et al., 1998). A utilização da hiperestrutura permite, portanto, caracterizar o problema MINLP e ver claramente as diferentes alternativas processuais, consistindo numa técnica estruturada de representação de configurações.

Yeomans e Grossmann (1999) caracterizaram dois tipos principais de representações da hiperestrutura, a STN, rede operação/estado (*State Task Network*), que foi introduzida por Kondili et al. (1993) para problemas de escalonamento (*scheduling*) e a SEN, rede equipamento/estado (*State Equipment Network*) desenvolvida inicialmente por Smith (1996). A representação STN começa por identificar os estados (ex.: estado físico, pressão, temperatura, etc. de uma corrente) e operações (ex.: destilação, reacção, etc.) e deixa a atribuição de equipamento para uma segunda etapa. Algumas das operações, tal como já foi dito, são facultativas e outras têm de estar presentes em todas as configurações. As operações envolvem transferência de massa, transferência de calor, alterações de temperatura, pressão e mudanças de fase. Uma ou mais destas transformações podem ser efectuadas numa operação se for tecnicamente viável. Uma vez identificados os estados e operações é necessário determinar que tipo de equipamento pode efectuar cada operação e depois atribuí-lo à operação correspondente. Existem duas possibilidades para atingir este objectivo:

- uma operação/um equipamento (OTOE): cada operação é atribuída a uma única peça de equipamento; se uma operação puder ser executada por dois tipos de equipamento diferentes, as operações terão de ser redefinidas para distinguir uma da outra;
- operação/equipamento variável (VTE): neste caso um conjunto de peças de equipamento que pode executar todas as operações no diagrama processual é identificado primeiro; a atribuição do equipamento às operações é considerada como parte do modelo de optimização; consequentemente um único equipamento pode ser atribuído a diferentes operações e uma única operação pode ser atribuída a diferentes peças de equipamento.

Na representação SEN são indicados os estados e as peças de equipamento que poderão ser utilizadas. Uma vez especificados estes elementos, as diferentes operações (uma ou mais) que cada peça de equipamento pode efectuar devem ser determinadas. A construção SEN conduz a um problema menor para a selecção de equipamento, contudo existe uma complexidade combinatória implícita nas possíveis ligações entre equipamentos.

Se em cada equipamento da representação SEN só se puder realizar uma única operação é possível obter a mesma representação que com o sistema STN/OTOE desde que as operações que aparecem em SEN sejam as mesmas da STN. A representação SEN é especialmente útil em problemas de alterações processuais em instalações já existentes, uma vez que mostra explicitamente o equipamento disponível. Como neste caso se estuda a síntese de processos escolheu-se a representação STN para representar a hiperestrutura.

2.2 Escolha e descrição sucinta da ferramenta de desenho estatístico

No desenho estatístico uma ou mais variáveis são variadas de forma a observar o efeito dessas variações numa ou mais variáveis de resposta. É um procedimento eficiente para planejar experiências de forma a que os resultados obtidos tenham significado estatístico e, portanto, possam representar a população. O desenho estatístico começa pelo estabelecimento dos objectivos e selecção das variáveis a variar. A escolha adequada dos planos experimentais permite maximizar a quantidade de informação que pode ser obtida para um determinado esforço experimental. O desenho estatístico pode ser aplicado a muitas situações, nomeadamente na escolha de alternativas simples, na selecção das variáveis relevantes para o processo em causa, na modelação da superfície de resposta (que visa a optimização e inclui objectivos como atingir uma meta, reduzir a variabilidade, maximizar ou minimizar uma resposta, tornar um processo robusto) e na modelação por regressão.

Para efectuar estudos comparativos de dimensão relativamente pequena usam-se planos completamente aleatórios, adequados para uma comparação inicial. Consideram um factor principal e comparam os valores da resposta para diferentes valores do factor principal. A comparação entre equipamentos é frequentemente efectuada usando este tipo de planos.

No entanto, para além do factor principal que interessa estudar existem também factores (variáveis) secundários que embora não sejam de interesse principal afectam a resposta. Quando se comparam diferentes procedimentos, por exemplo, existem variáveis que afectam a resposta, tais como o experimentador que executa o tratamento, a temperatura ambiente, etc. A constituição de blocos é uma técnica importante no controlo das variáveis secundárias e é usada para reduzir ou eliminar a contribuição dessas variáveis para o erro experimental. O conceito básico é criar blocos homogêneos onde as variáveis secundárias são mantidas constantes e a variável principal varia. Para esta situação usam-se planos de blocos aleatórios, nomeadamente quadrados latinos para duas variáveis secundárias, greco-latinos para três variáveis secundárias e hiper-greco-latinos para quatro variáveis secundárias. Estes planos consideram, portanto, um âmbito mais alargado que os planos completamente aleatórios e são adequados para uma confirmação da comparação inicial.

Os planos completos, fraccionados e de Plackett-Burman servem para identificar as variáveis importantes e consideram todas as variáveis principais que previsivelmente afectam a resposta. Se o número de variáveis a considerar é elevado, isto é, superior a cinco, usam-se os planos fraccionados e de Plackett-Burman pois a carga experimental associada aos planos completos torna-se muito elevada. O objectivo e a análise efectuada são semelhantes para estes tipos de planos.

A modelação da superfície de resposta consiste na aplicação de técnicas matemáticas e estatísticas de forma a modelar e analisar os problemas em que a resposta é influenciada por várias variáveis, sendo o objectivo principal a optimização da resposta. Os planos utilizados, centrados e de Box-Behnken, conseguem através da construção do modelo obter a superfície de resposta e são, por isso, adequados para melhorar o desempenho processual, nomeadamente através da descoberta de melhores pontos operacionais ou até do óptimo operacional, da resolução de problemas processuais incluindo pontos fracos, etc.

Existem ainda as matrizes ortogonais de Taguchi que permitem garantir que o processo é robusto em relação às variáveis não controláveis. Esta abordagem classifica as variáveis em controláveis e não controláveis (ruído) e procura encontrar os valores para as variáveis controláveis que minimizam a variabilidade transmitida à resposta pelas variáveis não controláveis. Considera uma matriz interior para as variáveis controláveis e uma matriz exterior para as variáveis não controláveis. Para cada ensaio da matriz interior, que reflecte as condições para as variáveis

controláveis, são calculados dois indicadores, nomeadamente a média dos resultados de todas as experiências na matriz exterior e um indicador que resume a informação acerca da média e da variância, denominado razão sinal/ruído. A razão sinal/ruído é definida de forma a que um valor máximo dessa razão minimize a variabilidade transmitida pelas variáveis ruído. É então efectuada uma análise para determinar quais os valores das variáveis controláveis que obtêm uma média mais próxima do objectivo estabelecido e um valor máximo para a razão sinal/ruído.

No caso presente o desenho estatístico vai ser aplicado com o objectivo de seleccionar as configurações capazes de satisfazer uma característica de qualidade, um critério económico e/ou ambiental. A cada configuração estão associadas variáveis que interessa considerar na avaliação do seu desempenho, pelo que são variáveis principais do processo, usando a terminologia do desenho estatístico. Face a este facto os planos completamente aleatórios e planos de blocos aleatórios revelam-se inadequados pois consideram apenas uma variável principal, o que neste caso corresponderia a um vector de variáveis que representaria a topologia e uma ou mais variáveis secundárias. Os planos centrados e de Box-Behnken também não são adequados pois o seu objectivo é construir um modelo e otimizar a resposta. Uma abordagem usando as matrizes ortogonais de Taguchi permite considerar todas as variáveis de interesse pelo que é uma alternativa viável para a prossecução dos objectivos. Para além disso permite considerar as variáveis não controláveis (ex.: a temperatura da água de arrefecimento) o que é vantajoso. Contudo a aplicação destas matrizes pode revelar-se ineficaz se existirem insucessos (simulações para as quais não se consegue convergência no simulador) o que levaria à existência de ensaios para os quais não se teria resposta, inviabilizando dessa forma a retirada de conclusões pela análise da razão sinal/ruído. Os planos completos, fraccionados e os planos de Plackett-Burman revelam-se também adequados por permitirem considerar todas as variáveis de interesse com a vantagem, relativamente ao método de Taguchi, de permitirem uma comparação directa da resposta com a característica de qualidade, critério económico e/ou ambiental estabelecido.

No Apêndice A.1 são expostos mais alguns detalhes das técnicas de desenho estatístico.

2.2.1 Aplicação do desenho estatístico

O desenho estatístico envolve em primeiro lugar um requisito, devendo ser estabelecida uma característica de qualidade a ser atingida. A aplicação do desenho estatístico permitirá, portanto, determinar quais as configurações capazes de satisfazer a característica de qualidade estabelecida. No entanto, se no final o número de configurações escolhidas for elevado é ainda possível utilizar os planos de desenho estatístico seleccionados e aplicar critérios económicos, ambientais ou mistos para reduzir por ordenação o número de configurações a ser alvo da optimização. A consideração da avaliação ambiental, quer *per se* ou integrada num indicador económico (critério misto), a par da tradicional avaliação económica contribuirá para uma maior sustentabilidade dos processos químicos.

2.2.1.1 Características de qualidade

A realização dos ensaios (simulações) de acordo com os planos propostos permite obter as respostas (ex.: pureza de uma determinada corrente) e verificar quais as configurações em que a característica de qualidade é atingida.

2.2.1.2 Avaliação económica

Para a avaliação económica propõe-se como indicador o Valor Actualizado Líquido, VAL, uma vez que é um método aconselhado para avaliar a rendibilidade de um projecto, sendo dos que têm em consideração o valor temporal do dinheiro. Dentro desta categoria é o mais utilizado pelas empresas (Peters et al., 2003).

$$VAL1 = \sum_{l=1}^n \left[(V_l - C_l - d) \times \left(1 - \frac{\Phi}{100} \right) + d \right] \times \frac{1}{\left(1 + \frac{i}{100} \right)^l} - I \quad (2.4)$$

sendo:

V	receitas (€/ano)
C	custo anual total (€/ano)
d	depreciação linear anual (€/ano)
Φ	taxa de impostos
i	taxa de actualização anual do dinheiro (constante)
I	investimento total (€), realizado integralmente no ano zero
n	número de anos considerado na avaliação

2.2.1.3 Avaliação ambiental

A avaliação ambiental baseada na massa emitida pelo processo não é suficientemente esclarecedora, pois não leva em conta as características inerentes a cada substância emitida e que conduz, portanto, a diferentes impactos ambientais potenciais. A avaliação do desempenho ambiental baseada em indicadores parcelares (ex.: minimização dos poluentes mais preocupantes ou minimização da contribuição para problemas específicos) é demasiado restritiva e não permite abordar o carácter multifacetado dos aspectos ambientais. A consideração dos diferentes impactos ambientais potenciais revela-se, portanto, a forma mais adequada de avaliar o desempenho ambiental. Existem várias metodologias para efectuar a avaliação dos impactos ambientais potenciais. Estas metodologias implicam a fixação do âmbito (espacial e temporal) e a escolha de um conjunto de categorias de impactos potenciais, a respectiva caracterização, normalização e o estabelecimento de pesos caso se pretenda um indicador agregado. A avaliação ambiental a efectuar deve ser compatível com o nível de informação disponível. Um indicador baseado na análise de ciclo de vida (*cradle to grave*) apesar de permitir uma avaliação muito exaustiva, revela-se difícil de calcular porque a informação disponível na concepção de processos é limitada e incerta. Parece, portanto mais lógico considerar que o âmbito da avaliação ambiental deverá restringir-se ao processo propriamente dito, incluindo os impactos resultantes das necessidades energéticas (*gate to gate*). Como base temporal pode considerar-se um ano de operação, embora no caso dos indicadores mistos a avaliação ambiental se reporte ao número de anos considerado para a avaliação do projecto.

As metodologias apresentadas de seguida foram escolhidas porque preconizam o cálculo de um indicador global ou são compatíveis com o seu cálculo (situação útil não

só na comparação de alternativas mas também na optimização pois permite o fácil estabelecimento de uma função objectivo ambiental), permitem a consideração multifacetada dos aspectos ambientais e representam um compromisso aceitável entre objectividade e simplicidade.

- Metodologia WAR (*Waste Reduction*) desenvolvida por Cabezas et al. (1999) e Young e Cabezas (1999), baseada inicialmente num estudo de Heijungs et al. (1992), considera oito categorias de impactos: aquecimento global, depleção da camada estratosférica de ozono, acidificação, formação fotoquímica de compostos, toxicidade humana por ingestão, toxicidade humana por inalação ou exposição cutânea, toxicidade aquática e toxicidade terrestre.

O impacto ambiental potencial global, IAPG, pode ser calculado por:

$$IAPG = \sum_j M_j \sum_k z_{kj} \Psi_k \quad (2.5)$$

j=1, número de correntes
k=1, número de compostos

em que:

M_j	caudal mássico da corrente j (kg/ano)
z_{kj}	fracção mássica do composto k na corrente j
Ψ_k	impacto ambiental potencial total do composto k

$$\text{e } \Psi_k = \sum_i \alpha_i \Psi_{ki}^s \quad (2.6)$$

i=1, número de categorias de impacto

sendo

α_i	peso relativo para a categoria de impacto i
Ψ_{ki}^s	impacto ambiental potencial específico do composto k para a categoria de impacto i

O impacto ambiental potencial específico do composto k é obtido dividindo o valor para o composto k pela média dos valores de todos os compostos na categoria i.

- Metodologia IChemE (IChemE, Janeiro/2007) considera os seguintes compartimentos ambientais: atmosfera (categorias de impactos: acidificação, aquecimento global, saúde humana - cancerígenos, depleção da camada de ozono e formação fotoquímica de compostos), água (categorias de impactos: acidificação aquática, carência de oxigénio, ecotoxicidade e eutrofização) e solo (categorias de impactos: deposição de resíduos sólidos perigosos).

O método propõe o cálculo dos impactos ambientais para cada categoria:

$$IA_i = \sum_k Mc_k F_{ki} \quad (2.7)$$

i=1, número de categorias de impacto

k=1, número de compostos

em que :

IA_i impacto ambiental para a categoria i (te do composto de referência/ano)

Mc_k caudal mássico do composto k (t/ano)

F_{ki} factor do composto k para a categoria de impacto i (te do composto de referência/t do composto k)

$$e \quad Mc_k = \sum_j M_j z_{kj} \quad (2.8)$$

j=1, número de correntes

sendo

M_j caudal mássico da corrente j (t/ano)

z_{kj} fracção mássica do composto k na corrente j

O impacto ambiental potencial global, IAPG, pode ser calculado após normalização e o estabelecimento de pesos. A divisão do impacto ambiental da categoria i pelo indicador de referência para a referida categoria origina o impacto normalizado para a categoria i. Para obter o impacto ambiental potencial global é necessário efectuar uma soma ponderada dos impactos normalizados das várias categorias, sendo portanto necessário estabelecer pesos (que reflectem a importância atribuída a cada categoria, sendo muitas das vezes estabelecida por um painel de pessoas).

- Metodologia EPS: o sistema EPS - *Environmental Priority Strategies* (Steen, 1999) foi desenvolvido para responder a requisitos de desenvolvimento do produto, em que as preocupações ambientais são mais um item. Foi inicialmente proposto pela Volvo, pelo Instituto Ambiental Sueco e pela Associação Industrial Sueca e tem em conta as normas ISO 14042, existindo um índice para cada elemento (ex.: um composto, como por exemplo, o CO₂ sendo o índice expresso em ELU (*environmental load unit*)/kg ou o transporte sendo o índice expresso em ELU/(t.km) o que permite a determinação da carga ambiental total somando as cargas ambientais parcelares, que se obtêm multiplicando o índice do elemento pelo seu caudal mássico (no caso de um composto ou substância química). Este sistema introduz o conceito de “vontade de pagar” (*willingness to pay* – WTP) para remediar os impactos causados sendo o único indicador (na versão mais simples). Esta abordagem económica traduz uma escolha no sentido de obter um valor facilmente compreendido pelos projectistas e pela sociedade em geral.

O impacto potencial global, IAPG-EPS expresso em ELU /ano, pode ser calculado por:

$$IAPG - EPS = \sum_k Mc_k Ind_k \quad (2.9)$$

k=1, número de compostos

em que

Mc_k caudal mássico do composto k (kg/ano)
 Ind_k índice EPS para o composto k (ELU/kg do elemento k)

$$e \quad Mc_k = \sum_j M_j z_{kj} \quad (2.10)$$

j=1, número de correntes

sendo

M_j caudal mássico da corrente j (kg/ano)
 z_{kj} fracção mássica do composto k na corrente j

O cálculo de outras cargas ambientais, como por exemplo a devida ao transporte podem ser efectuadas de acordo com a bibliografia (Steen, 1999). De referir, que no caso presente não foram considerados os impactos devidos ao transporte pois nesta fase de projecto não se possuem dados suficientes para a consideração dos impactos devidos a esta operação.

Foram utilizados dois métodos para avaliar os impactos ambientais: um semelhante às metodologias desenvolvidas por Douglas e Cabezas e pelo IChemE e o sistema EPS. Nos dois métodos são considerados os impactos ambientais potenciais devido ao processo químico e à geração de energia.

Para implementar o primeiro método é necessário definir quais as categorias de impactos a considerar, o que deve ser efectuado tendo em conta o modelo de Guinée (2002) e também o processo em causa, nomeadamente as emissões resultantes.

No modelo de Guinée (2002) as categorias de impacto ambiental foram escolhidas tendo em conta a lista básica desenvolvida pelo grupo SETAC (*the Society of Environmental Toxicology and Chemistry*) relativo à avaliação de impactos. Trata-se de uma metodologia orientada para os problemas, porque tem por base os problemas ambientais (o chamado ponto intermédio da cadeia causa – efeito) e não os danos (o ponto final desta cadeia). As categorias de impacto escolhidas para este estudo pertencem ao primeiro grupo de categorias de impactos, nomeadamente as categorias de impactos de base e para as quais existe um método de caracterização disponível na bibliografia (Guinée, 2002). As categorias de impactos a considerar são: depleção dos recursos abióticos, impactos da utilização da terra, alterações climáticas (aquecimento global), depleção da camada estratosférica de ozono, toxicidade humana, ecotoxicidade, formação fotoquímica de compostos, acidificação e eutrofização. De referir que enquanto para o aquecimento global, por exemplo, existem factores de impacto internacionalmente aceites, para a toxicidade humana

isso não acontece. Nesta categoria pode ser relevante usar uma caracterização mais direccionada para o processo em causa (ex.: num processo em que sejam emitidas substâncias cancerígenas pode ser mais adequado usar a categoria de impacto do IChemE, saúde humana – cancerígenos).

Dada a importância de se obter um único valor para os impactos ambientais é necessário proceder à normalização, adoptando para isso a estratégia do WAR (Young e Cabezas, 1999), isto é, dividir o valor para cada composto (Guinée ou IChemE consoante a categoria) pelo valor médio determinado a partir do total de compostos considerados para cada categoria. De acordo com a ISO 14042 a normalização consiste em calcular a magnitude de um indicador relativamente a uma informação de referência. Essa informação de referência pode estar associada a uma comunidade (país, continente ou até mundo), a uma pessoa ou outro sistema, para um dado período de tempo. Uma meta a atingir no futuro também pode ser uma informação de referência. Contudo a normalização dentro de cada categoria, usando o valor médio dos valores de todos os compostos dessa categoria, permite uma análise mais independente de referenciais espaciais e temporais o que no caso da concepção e optimização de processos pode ter vantagens, especialmente no caso em que essa informação de referência espacial e temporal possa não existir (problema mais premente nas categorias de impacto regionais ou locais).

Admitindo que não existe um local definido para a implantação da fábrica, considerou-se que o peso das diferentes categorias era igual e, portanto, o peso atribuído a cada categoria é igual a 1. De referir que a análise de sensibilidade, que seria necessário efectuar, pode ser substituída pela aplicação de uma abordagem orientada para o ponto final, como o Eco-indicator 99 ou o sistema EPS (Guinée, 2002).

2.2.1.4 Avaliação mista: económica e ambiental

Como indicador misto usou-se o valor actualizado líquido com incorporação dos custos dos impactos ambientais na rubrica custos de operação. O custo do impacto ambiental potencial global é numericamente igual ao impacto ambiental potencial global calculado segundo a metodologia EPS uma vez que um ELU é aproximadamente igual a um euro.

$$VAL2 = \sum_{l=1}^n \left[(V_l - (C_l + CA_l) - d) \times \left(1 - \frac{\Phi}{100} \right) + d \right] \times \frac{1}{\left(1 + \frac{i}{100} \right)^l} - I \quad (2.11)$$

sendo:

CA custo do impacto ambiental potencial global (€/ano)

3 Caso de estudo

O caso de estudo, a hidrodealquilação não catalítica do tolueno a benzeno, foi escolhido por duas razões: o processo e topologias principais estão bem estudados e existe abundância de dados termodinâmicos e cinéticos. Constitui, pelas razões acima enumeradas, um exemplo adequado para a aplicação da metodologia desenvolvida, para além de permitir a comparação com os resultados obtidos por outros autores (Douglas, 1988).

As reacções de interesse na hidrodealquilação não catalítica do tolueno a benzeno são as seguintes:



As correntes de alimentação são o tolueno e o hidrogénio contendo 3% de metano à pressão de $3,964 \times 10^6$ Pa e à temperatura de 303,2 K, que são as normalmente utilizadas na indústria e referidas por Qiu et al. (2000), Luyben et al. (1999) e por Douglas (1988), pretendendo-se obter um produto (benzeno) de elevada pureza (0,9997).

O Apêndice A.2 detalha este caso de estudo.

3.1 Escolha e descrição do simulador

As simulações foram realizadas usando o simulador disponível na instituição, PRO/II (Simulation Sciences Inc., 1994 - 2005). Para simular os vários planos experimentais foi desenvolvida uma interface simulador / programa que permite a simulação automática do diagrama processual (configuração com os valores atribuídos às diferentes variáveis) e a extracção de dados do relatório gerado através de módulos em VBA (Visual Basic for Applications). Estes dados podem ser resultados ou dados a serem utilizados pelos módulos análise económica ou ambiental, para determinar respectivamente o VAL e o impacto ambiental potencial global, associados àquela configuração e ao conjunto de valores atribuídos às variáveis.

Nas simulações, o modelo de Peng-Robinson foi seleccionado para o cálculo das propriedades termodinâmicas, pois é adequado para as prever para a maior parte dos fluidos constituídos por hidrocarbonetos.

3.2 Hiperestrutura e regras heurísticas

Depois de escolhida a reacção e matérias-primas foi possível definir (usando em alguns casos heurísticas) um conjunto de operações que foram sempre consideradas e que são muito dependentes da reacção escolhida: reacção (de referir que a nível industrial a temperatura de operação é sempre elevada, quer no caso da reacção catalítica quer no caso da reacção não catalítica (European_Commission, Fevereiro 2003)), aquecimento da alimentação do reactor (necessário para se poder atingir uma velocidade de reacção razoável), arrefecimento antes da separação de fases no separador líquido-gás (dada a temperatura de operação do reactor ser elevada, é

usual arrefecer a corrente de vapor), separação líquido-gás (após o arrefecimento é usual proceder a uma separação de fases) e separação de líquidos. Neste processo a reacção decorre em presença de excesso de hidrogénio, para evitar a formação de coque, o que levanta a questão da recirculação desse reagente. Dado ser um procedimento usual considerar um sistema de recirculação de gás (hidrogénio e metano) e uma purga, quando existe um reagente leve e uma impureza leve na alimentação (leve - ponto de ebulição menor que 225,2 K) (Douglas, 1988) essa opção foi contemplada na hiperestrutura. A purga é necessária para evitar a acumulação da impureza (neste caso o metano, que é também um produto de uma das reacções deste processo). A partir destas operações estruturais fixas foi possível a construção da hiperestrutura, através da consideração de diferentes alternativas processuais para atingir o fim em vista como no caso da separação de líquidos ou da adição de operações opcionais que poderiam provavelmente melhorar o desempenho, como por exemplo a separação G/G.

Na figura 2.3 é apresentada a representação STN da hiperestrutura para a hidrodealquilação do tolueno. Depois de construída a hiperestrutura aplicaram-se regras heurísticas que permitiram reduzir o número de configurações.

De referir que só foi considerada a reacção não catalítica (homogénea) porque os dados cinéticos disponíveis consideram essa situação.

De seguida são apresentadas algumas heurísticas que permitiram eliminar algumas das configurações da hiperestrutura.

As configurações que consideram um reactor isotérmico não foram tidas em conta porque a este tipo de reactor estão geralmente associados custos maiores decorrentes da remoção de calor, de forma a manter a temperatura constante. Existe a possibilidade de ocorrência de reacções indesejáveis caso se exceda o limite de temperatura recomendado ($T=978$ K (Douglas, 1988)), contudo, a elevação de temperatura para o reactor adiabático não deverá ser superior ao máximo recomendado.

A separação G/G é de considerar quando ocorrem duas situações: quando há perda significativa de compostos valiosos (a separação G/G seria colocada na purga) ou quando existem compostos que são prejudiciais ao funcionamento do reactor (ex.:envenenamento do catalisador; a separação G/G seria colocada na recirculação de gás). Dado que será efectuado o aproveitamento energético da purga e que a reacção considerada é homogénea, as configurações que contemplam esta opção não foram consideradas.

As configurações que restaram levam à constituição de grupos com uma ou duas configurações base (a consideração da recirculação da corrente de tolueno e bifenilo é, em alguns casos, uma opção, conforme assinalado na hiperestrutura). Cada um destes grupos apresenta um sistema de separação L/L diferente. Segue-se uma breve caracterização do sistema de separação L/L de cada um desses grupos e a aplicação de mais algumas heurísticas que permitirão eliminar alguns desses deles.

No grupo designado por A, a característica diferenciadora é a existência de apenas uma coluna de destilação, obtendo-se um destilado que contém o produto desejado (benzeno), o hidrogénio e o metano não se sabendo se será possível obter uma pureza suficientemente elevada para que este grupo seja considerado na optimização.

Nas configurações do grupo B existe mais uma coluna do que em A, que efectua a separação dos componentes da corrente de topo da primeira coluna.

Nas configurações do grupo C só existe uma coluna de destilação mas complexa, com três correntes de saída, metano e hidrogénio pelo topo, benzeno lateralmente e tolueno e bifenilo pelo fundo. Também neste caso existem dúvidas sobre se será possível com esta configuração atingir o grau de pureza desejado para a corrente de benzeno. Segundo Douglas (1985) do ponto de vista económico seria vantajoso considerar este tipo de colunas, contudo de acordo com Tedder (Tedder e Rudd, 1978) aquele tipo de separação é adequado se for aceitável uma baixa pureza para o produto intermédio.

Nas configurações do grupo CR a corrente retirada lateralmente da coluna referida no grupo anterior é alimentada a um rectificador e o benzeno separado pelo topo.

Nas configurações do grupo DC existe mais uma coluna do que no grupo C, que efectua a separação do tolueno e do bifenilo.

Nas configurações do grupo E existem duas colunas de destilação, a primeira um estabilizador cuja corrente de topo é constituída por hidrogénio e metano (essencialmente) e outra que permite obter no topo o benzeno e no fundo uma corrente, contendo essencialmente tolueno e bifenilo, que poderá ser ou não recirculada.

Nas configurações do grupo F existem três colunas de destilação, a primeira separa hidrogénio, metano e benzeno pelo topo e tolueno e bifenilo pelo fundo, a segunda separa o hidrogénio e metano do benzeno e a terceira separa o tolueno do bifenilo.

No caso do hidrogénio e do metano serem removidos separadamente dos restantes componentes utilizando uma dada sequência de colunas, deverão ser separados em primeiro lugar porque caso contrário obrigarão todas as colunas que condensem estes dois componentes na corrente de topo a trabalhar a alta pressão o que se traduzirá em custos de capital e de operação mais elevados, para além de provocar um maior consumo energético e, portanto, de recursos. Considerou-se também que não há interesse em separar o hidrogénio do metano, dado que esta corrente será utilizada como combustível. De referir, que todas as configurações que consideram a ordem inversa no sistema de separação de líquidos por destilação não foram escolhidas, dado que no sistema considerado, quase todas as regras heurísticas favorecem a sequência directa (Douglas, 1988). Pelos motivos anteriormente expostos as configurações do grupo B e do grupo F não foram consideradas.

No grupo G temos três colunas de destilação, a primeira um estabilizador cuja corrente de topo é constituída por hidrogénio e metano (essencialmente), outra que permite obter no topo o benzeno e no fundo uma corrente, contendo o tolueno e o bifenilo, e por fim uma que faz a separação destes dois componentes, sendo o tolueno recirculado.

As configurações consideradas estão representadas a vermelho na Figura 2.3.

A integração energética foi somente aplicada às configurações que não foram eliminadas pelas regras heurísticas. Contudo, a integração energética de uma só configuração tem à partida inúmeras alternativas, se forem consideradas todas as possibilidades de permuta, incluindo a possibilidade de divisão de correntes, recirculação, reutilização, etc. De referir que as oportunidades de permuta estão também relacionadas com as condições de operação. Face a esta situação as configurações que não foram eliminadas pelas regras heurísticas funcionam como casos base, para as quais foram consideradas diferentes alternativas que contemplam

a integração energética. Para obter as diferentes alternativas poder-se-ia ter de resolver os casos base. Com os dados disponíveis (temperaturas, caudais, etc.), o diagrama temperatura versus entalpia e o método de Linnhoff et al. (1994) é possível construir alternativas que contemplem a integração energética.

Para todas as configurações da hiperestrutura que não foram eliminadas pelas regras heurísticas, foram construídas alternativas que contemplam permutas energéticas visando a integração energética. O pré - aquecimento da corrente de alimentação do reactor utilizando correntes quentes processuais (neste caso a corrente de saída do reactor) é uma prática comum e foi implementada em algumas configurações. A procura de diferentes alternativas de integração energética passa pela análise das necessidades energéticas do processo e das possibilidades de permutas entre correntes quentes e frias. Para efectuar essa análise pode ser usado o diagrama temperatura versus entalpia e o método de Linnhoff et al. (1994) como já anteriormente referido, mas importa realçar que as alternativas geradas dessa forma são muito dependentes das condições de operação e variáveis de projecto consideradas o que significa que as alternativas podem ser muito específicas. No entanto, podem fornecer informações valiosas para as potenciais permutas viáveis, principalmente numa fase em que as condições de operação e variáveis de projecto não estão optimizadas. Convém ainda referir que as unidades industriais muito integradas são mais complexas e podem eventualmente ter uma flexibilidade e robustez menores, resultantes do elevado número de ligações entre as diferentes unidades, pelo que a integração energética a considerar deve ter presente esse potencial problema. As 11 configurações apresentadas por Douglas (1988) como alternativas para a integração energética de duas das configurações base (ErTB e GrTB) foram consideradas, contudo em três delas foram feitas ligeiras simplificações. Nas alternativas mais complexas considerou-se apenas uma permuta no reebulidor da coluna que separa o benzeno (GrTBe4, GrTBe5 e GrTBe7), por se considerar que as alternativas tal como estavam corresponderiam a situações muito específicas.

Na Tabela 2.1 é indicado, para as diferentes configurações, o equipamento necessário e se foi considerada a integração energética, sendo também indicado se é ou não realizada a recirculação da corrente de tolueno ou tolueno/bifenilo. Na Tabela 2.2 é descrita a integração energética efectuada.

O número de configurações na primeira fase é igual a 30 (Apêndice A.2): 4 do grupo A, 4 do grupo C, 4 do grupo CR, 2 do grupo DC, 8 do grupo E e 8 do grupo G. Este número já não é muito elevado e constituirá a base de trabalho para a aplicação do desenho estatístico.

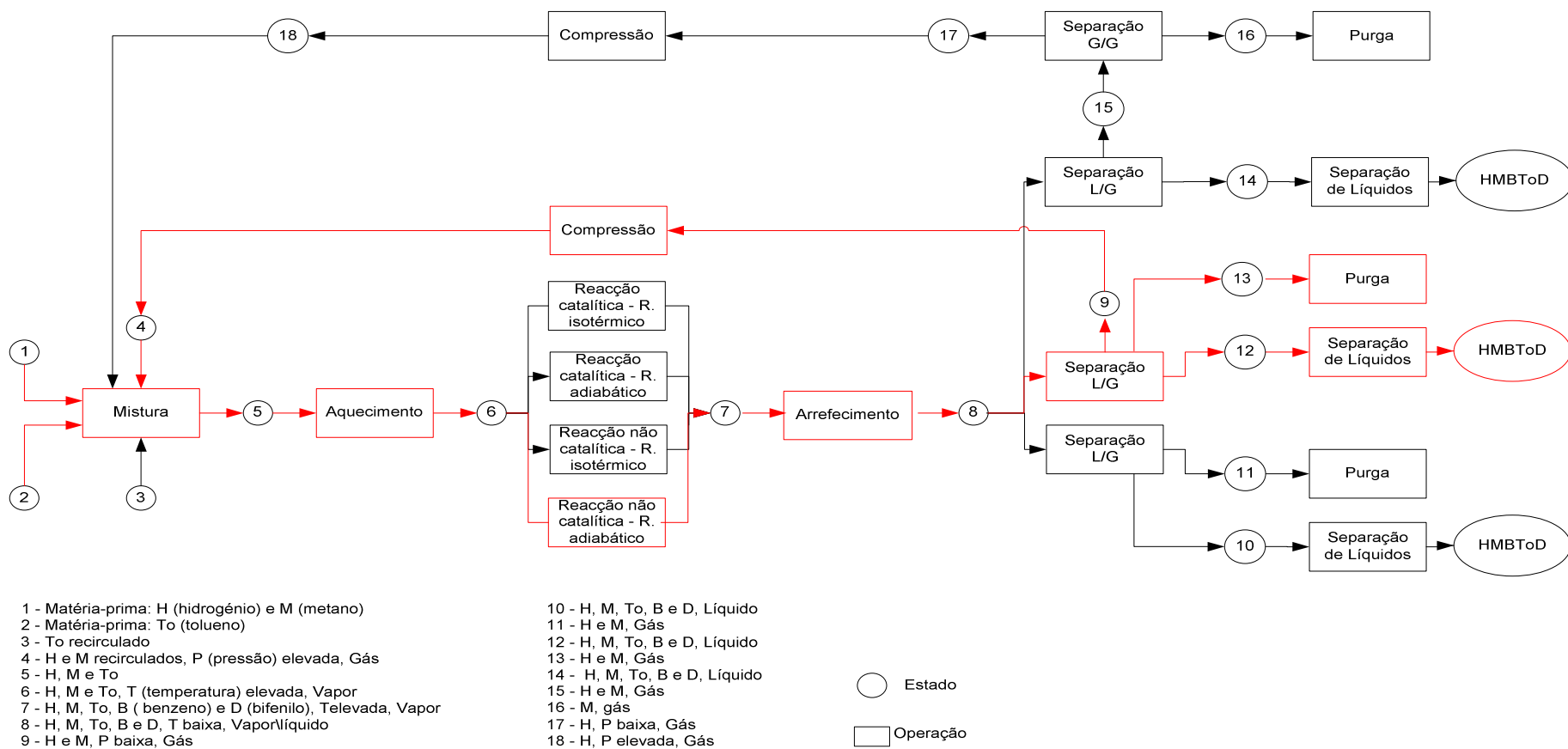


Figura 2.3 Hiperestrutura: representação STN para a produção de benzeno por hidrodealquilação do tolueno

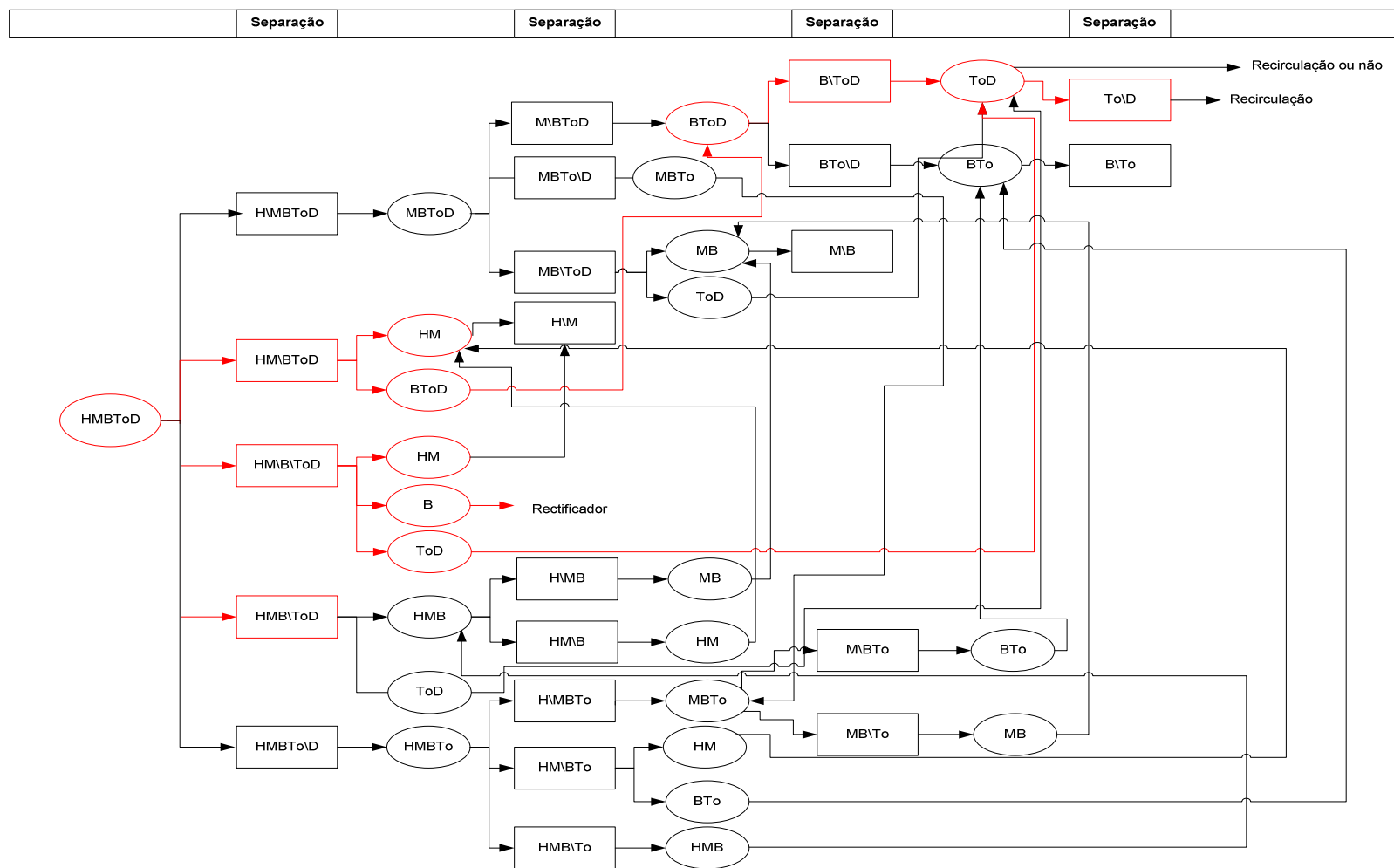


Figura 2.3 (cont.) Hiperestrutura: representação STN para a produção de benzeno por hidrodealkilação do tolueno

Douglas (1988) utiliza a sua metodologia para conseguir obter um caso, GrTB, e depois a partir deste e mediante a sua análise sugerir uma outra configuração, ErTB, em que se efectua a recirculação da corrente de tolueno/bifenilo, apresentando para estas duas configurações alternativas de integração energética (11). Com a metodologia proposta por este estudo não se pretende obter um caso base e a partir desse gerar alternativas. Pretende-se constituir um conjunto de configurações, constituído por parte das configurações representadas na hiperestrutura, que por sua vez resultou de um procedimento hierárquico/heurístico e da consideração de todas ou algumas das decisões alternativas mais promissoras em cada etapa do processo de geração. Esse conjunto de configurações, cuja selecção se baseou em conhecimentos de química, engenharia, heurísticas poderão previsivelmente satisfazer os objectivos pretendidos e serão na próxima etapa sujeitas a um processo de crivagem, considerando requisitos de qualidade, económicos e/ou ambientais por aplicação do desenho estatístico.

Tabela 2.1 Lista de equipamento e características das configurações para a aplicação do desenho estatístico

Grupo	Conf.	Reactor Adiab.	Flash	Compressor	Coluna 1 ¹	Coluna 2 ²	Coluna 3 ³	Rectificador	Rec. Tolueno	Int. Energ.
A	As	1	1	1		1			Não	Não
	Ae	1	1	1		1			Não	Sim
	ArTB	1	1	1		1			Sim	Não
	ArTBe	1	1	1		1			Sim	Sim
	Cs	1	1	1		1			Não	Não
C	Ce	1	1	1		1			Não	Sim
	CrTB	1	1	1		1			Sim	Não
	CrTBe	1	1	1		1			Sim	Sim
	CsR	1	1	1		1		1	Não	Não
CR	CeR	1	1	1		1		1	Não	Sim
	CrTBR	1	1	1		1		1	Sim	Não
	CrTBeR	1	1	1		1		1	Sim	Sim
DC	DrTB	1	1	1		1	1		Sim	Não
	DrTBe	1	1	1		1	1		Sim	Sim
E	Es	1	1	1	1	1			Não	Não
	Ee	1	1	1	1	1			Não	Sim
	ErTB	1	1	1	1	1			Sim	Não
	ErTBe	1	1	1	1	1			Sim	Sim
	ErTBe2	1	1	1	1	1			Sim	Sim
	ErTBe3	1	1	1	1	1			Sim	Sim
	ErTBe4	1	1	1	1	1			Sim	Sim
	ErTBe5	1	1	1	1	1			Sim	Sim
	GrTB	1	1	1	1	1	1		Sim	Não
	GrTBe	1	1	1	1	1	1		Sim	Sim
G	GrTBe2	1	1	1	1	1	1		Sim	Sim
	GrTBe3	1	1	1	1	1	1		Sim	Sim
	GrTBe4	1	1	1	1	1	1		Sim	Sim
	GrTBe5	1	1	1	1	1	1		Sim	Sim
	GrTBe6	1	1	1	1	1	1		Sim	Sim
	GrTBe7	1	1	1	1	1	1		Sim	Sim

¹ Separação HM\BToD

² Separação HM\BToD ou HMB\ToD ou B\ToD

³ Separação To\B

Tabela 2.2 Integração energética efectuada nas diferentes configurações

Configuração	Integração energética
As	Nenhuma
Ae	Pré – aquecimento da alimentação (um permutador)
ArTB	Nenhuma
ArTBe	Pré – aquecimento da alimentação (um permutador)
Cs	Nenhuma
Ce	Pré – aquecimento da alimentação (um permutador)
CrTB	Nenhuma
CrTBe	Pré – aquecimento da alimentação (um permutador)
CsR	Nenhuma
CeR	Pré – aquecimento da alimentação (um permutador)
CrTBR	Nenhuma
CrTBeR	Pré – aquecimento da alimentação (um permutador)
DrTB	Nenhuma
DrTBe	Pré – aquecimento da alimentação (um permutador)
Es	Nenhuma
Ee	Pré – aquecimento da alimentação (um permutador)
ErTB	Nenhuma
ErTBe	Pré – aquecimento da alimentação (um permutador)
ErTBe2	Pré – aquecimento da alimentação (dois permutadores) e aquecimento no reebulidor da coluna 1
ErTBe3	Pré – aquecimento da alimentação (dois permutadores) e aquecimento no reebulidor da coluna 2
ErTBe4	Pré – aquecimento da alimentação (dois permutadores) e aquecimento nos reebulidores das coluna 1 e 2
ErTBe5	Pré – aquecimento da alimentação (um permutador) e permuta reebulidor da coluna 1 e condensador da coluna2
GrTB	Nenhuma
GrTBe	Pré – aquecimento da alimentação (um permutador)
GrTBe2	Pré – aquecimento da alimentação (um permutador) e permuta reebulidor da coluna 2 e condensador da coluna 3
GrTBe3	Pré – aquecimento da alimentação (dois permutadores), aquecimento no reebulidor da coluna 1 e permuta reebulidor da coluna 2 e condensador da coluna3
GrTBe4	Pré – aquecimento da alimentação (dois permutadores), aquecimento no reebulidor da coluna 2
GrTBe5	Pré – aquecimento da alimentação (dois permutadores), aquecimento nos reebulidores das coluna 1 e 2
GrTBe6	Pré – aquecimento da alimentação (um permutador), permuta reebulidor da coluna 1 e condensador da coluna 2 e permuta reebulidor da coluna 2 e condensador da coluna 3
GrTBe7	Pré – aquecimento da alimentação (três permutadores), aquecimento nos reebulidores das coluna 1, 2 e 3

3.3 Desenho estatístico

No estudo presente pretende-se determinar quais as topologias processuais que permitem atingir determinada característica de qualidade (ex.: pureza de uma determinada corrente). As matrizes ortogonais de Taguchi não foram escolhidas dado que em alguns ensaios preliminares se constatou a existência de insucessos, o que leva à existência de ensaios para os quais não se tem resposta o que inviabiliza a retirada de conclusões pela análise da razão sinal/ruído. Para avaliar a resposta foram, portanto, consideradas matrizes ortogonais de planos fraccionados (SAS Institute Inc. , 1989-2003) e de Plackett-Burman (SAS Institute Inc. , 1989-2003). Os planos de Plackett- Burman e fraccionados, nestas circunstâncias revelam-se mais eficazes porque permitem fazer uma comparação directa da resposta com a característica de qualidade estabelecida. Desta forma é possível efectuar uma crivagem das configurações e eventualmente das variáveis principais. Se for possível efectuar a análise da variância (ANOVA) podem ser determinadas quais as variáveis que são significativas (havendo insucessos não é possível efectuar esta análise) o que permitiria tornar o problema de optimização (linear ou não linear) menor, uma vez que para as variáveis não significativas seria possível atribuir um valor em vez de se considerar a sua variação. A desvantagem da utilização deste tipo de planos (Plackett-Burman e fraccionados) é que não permitem a inclusão de variáveis não controláveis. Nos planos de Plackett- Burman e fraccionados foram considerados dois níveis para cada variável o que é usual se as variáveis envolvidas são contínuas. Estes planos usam um número reduzido de ensaios, são de resolução 3 e utilizam matrizes ortogonais.

A determinação das variáveis a considerar para a prossecução do plano de desenho estatístico, deve ser efectuada tendo em conta as relações de causa /efeito entre variáveis independentes e a resposta, em que podem intervir não só conhecimentos gerais de engenharia mas também do próprio processo em estudo. Devem ser incluídas todas as variáveis importantes que possivelmente e previsivelmente poderão afectar a resposta.

Neste caso existem variáveis relacionadas com a reacção e sua extensão como a razão molar dos reagentes, volume do reactor, caudal da purga, outras mais relacionadas com a separação líquido-gás como a pressão no *flash* e a composição da purga e outras ligadas à separação dos componentes líquidos como fracções molares ou recuperações, número de pratos e pressão nas colunas.

Um diagrama processual pode ser definido por um grande conjunto de equações lineares ou não lineares que descrevem a ligação das diferentes unidades (através de correntes processuais), que são específicas de cada unidade (balanços mássicos e energéticos internos assim como relações de equilíbrio) ou relações relativas a propriedades físicas (entalpias, constantes de equilíbrio, propriedades termodinâmicas, etc). No caso dos simuladores modulares existe uma separação clara entre os vários tipos de equações existindo uma hierarquia, podendo distinguir-se três níveis. O nível superior está relacionado com a topologia e as tarefas principais são estabelecer a sequência das unidades processuais, iniciar o diagrama e assegurar a convergência dos balanços mássico e energético globais. No nível intermédio situam-se as unidades, cada uma das quais é resolvida por um procedimento de cálculo específico. Estas unidades incorporam as equações específicas, sendo construídas com a ajuda dos procedimentos das propriedades físicas e calculam as variáveis de saída depois de todas as variáveis de entrada (correntes de alimentação, parâmetros de desempenho, etc) serem especificadas. As variáveis de saída são depois enviadas para o nível superior. As equações de ligação são consideradas implicitamente pela resolução de uma unidade de cada vez seguindo depois para a próxima unidade e assim sucessivamente. Se existirem correntes de recirculação isso origina um processo iterativo. O nível mais baixo está relacionado com as propriedades físicas e pode ser acedido pelos níveis intermédio e superior (Biegler et al., 1997). Num

diagrama processual o número de variáveis é elevado mas os graus de liberdade associados não são geralmente muitos. Quando se usam simuladores modulares muitas das variáveis estão escondidas no simulador. Nos simuladores modulares está incorporada no módulo de cada unidade uma análise dos graus de liberdade (graus de liberdade = número de variáveis – número de equações). Os graus de liberdade para cada unidade correspondem, portanto, às variáveis de decisão (*inputs*). As variáveis para o desenho estatístico foram escolhidas a partir deste conjunto de variáveis de decisão. As variáveis que são usadas para fixar o tamanho do equipamento são as variáveis de projecto e as que fixam os restantes graus de liberdade são denominadas de variáveis de operação.

3.3.1 Variáveis não consideradas para os planos

Algumas variáveis foram fixadas à priori tais como:

- a temperatura da alimentação do reactor (894 K porque abaixo desta temperatura a velocidade de reacção é baixa e acima dos 978 K ocorrem reacções indesejáveis) (Douglas, 1988);
- a temperatura da água de arrefecimento (limites superior e inferior, 313K e 293 K baseados em dados da Petrogal);
- pressão no reactor ($P = 3,4 \times 10^6 \text{ Pa}$, pressão usualmente considerada (Douglas, 1988));
- a temperatura da corrente após o arrefecimento no permutador colocado a jusante do reactor (311K, temperatura usual para este tipo de arrefecimento dado que a temperatura no reactor é superior à temperatura da água de arrefecimento (Douglas, 1988));
- caudal da corrente para rápido arrefecimento da corrente de saída do reactor para evitar a formação de coque no permutador colocado após o reactor (19,6 mol/s (Luyben et al., 1999), considerado suficiente para arrefecer abaixo do valor recomendado, o que foi confirmado posteriormente); esta variável não é uma variável de projecto nem uma variável de operação, está directamente relacionada com o caudal da corrente processual a arrefecer; é uma variável manipulativa como tal seria de considerar a sua variação caso se pretendesse fazer um estudo de controlabilidade; o valor escolhido para esta variável, deve, no entanto, procurar garantir que a restrição que lhe está associada nunca fique activa.
- diferença mínima de temperaturas a considerar nas permutas energéticas (5K) dado ser um valor usualmente considerado na literatura (Biegler et al., 1997);
- a pressão de saída do compressor ($3,8 \times 10^6 \text{ Pa}$ (Douglas, 1988)); a pressão de saída é superior à pressão de operação do reactor contemplando eventuais perdas de carga na recirculação de gás.

Para que fosse possível efectuar as simulações foi ainda necessário efectuar algumas escolhas relativas aos condensadores e reebulidores das colunas de destilação. De acordo com as opções do simulador foram escolhidos condensadores parciais (normalmente usados) para os condensadores e permutadores de serpentina (*kettle*, pois permitem elevados graus de vaporização) para os reebulidores.

3.3.2 Variáveis consideradas para os planos

A escolha das variáveis foi efectuada, portanto, tendo em conta as características do processo e da configuração considerada. O número de variáveis depende da

configuração escolhida, no entanto, há algumas que são comuns a todas as configurações.

As variáveis consideradas estão especificadas na Tabela 2.3.

Escolheram-se para a aplicação do desenho estatístico métodos de crivagem, nomeadamente planos fraccionados e de Plackett- Burman como referido anteriormente. O próximo passo será a determinação dos planos experimentais a utilizar o que depende do número de variáveis envolvidas e dos níveis considerados para cada uma. Geralmente nos métodos de crivagem existem dois níveis para cada variável, pelo que o número de graus de liberdade é igual ao número de variáveis, valor que deve ser inferior ao número total de ensaios da matriz. Esta regra determinou os planos a serem usados e que são indicados na Tabela 2. 4.

Tabela 2.3 Variáveis consideradas para as diferentes configurações

Variáveis	Configurações
Razão molar de reagentes	Todas
Pressão no flash	Todas
Fracção molar de benzeno na purga	Todas
Caudal da purga	Todas
Volume do reactor	Todas
Fracção molar de tolueno na corrente de topo da coluna 2	Todas
Fracção molar de benzeno na corrente de fundo da coluna 2	Todas
Pressão de operação da coluna 2	Todas
Fracção molar de benzeno da coluna 1	Grupos E e G
Razão de refluxo da coluna 1	Grupos E e G
Pressão de operação da coluna 1	Grupos E e G
Fracção molar de bifenilo da coluna 3	Grupos DC e G
Pressão de operação da coluna 3	Grupos DC e G
Número de pratos da coluna 1	Grupos E e G
Número de pratos da coluna 2	Todas
Número de pratos do rectificador	Grupo CR
Número de pratos da coluna 3	Grupos DC e G
Fracção molar de tolueno da coluna 3	Grupos DC e G
Fracção molar de tolueno no rectificador	Grupo CR
Caudal fixo da coluna 2	Grupos C, CR e DC

3.3.3 Níveis para as variáveis seleccionadas

A escolha dos níveis para os factores é também uma etapa importante, pelo que para o seu estabelecimento se recorreu a alguns dados existentes na bibliografia. Na Tabela 2. 5 apresentam-se os níveis +1 e -1 para cada um dos factores.

Segundo Douglas (1988) a razão hidrogénio/aromáticos à entrada do reactor deve ser de 5, contudo a razão que se está a considerar na Tabela 2. 5 diz respeito à razão entre a corrente de alimentação de hidrogénio e a alimentação de tolueno (37 mol/s) pelo que o valor de referência não pode ser usado. Considerou-se como nível superior (+1) 2,5 e como nível inferior (-1) 1,0. O nível inferior corresponde a ter um caudal molar de alimentação de hidrogénio igual ao caudal de alimentação de tolueno e o nível superior corresponde a considerar um caudal cerca de 50% superior ao caudal

de alimentação do hidrogénio referido por alguns autores, nomeadamente Luyben et al. (1999) e Qiu et al. (2000).

De forma a variar a conversão considerar-se-á uma gama de valores para o volume do reactor tomando para valor médio aproximadamente o volume considerado por Douglas (1988) e para amplitude 57 m³ (correspondente a uma variação de 50% em torno do valor médio).

A pressão no *flash* variará entre 3,4x10⁶ e 3,4x10⁵ Pa, tendo esta gama sido estabelecida considerando a bibliografia (Luyben et al., 1999) e (Douglas, 1988).

A gama para a composição molar da purga foi estabelecida tendo em conta o valor utilizado por Qiu et al (2000) de 0,0077, considerando este valor como referência.

A gama para o caudal da purga teve como referência os valores do caudal da corrente de hidrogénio.

Tabela 2. 4 Número de variáveis para cada configuração e plano utilizado

Configurações	Número de Variáveis	Plano utilizado
As	9	Plackett-Burman N=12
Ae	9	Plackett-Burman N=12
ArTB	9	Plackett-Burman N=12
ArTBe	9	Plackett-Burman N=12
Cs	10	Plackett-Burman N=12
Ce	10	Plackett-Burman N=12
CrTB	10	Plackett-Burman N=12
CrTBe	10	Plackett-Burman N=12
CsR	12	Plano fraccionado de dois níveis 2 _{III} ¹²⁻⁸ N=16
CeR	12	Plano fraccionado de dois níveis 2 _{III} ¹²⁻⁸ N=16
CrTBR	12	Plano fraccionado de dois níveis 2 _{III} ¹²⁻⁸ N=16
CrTBeR	12	Plano fraccionado de dois níveis 2 _{III} ¹²⁻⁸ N=16
DrTB	14	Plano fraccionado de dois níveis 2 _{III} ¹⁴⁻¹⁰ N=16
DrTBe	14	Plano fraccionado de dois níveis 2 _{III} ¹⁴⁻¹⁰ N=16
Es	13	Plano fraccionado de dois níveis 2 _{III} ¹³⁻⁹ N=16
Ee	13	Plano fraccionado de dois níveis 2 _{III} ¹³⁻⁹ N=16
ErTB	13	Plano fraccionado de dois níveis 2 _{III} ¹³⁻⁹ N=16
ErTBe	13	Plano fraccionado de dois níveis 2 _{III} ¹³⁻⁹ N=16
ErTBe2	13	Plano fraccionado de dois níveis 2 _{III} ¹³⁻⁹ N=16
ErTBe3	13	Plano fraccionado de dois níveis 2 _{III} ¹³⁻⁹ N=16
ErTBe4	13	Plano fraccionado de dois níveis 2 _{III} ¹³⁻⁹ N=16
ErTBe5	13	Plano fraccionado de dois níveis 2 _{III} ¹³⁻⁹ N=16
GrTB	17	Plano Plackett-Burman N=20
GrTBe	17	Plano Plackett-Burman N=20
GrTBe2	17	Plano Plackett-Burman N=20
GrTBe3	17	Plano Plackett-Burman N=20
GrTBe4	17	Plano Plackett-Burman N=20
GrTBe5	17	Plano Plackett-Burman N=20
GrTBe6	17	Plano Plackett-Burman N=20
GrTBe7	17	Plano Plackett-Burman N=20

A gama para a fracção molar do benzeno nas especificações das colunas 1 e 2 foi estabelecida tendo em conta a pureza que se pretende obter para a corrente de benzeno, pelo que o nível +1 será igual a 0,001 e o nível -1 será igual a 0,0003.

Sempre que houve necessidade de estabelecer uma gama para a fracção relativa a um componente considerou-se que o nível +1 será igual a 0,001 e o nível -1 será igual a 0,0003, porque permite obter correntes bastantes puras, exceptuando a fracção de benzeno para a primeira coluna, onde se efectua a separação do hidrogénio e metano, que será 0,06-0,10 determinada após a realização de alguns ensaios.

Para a razão de refluxo na coluna 1 considerou-se uma gama de 0,25-5,00 estabelecida tendo em conta o valor utilizado por Qiu et al. (2000) de 0,5; o limite superior da gama corresponde ao máximo geralmente considerado para refluxo.

A pressão de operação das colunas de destilação variará entre $1,0 \times 10^6$ Pa e $1,0 \times 10^5$ Pa valores referidos na bibliografia (Douglas, 1988).

As gamas para o número de pratos a considerar nas diferentes colunas de destilação foram estabelecidas tendo em conta os valores apresentados por Qiu et al. (2000).

Aa gamas para o caudal fixo da coluna T2 e para o número de pratos do rectificador foram estabelecidas após a realização de alguns ensaios preliminares.

Tabela 2. 5 Níveis considerados para cada variável

Variáveis	Nível +1	Nível -1	Referência
Razão molar das correntes de alimentação	2,50:1,00	1,00:1,00	
Volume do reactor	142 m ³	85 m ³	116m ³ (Douglas, 1988)
Pressão no flash	$3,4 \times 10^6$ Pa	$3,4 \times 10^5$ Pa	$3,4 \times 10^5$ Pa (Douglas, 1988) $3,4 \times 10^6$ psia (Luyben et al., 1999)
Fracção molar de benzeno na purga	0,01000	0,00500	0,0077 (Qiu et al., 2000)
Caudal da purga	72,5 mol/s	12,6mol/s	
Fracção molar de benzeno na corrente de fundo da coluna 2	0,0010	0,0003	0,0003(Douglas, 1988), (Luyben et al., 1999; Qiu et al., 2000)
Fracção molar de tolueno na corrente de topo da coluna 2	0,0010	0,0003	
Pressão de operação da coluna 2	$1,0 \times 10^6$ Pa	$1,0 \times 10^5$ Pa	
Fracção molar de benzeno da coluna 1	0,10	0,06	
Razão de refluxo da coluna 1	5	0,25	
Pressão de operação da coluna 1	$1,0 \times 10^6$ Pa	$1,0 \times 10^5$ Pa	(Douglas, 1988)
Fracção molar de tolueno da corrente de fundo da coluna 3	0,0010	0,0003	
Pressão de operação da coluna 3	$1,0 \times 10^6$ Pa	$1,0 \times 10^5$ Pa	
Número de pratos da coluna 2	42	23	27 (Qiu et al., 2000)
Número de pratos da coluna 1	10	3	5 (Qiu et al., 2000)
Número de pratos da coluna 3	12	5	7 (Qiu et al., 2000)
Fracção molar de bifenilo da corrente de topo da coluna 3	0,0010	0,0003	
Caudal fixo da coluna T2	35,3 mol/s	12,6 mol/s	
Fracção molar de tolueno no rectificador	0,0010	0,0003	
Número de pratos do rectificador	22	10	

3.4 Resolução aproximada do problema inteiro

Seguindo o algoritmo proposto, utilizou-se o desenho estatístico para resolver o subproblema associado às variáveis discretas, usando-o para seleccionar as configurações capazes de potencialmente enquadrarem o óptimo. Nesta etapa foram seleccionadas as configurações que demonstraram serem capazes de produzir correntes de benzeno com pureza superior a 99,0%, dado que é um valor elevado para essa grandeza sem contudo ser demasiado restritivo, podendo a sua especificação na gama considerada corresponder a diferentes segmentos do mercado e permitindo também uma melhor avaliação da metodologia utilizada.

3.4.1 Característica de qualidade

3.4.1.1 Ensaios

Para resolver o subproblema inteiro realizaram-se inicialmente quatro séries de ensaios (Tabela 2.6) que diferem entre si na razão molar das correntes de alimentação (para fazer variar a razão molar das correntes de alimentação é variado o caudal de alimentação de hidrogénio, sendo o caudal de alimentação de tolueno constante em todos os casos) e no caudal da purga, dado que se constatou a existência de incompatibilidades entre as gamas destas duas variáveis. De facto, existiram algumas dificuldades na obtenção de casos de sucesso nas simulações (situação em que se verifica haver convergência no simulador) especialmente nas configurações mais complexas. Assim após a realização da primeira série da Tabela 2.6, definiu-se como estratégia para tentar ultrapassar essa dificuldade a utilização de séries que consideram gamas mais estreitas e mais favoráveis para algumas variáveis (razão molar das correntes de alimentação e caudal da purga), o que originou as séries seguintes da Tabela 2.6. As restantes variáveis referidas na tabela 2.5 foram variadas de acordo com o plano experimental adoptado (Apêndice A.1). As quatro primeiras séries foram efectuadas considerando fracções molares nas especificações das colunas que executam a separação dos diferentes componentes. Estas fracções, nomeadamente as fracções de benzeno e de tolueno nas correntes de fundo e topo da coluna T2 e as fracções de tolueno e bifenilo nas correntes de fundo e topo da coluna T3, muito exigentes em termos de separação, foram posteriormente alteradas para recuperações em duas outras séries tentando aumentar o número de ensaios com convergência no simulador. A fracção de benzeno na coluna T1 foi também substituída por uma recuperação. A não existência de respostas (ausência de convergência no simulador) para alguns dos ensaios afecta significativamente a análise dos resultados, pois a realização de determinados cálculos estatísticos é impossível, impedindo dessa forma a retirada de conclusões sob essa perspectiva. A convergência dos ensaios também é dificultada por outros motivos, nomeadamente a sequência de resolução dos equipamentos definida no simulador. Esta sequência pode ser alterada. Contudo o número de peças de equipamento existente é elevado especialmente nas configurações mais complexas (para as quais o problema da convergência é mais pertinente) o que dificulta o estabelecimento da sequência mais favorável para a resolução.

Tabela 2.6 Séries de ensaios que utilizam fracções

Série	Razão molar		Caudal da Purga (mol/s)	
	Nível +1	Nível -1	Nível +1	Nível -1
1	2,5	1,0	72,4	12,6
2	1,5	1,0	34,6	12,6
3	2,0	1,5	50,4	12,6
4	2,5	2,0	72,4	12,6

Tal como referido anteriormente foram efectuadas mais duas séries de experiências (Tabela 2.7), tentando melhorar o desempenho das simulações, nomeadamente a obtenção de um maior número de sucessos, sem contudo descurar o objectivo principal que é saber que configurações conseguem obter sucessos em que a pureza da corrente de benzeno é superior a 99,0%. Nestas simulações as fracções molares usadas nas especificações das colunas foram substituídas por recuperações de determinados compostos. O nível +1 considerado foi 99,9% e o nível -1, 99,0%.

Tabela 2.7 Séries de ensaios que utilizam recuperações

Série	Razão molar		Caudal da Purga (mol/s)	
	Nível +1	Nível -1	Nível +1	Nível -1
5	2,5	1,0	72,4	12,6
6	2,5	2,0	72,4	12,6

3.4.1.2 Resultados e discussão

Da primeira série de ensaios concluiu-se que das trinta configurações (Tabela 2. 8), 15 são automaticamente seleccionadas pois conseguem purezas superiores a 99,0% (amarelo), 3 atingem esse valor apesar de infringirem restrições e, portanto, constituem configurações a ter em consideração (azul) dado que poderão eventualmente ser capazes de atingir o critério de qualidade, 10 são eliminadas pois não conseguem obter purezas superiores a 99,0% (vermelho) e sobre as restantes duas nada se pode concluir por não haver resultados suficientes.

As três séries que se seguem resultam da divisão das gamas inicialmente usadas para a razão molar das correntes de alimentação e do caudal da purga em intervalos mais estreitos mas que no seu conjunto abrangem as gamas consideradas na primeira série. Dos resultados obtidos para estas três séries de ensaios concluiu-se que das trinta configurações, 19 são automaticamente seleccionadas pois conseguem purezas superiores a 99,0% (amarelo), 3 atingem esse valor apesar de infringirem restrições e, portanto, constituem um grupo a ter em consideração (azul), 7 são eliminadas pois não conseguem obter purezas superiores a 99,0% (vermelho) e sobre a restante nada se pode concluir por não haver resultados suficientes. Assim pode-se concluir que a utilização de gamas menores para a razão molar das alimentações e para o caudal da purga foi vantajosa pois permitiu eliminar algumas incompatibilidades processuais (ex.: razão molar pequena e caudal da purga elevado).

Tabela 2. 8 Selecção de configurações

Grupo	Configuração	Série 1	Série 2	Série 3	Série 4	Série 5	Série 6
A	As						
	Ae						
	ArTB						
	ArTBe						
C	Cs						
	Ce						
	CrTB						
	CrTBe						
CR	CsR						
	CRe						
	CrTBR						
	CrTBRe						
DC	DrTB						
	DrTBe						
E	Es						
	Ee						
	ErTB						
	ErTBe						
	ErTBe2						
	ErTBe3						
	ErTBe4						
	ErTBe5						
G	GrTB						
	GrTBe						
	GrTBe2						
	GrTBe3						
	GrTBe4						
	GrTBe5						
	GrTBe6						
	GrTBe7						

Relativamente à facilidade de obtenção de sucessos podemos concluir que os grupos A, CR e E são os que têm maior número de sucessos (Tabela 2. 9).

De referir que destas simulações é possível concluir que as configurações As, Ae, Ce, CsR, CeR, CrTBR, CrTBeR, DrTB, Es, Ee, ErTB, ErTBe, ErTBe2, ErTBe3, ErTBe4, GrTB, GrTBe, GrTBe2, GrTBe3, GrTBe4 e GrTBe5 conseguem atingir a pureza pretendida para a corrente de benzeno. As configurações ErTBe5, GrTBe6 e GrTBe7 revelam-se pouco atractivas dados os resultados obtidos apesar de poder ser possível atingir a pureza pretendida. Com as configurações ArTB, ArTBe, Cs, CrTB, CrTBe e DrTBe não foi possível atingir o objectivo estabelecido.

A utilização de recuperações em vez de fracções molares nas especificações das colunas revelou-se mais favorável para conseguir convergência em determinadas configurações, especialmente no grupo G.

Tabela 2. 9 Número de sucessos obtidos em cada série

Configuração	Série 1		Série 2		Série 3		Série 4		Série 5		Série 6	
	Sucessos	Sucessos com Infracção	Sucessos	Sucessos com Infracção	Sucessos	Sucessos com Infracção	Sucessos	Sucessos com Infracção	Sucessos	Sucessos com Infracção	Sucessos	Sucessos com Infracção
As	4		7		7		7		7		10	
Ae	4		7		7		7		4	3	7	2
ArTB	6		8		8		7		7		10	
ArTBe	5		6		5	1	5	1	3	1	5	1
Cs	1		3		3		3		0		0	
Ce	1		2		3		2		0		1	
CrTB	3		5		4		3		3		3	
CrTBe	2		2		2		2		3		4	
CsR	4		4		4		6		2	1	2	1
CRe	2	2	3	1	3	1	4	2	0	3	0	3
CrTBR	7		9		10		9		0	1	1	1
CrTBRe	5		6		7	1	7	1	0		0	
DrTB	2		4		3		5		3		5	
DrTBe	1		1	1	2		3		0		1	1
Es	3		3		4		5		2		2	
Ee	2		4		2		2		0		2	
ErTB	7		5		7		6		5	4	5	5
ErTBe	4		3		4		5		1	1	3	1
ErTBe2	4		1		2		6		1	2	2	2
ErTBe3	4		1		4		6		2	4	4	4
ErTBe4	4		1		4		6		2	4	4	4
ErTBe5	0	6	0	3	0	7	0	8	0	4	0	4
GrTB	3		2	1	3	1	3		7	4	8	5
GrTBe	0	1	0	1	0	1	0	1	3	5	5	7
GrTBe2	1	1	1	2	1	1	2		0	1	1	2
GrTBe3	0	1	0	1	0		2	1	0	1	0	1
GrTBe4	1		1		1		1		5	3	7	3
GrTBe5	1		1		1		1		5	3	7	3
GrTBe6	0		0	2	0	1	0	1	0		0	
GrTBe7	0		0		0		0		0		0	

Esta metodologia permitiu claramente seleccionar as configurações que conseguem satisfazer o critério de qualidade estabelecido. Com a aplicação desta metodologia é feita uma separação das configurações:

- as que satisfazem o critério estabelecido e que, portanto, estão contidas no espaço de configurações viáveis da hiperestrutura (As, Ae, Ce, CsR, CeR, CrTBR, CrTBeR, DrTB, Es, Ee, ErTB, ErTBe, ErTBe2, ErTBe3, ErTBe4, GrTB, GrTBe, GrTBe2, GrTBe3, GrTBe4 e GrTBe5);
- as que satisfazem o critério estabelecido mas violam restrições (ex.: limites de temperaturas nos permutadores) e que possivelmente são configurações para os quais os valores das variáveis têm de ser criteriosamente escolhidos de forma a que não haja violação de restrições e que provavelmente corresponderão a configurações cuja flexibilidade será reduzida (ErTBe5 e GrTBe6);
- as que não demonstram, após a realização dos ensaios dos planos experimentais, serem capazes de satisfazer o critério e que, portanto,

provavelmente estarão contidas no espaço não viável da hiperestrutura (ArTB, ArTBe, Cs, CrTB, CrTBe e DrTBe);

- as que devido a dificuldades de convergência no simulador (que reflectem impossibilidades processuais) inviabilizam a retirada de conclusões decorrentes da realização dos planos experimentais e que correspondem a configurações em que o número de peças de equipamento e/ou o número de interligações entre elas é muito elevado e cuja flexibilidade poderá ser reduzida (GrTBe7).

O número de ensaios em que há convergência no simulador (situação de sucesso) em cada plano experimental não é um critério de selecção, contudo indica as configurações em que as impossibilidades processuais e/ou de convergência se verificam menos frequentemente, nas gamas consideradas para as variáveis.

Após a aplicação do desenho estatístico usando uma característica de qualidade pode-se concluir que 21 das 30 configurações iniciais conseguem satisfazer a característica de qualidade e que 6 não o conseguem fazer. Relativamente às configurações ErTBe5 e GrTBe6 é de referir que dada as suas topologias, nomeadamente as trocas de calor a efectuar entre reebulidores e condensadores de colunas de destilação diferentes, sabe-se que existe uma relação de desigualdade entre as pressões das colunas de forma a tornar viável essas permutas pelo que os resultados obtidos reflectem também as consequências dessas restrições adicionais. Comparando com o trabalho desenvolvido por Douglas (1988) foi possível concluir que das dez configurações comuns a este autor (ErTB, ErTBe, ErTBe2, ErTBe3, ErTBe4, ErTBe5, GrTB, GrTBe, GrTB2 e GrTBe3) nove provaram ser capazes de satisfazer o critério de qualidade e uma, ErTBe5, atingiu o critério mas infringiu restrições. Esta metodologia pode apresentar algumas dificuldades no caso de configurações que apresentem restrições adicionais como é o caso das configurações ErTBe5 e GrTB6 e no caso de configurações muito complexas como é o caso de GrTBe7.

3.4.2 Critérios económicos, ambientais ou mistos

No Apêndice A.3 são descritos em pormenor os cálculos das diferentes rubricas necessárias para a determinação do valor actualizado líquido.

Relativamente à avaliação ambiental e nomeadamente para o cálculo do primeiro indicador ambiental (IAPG) algumas categorias do grupo base referido anteriormente são categorias vazias ou não foram seleccionadas. Os impactos relativos à utilização da terra não foram considerados porque o estudo desenvolvido não inclui um detalhe de projecto que inclua a determinação da área necessária, para além de não se saber qual a zona de implantação da unidade processual. Para a categoria depleção da camada de ozono estratosférico não existem, neste processo, produtos que contribuam para essa categoria pelo que corresponde a uma categoria vazia. Do modelo de Guinée (2002) também não foram consideradas outras duas categorias que poderiam integrar o conjunto seleccionado: a toxicidade humana e a ecotoxicidade. A primeira foi substituída por outra categoria, a da saúde humana-cancerígenos que no caso deste processo em particular se reveste de particular importância, dada a presença de benzeno. Esta categoria baseou-se no modelo apresentado pelo IChemE. Neste modelo e para esta categoria os factores provêm dos limites ocupacionais de exposição estabelecidos pelo *UK Health and Safety Executive*. Relativamente à categoria saúde humana e ao contrário do que acontece com o aquecimento global não existem factores de impacto internacionalmente aceites (IChemE, Janeiro/2007). A ecotoxicidade não foi considerada por apresentar valores muito baixos para os componentes deste processo, pelo que o seu impacto não seria significativo.

Na Tabela 2.10 são referidas as categorias usadas, o modelo em que se baseiam e os compostos de referência. Indicam-se também os compostos emitidos ou necessários pelo processo que contribuem para cada categoria.

Tabela 2.10 Categorias de impactos, modelos e indicadores

Categorias de impactos	Escala	Modelo	Compostos de referência	Compostos emitidos ou necessários
Mudanças climáticas	Global	Guinée	CO ₂	CO ₂ CH ₄
Acidificação	Regional Local	Guinée	SO ₂	NO _x SO ₂
Eutrofização	Local	Guinée	PO ₄ ³⁻	NO _x
Formação fotoquímica de compostos	Local	Guinée	etileno	C ₆ H ₆ ; CH ₄ C ₇ H ₈ ; SO ₂
Saúde humana/Cancerígenos	Local	IChemE	benzeno	C ₆ H ₆
Depleção de recursos	Global Regional Local	Guinée	antimónio	Fuel

O impacto ambiental devido à utilização de energia (no compressor, reebulidores e caldeira) foi também considerado, inventariando nessa altura as emissões resultantes da produção de energia. Essas emissões foram avaliadas tendo em conta as categorias de impactos consideradas. No Apêndice A.4 são indicados os valores normalizados assim como outras informações.

Relativamente à metodologia EPS (*Environmental Priority Strategies* (Steen, 1999)) são indicados no Apêndice A.4 os valores dos índices para cada elemento. Neste modelo a depleção de recursos é contemplada, considerando alternativas sustentáveis para a produção do recurso. No caso concreto do fuel é considerada a produção de biodiesel a partir da colza, sendo estimado um índice WTP para essa produção.

3.4.2.1 Ensaios

Para seleccionar configurações mediante critérios económicos, ambientais ou mistos, utilizou-se o conjunto de ensaios que conduziu a melhores resultados na primeira etapa e que corresponde a uma gama para a razão molar dos reagentes de 2,5-2,0. Para esta gama de razões molares existem duas alternativas: configurações que utilizam nas especificações das colunas fracções molares e as que utilizam recuperações. Foi escolhida a série de ensaios que conduziu a um melhor desempenho na primeira parte. Assim para as configurações Ce, GrTB, GrTBe, GrTBe4 e GrTBe5 escolheram-se os ensaios correspondentes à utilização de recuperações nas especificações (Tabela 2.11).

Tabela 2.11 Quadro resumo das configurações e especificações usadas

Configurações usadas com fracções nas especificações	As, Ae, CsR, CRe, CrTBR, CrTBRe, DrTB, Es, Ee, ErTB, ErTBe, ErTBe2, ErTBe3, ErTBe4, GrTBe2 e GrTBe3
Configurações usadas com recuperações nas especificações	Ce, GrTB, GrTBe, GrTBe4 e GrTBe5

3.4.2.2 Resultados e discussão

Para cada configuração e série de ensaios realizada de acordo com o plano experimental, foram calculadas as médias dos valores do Impacto Ambiental Potencial Global (IAPG), do Valor Actualizado Líquido (VAL1), Impacto Ambiental Potencial Global mediante metodologia EPS (IAPG-EPS) e do Valor Actualizado Líquido com inclusão dos custos dos impactos ambientais EPS (VAL2).

Estes valores médios (Tabela 2.12) foram utilizados para hierarquizar as configurações, conforme se mostra na Tabela 2.13.

Tabela 2.12 Valores médios das várias grandezas para cada configuração

Configuração	Pureza ⁴	IAPG	VAL1	IAPG-EPS	VAL2
As	0,931	8,477x10 ⁵	-2,681x10 ⁸	5,611x10 ⁷	-4,540x10 ⁸
Ae	0,931	7,150 x10 ⁵	-2,350x10 ⁸	2,932x10 ⁷	-3,322x10 ⁸
Ce	0,999	8,540x10 ⁶	-7,894x10 ⁸	3,099x10 ⁸	-1,816x10 ⁹
CsR	0,981	2,017x10 ⁷	-1,776x10 ⁹	7,237x10 ⁸	-4,173x10 ⁹
CRe	0,972	1,275x10 ⁷	-1,086x10 ⁹	4,367x10 ⁸	-2,532x10 ⁹
CrTBR	0,983	1,635x10 ⁷	-1,467x10 ⁹	6,741x10 ⁸	-3,700x10 ⁹
CrTBRe	0,983	2,866x10 ⁷	-2,359x10 ⁹	8,896x10 ⁸	-5,305x10 ⁹
DrTB	0,896	1,843x10 ⁷	-1,352x10 ⁹	7,145x10 ⁸	-3,719x10 ⁹
Es	0,996	1,416x10 ⁶	-4,416x10 ⁸	6,669x10 ⁷	-6,625x10 ⁸
Ee	0,999	1,733x10 ⁶	-4,092x10 ⁸	3,788x10 ⁷	-5,347x10 ⁸
ErTB	0,991	1,075x10 ⁷	-1,079x10 ⁹	5,307x10 ⁸	-2,837x10 ⁹
ErTBe	0,986	2,400x10 ⁷	-2,301x10 ⁹	6,919x10 ⁸	-4,593x10 ⁹
ErTBe2	0,991	1,307x10 ⁷	-1,176x10 ⁹	2,977x10 ⁸	-2,162x10 ⁹
ErTBe3	0,991	1,084x10 ⁷	-8,846x10 ⁸	3,643x10 ⁸	-2,091x10 ⁹
ErTBe4	0,991	1,120x10 ⁷	-8,805x10 ⁸	3,598x10 ⁸	-2,072x10 ⁹
GrTB	0,935	4,028x10 ⁶	-5,530x10 ⁸	1,990x10 ⁸	-1,212x10 ⁹
GrTBe	0,985	2,034x10 ⁶	-3,073x10 ⁸	4,103x10 ⁷	-4,432x10 ⁸
GrTBe2	0,998	2,264x10 ⁷	-2,632x10 ⁹	6,200x10 ⁸	-4,686x10 ⁹
GrTBe3	0,998	1,706x10 ⁷	-1,825x10 ⁹	3,513x10 ⁸	-2,989x10 ⁹
GrTBe4	0,968	4,391x10 ⁶	-6,319x10 ⁸	1,434x10 ⁸	-1,107x10 ⁹
GrTBe5	0,971	3,435x10 ⁶	-4,663x10 ⁸	1,113x10 ⁸	-8,350x10 ⁸

De referir que a normalização efectuada para os impactos ambientais não considerou como usualmente um referencial espacial e temporal, tal como já referido

⁴ Pureza da corrente de benzeno

anteriormente, pelo que os valores dos impactos são elevados. O valor actualizado líquido apresenta sempre valores negativos porque a diferença de preço entre o tolueno, matéria-prima, e o benzeno (produto) não é suficientemente elevada para o processo ser rentável.

Refira-se ainda que a via processual considerada, hidrodealquilação do tolueno, é o processo geralmente mais dispendioso para produzir benzeno, pelo que este processo é maioritariamente usado para responder a picos de mercado.

Tabela 2.13 Hierarquização mediante critérios ambientais e/ou económicos

Classificação	Ambiental		Económica	
	IAPG	IAPG-EPS	VAL1	VAL2
1º	Ae	Ae	Ae	Ae
2º	As	Ee	As	GrTBe
3º	Es	GrTBe	GrTBe	As
4º	Ee	As	Ee	Ee
5º	GrTBe	Es	Es	Es
6º	GrTBe5	GrTBe5	GrTBe5	GrTBe5
7º	GrTB	GrTBe4	GrTB	GrTBe4
8º	GrTBe4	GrTB	GrTBe4	GrTB
9º	Ce	ErTBe2	Ce	Ce
10º	ErTB	Ce	ErTBe4	ErTBe4
11º	ErTBe3	GrTBe3	ErTBe3	ErTBe3
12º	ErTBe4	ErTBe4	ErTB	ErTBe2
13º	CRe	ErTBe3	CRe	CRe
14º	ErTBe2	CRe	ErTBe2	ErTB
15º	CrTBR	ErTB	DrTB	GrTBe3
16º	GrTBe3	GrTBe2	CrTBR	CrTBR
17º	DrTB	CrTBR	CsR	DrTB
18º	CsR	ErTBe	GrTBe3	CsR
19º	GrTBe2	DrTB	ErTBe	ErTBe
20º	ErTBe	CsR	CrTBRe	GrTBe2
21º	CrTBRe	CrTBRe	GrTBe2	CrTBRe

Da análise da tabela 2.13 pode-se concluir que a configuração Ae é a que apresenta as melhores médias para todos os critérios. A configuração As apresenta a segunda melhor média para IAPG e VAL1, a configuração Ee apresenta a segunda melhor média para IAPG-EPS, a configuração GrTBe apresenta a segunda melhor média para VAL2 e a configuração Es apresenta a terceira melhor média para IAPG. As configurações As, Ae, Es, Ee e GrTBe são as que se revelam mais promissoras dado que para todos os critérios apresentam as melhores médias (tabela 2.13). Para todos os critérios estas cinco configurações encontram-se nos primeiros cinco lugares só depois aparecendo as restantes configurações.

A distribuição das respostas foi também analisada e, portanto, para cada critério (IAPG, VAL1, IAPG-EPS e VAL2) a gama de resultados foi dividida em 10 intervalos iguais e calculou-se para cada configuração a percentagem de ensaios do plano experimental cujo resultado estava contido no primeiro intervalo. Concluiu-se que para as configurações As, Ae, Es, Ee e GrTBe os resultados estão maioritariamente contidos no primeiro intervalo tal como se pode ver na Tabela 2.14. Para todos os critérios estas configurações apresentam, portanto, uma maior percentagem de respostas no primeiro intervalo, com excepção da configuração Ee para o critério

económico VAL1 em que as configurações CRe, GrTB e GrTBe5 apresentam um resultado melhor.

Tabela 2.14 Percentagem de ensaios contidos no primeiro intervalo

Configuração	IAPG	IAPG-EPS	VAL1	VAL2
As	100%	100%	100%	100%
Ae	100%	100%	100%	100%
Ce	0%	0%	0%	0%
CsR	67%	67%	67%	67%
CRe	75%	75%	75%	75%
CrTBR	33%	33%	22%	33%
CrTBeRe	0%	14%	0%	0%
DrTB	40%	40%	40%	40%
Es	100%	100%	80%	80%
Ee	100%	100%	67%	100%
ErTB	33%	33%	50%	33%
ErTBe	0%	0%	0%	0%
ErTBe2	33%	33%	50%	33%
ErTBe3	33%	33%	50%	33%
ErTBe4	33%	33%	50%	33%
GrTB	63%	63%	75%	63%
GrTBe	100%	100%	100%	100%
GrTBe2	0%	0%	0%	0%
GrTBe3	0%	0%	0%	0%
GrTBe4	67%	83%	67%	67%
GrTBe5	83%	83%	83%	67%

Na próxima etapa, a optimização, serão estudadas cinco configurações, As, Ae, Es, Ee e GrTBe, por serem as que se revelaram melhores mediante os critérios considerados, IAPG, VAL1, IAPG-EPS e VAL2. Estas cinco configurações possuem as melhores médias e uma percentagem de respostas no primeiro intervalo da distribuição das respostas igual ou próxima de 100%.

4 Conclusões

A metodologia descrita propõe a aplicação de um procedimento hierárquico/heurístico que permite a criação de uma hiperestrutura de alternativas, por consideração de todas ou algumas das decisões alternativas mais promissoras em cada etapa do processo de geração. Segue-se uma etapa de refinamento do espaço de procura, mediante a aplicação de regras heurísticas, com o objectivo de eliminar as configurações que sejam inviáveis e/ou de difícil execução e/ou cujos resultados possam ser pouco interessantes. O conjunto de configurações resultante é depois alargado, para considerar alternativas que contemplem a integração energética. Desta forma é definido o espaço de procura, resolvendo de forma aproximada o problema inteiro.

A aplicação do desenho estatístico às configurações do conjunto anteriormente referido permite seleccionar de forma clara as que permitem satisfazer um determinado requisito de qualidade e que, portanto, estão contidas no espaço de configurações viáveis da hiperestrutura. Por outro lado, os resultados para os ensaios dos planos experimentais permitem também determinar as configurações que não foram capazes de satisfazer o critério de qualidade, para as gamas de variação consideradas. Para outras configurações a aplicação do desenho estatístico não permite concluir se estão no espaço de configurações viáveis para as gamas de variação consideradas, umas porque infringem restrições e outras por ausência de resultados, devido a dificuldades de convergência, que podem reflectir impossibilidades processuais e/ou problemas de resolução no simulador. As configurações As, Ae, Ce, CsR, CeR, CrTBR, CrTBeR, DrTB, Es, Ee, ErTB, ErTBe, ErTBe2, ErTBe3, ErTBe4, GrTB, GrTBe, GrTBe2, GrTBe3, GrTBe4 e GrTBe5 evidenciaram conseguir cumprir o requisito de qualidade (pureza da corrente de benzeno superior a 99,0%) enquanto as configurações ArTB, ArTBe, Cs, CrTB, CrTBe e DrTBe não o fizeram. As configurações ErTBe5 e GrTBe6 conseguiram atingir o objectivo mas infringiram restrições e para a configuração GrTBe7 não existem resultados. Comparando as conclusões da aplicação do desenho estatístico (considerando um requisito de qualidade) com o trabalho desenvolvido por Douglas (1988) foi possível concluir que das dez configurações comuns a este autor (ErTB, ErTBe, ErTBe2, ErTBe3, ErTBe4, ErTBe5, GrTB, GrTBe, GrTB2 e GrTB3) todas evidenciaram serem capazes de satisfazer o critério de qualidade embora ErTBe5 tenha infringido restrições. De referir que no caso desta configuração e de GrTBe6 existem restrições adicionais que se reflectem nos resultados de alguns dos ensaios dos planos experimentais.

Da etapa anterior pode resultar um número apreciável de configurações que pode interessar reduzir, sendo possível aplicar novamente o desenho estatístico, agora usando critérios económicos, ambientais e/ou mistos, que consideram uma análise detalhada de todos os seus componentes, para seleccionar as configurações por ordenação. Da análise dos resultados obtidos para a aplicação do desenho estatístico considerando critérios económicos, ambientais e mistos, concluiu-se que existem 5 configurações que se destacam, por apresentarem melhores médias que as restantes para todos os critérios (IAPG, IAPG-EPS, VAL1 e VAL2) e pelo facto da percentagem de ensaios contido no primeiro intervalo da distribuição de resultados ser igual ou próxima de 100%. Verificou-se que para o grupo E as configurações em que existe recirculação da corrente de tolueno e bifenilo obtiveram piores resultados, devido ao facto dos caudais das correntes processuais serem geralmente superiores, o que implica não só maiores custos de capital e de operação (ex.: no compressor) mas também maiores impactos ambientais (as emissões fugitivas são superiores). Relativamente à integração energética existem casos em que é vantajosa quer do ponto de vista económico quer do ponto de vista ambiental (ex.: A e Ae) e outros em

que isso não acontece (ex.: Es e Ee). Relativamente ao grupo G existem configurações que contemplam a integração que são melhores economicamente e ambientalmente do que a configuração base (ex.: GrTBe) e outras que são piores (ex.: GrTBe2).

Com a aplicação do desenho estatístico foi possível reduzir o número de configurações, de 30 (seleccionadas por regras heurísticas) para 5. As configurações que satisfizeram todos os requisitos, de qualidade, económicos, ambientais e mistos são As, Ae, Es, Ee e GrTBe. Das configurações comuns a Douglas (1988) apenas uma foi seleccionada (GrTBe). As configurações comuns a este autor e pertencentes ao grupo E e G não foram seleccionadas essencialmente devido ao facto de apresentarem caudais das correntes processuais elevados o que piora o desempenho económico e ambiental.

Esta metodologia permite, portanto, resolver o problema da definição do espaço de procura, resolvendo de forma aproximada o problema inteiro. Para além disso, permite seleccionar rápida e eficientemente, as configurações que provavelmente conterão o óptimo, uma vez que considera requisitos de qualidade, critérios económicos, ambientais e mistos para a sua selecção. Outra vantagem desta metodologia é que considera na sua abordagem as interacções das variáveis o que lhe confere características de uma abordagem de resolução simultânea (de que é exemplo a programação matemática).

5 Bibliografia

Andreovich, M. J. e Westerberg, A. W. (1985). "An MILP formulation for heat - integrated distillation sequence synthesis." *AIChE Journal* **31**: 1461-1474.

Bagajewicz, M. J. e Manousiouthakis, V. (1992). "Mass/heat -exchange network representation of distillation networks." *AIChE Journal* **38**: 1769-1800.

Biegler, L. T., Grossmann, I. E. e Westerberg, A. W. (1997). *Systematic Methods of Chemical Process Design*. New Jersey, Prentice-Hall , Inc.

Cabezas, H., Bare, J. C. e Mallick, S. K. (1997). "Pollution prevention with chemical process simulators: the generalized waste reduction (WAR) algorithm." *Computers & Chemical Engineering* **21**: S305-S310.

Cano-Ruiz, J. A. e McRae, G. J. (1998). "Environmentally conscious chemical process design." *Ann. Rev. Energy Environ.* **23**: 499-523.

Cardona, C. A., Marulanda, V. F. e Young, D. (2004). "Analysis of the environmental impact of butylacetate process through the WAR algorithm." *Chem. Eng. Sci.* **59**: 5839-5845.

Daichenndt, M. M. e Grossmann, I. E. (1997). "Integration of hierarchical decomposition and mathematical programming for the synthesis of process flowsheets." *Computers and Chemical Engineering* **22**(1-2): 147-175.

Dantus, M. M. e High, K. A. (1996). "Economic Evaluation for the Retrofit of Chemical Process through Waste Minimization and Process Integration." *Ind. Eng. Chem. Res.* **35**: 4566-4578.

Douglas, J. M. (1985). "A Hierarchical Decision Procedure for Process Synthesis." *AIChE Journal* **31**: 353-362.

Douglas, J. M. (1988). *Conceptual Design of Chemical Processes*. Singapore, McGraw-Hill Chemical Engineering Series.

Douglas, J. M. (1992). "Process synthesis for waste minimization." *Ind. Eng. Chem. Res.* **31**: 238-243.

El-Halwagi, M. M. e Hamad, A. A. (1996). "Synthesis of Waste Interception and Allocation Networks." *AIChE J.* **42**(11): 3087-3101.

El-Halwagi, M. M. e Manousiouthakis, V. (1990). "Automatic Synthesis of Mass-Exchange Networks with Single-Component Targets." *Chem. Eng. Sci.* **45**(9): 2813-2831.

Elliott, A. D., Sowerby, B. e Crittenden, B. D. (1996). "Quantitative environmental impact analysis for clean design." *Computers & Chemical Engineering* **20**: S1377-S1382.

European_Commission (Fevereiro 2003). *Integrated Pollution Prevention and Control (IPPC). Reference Document on Best Available Techniques in the Large Volume Organic Chemical Industry*.

Geoffrion, A. M. (1972). "Generalized Benders Decomposition." *Journal of Optimization Theory and Applications* **10**: 237-260.

Guinée, J. B. (2002). *Handbook on life cycle assessment. Operational guide to the ISO standards*. Dordrecht, Kluwer Academic Publishers.

IChemE. (Janeiro/2007). "The Sustainability Metrics." www.icheme.org.

Kocis, G. R. e Grossmann, I. E. (1989). "A modeling and decomposition strategy for the MINLP optimization of process flowsheets." *Computers and Chemical Engineering* **13**: 797-819.

Kondili, E., Pantelides, C. C. e Sargent, R. W. H. (1993). "A general algorithm for short-term scheduling of batch operations-I. MILP formulation." *Computers and Chemical Engineering* **17**: 211-227.

Kravanja, S., Kravanja, Z. e Bedenik, B. S. (1998). "The MINLP optimization approach to structural synthesis. Part I: A general view on simultaneous topology and parameter optimization." *Int.J.Numer. Meth. Engng* **43**: 263-292.

Land, A. H. e Doig, A. G. (1960). "An automatic method of solving discrete programming problems." *Econometrica* **28**: 497-520.

Linnhoff, B., Townsend, D. W., Boland, D., Hewitt, G. F., Thomas, B. E. A., Guy, A. R. e Marsland, R. H. (1994). *A User Guide on PROCESS INTEGRATION FOR THE EFFICIENT USE OF ENERGY*. Warwickshire, Institution of Chemical Engineers.

Luyben, W. L., Tyréus, B. D. e Luyben, M. L. (1999). *Plantwide Process Control*. New York, McGraw-Hill.

Mallick, S. K., Cabezas, H., Bare, J. C. e Sikdar, S. K. (1996). "A pollution reduction methodology for chemical process simulators." *Ind. Eng. Chem. Res.* **35**: 4128-4138.

Montgomery, D. C. (2001). *Design and Analysis of Experiments*. New York, John Wiley & Sons, Inc.

Papalexandri, K. P. e Pistikopoulos, E. N. (1996). "Generalized modular representation framework for process synthesis." *AIChE Journal* **42**: 1010-1032.

Peters, M. S., Timmerhaus, K. D. e West, R. E. (2003). *Plant Design and Economics for Chemical Engineers*. Boston, McGraw-Hill.

Qiu, Q. F., Krishnaswamy, P. R. e Rangaiah, G. P. (2000). *Modeling and simulation of HDA process for plant-wide design and control studies*. Chemical and Process Engineering Conference (CPEC), Singapore.

Relvas, S., Fernandes, M. C., Matos, H. A. e Nunes, C. P. (2002). *integração de Processos - Uma metodologia de otimização energética e ambiental*.

Rossiter, A. P., Spriggs, H. D. e Klee, H. (1993). "Apply Process integration to Waste Minimization." *Chemical Engineering Progress* **January**: 30-36.

Roy, R. K. (2001). *Design of Experiments Using the Taguchi Approach*. New York, John Wiley & Sons, Inc.

- SAS Institute Inc. (1989-2003). JMP 5.0.1.2.
- Siirola, J. J., Powers, G. J. e Rudd, D. F. (1971). "Synthesis of System Designs." *AIChE Journal* **17**: 677-682.
- Simulation Sciences Inc. (1994 - 2005). Pro/II 7.1.
- Smith, R. (1995). *Chemical Process Design*. Singapore, McGraw-Hill, Inc.
- Smith, R. L., Mata, T. M., Young, D. M., Cabezas, H. e Costa, C. A. V. (2004). "Designing environmentally friendly chemical processes with fugitive and open emissions." *Journal of Cleaner Production* **12**: 125-129.
- Srinivas, B. K. e El-Halwagi, M. M. (1994). "Synthesis of Combined Heat and Reactive Mass-Exchange Networks." *Chem. Eng. Sci.* **49**(13): 2059-2074.
- Steen, B. (1999). A systematic approach to environmental priority strategies in product development (EPS). Version 2000 - Models and data of the default method, Centre for the environmental assessment of Products and Material systems.
- Tedder, W. D. e Rudd, D. F. (1978). "Parametric Studies in Industrial Distillation." *AIChE Journal* **24**(2): 303-315.
- Uerdingen, E., Fischer, U. e Hungerbuhler, K. (2003). "Screening for Profitable Retrofit Options of Chemical Processes: a New Method." *AIChE Journal* **49**(9): 2400-2418
- Wang, Y. P. e Smith, R. (1994). "Wastewater minimisation." *Chem. Eng. Sci.* **49**: 981-1006.
- Yeomans, H. e Grossman, I. E. (1999). "A Systematic modelling framework of superstructure optimization in process synthesis." *Computers and Chemical Engineering* **23**: 709-731.
- Young, D. M. e Cabezas, H. (1999). "Designing sustainable processes with simulation: the waste reduction (WAR) algorithm." *Computers and Chemical Engineering* **23**: 1477-1491.

APÊNDICES

Os apêndices deste capítulo estão no CD.

A1. Experimentação factorial

A2. Caso de estudo

A3. Avaliação económica

A4. Avaliação ambiental

A5. Resultados

Capítulo 3

Optimização de processos químicos usando meta-heurísticas

Nomenclatura

ΔC	diferença entre os valores da função objectivo para iterações consecutivas	
C_M	valor mais desfavorável encontrado para a função objectivo	[€]
d_m	diferença máxima entre avaliações durante a qual não houve alteração da solução	
f	função objectivo	
g	funções restrição	
h	funções ligação	
IAPG	impacto ambiental potencial global	
IAPG-EPS	impacto ambiental potencial global (metodologia EPS)	[ELU/ano]
K	número de ciclos (SA)	
k	número da iteração actual	
k_{center}	determina qual a fracção do número total de iterações para o qual $s(k) = 0,5$	
M	número total de iterações	
P	probabilidade	
$s(k)$	função sigmóide	
T_{SA}	temperatura	
T_{SA0}	temperatura inicial	
ud	diferença entre o número total de avaliações e o número da avaliação correspondente à última solução encontrada	
US	número da avaliação correspondente ao último sucesso	
VAL1	valor actualizado líquido sem inclusão dos custos dos impactos ambientais EPS	[€]
VAL2	valor actualizado líquido com inclusão dos custos dos impactos ambientais EPS	[€]
vc (1)	caudal de hidrogénio	[mol/s]
vc (2)	caudal de metano	[mol/s]
vc (3)	pressão do flash	[Pa]
vc (4)	fracção molar de benzeno na purga	
vc (5)	caudal da purga	[mol/s]
vc (6)	volume do reactor	[m ³]
vc (7)	fracção molar de tolueno da coluna 2	
vc (8)	fracção molar de benzeno da coluna 2	
vc (9)	pressão da coluna 2	[Pa]
vc (10)	fracção molar de benzeno da coluna 1	
vc (11)	razão de refluxo da coluna 1	
vc (12)	pressão da coluna 1	[Pa]
vc (13)	fracção molar bifenilo da coluna 3	
vc (14)	pressão da coluna 3	[Pa]
vc (15)	número de pratos da coluna 1	
vc (16)	número de pratos da coluna 2	
vc (17)	número de pratos rectificador	
vc (18)	número de pratos da coluna 3	
vc (19)	fracção molar de tolueno da coluna 3	
vc (20)	fracção molar de tolueno no rectificador	
vc (21)	caudal fixo da coluna 2	[mol/s]
Δv_c	incremento para a variável vc	
x	vector variáveis de decisão	

Letras gregas

α	constante
δ	valor específico
$\sigma (T_{SA})$	desvio padrão da função objectivo à temperatura actual

Acrónimos

GRASP	<i>greedy randomized adaptive search procedure</i>
ILS	<i>iterated local search</i>
ISWT	<i>Interactive Surrogate Worth Trade-off</i>
LP	problema linear
MOLP	problema linear multi-objectivo
MONLP	problema não linear multi-objectivo
MOSA	recozimento simulado multi-objectivo desenvolvido por ULungu et al. (1999)
NBI	método da intersecção do limite normal
NLP	problema não linear
NSGA	algoritmo genético de procura não dominada
PDMOSA	<i>Pareto Domination based Multiobjective Simulated Annealing</i> desenvolvido por Suman (2003)
PSA	recozimento simulado de <i>Pareto</i>
SA	recozimento simulado
SMOSA	recozimento simulado multi-objectivo desenvolvido por Suppapitnarm et al. (2000)
SQP	programação quadrática sequencial
TS	pesquisa tabu
WMOSA	<i>Weight based Multiobjective Simulated Annealing</i> desenvolvido por Suman (2003)

ÍNDICE

1	Introdução	1
2	Optimização monobjectivo	3
2.1	Introdução	3
2.2	Metodologia/algoritmos	4
2.2.1	Interface simulador / programa	4
2.2.2	Recozimento simulado.....	4
2.2.3	Pesquisa Tabu	10
2.3	Sintonização do algoritmo com SA e funções objectivo	14
2.4	Sintonização do algoritmo com TS e funções objectivo.....	16
2.5	Resultados e discussão	18
2.5.1	Recozimento simulado (SA)	18
2.5.2	Pesquisa tabu (TS).....	31
3	Optimização multi-objectivo – recozimento simulado modificado	45
3.1	Introdução	45
3.2	Problema de optimização multi-objectivo	49
3.2.1	Formulação	49
3.2.2	Características	49
3.2.3	Soluções óptimas de Pareto e dominância	49
3.3	Algoritmo SA proposto	51
3.4	Resultados e discussão	53
4	Conclusões	61
4.1	Optimização monobjectivo	61
4.2	Optimização multi-objectivo	62
5	Bibliografia	63
APÊNDICES		
B1. Resultados Recozimento Simulado		
B2. Resultados Pesquisa Tabu		
B3. Resultados Multi-objectivo Recozimento Simulado		

Índice de figuras

Figura 3. 1 Ligação entre optimização e simulação.....	4
Figura 3. 2 Algoritmo do recozimento simulado aplicado à Simulação/Optimização	9
Figura 3. 3 Algoritmo da pesquisa Tabu aplicado à Simulação/Optimização	13
Figura 3.4 Evolução da primeira optimização A/VAL1/SA.....	19
Figura 3.5 Evolução da quarta optimização Ee/VAL1/SA.....	19
Figura 3.6 Evolução das diferentes grandezas avaliadas para a melhor solução obtida na optimização de VAL1 (pureza >0,990) – GrTBe	24
Figura 3.7 Evolução das diferentes grandezas avaliadas para a melhor solução obtida na optimização de VAL2 (pureza>0,990) – GrTBe	25
Figura 3.8 Evolução das diferentes grandezas avaliadas para a melhor solução obtida na optimização de IAPG (pureza>0,990) – E.....	27
Figura 3.9 Evolução das diferentes grandezas avaliadas para a melhor solução obtida na optimização de IAPG-EPS (pureza>0,990) – GrTBe.....	28
Figura 3.10 Impactos ambientais potenciais globais – Função objectivo IAPG – Configuração E	29
Figura 3.11 Impactos ambientais potenciais globais – Função objectivo IAPG-EPS – Configuração GrTBe	30
Figura 3.12 Evolução da optimização E/VAL1/TS	32
Figura 3.13 Evolução da optimização Ee/IAPG-EPS/TS	33
Figura 3.14 Evolução das diferentes grandezas avaliadas para a melhor solução obtida na optimização de VAL1 (pureza>0,990) – GrTBe	37
Figura 3.15 Evolução das diferentes grandezas avaliadas para a melhor solução obtida na optimização de VAL2 (pureza>0,990) – GrTBe	38
Figura 3.16 Evolução das diferentes grandezas avaliadas para a melhor solução obtida na optimização de IAPG (pureza>0,990) –E.....	40
Figura 3.17 Evolução das diferentes grandezas avaliadas para a melhor solução obtida na optimização de IAPG-EPS (pureza>0,990) – GrTBe.....	41
Figura 3.18 Detalhe do critério de aceitação no SA multi-objectivo	52

Índice de tabelas

Tabela 3.1 Precisão nas optimizações efectuadas com SA	21
Tabela 3.2 Análise da aplicação de um critério de convergência (SA).....	22
Tabela 3.3 Resultados para VAL1 (SA)	23
Tabela 3.4 Resultados para VAL2 (SA)	23
Tabela 3.5 Resultados para IAPG (SA)	26
Tabela 3.6 Resultados para IAPG-EPS (SA)	26
Tabela 3.7 Precisão nas optimizações efectuadas com TS	34
Tabela 3.8 Análise da aplicação de um critério de convergência (TS).....	35
Tabela 3.9 Resultados para VAL1 (TS)	36
Tabela 3.10 Resultados para VAL2 (TS)	36
Tabela 3.11 Resultados para IAPG (TS)	39
Tabela 3.12 Resultados para IAPG-EPS (TS)	39
Tabela 3.13 Soluções não dominadas obtidas nas optimizações multi-objectivo	53
Tabela 3.14 Resultados das cinco optimizações multi-objectivo considerando VAL1 como a primeira função objectivo – Configuração E	55
Tabela 3.15 Desempenho do algoritmo multi-objectivo SA – Configuração E.....	56
Tabela 3.16 Desempenho do algoritmo multi-objectivo SA – Configuração Ee.....	56
Tabela 3.17 Desempenho do algoritmo multi-objectivo SA – Configuração GrTBe.....	57

1 Introdução

Para resolver os problemas de optimização NLP ou LP incluindo os resultantes da resolução aproximada do problema inteiro efectuada no segundo capítulo, poder-se-iam utilizar os algoritmos simplex e os métodos barreira para os problemas lineares e os métodos baseados em programação quadrática sequencial (SQP) e no gradiente reduzido generalizado (GRG) para os problemas não lineares. Contudo, dado tratar-se de problemas de optimização de diagramas completos e não de operações ou fracções de diagramas (p.ex.: redes de transferência de calor), o que implica uma maior complexidade, as meta-heurísticas constituem uma classe de algoritmos adequada à resolução deste tipo de problemas. As meta-heurísticas não requerem o cálculo de gradientes ao contrário do que acontece, por exemplo, com o gradiente reduzido generalizado, GRG (*generalized reduced gradient*), sendo métodos de procura global e conseguindo em muitos problemas difíceis obter boas soluções, embora não haja evidências matemáticas da sua convergência para o óptimo.

As meta-heurísticas envolvem um conjunto de estratégias e de heurísticas, integradas num algoritmo, que podem ser aplicadas com sucesso a problemas muito diferentes, não sendo necessário efectuar grandes alterações. O recozimento simulado (SA), a pesquisa Tabu (TS), os algoritmos evolucionários (que incluem os algoritmos genéticos), os métodos de pesquisa local como o ILS (*Iterated Local Search*) ou o GRASP (*Greedy Randomized Adaptive Search Procedure*) e colónia de formigas são exemplos de meta-heurísticas. Para alguns destes métodos, nomeadamente para o recozimento simulado e para os algoritmos genéticos, existem teoremas que garantem convergência e unicidade de solução em determinadas circunstâncias. À medida que o número de iterações aumenta, a probabilidade de atingir o óptimo tende para 1.

As meta-heurísticas exploram o espaço de forma a procurar soluções óptimas ou próximas do óptimo, são geralmente não determinísticas, incorporam normalmente mecanismos que impedem a convergência para óptimos locais e algumas utilizam a memória para guiar a procura. Aquelas podem ser classificadas de acordo com o tipo de pesquisa que efectuam, num ponto (ex.: SA, TS) ou populações de pontos (ex.: algoritmos genéticos) (Blum e Roli, 2003). Algumas das meta-heurísticas são inspiradas na natureza, tais como os algoritmos genéticos e a colónia de formigas, e designam-se por meta-heurísticas naturais. A utilização da memória na procura também pode servir como critério para classificar as meta-heurísticas. A pesquisa Tabu usa a memória na sua estratégia de procura do óptimo contrariamente ao que acontece com o recozimento simulado que geralmente para a progressão do algoritmo apenas utiliza informação actual.

Actualmente a prevenção da poluição é alvo de maior interesse, o que implica a consideração dos aspectos ambientais na concepção de diagramas processuais e na sua optimização como forma de conseguir processos simultaneamente com menores incidências ambientais e economicamente competitivos. Nesta área podem-se referir os trabalhos realizados por Brennecke e Stadtherr (2002) na identificação de estratégias de prevenção da poluição e de Cano-Ruiz e McRae (1998) pela síntese efectuada relativamente às abordagens existentes para a incorporação dos aspectos ambientais na concepção de processos. Referem-se ainda os trabalhos de Bakshi (2002) que desenvolveu um método baseado na termodinâmica (análise da emergência e exergia) para avaliar o desempenho ambiental e sustentabilidade de um processo e o trabalho de Stefanis et al. (1995) que apresenta uma metodologia para minimização dos impactos ambientais, preconizando o cálculo de um vector que representa o impacto ambiental global do processo. Os impactos ambientais têm um peso económico para a empresa, para os clientes e para a sociedade em geral, embora a

sua tradução em termos económicos seja por vezes uma tarefa difícil e rodeada de inúmeras incertezas.

A optimização económica e ambiental monobjectivo, usando funções objectivo económicas, ambientais ou mistas, surge assim como um passo essencial para a obtenção de processos químicos mais económicos e mais ecológicos. Contudo, a optimização segundo critérios económicos convencionais e segundo critérios ambientais pode conduzir a diferentes óptimos. A optimização dos problemas LP ou NLP considerando funções objectivo económicas, como por exemplo o valor actualizado líquido, VAL1, poderá encontrar o óptimo económico. Por outro lado, a optimização usando funções objectivo ambientais, como por exemplo o impacto potencial global, IAPG, poderá determinar o óptimo ambiental. Nesta situação, a optimização considerando funções objectivo mistas (económicas e ambientais) como o valor líquido actualizado com inclusão do custo dos impactos ambientais, VAL2, pode revestir-se de particular importância por permitir determinar um óptimo económico e ambiental.

Outra alternativa para a resolução adequada dos problemas que consideram não só objectivos económicos mas ambientais será a optimização multi-objectivo. A optimização multi-objectivo será tratada com maior detalhe no ponto 3 o que permitirá comparar os resultados obtidos pela optimização monobjectivo (considerando funções objectivo económicas, ambientais e mistas), com os resultados obtidos com a optimização multi-objectivo.

Neste capítulo explora-se a aplicação de algoritmos de optimização mono e multi objectivo para a resolução dos problemas NLP resultantes da aplicação do procedimento apresentado no Capítulo 2 ao caso de estudo.

2 Optimização monobjectivo

2.1 Introdução

Dada a natureza combinatória dos problemas LP ou NLP, o recozimento simulado é uma boa opção para sua resolução, pelo que foi escolhido. A comparação de resultados obtidos pela aplicação de diferentes meta-heurísticas a um determinado problema é importante para avaliar o desempenho e adequabilidade de cada meta-heurística para esse tipo de problemas, pelo que os problemas LP ou NLP foram também resolvidos utilizando a pesquisa Tabu. Esta foi escolhida, por ser um método apropriado para problemas combinatórios, que difere significativamente do recozimento simulado, uma vez que utiliza a memória na progressão do algoritmo e porque não tem sido muito utilizado na optimização de processos. Para realizar as optimizações pretendidas foram escolhidas, portanto, duas meta-heurísticas: o recozimento simulado e a pesquisa tabu.

O método do recozimento simulado tem sido reconhecido como indicado para problemas de elevada dimensão. Foi utilizado com sucesso na resolução do problema do caixeiro-viajante e no projecto de circuitos integrados complexos e a sua implementação é relativamente simples (Press et al., 1992). Esta classe de algoritmos é muito utilizada na minimização em problemas combinatórios. Na área da engenharia química, podem-se referir os trabalhos realizados por Dolan et al.(1990) em redes de permutadores, Das et al. (1990), Ku e Karimi (1991), Patel et al. (1991) e Cardoso et al. (1997) em escalonamento da produção, Hanke e Li (2000) na optimização de processos de destilação não contínuos e Faber et al. (2004) em optimização dinâmica entre outros. Em relação à optimização de problemas de variáveis contínuas podem-se referir os trabalhos de Press e Teukolsky (1991) e Cardoso et al. (1996).

Em relação à pesquisa Tabu podem-se referir os trabalhos de Cavin et al. (2005) em escalonamento da produção e de Lin e Miller (2004) na optimização de alguns casos de estudo de engenharia química, de que se pode destacar o projecto de redes de transferência de calor e de sistemas de bombas. A pesquisa Tabu tem sido, portanto, pouco utilizada na optimização de processos.

Em qualquer dos casos não são frequentes os trabalhos que usam funções objectivo contemplando aspectos ambientais para além dos económicos.

Objectivos do subcapítulo

- análise da aplicação de algoritmos usando meta-heurísticas do tipo recozimento simulado e pesquisa Tabu à optimização de processos;
- utilização de funções objectivo do tipo económico, ambiental ou misto;
- comparação do desempenho dos algoritmos para as mesmas funções objectivo;
- comparação dos resultados de optimização face às funções objectivo.

2.2 Metodologia/algoritmos

2.2.1 Interface simulador / programa

A formulação matemática de alguns problemas reais, como os relacionados com a optimização de processos químicos completos, conduz a maior parte das vezes a expressões complicadas e o desenvolvimento de um modelo pode constituir uma tarefa difícil. A simulação nestes casos reveste-se de particular importância, podendo usar-se para o efeito um dos simuladores comerciais existentes no mercado, de que é exemplo o PRO/II. A simulação constitui uma ferramenta importante para melhorar o desempenho e eficiência das instalações existentes e no projecto de novas instalações. Contudo uma das desvantagens da simulação é que só possibilita a análise pontual, sendo geralmente alvo de estudo uma fracção muito pequena das opções existentes. A enumeração completa de todas as combinações de variáveis que permitiria resolver este problema não é uma opção viável, especialmente no caso de problemas de elevada dimensão. A ligação do simulador a um programa de optimização permite a procura da solução ótima. Dado o carácter desta ligação, no caso dos simuladores modulares, em que o programa de optimização não tem acesso directo ao simulador, contribuindo com os dados de entrada para que se efectue a simulação pretendida e retirando os dados de saída que servirão para cálculo da função objectivo, as meta-heurísticas são algoritmos de optimização indicados para esta situação, embora também seja possível aplicar de outro tipo. Tal como já referido foi desenvolvida uma interface programa de optimização/simulador.

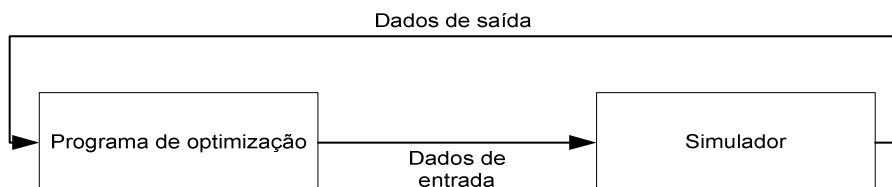


Figura 3. 1 Ligação entre optimização e simulação

2.2.2 Recozimento simulado

Este algoritmo foi proposto por Kirkpatrick (1983) que estabeleceu uma analogia entre o arrefecimento de um líquido e a optimização de um sistema complexo.

O recozimento simulado é uma técnica de optimização multivariável baseada num processo aleatório, condicionada por uma função probabilidade (por exemplo, distribuição de Boltzman). Aceita e rejeita movimentos de forma aleatória, podendo aceitar movimentos que modificam o valor da função objectivo na direcção oposta à que se pretende. Isto implica que num problema de minimização um movimento que aumenta o valor da função objectivo pode ser aceite como fazendo parte de uma série de movimentos que procura a diminuição do valor da função objectivo. Desta forma, o recozimento simulado é capaz de explorar todo o espaço da solução, evitar extremos locais e as soluções obtidas são independentes do ponto inicial, evitando-se, portanto, o perigo de paragem num ponto afastado do ótimo.

Após terem sido introduzidos alguns parâmetros do algoritmo, tais como temperatura inicial, factor de temperatura, configuração escolhida e eventuais restrições do problema em estudo e terem sido efectuados alguns cálculos iniciais, dependentes do número de variáveis (número de iterações por temperatura, número de sucessos a alcançar, etc.) serão então atribuídos de forma aleatória valores às variáveis de projecto no gerador de soluções. As restrições que existem para as diferentes variáveis podem ser incorporadas no processo de geração através da sua consideração no espaço de procura, de forma que por exemplo, a uma fracção molar nunca seja atribuído um valor negativo. A solução será então simulada e em caso de sucesso são retirados do relatório gerado os resultados para verificação de restrições (ex.: temperaturas nos permutadores) e para cálculo da função objectivo. Em seguida é aplicado o critério de aceitação que decide quais os movimentos que serão aceites. O programa executará então uma série de iterações que conduzirão ao aparecimento de soluções que tenderão a minimizar ou maximizar a função objectivo consoante o que se pretende.

A temperatura é diminuída periodicamente de acordo com o protocolo de arrefecimento: numa primeira fase os movimentos que evoluem no sentido oposto ao que se pretende serão mais facilmente aceites, enquanto numa fase posterior, em que a temperatura já baixou significativamente, dificilmente serão aceites. Desta forma será possível a obtenção de uma solução que é o óptimo ou muito próxima do óptimo da função objectivo. A paragem do programa é efectuada segundo o critério de paragem escolhido (Figura 3. 2).

Para aplicar o recozimento simulado a um determinado problema de optimização é necessário efectuar as seguintes etapas:

- definir a função objectivo;
- determinar a temperatura inicial;
- definir a estratégia para determinar a solução seguinte;
- definir critério de aceitação;
- definir protocolo de arrefecimento;
- definir critério de paragem.

Função objectivo

A função objectivo é previamente definida e a obtenção do máximo ou do mínimo constitui o objectivo do programa. Como exemplos de funções objectivo (f) podem-se referir expressões para cálculo de custos ($f = \sum \text{custos}$) ou de impactos ambientais ($f = \sum \text{impactos ambientais}$).

Temperatura inicial

Da temperatura inicial depende muitas das vezes a obtenção de uma solução óptima. Existem para este parâmetro algumas regras heurísticas (Laarhoven e Aarts, 1987; Press et al., 1992) embora para cada situação seja necessário efectuar uma análise do comportamento do problema face a este parâmetro, o que foi efectuado através da realização de algumas optimizações usando o programa desenvolvido (que engloba o recozimento simulado e o simulador).

Pode ser definida decidindo qual a fracção das soluções geradas que será aceite inicialmente. Quanto maior a temperatura maior o número de movimentos que será aceite o que garante que maior será a procura no espaço de solução. Contudo, isso poderá implicar a necessidade de mais tempo e, portanto, existe aqui uma situação de compromisso entre o valor inicial da temperatura e o tempo necessário (Patel et al., 1991).

A temperatura inicial deve permitir que no início muitos movimentos sejam aceites garantindo assim que o resultado final seja independente da solução inicial considerada.

Fixando a probabilidade de aceitação é possível estimar a temperatura inicial a partir da diferença máxima entre os valores da função objectivo para iterações consecutivas, quando todos os movimentos são aceites. A temperatura inicial é obtida dividindo essa diferença pelo logaritmo natural da probabilidade.

Outra possibilidade é, por exemplo, considerar a temperatura inicial função do valor mais desfavorável para a função objectivo.

Estratégia para determinar a solução seguinte

A solução seguinte pode ser obtida considerando perturbações nas variáveis. O modo e o número de variáveis a sofrerem perturbação depende do problema considerado (Patel et al., 1991; Press et al., 1992; Cardoso et al., 1994). As alterações a efectuar podem ser simplesmente aleatórias ou seguirem regras heurísticas (Press et al., 1992).

Critério de aceitação

Os critérios de aceitação usuais são o algoritmo de Metropolis (1953) e o algoritmo de Glauber (1963).

Algoritmo de Metropolis

Se o valor da função objectivo diminui relativamente à iteração anterior então o movimento é aceite, uma vez que corresponde, no caso de se pretender minimizar a função objectivo, a uma solução melhor que a anterior. Se o seu valor aumentar então os novos valores das variáveis serão aceites com probabilidade P , dada pela distribuição de Boltzman (Press et al., 1992):

$$P = e^{\left(\frac{-\Delta C}{T_{SA}}\right)} \quad (3.1)$$

sendo:

P	probabilidade (número compreendido entre zero e a unidade)
ΔC	diferença entre os valores da função objectivo para iterações consecutivas
T_{SA}	temperatura

Todos os movimentos que resultam num decréscimo do valor da função objectivo são, portanto, aceites com probabilidade um. Os restantes movimentos serão aceites com uma probabilidade compreendida entre 0 e 1, que decresce à medida que a temperatura diminui; no início, esta probabilidade é próxima de um.

Algoritmo de Glauber

No algoritmo de Glauber nem todos os movimentos em que há decréscimo do valor da função objectivo, no caso da minimização de uma função, são aceites.

Todos os movimentos são aceites com uma probabilidade P dada pela seguinte expressão:

$$P = \frac{e^{-\frac{\Delta C}{T_{SA}}}}{1 + e^{-\frac{\Delta C}{T_{SA}}}} \quad (3.2)$$

Isto significa que no início todos os movimentos, quer aumentem quer diminuam o valor da função objectivo, serão aceites com uma probabilidade de 0,5. À medida que a temperatura diminui a probabilidade referente aos movimentos que diminuem o valor da função objectivo, no caso da minimização de uma função, tenderá para 1 enquanto a probabilidade para os outros movimentos tenderá para 0.

Protocolo de arrefecimento

Existem dois protocolos que são geralmente usados, o de Kirkpatrick et al. (1983) e o Aarts e van Laarhoven (1985).

Protocolo de Kirkpatrick

Neste protocolo, designado de arrefecimento exponencial, a nova temperatura é obtida multiplicando a temperatura actual por uma constante, α , compreendida entre zero e um. A nova temperatura é obtida de acordo com a seguinte expressão:

$$T_{SAi+1} = \alpha T_{SAi} \quad (3.3)$$

sendo:

$$\begin{array}{ll} T_{SAi+1} & \text{nova temperatura} \\ T_{SAi} & \text{temperatura actual} \end{array}$$

Este protocolo é determinado pela escolha de α ; quanto maior for esta constante mais lento é o arrefecimento o que favorece a obtenção da solução óptima mas implica a necessidade de um tempo computacional superior. Valores próximos de 1 são geralmente considerados adequados: 0,9 (Press et al., 1992), 0,89 (Das et al., 1990) e 0,91 (Patel et al., 1991).

Protocolo de Aarts e van Laarhoven

Neste protocolo o factor multiplicativo não é uma constante e depende da proximidade ao equilíbrio na temperatura actual. Quanto mais próximo o sistema estiver do equilíbrio (menor desvio padrão) à temperatura actual menor o factor multiplicativo e mais rápido será o recozimento simulado. A ideia base é ter um ritmo que mantenha o sistema perto do equilíbrio para cada temperatura. A nova temperatura é obtida de acordo com a expressão:

$$T_{SAi+1} = T_i \left[1 + \frac{\ln(1+\delta)T_{SAi}}{3\sigma(T_{SA})} \right]^{-1} \quad (3.4)$$

Sendo:

$\sigma(T_{SA})$	desvio padrão da função objectivo à temperatura actual
δ	valor específico, que é uma medida da proximidade ao equilíbrio; quanto mais pequeno, maior é a proximidade pretendida ao equilíbrio e mais lento o recozimento simulado.

Este protocolo é determinado pela escolha de δ . Os valores referidos na bibliografia são geralmente baixos.

Uma das questões mais prementes é o número de iterações a considerar para cada temperatura. Segundo Press et al. (1992) e Aarts and Laarhoven (1985) esse número depende do número de variáveis. De acordo com Aarts and Laarhoven (1985) o número de movimentos a considerar em cada temperatura deve ser no mínimo igual ao número de configurações atingíveis a partir da posição actual. Contudo quando as variáveis são contínuas esse número é infinito, pelo que se torna necessário usar uma heurística. A gama contínua de valores de uma variável poderá ser discretizada em intervalos, nos quais se considera que a função objectivo não varia significativamente e apenas as configurações correspondentes aos extremos serão tratadas. Qualquer outra configuração em que a variável de optimização apresente um valor contido num intervalo será tratada como sendo igual a uma das duas configurações (correspondentes aos extremos). Logo o número de configurações que podem ser geradas a partir da configuração actual, considerando esse intervalo, é igual a duas vezes o número de variáveis de optimização. No entanto, isto coloca a questão do número de intervalos a considerar (Patel et al., 1991). Contudo, poderá servir para estabelecer um número mínimo de iterações a efectuar. Este número deve também ser alvo de experimentação de forma a ser adequado ao problema a ser resolvido.

Critério de paragem

Existem vários critérios de paragem que podem usados: um número fixo de iterações (Patel et al., 1991), a derivada da média dos valores da função objectivo proposto por Aarts and van Laarhoven (1985) e usada também por Patel et al. (1991), o número de sucessos (Press et al., 1992), etc.

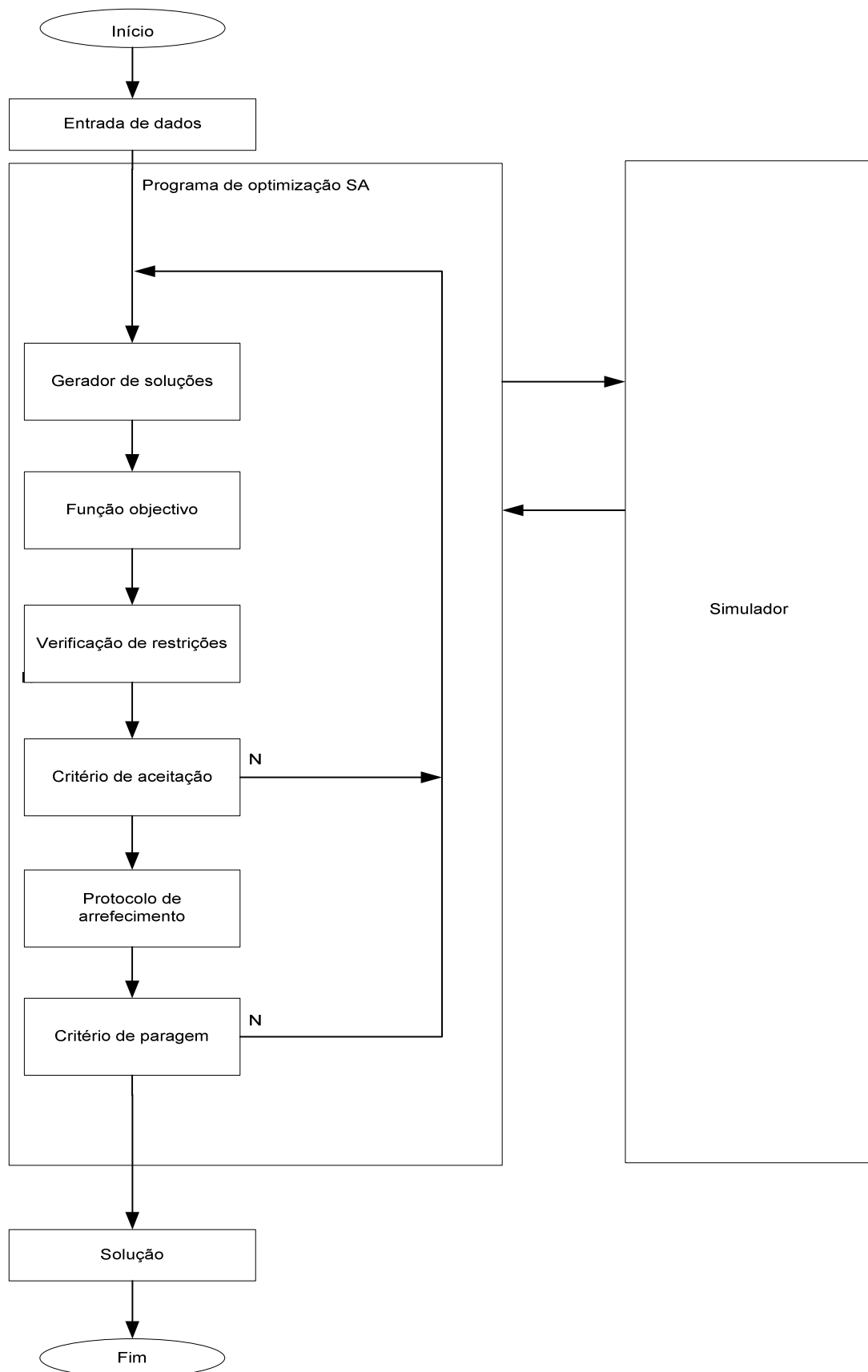


Figura 3. 2 Algoritmo do recozimento simulado aplicado à Simulação/Otimização

2.2.3 Pesquisa Tabu

A pesquisa Tabu é um método de optimização estocástico baseado na memória (Glover, 1986). A pesquisa começa por uma solução inicial viável e gerada aleatoriamente. A partir desta solução inicial são geradas outras soluções através da sua alteração. Estas soluções são avaliadas através da função objectivo. A melhor, que deverá também ser melhor do que a solução inicial, será escolhida como novo ponto de partida, começando novo ciclo. Se a solução melhor, não for melhor que a solução inicial então esse ponto irá para a lista Tabu que terá um funcionamento do tipo *first in /first out* e que é actualizada sistematicamente. A segunda melhor solução será nessa altura o novo ponto de partida. Esta memória é usada para evitar óptimos locais e permite que o algoritmo se adapte ao presente estado da pesquisa, de forma a que todo o espaço seja adequadamente explorado e permite o reconhecimento de situações em que a pesquisa está a convergir para um óptimo local. Estratégias de intensificação fazem com que áreas promissoras sejam exploradas de forma mais minuciosa enquanto as estratégias de diversificação são usadas para fomentar a procura em todo o espaço de solução. O critério de aspiração é utilizado para se sobrepor à lista Tabu nos casos em que é encontrada uma solução melhor que todas as anteriores (Figura 3. 3). Na sua forma mais simples o critério de aspiração pode simplesmente dizer que sempre que isso acontece, essa solução melhor mas que pertence à lista Tabu será daí retirada e usada como novo ponto de partida.

Para aplicar a pesquisa Tabu a um determinado problema de optimização é necessário efectuar as seguintes etapas:

- definir a função objectivo;
- definir a estratégia para determinar as soluções seguintes;
- definir listas tabu;
- definir critério de aspiração;
- definir estratégias de diversificação;
- definir estratégias de intensificação;
- definir critério de paragem.

Função objectivo

A função objectivo é previamente definida e calculada para as sucessivas soluções geradas.

Estratégia para determinar as soluções seguintes

Existem várias estratégias para determinar as soluções seguintes a partir da solução inicial: segundo Lin e Miller (2004) isso poderá ser efectuado mediante a adição à solução inicial de um determinado incremento, Δv_c , calculado através do produto de um número aleatório (entre -1 e 1) e a magnitude do espaço de procura da variável v_c , o mesmo acontecendo para as restantes variáveis; a selecção aleatória de um subconjunto de alterações possíveis foi o critério utilizado por Cavin et al. (2005).

Listas Tabu

O primeiro objectivo das listas Tabu é permitir que o método encontre o óptimo global. As listas Tabu de curta memória são uma forma de exploração agressiva que procura efectuar o melhor movimento possível (Glover, 1990). As restrições incluídas na

constituição da lista Tabu são definidas para evitar a repetição de certos movimentos (que serão proibidos durante um certo número de iterações) e a convergência para óptimos locais, sendo contrabalançadas pelo critério de aspiração. Quando a melhor solução não é melhor que a solução actual, é classificada Tabu e é adicionada à lista Tabu. À medida que novas soluções são adicionadas à lista as mais antigas são libertadas, pelo que esta lista guarda as soluções recentemente estudadas e proíbe portanto, que soluções pouco promissoras sejam novamente avaliadas durante um certo número de iterações. De referir, que num espaço contínuo a probabilidade de uma solução ser gerada mais do que uma vez, é pequena, pelo que apesar das listas Tabu só guardarem soluções específicas, as áreas em redor dessas soluções são classificadas Tabu (Lin e Miller, 2004).

As listas Tabu de média e longa memória actuam principalmente como estratégias de diversificação e intensificação (Glover, 1990). A lista de longa memória depende da frequência com que uma solução é avaliada. Depois de atingido o número máximo de elementos na lista de frequência a solução com um índice menor (o índice corresponde ao número de vezes que a solução foi avaliada e seleccionada, uma vez que esta lista guarda as melhores soluções) será substituída. A memória de longa duração contém mais informação acerca do processo de busca e complementa a memória de curta duração na selecção de futuros movimentos. Permite que a pesquisa Tabu defina uma região historicamente atractiva e que merece ser melhor explorada. Quando é atingido um certo número de iterações pode-se usar como solução de partida a melhor solução da lista de frequência, procedendo desta forma a uma estratégia de intensificação. Para além disso, estas listas permitem ainda direccionar a pesquisa para áreas não avaliadas ou avaliadas menos frequentemente (Lin e Miller, 2004). Quando o índice de uma determinada solução for igual ao número máximo de elementos pode-se prosseguir a procura com uma solução gerada aleatoriamente, efectuando desta forma uma estratégia de diversificação.

Em muitas das primeiras aplicações da pesquisa Tabu o número de elementos nas listas estava compreendido entre 5 e 12 (Glover, 1990). Lin e Miller (2004) sugerem como ponto de partida que o número de elementos nas listas seja igual ao número de variáveis não desvalorizando contudo a experimentação necessária para determinar para cada caso o melhor tamanho das listas.

Critério de aspiração

Enquanto a pesquisa prossegue, várias partes do espaço de procura são classificadas Tabu, mas a melhor solução pode aparecer numa dessas áreas. Nessa altura o critério de aspiração pode ser aplicado e determinar se essa solução será ou não usada. O critério de aspiração pode, tal como já foi dito, sobrepor-se à propriedade Tabu e, portanto, uma solução Tabu que seja melhor que todas as anteriores deixará de o ser e será utilizada no prosseguimento da procura. Pode também apresentar formas mais elaboradas, procurando incorporar intensificação e diversificação na sua avaliação, tal como no trabalho desenvolvido por Lin e Miller (2004).

Estratégias de diversificação

O objectivo das estratégias de diversificação é encorajar a procura em áreas não exploradas através da geração de soluções significativamente diferentes das anteriores.

Quando na lista Tabu de frequência o índice de uma solução, que indica o número de vezes que essa solução foi considerada, atinge o limite máximo considerado (igual ao número de elementos na lista) o processo de pesquisa pode ser reiniciado a partir de

uma solução gerada aleatoriamente (Lin e Miller, 2004), permitindo que a procura prossiga em áreas diferentes e pouco exploradas.

Estratégias de intensificação

Existem várias estratégias de intensificação possíveis tais como a escolha de um conjunto de soluções de elite cujos componentes são usados para construir novas soluções como o fizeram Wang et al. (1999) ou o método de Lin e Miller (2004) que procura aprofundar a relação entre a intensificação e a distribuição das soluções.

Critério de paragem

Como critérios de paragem podem referir-se a consideração de um número fixo de iterações ou um critério de convergência como o usado por Lin e Miller (2004) em que se não houver melhoria significativa entre soluções consecutivas durante um certo número de iterações o algoritmo pára.

Na figura seguinte encontra-se representado o algoritmo da pesquisa Tabu.

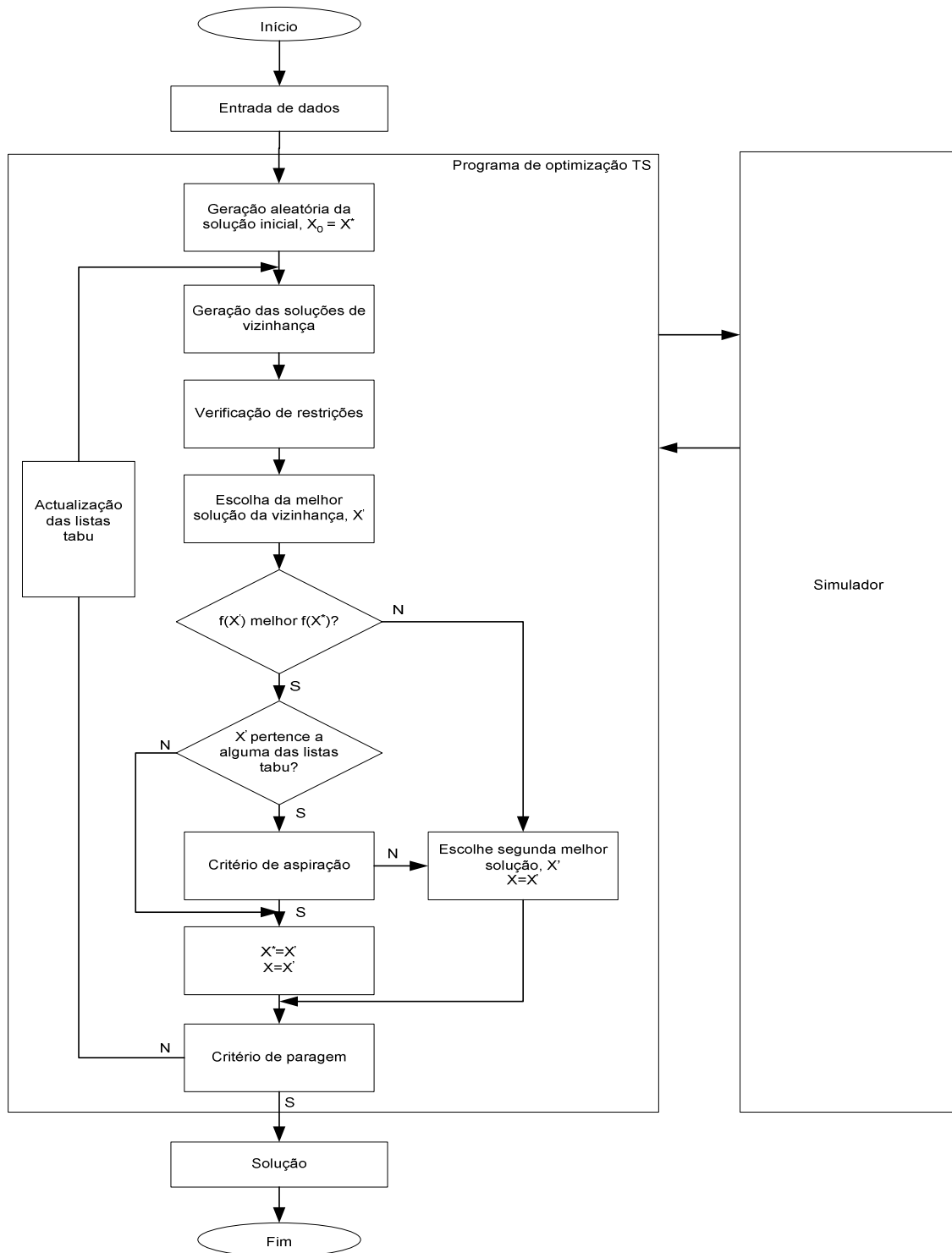


Figura 3. 3 Algoritmo da pesquisa Tabu aplicado à Simulação/Optimização

2.3 Sintonização do algoritmo com SA e funções objectivo

Funções objectivo

Foram consideradas quatro funções objectivo:

- Valor Actualizado Líquido (VAL1) - maximização;
- Valor Actualizado Líquido com inclusão dos custos dos impactos ambientais EPS (VAL2) - maximização;
- Impacto Ambiental Potencial Global (IAPG) - minimização;
- Impactos ambientais mediante metodologia EPS (IAPG-EPS) – minimização.

Temperatura inicial

Para determinar a temperatura inicial foram efectuadas algumas optimizações. Os valores testados para a temperatura inicial são função do valor mais desfavorável para a função objectivo (C_M) determinado na fase de selecção de configurações mediante critérios económicos, ambientais ou mistos. Foram calculados três valores para a temperatura inicial (T_{SA0}), considerando percentagens do valor mais desfavorável para a função objectivo, nomeadamente 1%, 10% e 100% ($T_{SA0}=0,01 \cdot C_M$; $T_{SA0}=0,1 \cdot C_M$; $T_{SA0}=1 \cdot C_M$). Para seleccionar a temperatura inicial a utilizar realizaram-se várias optimizações e determinou-se o desvio das várias soluções encontradas relativamente à melhor solução obtida. Mediante os resultados obtidos e que podem ser consultados no Apêndice B.1 escolheu-se $T_{SA0}=0,1 \cdot C_M$.

Estratégia para determinar a solução seguinte

No caso da optimização de configurações de processos químicos, existem variáveis contínuas, como a pressão e a temperatura e variáveis discretas, como o número de pratos nas colunas. De referir que algumas das variáveis discretas (do tipo 0 ou 1) já foram especificadas no Capítulo 2, nomeadamente as que dizem respeito à construção da topologia das configurações. Em cada iteração é gerado, para cada variável, um número aleatório que corresponderá a uma determinada percentagem da gama de variação dessa variável, o que permite o cálculo de um incremento. Foi construída, portanto, uma matriz fazendo corresponder números inteiros a percentagens da gama de variação. O valor da variável para cada iteração é a soma do valor mínimo para essa variável mais o incremento calculado aleatoriamente. No caso das variáveis inteiras esse valor é arredondado para o inteiro mais próximo. No caso do valor da variável exceder o valor máximo permitido para essa variável é calculado aleatoriamente um novo incremento o que permitirá o cálculo de um novo valor para a variável. Desta forma resolve-se o problema de algumas das restrições por integração das mesmas no espaço de procura, sendo também resolvido o problema do incremento a considerar para cada variável. A primeira solução é sempre viável e gerada aleatoriamente, se necessário por tentativas.

Critério de aceitação

O algoritmo de Metropolis tem revelado melhor desempenho que o de Glauber tal como pode ser constatado nos trabalhos de Das et al. (1990), Patel et al. (1991) e Cardoso et al. (1994), pelo que foi o escolhido.

Protocolo de arrefecimento

O protocolo de Kirkpatrick é mais susceptível de convergir para ótimos locais, especialmente quando a constante α é pequena. Permite, no entanto, a convergência mediante a realização de um número aceitável de iterações. Os valores sugeridos para α estão compreendidos entre 0,5 e 0,99. Um mínimo global pode ser atingido, com probabilidade elevada, se a temperatura for baixada lentamente, ou seja considerando valores para α próximos de 1 (Faber et al., 2005).

Para a constante α apenas foram testados valores elevados, nomeadamente 0,95 e 0,9, porque um valor elevado para esta constante implica um arrefecimento mais lento e, portanto, uma melhor qualidade da solução final. Optou-se pelo valor de 0,9 porque os ensaios (Apêndice B.1) que consideraram este valor apresentaram desvios menores relativamente à melhor solução encontrada. O número de iterações a efectuar por temperatura é igual a duas vezes o número de variáveis de optimização, uma vez que os ensaios que consideraram esse número obtiveram geralmente melhores soluções.

Critério de paragem

Neste caso usou-se como critério um número fixo de iterações e simultaneamente o número de sucessos. O número de sucessos é relativamente elevado e, portanto, em situação normal não é um critério actuante. Depois de seleccionados a temperatura inicial, a constante α e o número de iterações por temperatura foram realizadas mais algumas optimizações em que a única diferença foi o número de ciclos efectuado (50). Compararam-se os resultados destas optimizações com os as que efectuaram apenas 26 ciclos e foi possível concluir que se fosse considerado um critério de convergência que parasse a optimização se não houvesse alteração da solução durante cerca de 40% do número total de iterações, duas das três optimizações que efectuaram 50 ciclos parariam antes de completar os 50 ciclos. Para estas duas optimizações o último sucesso foi atingido antes de completarem o vigésimo sexto ciclo. De referir que as soluções das optimizações que efectuaram 50 ciclos, incluindo a que não pararia com o critério de convergência, não são melhores que todas as outras encontradas quando o número de ciclos é igual a 26. Considerou-se, portanto, o número de ciclos, K, igual a 26 porque se constatou que um número maior de ciclos não se traduz necessariamente numa melhoria da solução encontrada (Apêndice B.1).

2.4 Sintonização do algoritmo com TS e funções objectivo

Função objectivo

Foram consideradas quatro funções objectivo:

- Valor Actualizado Líquido (VAL1) - maximização;
- Valor Actualizado Líquido com inclusão dos custos dos impactos ambientais EPS (VAL2) - maximização;
- Impacto Ambiental Potencial Global (IAPG) - minimização;
- Impactos ambientais mediante metodologia EPS (IAPG-EPS) - minimização.

Estratégia para determinar as soluções seguintes

Neste caso seguiu-se o método apresentado por Lin e Miller (2004) por ser o mais adequado para o tipo de problema em causa (optimização em que estão envolvidas principalmente variáveis contínuas).

Listas Tabu

Nas listas Tabu de curta memória são guardadas soluções específicas mas foram consideradas Tabu as áreas circundantes, isto porque tal como já foi dito num espaço contínuo a probabilidade de uma solução ser gerada mais do que uma vez, é pequena. A área Tabu é cerca de 20% da área total centrada na solução para cada dimensão (Lin e Miller, 2004).

Crítério de aspiração

Neste caso usou-se o critério de aspiração apresentado por Lin e Miller (2004) que consegue um equilíbrio entre intensificação e diversificação, importante neste caso em que o número de iterações a realizar não irá ser muito elevado.

O critério de aspiração baseia-se numa função sigmóide:

$$s(k) = \frac{1}{1 + e^{-\sigma(k - k_{center} \times M)}} \quad (3.5)$$

Em que k é o número da iteração actual, k_{center} determina quando é que a função sigmóide é igual a 0,5 e M é o número total de iterações. Um valor mais elevado para k_{center} implica uma maior diversificação durante a procura, enquanto um valor menor aumenta a probabilidade do critério de aspiração ser satisfeito favorecendo, portanto, a intensificação na procura. Um número aleatório entre 0 e 1 é gerado e se esse número for superior a $s(k)$ então a propriedade Tabu fica activa e a melhor solução não Tabu é utilizada, caso contrário o critério de aspiração sobrepõe-se à propriedade Tabu e a melhor solução será utilizada como ponto de partida. No início da pesquisa é difícil a sobreposição do critério de aspiração à lista Tabu dado que o valor da função sigmóide é pequeno, enquanto no final se torna mais fácil dado que o valor da função sigmóide é maior permitindo, portanto, a intensificação da pesquisa numa determinada área.

Estratégias de diversificação

Como estratégia de diversificação usou-se a geração aleatória de uma nova solução inicial quando na lista Tabu de frequência uma das soluções atingir o limite de frequência máximo. Desta forma a procura em áreas não exploradas é fomentada através da geração de soluções significativamente diferentes das anteriores.

Estratégias de intensificação

Após um certo número de iterações escolhe-se a melhor solução da lista de longa memória como novo ponto de partida. Com esta estratégia pretende-se intensificar a procura em áreas promissoras.

Critério de paragem

O número de iterações, M , a considerar assim como o número de soluções a avaliar em cada iteração foi alvo de alguns ensaios de optimização. Dos resultados conclui-se que avaliar 3 soluções em cada iteração conduz a bons resultados (Apêndice B.2). Em cada iteração da pesquisa Tabu são, portanto, avaliadas 3 soluções, em que uma das soluções é geralmente proveniente da iteração anterior, excepto no caso de haver a geração aleatória de uma solução inicial, pelo que se considerou que o algoritmo efectuará um número de iterações igual ao número de iterações realizado pelo recozimento simulado a dividir por três. Desta forma as optimizações efectuadas pela pesquisa Tabu demoraram menos tempo, uma vez que geralmente para uma das soluções consideradas em cada iteração já se possui o valor da função objectivo. Depois de efectuadas as optimizações foi aplicado um critério de convergência aos resultados e determinou-se que optimizações parariam antes de serem completadas as iterações programadas. O critério considerado foi paragem do algoritmo se não houvesse melhoria entre soluções consecutivas durante um certo número de iterações (40% do número total de iterações).

2.5 Resultados e discussão

2.5.1 Recozimento simulado (SA)

Apresenta-se seguidamente um conjunto de testes efectuados com o algoritmo descrito aplicado à optimização das várias configurações. O objectivo é ver como se comportam as soluções óptimas obtidas a partir de valores iniciais gerados aleatoriamente. Os resultados obtidos estão resumidos na Tabela 3.1 e detalhados no Apêndice B.1.

Foram realizadas cinco optimizações por função objectivo e por configuração, tendo sido retidas a solução óptima e a melhor solução encontrada durante a optimização. A referida tabela apresenta o valor inicial das funções objectivo, o desvio percentual das várias soluções óptimas para um par configuração/função objectivo relativamente à melhor solução seja ela a “óptima” encontrada pelo algoritmo, seja a melhor encontrada durante a optimização. Estas melhores soluções têm desvio nulo que está representado a azul e os desvios inferiores a 5% a vermelho. Nas duas últimas colunas apresentam-se desvios percentuais médios, um calculado como a média aritmética dos desvios percentuais entre as soluções óptimas e a melhor solução encontrada e, outro, calculado como a média aritmética dos desvios percentuais entre as melhores soluções e a melhor de todas.

A primeira constatação é que o desvio percentual médio observado quando se retém a melhor solução é bastante menor do que quando se consideram só as soluções óptimas, pelo que é uma boa opção guardar a melhor solução encontrada durante o processo de optimização e, conseqüentemente, na discussão subsequente será esta a solução que se considera.

Considerando que a probabilidade de numa única corrida se encontrar uma solução óptima ou vizinha, aumenta quando o desvio percentual médio diminui, pode considerar-se que o algoritmo apresenta bom desempenho no caso das configurações A e Ae para quaisquer funções objectivo, o mesmo acontecendo para a configuração E mas somente para funções objectivo VAL e para a GrTBe no caso do VAL1. Ainda poderá ser considerado razoável para desvios médios entre 5 e 10%, ficando aqui incluídos os casos E/EPS e GrTBe/VAL2. Nos restantes casos o desempenho é bastante fraco.

Relativamente ao critério de paragem usou-se tal como referido um número fixo de iterações considerado suficiente de acordo com os ensaios preliminares efectuados (Apêndice B.1). A Figura 3.4, apresentada a título ilustrativo, mostra a evolução de uma optimização e evidencia a tendência evolutiva das optimizações efectuadas, podendo concluir-se que o número de iterações considerado permite a convergência do algoritmo para o óptimo ou para uma solução relativamente próxima do óptimo. Na Figura 3.5 é apresentada a evolução da optimização correspondente a uma optimização de Ee, considerando a função objectivo VAL1, que evidencia os problemas de prosseguimento do recozimento simulado nas optimizações realizadas com esta configuração. Para esta configuração e função objectivo foi realizada uma optimização em que se aumentou o número de ciclos para 50, tendo-se obtido uma solução final substancialmente melhor que as soluções finais e melhores soluções das outras optimizações que consideraram um número de ciclos igual a 26 (Tabela 3.4). Refira-se, no entanto que esta melhor solução foi obtida antes de se completarem os 26 ciclos, ou seja, se se tivesse considerado 26 ciclos (mesmo número de ciclos das outras optimizações) esta solução teria sido obtida, o que evidencia que os parâmetros do recozimento simulado estão adequadamente sintonizados.

Analisando a evolução das optimizações com funções objectivo VAL1 ou VAL2, verifica-se um aumento de VAL1 e VAL2, respectivamente à medida que o número de iterações aumenta apesar das oscilações principalmente na fase inicial, decorrentes

do mecanismo do algoritmo. Analisando a evolução das optimizações com funções objectivo IAPG ou IAPG-EPS, é possível constatar uma diminuição de IAPG e IAPG-EPS, respectivamente, ao longo das optimizações.

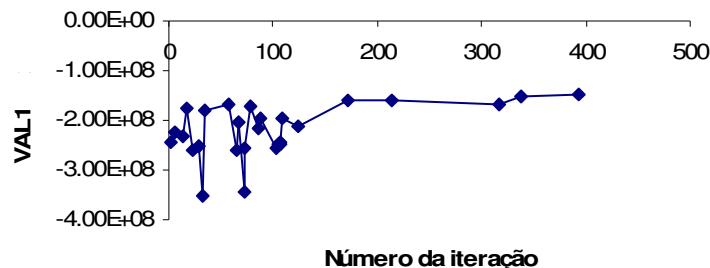


Figura 3.4 Evolução da primeira optimização A/VAL1/SA

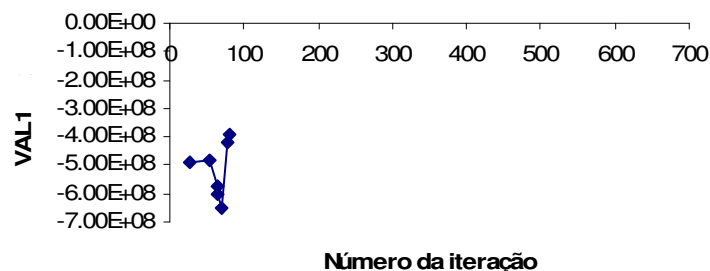


Figura 3.5 Evolução da quarta optimização Ee/VAL1/SA

Após as optimizações procedeu-se a uma análise dos resultados procurando verificar a adequabilidade da aplicação de um critério de convergência, paragem do algoritmo se não houver melhoria da solução durante uma determinada percentagem de iterações.

Na Tabela 3.2 são apresentadas para cada configuração e para cada função objectivo a diferença máxima entre avaliações (no caso do recozimento simulado cada avaliação corresponde a uma iteração) durante a qual não houve alteração da solução, dm , e a diferença entre o número total de avaliações e o número da avaliação correspondente à última solução encontrada, ud , tendo sido calculadas as respectivas percentagens relativamente ao número total de avaliações (iteraões). Da análise desta tabela conclui-se que a aplicação de um critério de convergência que parasse o algoritmo se não houvesse melhoria da solução durante 40% do número total de iteraões permitiria chegar na maioria das optimizaões à solução final encontrada.

De referir que o recozimento simulado aplicado actualiza e guarda a melhor solução encontrada durante o decorrer da optimização, embora a evolução do algoritmo prossiga como usualmente aceitando e rejeitando movimentos de acordo com o critério de aceitação, o que permite a aceitação de soluções piores durante a optimização. Por vezes foi detectada uma certa disparidade entre as soluções finais e as melhores soluções encontradas durante a optimização, sendo contudo de referir

que existem outras optimizações cujas soluções finais apresentam valores para função objectivo iguais ou aproximadamente iguais aos dessas melhores soluções. Exemplificando, para a configuração E e para a função objectivo VAL1 a melhor solução de todas as optimizações corresponde à melhor solução encontrada durante a 3ª optimização, para qual a solução final apresenta um desvio de 9,9 % relativamente à melhor solução. Contudo, na 5ª optimização a solução final que é também a melhor solução dessa optimização é aproximadamente igual (desvio 0,9%) à melhor solução da 3ª optimização (Tabela 3.1).

Nas Tabelas 3.3, 3.4, 3.5 e 3.6 apresentam-se os melhores resultados para cada uma das configurações e para as diferentes funções objectivo.

Nas Figuras 3.6, 3.7, 3.8 e 3.9 é apresentada a evolução das diferentes grandezas avaliadas para a melhor solução obtida na optimização de VAL1, VAL2, IAPG e IAPG-EPS.

Da análise das Tabelas 3.3, 3.4, 3.5 e 3.6 verifica-se que as melhores soluções e soluções finais das optimizações para as configurações A e Ae apresentam correntes de benzeno com pureza inferior a 0,990. De referir, que no decorrer das optimizações efectuadas para as configurações A e Ae as soluções intermédias que permitem obter correntes de benzeno com pureza superior a 0,990 são raras. Para essas soluções os valores para as funções objectivo são piores que os obtidos pelas outras configurações, nomeadamente E e GrTBe, pelo que não são apresentados aqui. O que mais contribui para estes resultados é o facto destas soluções das configurações A e Ae conduzirem a correntes processuais de caudal mais elevado o que provoca um aumento dos custos de capital (ex.: no sistema de recirculação de gás), maiores consumos energéticos e impactos ambientais superiores. Estes resultados podem ser consultados no Apêndice B.1.

Por outro lado, as soluções da configuração Ee têm geralmente piores valores para todas as funções objectivo (menores valores para VAL1 e VAL2 e valores maiores para IAPG e IAPG-EPS) do que as soluções de E e GrTBe. Refira-se que as soluções de Ee conduzem geralmente a caudais processuais muito elevados, situação desfavorável económica e ambientalmente. Refira-se ainda que as soluções de Ee que conduzem a correntes com caudais processuais razoáveis (não muito elevados) são raras. Por outro lado, a área necessária para o permutador onde se faz o pré-aquecimento da alimentação é geralmente muito superior à necessária pelas soluções da configuração GrTBe.

As soluções das optimizações que obtiveram os melhores resultados para cada configuração e para função objectivo mostram que as soluções das configurações GrTBe e E apresentam valores para VAL1, VAL2 e IAPG-EPS muito similares nas optimizações com essas funções objectivo, embora as de GrTBe conduzam a valores ligeiramente melhores. Quando a função objectivo é IAPG a solução de E apresenta um valor para IAPG claramente superior ao das soluções de GrTBe e Ee.

Tabela 3.1 Precisão nas optimizações efectuadas com SA

	1ª otimização			2ª otimização			3ª otimização			4ª otimização			5ª otimização			Desvio percentual médio %	
	Desvio percentual %		Solução inicial	Desvio percentual %		Solução inicial	Desvio percentual %		Solução inicial	Desvio percentual %		Solução inicial	Desvio percentual %		Solução inicial		
	Solução	Melhor solução		Solução	Melhor solução		Solução	Melhor solução		Solução	Melhor solução		Solução	Melhor solução		Solução	Melhor solução
A VAL1	0,0		-3,25x10 ⁸	4,4	0,6	-2,26x10 ⁸	10,3	1,5	-3,72x10 ⁸	4,6	1,1	-3,16x10 ⁸	0,2		-3,85x10 ⁸	4,9	0,8
A VAL2	1,7		-3,63x10 ⁸	13,4	3,3	-3,75x10 ⁸	0,0		-3,03x10 ⁸	4,9	0,6	-4,37x10 ⁸	1,0		-7,23x10 ⁸	5,3	1,7
A IAPG	9,4	5,9	4,97x10 ⁵	0,0		6,64x10 ⁵	61,3	2,7	2,56x10 ⁶	7,6	7,5	2,24x10 ⁶	28,9	3,3	3,30x10 ⁵	26,8	4,9
A IAPG-EPS	0,0		5,82x10 ⁷	4,6		4,05x10 ⁷	5,2	0,5	4,92x10 ⁷	24,2	6,4	3,60x10 ⁷	6,3	2,3	3,21x10 ⁷	10,1	3,5
Ae VAL1	0,5		-2,34x10 ⁸	3,3		-3,62x10 ⁸	1,2		-2,84x10 ⁸	0,0		-2,28x10 ⁸	6,0	0,2	-4,18x10 ⁸	2,7	1,3
Ae VAL2	11,1	3,0	-5,37x10 ⁸	7,1	2,4	-6,76x10 ⁸	3,2		-9,28x10 ⁸	4,3		-3,34x10 ⁸	7,3	0,0	-4,31x10 ⁸	6,6	3,2
Ae IAPG	17,4	1,8	6,04x10 ⁵	7,3		5,62x10 ⁵	14,6	0,0	1,09x10 ⁶	11,3	7,3	8,90x10 ⁵	0,0		1,25x10 ⁶	10,1	4,1
Ae IAPG-EPS	13,6	5,4	4,73x10 ⁷	15,4	3,6	6,38x10 ⁷	17,2	2,3	5,68x10 ⁷	10,7	1,4	4,20x10 ⁷	0,0		4,99x10 ⁷	14,2	3,2
E VAL1	1,5	0,9	-4,39x10 ⁸	13,7	0,7	-3,16x10 ⁸	9,9	0,0	-3,20x10 ⁸	39,5	1,4	-2,57x10 ⁸	0,9		-4,49x10 ⁸	13,1	1,0
E VAL2	6,5	2,0	-3,54x10 ⁸	11,5	8,7	-1,03x10 ⁹	4,3	3,3	-4,87x10 ⁸	5,8		-3,48x10 ⁸	0,0		-4,21x10 ⁸	7,0	4,9
E IAPG	11,3	10,6	8,49x10 ⁵	33,9	15,9	2,45x10 ⁶	13,4	7,9	7,14x10 ⁵	53,2	26,8	1,11x10 ⁶	0,0		7,86x10 ⁵	28,0	15,3
E IAPG-EPS	27,0	0,0	3,47x10 ⁷	17,6	16,8	3,66x10 ⁷	0,3		3,49x10 ⁷	1,8		3,51x10 ⁷	52,7	8,6	5,27x10 ⁷	19,9	6,9
Ee VAL1	158,9	127,9	-6,98x10 ⁸	177,0		-8,15x10 ⁸	127,6		-4,98x10 ⁸	119,7		-5,02x10 ⁸	157,8	136,4	-7,37x10 ⁸	148,2	137,7
Ee VAL2	146,6		-8,63x10 ⁸	0,0		-1,95x10 ⁹	164,3		-8,05x10 ⁸	162,5		-1,15x10 ⁹	132,8		-8,67x10 ⁸	151,5	151,5
Ee IAPG	85,4		4,07x10 ⁶	337,7		3,94x10 ⁶	0,0		6,04x10 ⁶	344,0		8,19x10 ⁶	209,2		3,47x10 ⁶	244,1	244,1
Ee IAPG-EPS	23,0		9,62x10 ⁷	0,0		4,96x10 ⁸	19,4		8,84x10 ⁷	23,6		1,91x10 ⁸	60,5	50,6	4,93x10 ⁷	31,7	29,2
GrTBe VAL1	4,6	0,6	-4,09x10 ⁸	4,8	3,5	-1,65x10 ⁸	3,9	0,0	-4,05x10 ⁸	1,5		-2,92x10 ⁸	10,0	3,1	-3,49x10 ⁸	5,0	2,2
GrTBe VAL2	14,3	0,0	-5,51x10 ⁸	4,4		-3,91x10 ⁸	35,6	6,1	-4,76x10 ⁸	8,4		-2,40x10 ⁸	16,8		-7,15x10 ⁸	15,9	8,9
GrTBe IAPG	52,0	18,7	2,92x10 ⁵	20,9	17,9	1,42x10 ⁶	26,5	6,0	8,76x10 ⁵	32,0	0,0	1,93x10 ⁶	26,9	15,8	2,84x10 ⁶	31,7	14,6
GrTBe IAPG-EPS	22,8	0,0	5,00x10 ⁷	13,4	13,2	5,35x10 ⁷	53,1	43,6	1,96x10 ⁷	6,0	4,6	2,13x10 ⁷	9,6		6,37x10 ⁷	21,0	17,7

Nota : os desvios para o par configuração Ee e função VAL1 foram calculados usando a melhor solução encontrada (Tabela 3.4)

Tabela 3.2 Análise da aplicação de um critério de convergência (SA)

	VAL 1		VAL2		IAPG		IAPG-EPS			VAL 1		VAL2		IAPG		IAPG-EPS	
	Nº iterações		Nº iterações		Nº iterações		Nº iterações			Percentagem de iterações		Percentagem de iterações		Percentagem de iterações		Percentagem de iterações	
A	ud	dm	ud	dm	ud	dm	ud	dm		ud	dm	ud	dm	ud	dm	ud	dm
1ª otimização	74	102	43	58	3	100	12	132		16%	22%	9%	12%	1%	21%	3%	28%
2ª otimização	39	62	67	70	46	97	40	82		8%	13%	14%	15%	10%	21%	9%	18%
3ª otimização	40	133	25	80	88	107	83	57		9%	28%	5%	17%	19%	23%	18%	12%
4ª otimização	88	73	55	72	67	128	54	41		19%	16%	12%	15%	14%	27%	12%	9%
5ª otimização	219	144	1	107	94	79	73	57		47%	31%	0%	23%	20%	17%	16%	12%
Ae																	
1ª otimização	84	72	101	136	175	57	142	82		18%	15%	22%	29%	37%	12%	30%	18%
2ª otimização	80	146	200	65	40	92	73	88		17%	31%	43%	14%	9%	20%	16%	19%
3ª otimização	141	68	3	194	34	86	90	168		30%	15%	1%	41%	7%	18%	19%	36%
4ª otimização	38	98	176	57	71	147	52	133		8%	21%	38%	12%	15%	31%	11%	28%
5ª otimização	159	60	46	154	311	40	177	105		34%	13%	10%	33%	66%	9%	38%	22%
E																	
1ª otimização	131	82	280	149	218	88	121	60		19%	12%	41%	22%	32%	13%	18%	9%
2ª otimização	53	121	94	177	112	137	253	80		8%	18%	14%	26%	17%	20%	37%	12%
3ª otimização	3	124	15	176	316	51	234	43		0%	18%	2%	26%	47%	8%	35%	6%
4ª otimização	67	57	169	42	157	89	223	71		10%	8%	25%	6%	23%	13%	33%	11%
5ª otimização	80	162	197	96	8	93	124	71		12%	24%	29%	14%	1%	14%	18%	11%
Ee																	
1ª otimização	375	50	338	107	169	223	168	294		55%	7%	50%	16%	25%	33%	25%	43%
2ª otimização	313	99	554	63	401	89	337	146		46%	15%	82%	9%	59%	13%	50%	22%
3ª otimização	517	104	640	30	550	75	26	518		76%	15%	95%	4%	81%	11%	4%	77%
4ª otimização	596	28	87	207	577	44	83	181		88%	4%	13%	31%	85%	7%	12%	27%
5ª otimização	300	241	472	82	450	161	100	152		44%	36%	70%	12%	67%	24%	15%	22%
GrTBe																	
1ª otimização	191	182	145	254	54	178	152	245		22%	21%	16%	29%	6%	20%	17%	28%
2ª otimização	106	141	341	192	61	220	99	285		12%	16%	39%	22%	7%	25%	11%	32%
3ª otimização	69	264	136	185	71	132	34	429		8%	30%	15%	21%	8%	15%	4%	49%
4ª otimização	144	185	509	258	3	227	19	277		16%	21%	58%	29%	0%	26%	2%	31%
5ª otimização	16	229	68	260	214	112	59	288		2%	26%	8%	29%	24%	13%	7%	33%

Tabela 3.3 Resultados para VAL1 (SA)

	A	Ae		E	Ee		GrTBe
VAL1	-1,50x10 ⁸	-1,44x10 ⁸	VAL1	-1,57x10 ⁸	-1,78x10 ⁸	VAL1	-1,54x10 ⁸
VAL2	-2,04x10 ⁸	-1,97x10 ⁸	VAL2	-2,12x10 ⁸	-2,34x10 ⁸	VAL2	-2,04x10 ⁸
IAPG	2,15x10 ⁵	2,62x10 ⁵	IAPG	2,49x10 ⁵	3,31x10 ⁵	IAPG	4,70x10 ⁵
IAPGEPS	1,64x10 ⁷	1,57x10 ⁷	IAPGEPS	1,65x10 ⁷	1,70x10 ⁷	IAPGEPS	1,51x10 ⁷
Pureza	0,941	0,947	Pureza	0,999	0,999	Pureza	0,997
vc (1)	45,7	56,9	vc (1)	59,5	52,1	vc (1)	57,9
vc (2)	1,4	1,7	vc (2)	1,8	1,6	vc (2)	1,7
vc (3)	2,39x10 ⁶	2,63x10 ⁶	vc (3)	2,78x10 ⁶	2,33x10 ⁶	vc (3)	3,32x10 ⁶
vc (4)	0,0072	0,0076	vc (4)	0,0084	0,0068	vc (4)	0,0099
vc (5)	49,1	59,9	vc (5)	62,9	53,3	vc (5)	57,5
vc (6)	86,1	92,9	vc (6)	103,6	138,8	vc (6)	125,6
vc (7)	0,00074	0,00057	vc (7)	0,00066	0,00058	vc (7)	0,99693
vc (8)	0,00072	0,00070	vc (8)	0,00068	0,00066	vc (8)	0,99000
vc (9)	2,25x10 ⁵	3,27x10 ⁵	vc (9)	2,34x10 ⁵	8,67x10 ⁵	vc (9)	6,62x10 ⁵
vc (16)	32	38	vc (10)	0,082	0,088	vc (10)	0,997
US	394	430	vc (11)	4,19	1,58	vc (11)	0,77
			vc (12)	1,02x10 ⁶	8,01x10 ⁵	vc (12)	7,55x10 ⁵
			vc (15)	7	9	vc (13)	0,99783
			vc (16)	25	41	vc (14)	8,48x10 ⁵
			US	673	506	vc (15)	4
						vc (16)	36
						vc (18)	6
						vc (19)	0,99837
						US	815

Tabela 3.4 Resultados para VAL2 (SA)

	A	Ae		E	Ee		GrTBe
VAL2	-2,03x10 ⁸	-1,90x10 ⁸	VAL2	-2,09x10 ⁸	-2,25x10 ⁸	VAL2	-1,98x10 ⁸
VAL1	-1,51x10 ⁸	-1,40x10 ⁸	VAL1	-1,56x10 ⁸	-1,70x10 ⁸	VAL1	-1,48x10 ⁸
IAPG	2,23x10 ⁵	2,50x10 ⁵	IAPG	2,46x10 ⁵	3,23x10 ⁵	IAPG	3,45x10 ⁵
IAPGEPS	1,54x10 ⁷	1,51x10 ⁷	IAPGEPS	1,59x10 ⁷	1,66x10 ⁷	IAPGEPS	1,51x10 ⁷
Pureza	0,939	0,937	Pureza	1,000	0,999	Pureza	0,999
vc (1)	55,8	59,5	vc (1)	59,5	68,1	vc (1)	53,1
vc (2)	1,7	1,8	vc (2)	1,8	2,0	vc (2)	1,6
vc (3)	3,11x10 ⁶	3,35x10 ⁶	vc (3)	3,32x10 ⁶	3,20x10 ⁶	vc (3)	3,32x10 ⁶
vc (4)	0,0083	0,0073	vc (4)	0,0068	0,0054	vc (4)	0,0060
vc (5)	58,7	62,3	vc (5)	60,5	69,5	vc (5)	55,1
vc (6)	123,4	94,5	vc (6)	93,5	90,7	vc (6)	114,9
vc (7)	0,00038	0,00071	vc (7)	0,00040	0,00079	vc (7)	0,99765
vc (8)	0,00078	0,00039	vc (8)	0,00059	0,00073	vc (8)	0,99234
vc (9)	3,83x10 ⁵	2,34x10 ⁵	vc (9)	1,59x10 ⁵	1,01x10 ⁶	vc (9)	1,02x10 ⁶
vc (16)	40	32	vc (10)	0,089	0,089	vc (10)	0,998
US	443	422	vc (11)	1,48	2,44	vc (11)	0,92
			vc (12)	5,97x10 ⁵	5,78x10 ⁵	vc (12)	7,27x10 ⁵
			vc (15)	9	9	vc (13)	0,99819
			vc (16)	33	40	vc (14)	8,58x10 ⁵
			US	479	122	vc (15)	4
						vc (16)	33
						vc (18)	11
						vc (19)	0,99630
						US	739

Nota: Os valores a vermelho nas tabelas correspondem à melhor solução encontrada durante a optimização e não à solução final. A solução apresentada para a configuração Ee, considerando a função objectivo VAL1 corresponde à optimização efectuada com número de ciclos igual a 50, contudo o último sucesso (assinalado a amarelo) foi obtido antes de se completarem os 26 ciclos.

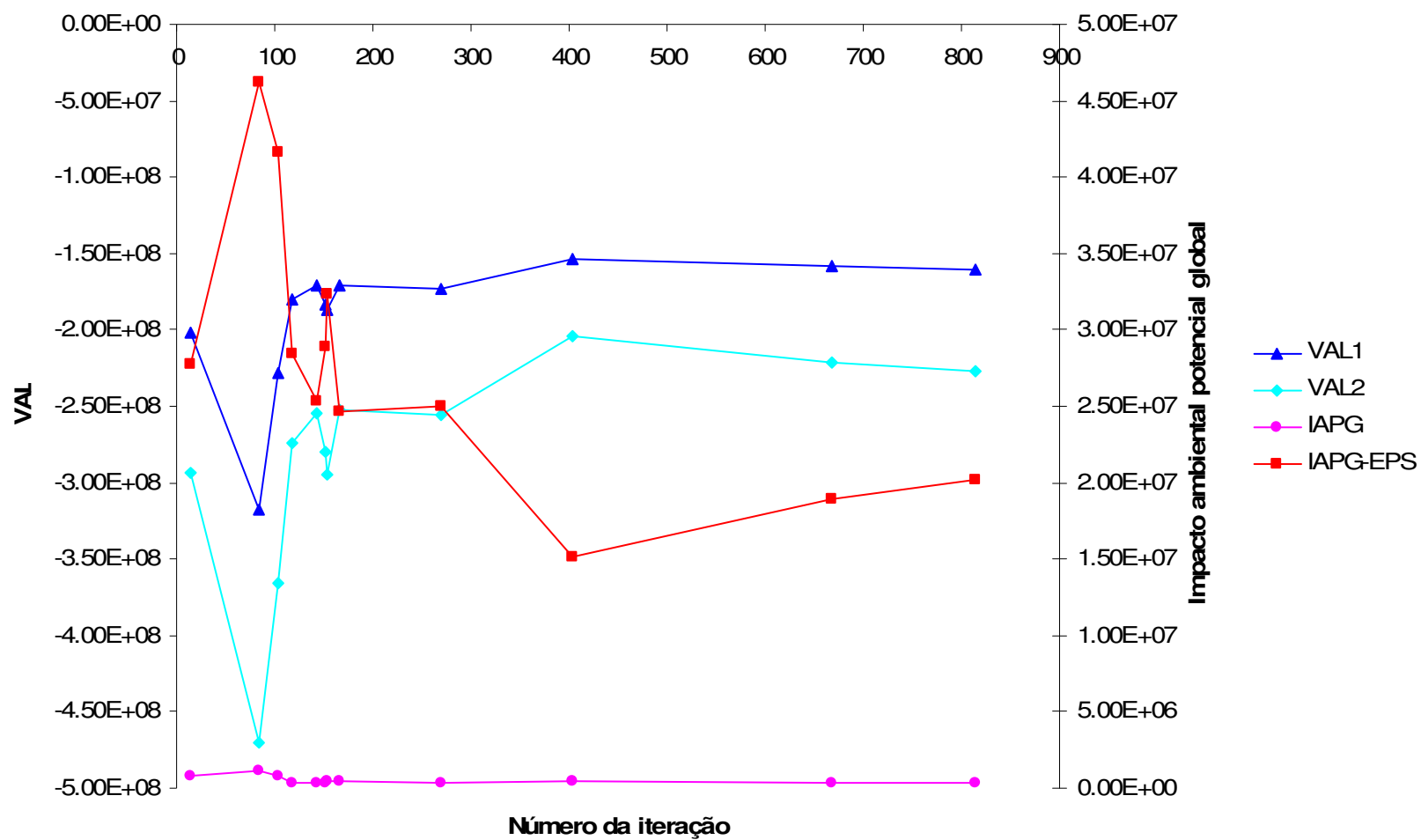


Figura 3.6 Evolução das diferentes grandezas avaliadas para a melhor solução obtida na otimização de VAL1 (pureza >0.,990) – GrTBe

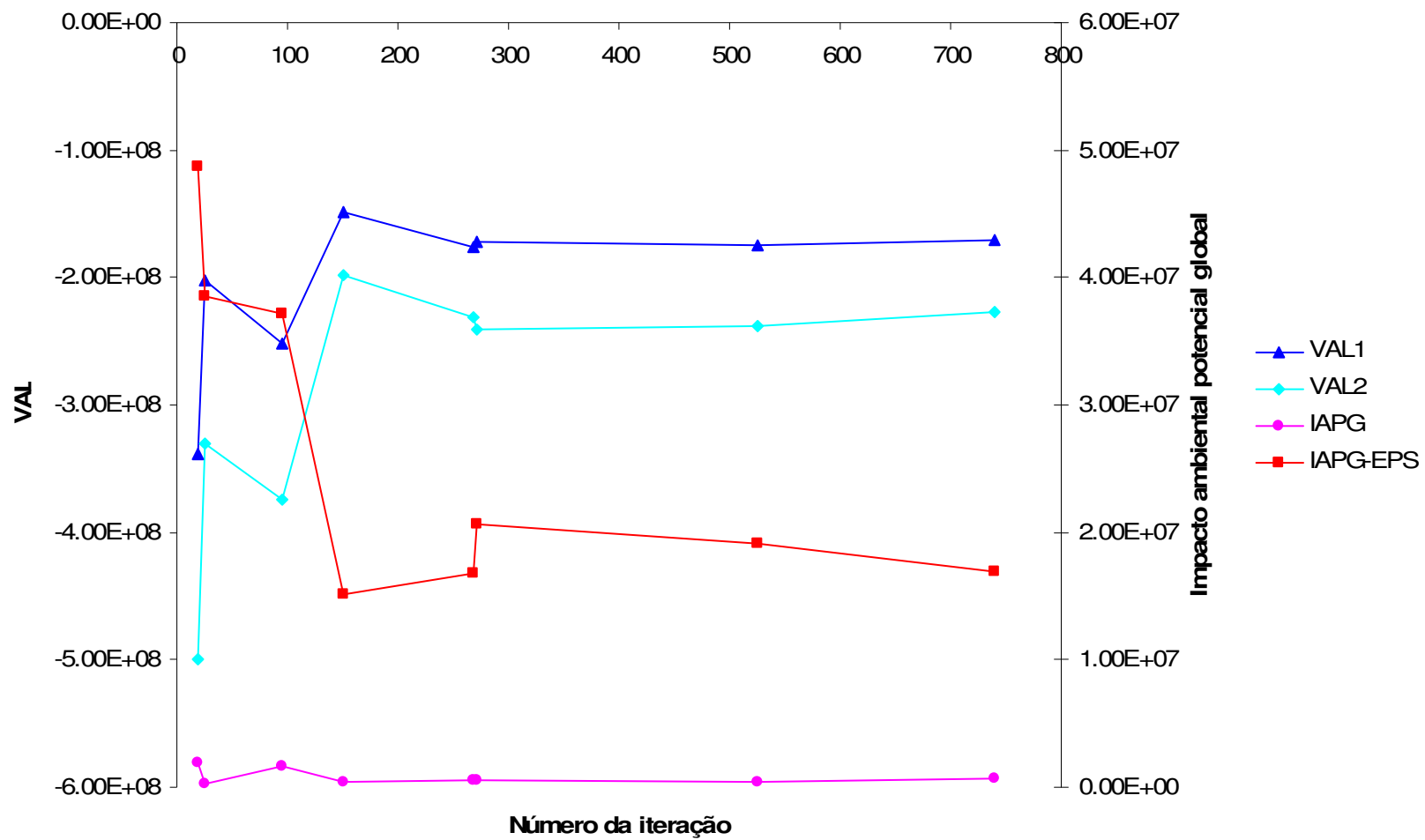


Figura 3.7 Evolução das diferentes grandezas avaliadas para a melhor solução obtida na otimização de VAL2 (pureza>0,990) – GrTBe

Tabela 3.5 Resultados para IAPG (SA)

	A	Ae		E	Ee		GrTBe		A	Ae		E	Ee		GrTBe
IAPG	2,21x10 ⁵	2,48x10 ⁵	IAPG	1,89x10 ⁵	3,51x10 ⁵	IAPG	2,50x10 ⁵	IAPGEPS	1,54x10 ⁷	1,49x10 ⁷	IAPGEPS	1,53x10 ⁷	3,60x10 ⁷	IAPGEPS	1,48x10 ⁷
IAPGEPS	1,52x10 ⁷	1,51x10 ⁷	IAPGEPS	2,59x10 ⁷	1,91x10 ⁷	IAPGEPS	3,47x10 ⁷	IAPG	2,44x10 ⁵	2,56x10 ⁵	IAPG	2,28x10 ⁵	6,68x10 ⁵	IAPG	5,64x10 ⁵
VAL1	-1,48x10 ⁸	-1,43x10 ⁸	VAL1	-1,71x10 ⁸	-1,84x10 ⁸	VAL1	-1,89x10 ⁸	VAL1	-1,58x10 ⁸	-1,48x10 ⁸	VAL1	-1,53x10 ⁸	-2,56x10 ⁸	VAL1	-1,68x10 ⁸
VAL2	-1,98x10 ⁸	-1,93x10 ⁸	VAL2	-2,57x10 ⁸	-2,47x10 ⁸	VAL2	-3,03x10 ⁸	VAL2	-2,09x10 ⁸	-1,97x10 ⁸	VAL2	-2,04x10 ⁸	-3,75x10 ⁸	VAL2	-2,17x10 ⁸
Pureza	0,951	0,938	Pureza	1,000	0,999	Pureza	0,998	Pureza	0,963	0,957	Pureza	0,999	0,999	Pureza	0,997
vc (1)	65,9	59,5	vc (1)	47,3	57,9	vc (1)	49,4	vc (1)	67,5	64,3	vc (1)	67,0	42,0	vc (1)	52,1
vc (2)	2,0	1,8	vc (2)	1,4	1,7	vc (2)	1,5	vc (2)	2,0	1,9	vc (2)	2,0	1,3	vc (2)	1,6
vc (3)	2,72x10 ⁶	3,35x10 ⁶	vc (3)	3,11x10 ⁶	3,32x10 ⁶	vc (3)	3,26x10 ⁶	vc (3)	2,03x10 ⁶	2,33x10 ⁶	vc (3)	3,17x10 ⁶	9,76x10 ⁵	vc (3)	7,05x10 ⁵
vc (4)	0,0068	0,0084	vc (4)	0,0071	0,0099	vc (4)	0,0061	vc (4)	0,0086	0,0089	vc (4)	0,0060	0,0082	vc (4)	0,0052
vc (5)	69,5	62,3	vc (5)	58,1	57,5	vc (5)	65,3	vc (5)	70,7	66,5	vc (5)	70,1	40,7	vc (5)	52,1
vc (6)	86,1	119,6	vc (6)	108,7	140,4	vc (6)	122,4	vc (6)	133,7	119,0	vc (6)	100,8	114,9	vc (6)	102,0
vc (7)	0,00093	0,00065	vc (7)	0,00043	0,00084	vc (7)	0,99333	vc (7)	0,00084	0,00100	vc (7)	0,00099	0,00077	vc (7)	0,99252
vc (8)	0,00065	0,00052	vc (8)	0,00050	0,00030	vc (8)	0,99423	vc (8)	0,00071	0,00095	vc (8)	0,00048	0,00091	vc (8)	0,99459
vc (9)	4,76x10 ⁵	2,34x10 ⁵	vc (9)	5,32x10 ⁵	6,62x10 ⁵	vc (9)	5,03x10 ⁵	vc (9)	5,23x10 ⁵	1,13x10 ⁵	vc (9)	4,94x10 ⁵	2,43x10 ⁵	vc (9)	5,97x10 ⁵
vc (16)	37	41	vc (10)	0,089	0,093	vc (10)	0,990	vc (16)	39	31	vc (10)	0,098	0,095	vc (10)	0,992
US	422	434	vc (11)	2,62	0,77	vc (11)	2,86	US	456	291	vc (11)	2,77	3,58	vc (11)	0,63
			vc (12)	8,58x10 ⁵	7,55x10 ⁵	vc (12)	6,43x10 ⁵				vc (12)	9,13x10 ⁵	2,52x10 ⁵	vc (12)	5,03x10 ⁵
			vc (15)	9	5	vc (13)	0,99009				vc (15)	8	6	vc (13)	0,99423
			vc (16)	29	37	vc (14)	3,18x10 ⁵				vc (16)	37	39	vc (14)	3,18x10 ⁵
			US	668	126	vc (15)	3				US	555	339	vc (15)	4
						vc (16)	41							vc (16)	34
						vc (18)	9							vc (18)	7
						vc (19)	0,99036							vc (19)	0,99792
						US	881							US	732

Nota: Os valores a vermelho correspondem à melhor solução encontrada durante a optimização e não à solução final.

Os resultados de todas as optimizações efectuadas, cinco por função objectivo e para cada configuração são apresentados no apêndice B.1.

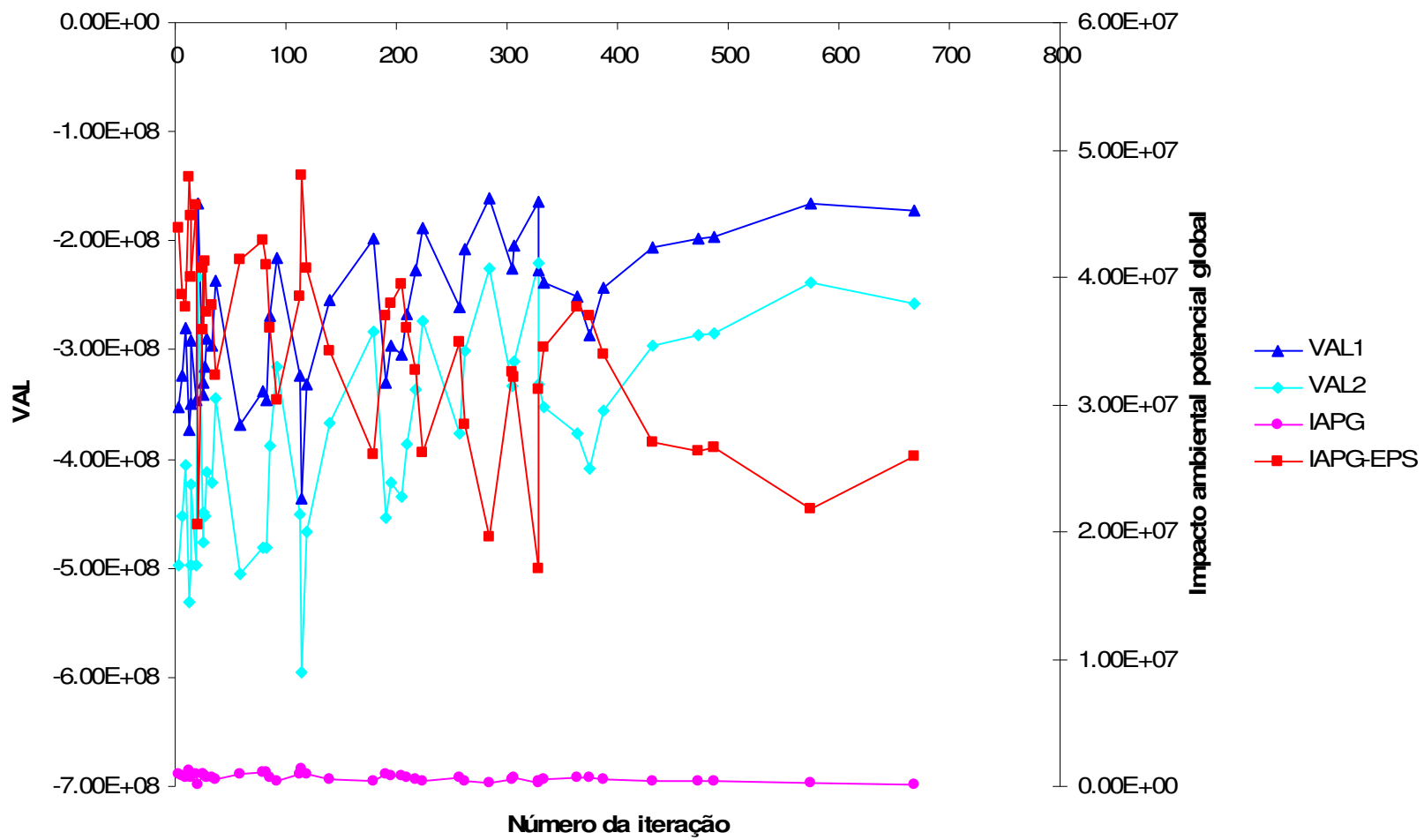


Figura 3.8 Evolução das diferentes grandezas avaliadas para a melhor solução obtida na otimização de IAPG (pureza>0,990) – E

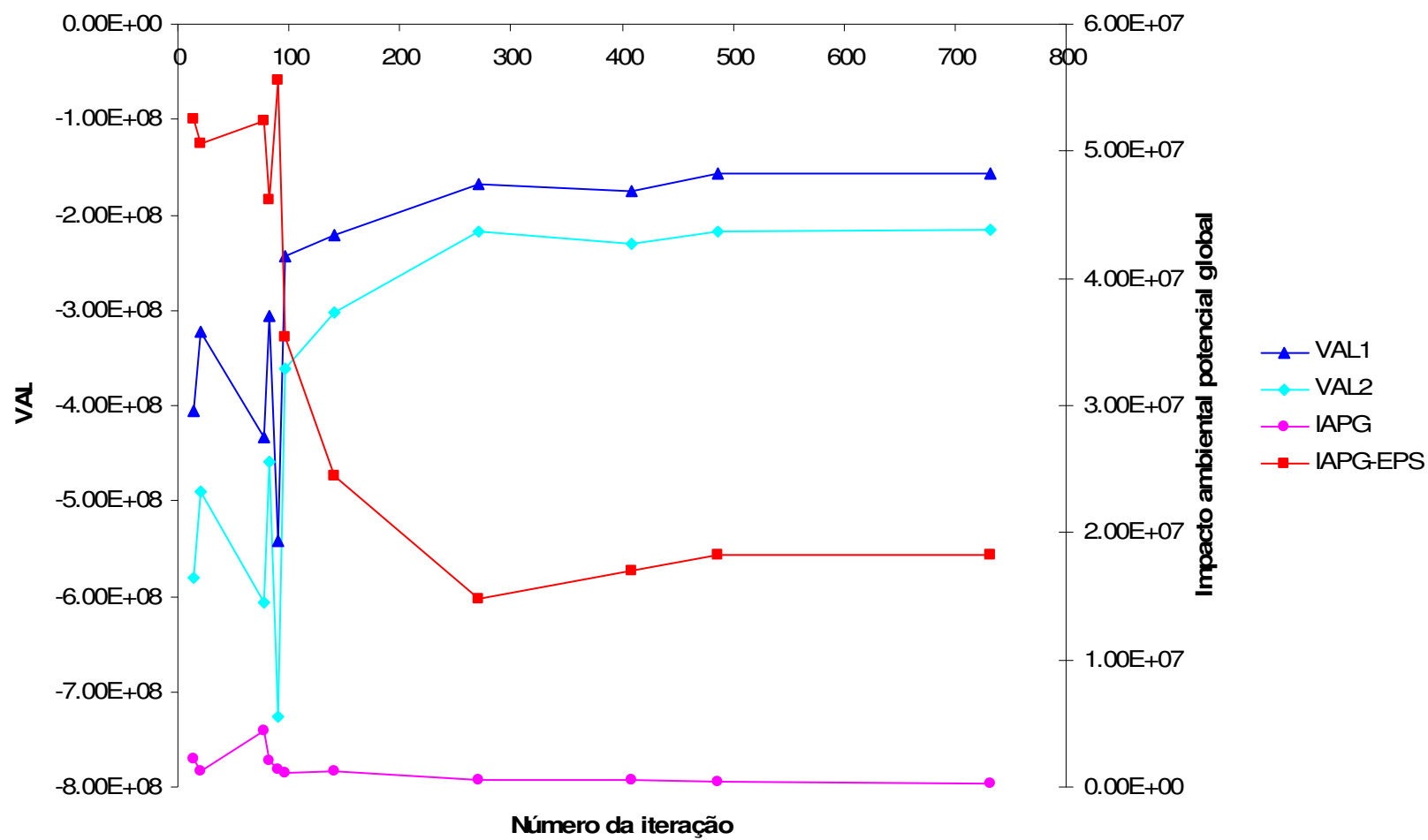


Figura 3.9 Evolução das diferentes grandezas avaliadas para a melhor solução obtida na otimização de IAPG-EPS (pureza>0,990) – GrTBe

Quando se consideraram como funções objectivo VAL1, VAL2 e IAPG-EPS a configuração que conduziu às melhores soluções foi GrTBe, enquanto que quando a função objectivo era IAPG foi a configuração E.

Das Figuras 3.6 e 3.7 que representam a evolução de todas as grandezas para as optimizações que conduziram às melhores soluções segundo VAL1 ou VAL2, é possível verificar que um aumento destas grandezas é geralmente acompanhado de uma diminuição dos impactos ambientais, especialmente de IAPG-EPS. A partir das Figuras 3.8 e 3.9, que representam a evolução de todas as grandezas para optimizações que conduziram às melhores soluções segundo IAPG ou IAPG-EPS, é possível verificar que a uma diminuição destas grandezas corresponde geralmente um aumento de VAL1 e VAL2.

O facto dos impactos ambientais terem valores com ordens de grandeza distintas consoante a metodologia pela qual são calculados, dificulta a análise dos gráficos, especialmente no caso dos impactos ambientais IAPG. De seguida seguem-se duas figuras (Figuras 3.10 e 3.11) que mostram em detalhe a evolução de IAPG e IAPG-EPS nas optimizações correspondentes às melhores soluções para as funções objectivo IAPG e IAPG-EPS.

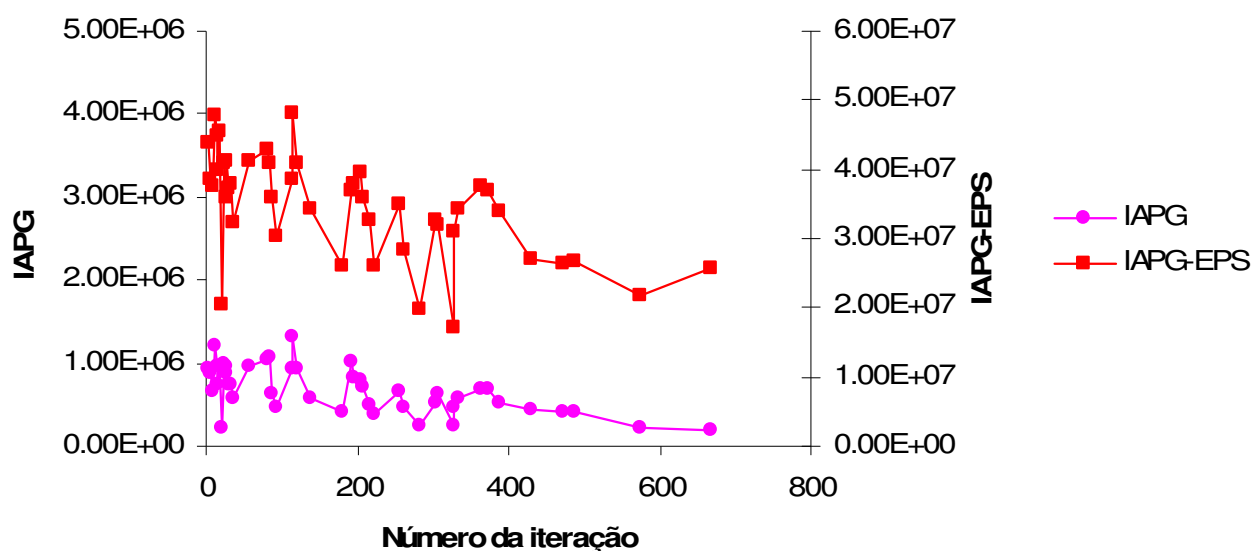


Figura 3.10 Impactos ambientais potenciais globais – Função objectivo IAPG – Configuração E

Da análise das Figuras 3.10 e 3.11 verifica-se que os impactos ambientais IAPG e IAPG-EPS apesar de apresentarem ordens de grandeza diferentes apresentam perfis evolutivos semelhantes, embora pontualmente possam apresentar diferenças de sentido significativas. Assim uma solução que apresenta o melhor valor para o impacto ambiental potencial global calculado segundo a metodologia designada por IAPG pode na metodologia IAPG-EPS não conduzir ao melhor valor para o impacto ambiental potencial global.

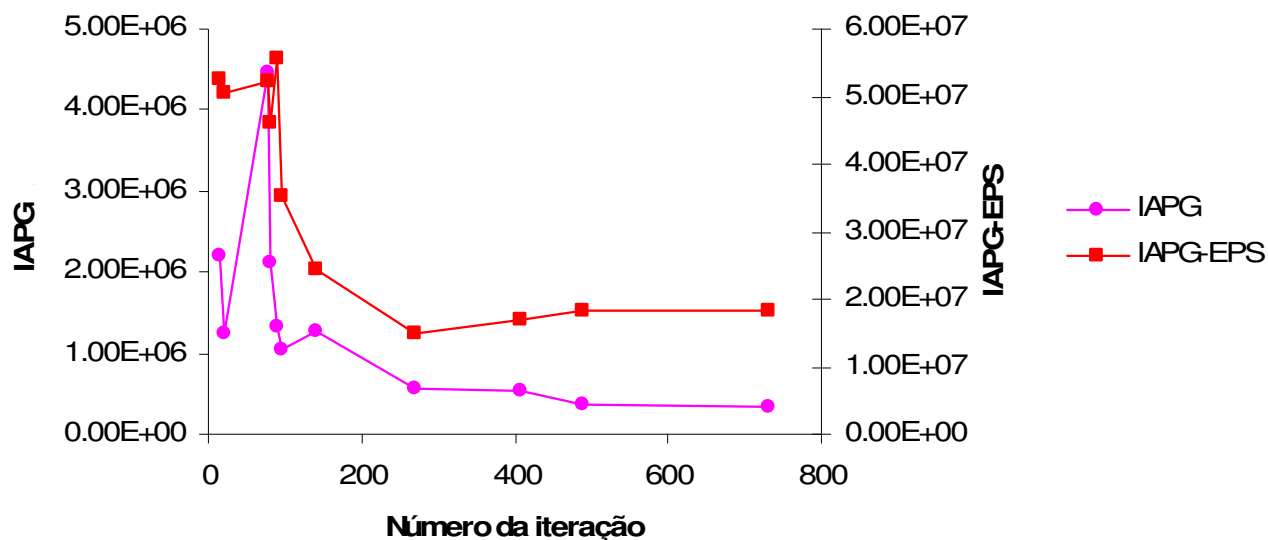


Figura 3.11 Impactos ambientais potenciais globais – Função objectivo IAPG-EPS – Configuração GrTBe

As optimizações que conduziram às soluções que apresentam os melhores valores para as funções objectivo VAL1 (objectivo económico), IAPG (objectivo ambiental) e IAPG-EPS (objectivo ambiental), relativas respectivamente às configurações GrTBe, E e novamente GrTBe foram analisadas. Dessa análise foi possível concluir que no caso da optimização com função objectivo VAL1, a solução que apresenta o melhor valor para VAL1 é também a melhor segundo IAPG-EPS não acontecendo o mesmo para IAPG. Na optimização com função objectivo IAPG a solução que apresenta o melhor valor para IAPG não é a melhor segundo VAL1 nem segundo IAPG-EPS. Na optimização com função objectivo IAPG-EPS a solução que conduz ao melhor valor para IAPG-EPS não apresenta o melhor valor para VAL1 nem para IAPG. Os objectivos económicos e ambientais não são, portanto, muito divergentes quando se considera a metodologia IAPG-EPS para determinação do impacto ambiental potencial global.

2.5.2 Pesquisa tabu (TS)

Comparando as optimizações que consideraram a configuração A, a função objectivo VAL2, número de soluções avaliadas em cada iteração igual a 3, número total de avaliações igual a 468 e limite para promover estratégia de intensificação igual a 150 (Apêndice B.2), foi possível verificar que existe alguma disparidade nos resultados obtidos pelas optimizações que usaram a mesma solução inicial. Para as outras duas optimizações, que consideraram os mesmos valores para os parâmetros mas em que a solução inicial foi diferente, verificou-se, uma menor disparidade de resultados. Os valores obtidos para VAL2 para estas duas optimizações são melhores do que os obtidos por duas das optimizações que consideraram a mesma solução inicial. As soluções finais obtidas embora sejam independentes da solução inicial considerada, podem apresentar alguma disparidade.

De seguida é apresentado um conjunto de testes efectuados com a pesquisa Tabu aplicada à optimização das várias configurações. O objectivo é ver como se comportam as soluções óptimas obtidas a partir de valores iniciais gerados aleatoriamente. Os resultados obtidos estão resumidos na Tabela 3.7 e detalhados no Apêndice B.2.

Foram realizadas cinco optimizações por função objectivo e por configuração. A referida tabela apresenta o valor inicial das funções objectivo, o desvio percentual das várias soluções óptimas para um par configuração/função objectivo relativamente à melhor solução. Estas melhores soluções têm desvio nulo que está representado a azul e os desvios inferiores a 5% a vermelho. Na última coluna apresenta-se o desvio percentual médio, calculado como a média aritmética dos desvios percentuais entre as soluções óptimas e a melhor solução encontrada.

Pode considerar-se que o algoritmo apresenta bom desempenho no caso das configurações A e Ae para as funções objectivo VAL1 e VAL2. A configuração Ae também apresenta um bom desempenho para IAPG. Com um desempenho razoável estão os casos A/IAPG-EPS, Ae/IAPG-EPS, Ee/VAL1, GrTBe/VAL1 e GrTBe/IAPG. Para a configuração E foi registado um bom desempenho para todas as funções objectivo embora E/IAPG-EPS esteja no limite (5,5%). Nos restantes casos o desempenho é bastante fraco, particularmente para a configuração Ee, embora geralmente seja melhor que o registado no recozimento simulado.

De referir que a configuração Ee é a que apresenta piores resultados em termos de precisão das soluções finais para todas as funções objectivo, excepto VAL1. Analisando as optimizações efectuadas foi novamente possível verificar que as soluções de Ee que conduzem a correntes processuais com caudais não muito elevados são raras, sendo estas as que são interessantes económica e ambientalmente.

Para todas as optimizações efectuadas que usaram a pesquisa Tabu foi calculada a percentagem de soluções inviáveis e/ou que infringiram restrições para as configurações E, Ee e GrTBe, tendo-se verificado que a configuração GrTBe é a configuração que apresenta a percentagem mais elevada para todas as funções objectivo (Apêndice B.2), seguindo-se a configuração Ee. A configuração E é a que apresenta percentagens mais baixas para todas as funções objectivo.

As melhores soluções obtidas para as configurações E, Ee e GrTBe nas optimizações com função objectivo VAL1 e IAPG-EPS, foram alvo de um estudo de sensibilidade. Para cada solução foi variada uma variável de cada vez (considerou-se 95% do seu valor e nos casos em que o limite inferior foi atingido considerou-se o valor mínimo para essa variável) e analisou-se o efeito nas grandezas VAL1, VAL2, IAPG e IAPG-EPS. Não foi, portanto, observado o efeito de possíveis interacções. Para as melhores soluções de E, Ee e GrTBe segundo VAL1, verificou-se que no caso da configuração Ee a alteração referida em 5 das variáveis provocou ou a infracção de restrições ou a inviabilidade das 5 correspondentes soluções. Para E foram registadas 4 soluções inviáveis e para GrTBe 2. Para as melhores soluções de E, Ee e GrTBe segundo

IAPG-EPS constatou-se que para a configuração Ee existem 8 soluções inviáveis, para E 3 inviáveis e 1 que infringe restrições e para GrTBe 3 que infringem restrições (Apêndice B.2) Também foi possível verificar que a variação registada (nos casos em que ocorreu) em VAL1, VAL2, IAPG e IAPG-EPS decorrentes da alteração dos valores das variáveis, tem geralmente maior amplitude nos valores de IAPG e IAPG-EPS do que em VAL1 e VAL2. Para as configurações E e Ee variações na razão molar de reagentes e no número de pratos da coluna 1 conduziram sempre a soluções em que houve infracção de restrições ou em que não houve convergência. Para a configuração GrTBe variações na recuperação de benzeno na coluna 1 e na pressão da coluna 1 conduziram a soluções que infringiram restrições ou em que não houve convergência. Refira-se ainda que as soluções geradas apresentam geralmente valores iguais ou piores para a função objectivo do que a solução de partida (designada por nominal).

As Figuras 3.12 e 3.13 representam a evolução das optimizações que permitiram obter as melhores soluções para a configuração E e Ee, considerando respectivamente VAL1 e IAPG-EPS como funções objectivo e são apresentadas, como exemplo, para ilustrar a evolução das optimizações efectuadas.

Relativamente ao critério de paragem usou-se tal como referido um número fixo de iterações considerado suficiente de acordo com os ensaios preliminares efectuados (Apêndice B.2). No entanto, procedeu-se após as optimizações a uma análise dos resultados procurando verificar a adequabilidade da aplicação de um critério de convergência, paragem do algoritmo se não houver melhoria da solução durante uma determinada percentagem de iterações.

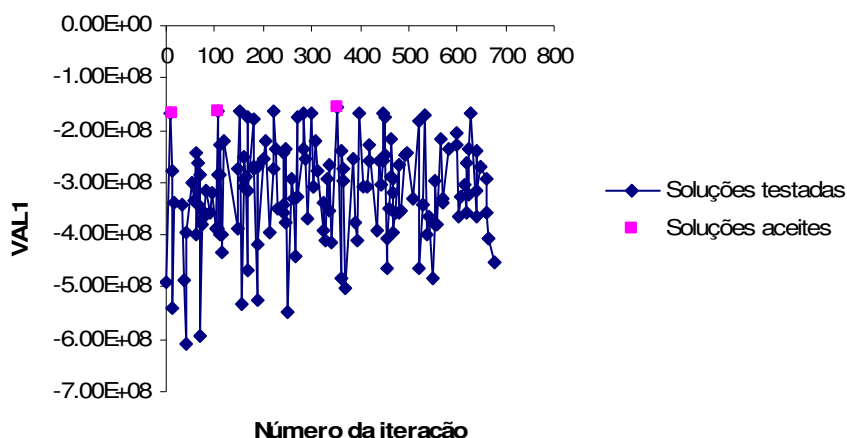


Figura 3.12 Evolução da optimização E/VAL1/TS

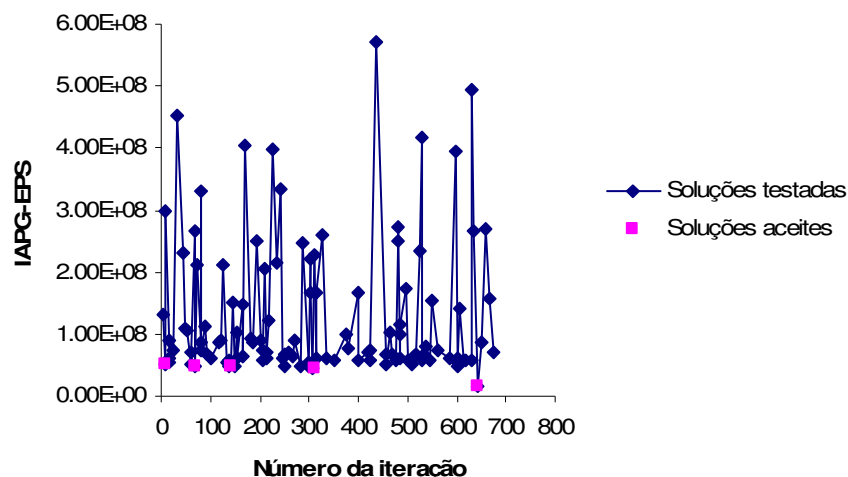


Figura 3.13 Evolução da otimização Ee/IAPG-EPS/TS

Na Tabela 3.8 são apresentadas para cada configuração e para cada função objectivo a diferença máxima entre avaliações (no caso da pesquisa tabu cada iteração corresponde a 3 avaliações) durante a qual não houve alteração da solução, dm , e a diferença entre o número total de avaliações e o número da avaliação correspondente à última solução encontrada, ud , tendo sido calculadas as respectivas percentagens relativamente ao número total de avaliações. Da análise desta tabela conclui-se que a aplicação de um critério de convergência que parasse o algoritmo se não houvesse melhoria da solução durante 40% do número total de iterações, provocaria a paragem do algoritmo antes de encontrar a solução final obtida de um número significativo de optimizações (valores assinalados a azul).

Nas Tabelas 3.9, 3.10, 3.11 e 3.12 apresentam-se os melhores resultados para cada uma das configurações e para as diferentes funções objectivo.

Nas Figuras 3.14, 3.15, 3.16 e 3.17 é apresentada a evolução das diferentes grandezas avaliadas para a melhor solução obtida na optimização de VAL1, VAL2, IAPG e IAPG-EPS.

Tabela 3.7 Precisão nas optimizações efectuadas com TS

[illegible]

Tabela 3.8 Análise da aplicação de um critério de convergência (TS)

	VAL 1		VAL2		IAPG		IAPG-EPS			VAL 1		VAL2		IAPG		IAPG-EPS	
	Nº avaliações		Nº avaliações		Nº avaliações		Nº avaliações			Percentagem de iterações		Percentagem de iterações		Percentagem de iterações		Percentagem de iterações	
A	ud	dm	ud	dm	ud	dm	ud	dm		ud	dm	ud	dm	ud	dm	ud	dm
1ª otimização	177	142	251	117	348	76	365	57		38%	30%	54%	25%	74%	16%	78%	12%
2ª otimização	464	0	145	185	200	227	313	109		99%	0%	31%	40%	43%	49%	67%	23%
3ª otimização	330	135	261	132	399	44	324	125		71%	29%	56%	28%	85%	9%	69%	27%
4ª otimização	192	260	151	287	378	50	284	118		41%	56%	32%	61%	81%	11%	61%	25%
5ª otimização	449	16	36	212	24	318	249	147		96%	3%	8%	45%	5%	68%	53%	31%
Ae																	
1ª otimização	333	65	24	294	212	121	326	84		71%	14%	5%	63%	45%	26%	70%	18%
2ª otimização	108	174	239	111	392	26	297	114		23%	37%	51%	24%	84%	6%	63%	24%
3ª otimização	195	247	435	16	138	289	47	188		42%	53%	93%	3%	29%	62%	10%	40%
4ª otimização	460	2	341	41	449	6	432	31		98%	0%	73%	9%	96%	1%	92%	7%
5ª otimização	354	55	154	271	182	249	195	127		76%	12%	33%	58%	39%	53%	42%	27%
E																	
1ª otimização	39	262	409	102	62	393	434	119		6%	56%	61%	15%	9%	58%	64%	18%
2ª otimização	489	55	69	302	202	93	137	339		72%	8%	10%	45%	30%	14%	20%	50%
3ª otimização	539	49	402	158	208	286	337	181		80%	7%	59%	23%	31%	42%	50%	27%
4ª otimização	323	127	628	30	102	530	625	27		48%	19%	93%	4%	15%	78%	92%	4%
5ª otimização	328	277	82	319	71	518	595	69		49%	41%	12%	47%	11%	77%	88%	10%
Ee																	
1ª otimização	430	231	317	272	230	192	279	241		64%	34%	47%	40%	34%	28%	41%	36%
2ª otimização	530	82	636	15	289	198	573	68		78%	12%	94%	2%	43%	29%	85%	10%
3ª otimização	391	155	97	523	340	221	371	252		58%	23%	14%	77%	50%	33%	55%	37%
4ª otimização	207	38	276	353	196	407	33	332		31%	6%	41%	52%	29%	60%	5%	49%
5ª otimização	295	185	180	329	644	10	244	214		44%	27%	27%	49%	95%	1%	36%	32%
GrTBe																	
1ª otimização	105	313	222	254	505	275	33	418		12%	35%	25%	29%	57%	31%	4%	47%
2ª otimização	211	577	316	402	813	44	151	187		24%	65%	36%	45%	92%	5%	17%	21%
3ª otimização	192	595	565	252	60	558	224	263		22%	67%	64%	29%	7%	63%	25%	30%
4ª otimização	72	551	530	168	873	0	14	433		8%	62%	60%	19%	99%	0%	2%	49%
5ª otimização	311	331	309	263	520	273	522	160		35%	37%	35%	30%	59%	31%	59%	18%

Tabela 3.9 Resultados para VAL1 (TS)

	A	Ae		E	Ee		GrTBe
VAL1	-1,48x10 ⁸	-1,43x10 ⁸	VAL1	-1,56x10 ⁸	-1,75x10 ⁸	VAL1	-1,48x10 ⁸
VAL2	-2,01x10 ⁸	-1,98x10 ⁸	VAL2	-2,09x10 ⁸	-2,40x10 ⁸	VAL2	-1,97x10 ⁸
IAPG	2,08x10 ⁵	2,83x10 ⁵	IAPG	2,35x10 ⁵	3,60x10 ⁵	IAPG	3,40x10 ⁵
IAPGEPS	1,58x10 ⁷	1,65x10 ⁷	IAPGEPS	1,59x10 ⁷	1,95x10 ⁷	IAPGEPS	1,46x10 ⁷
Pureza	0,941	0,944	Pureza	1,000	0,999	Pureza	0,998
vc (1)	54,2	62,2	vc (1)	53,3	65,8	vc (1)	48,9
vc (2)	1,6	1,9	vc (2)	1,6	2,0	vc (2)	1,5
vc (3)	2,88x10 ⁶	2,95x10 ⁶	vc (3)	2,78x10 ⁶	3,35x10 ⁶	vc (3)	3,05x10 ⁶
vc (4)	0,0077	0,0055	vc (4)	0,0057	0,0070	vc (4)	0,0069
vc (5)	58,0	65,2	vc (5)	55,8	65,9	vc (5)	50,7
vc (6)	89,3	87,8	vc (6)	97,8	127,5	vc (6)	100,6
vc (7)	0,00042	0,00030	vc (7)	0,00031	0,00092	vc (7)	0,99100
vc (8)	0,00030	0,00037	vc (8)	0,00068	0,00100	vc (8)	0,99400
vc (9)	1,86x10 ⁵	9,00x10 ⁵	vc (9)	2,48x10 ⁵	6,00x10 ⁵	vc (9)	3,21x10 ⁵
vc (16)	32	39	vc (10)	0,096	0,097	vc (10)	0,991
US	276	360	vc (11)	4,70	0,45	vc (11)	0,55
			vc (12)	4,76x10 ⁵	1,86x10 ⁵	vc (12)	2,38x10 ⁵
			vc (15)	9	8	vc (13)	0,99401
			vc (16)	38	37	vc (14)	2,07x10 ⁵
			US	353	146	vc (15)	3
						vc (16)	30
						vc (18)	11
						vc (19)	0,99701
						US	573

Tabela 3.10 Resultados para VAL2 (TS)

	A	Ae		E	Ee		GrTBe
VAL2	-2,00x10 ⁸	-1,94x10 ⁸	VAL2	-2,06x10 ⁸	-2,14x10 ⁸	VAL2	-1,98x10 ⁸
VAL1	-1,51x10 ⁸	-1,44x10 ⁸	VAL1	-1,55x10 ⁸	-1,63x10 ⁸	VAL1	-1,55x10 ⁸
IAPG	2,05x10 ⁵	2,51x10 ⁵	IAPG	2,22x10 ⁵	2,97x10 ⁵	IAPG	6,09x10 ⁵
IAPGEPS	1,46x10 ⁷	1,49x10 ⁷	IAPGEPS	1,55x10 ⁷	1,54x10 ⁷	IAPGEPS	1,30x10 ⁷
Pureza	0,951	0,941	Pureza	1,000	0,999	Pureza	0,991
vc (1)	63,1	57,8	vc (1)	66,7	69,3	vc (1)	67,6
vc (2)	1,9	1,7	vc (2)	2,0	2,1	vc (2)	2,0
vc (3)	2,55x10 ⁶	3,05x10 ⁶	vc (3)	3,32x10 ⁶	2,78x10 ⁶	vc (3)	3,05x10 ⁶
vc (4)	0,0052	0,0087	vc (4)	0,0098	0,0052	vc (4)	0,0059
vc (5)	66,6	59,4	vc (5)	70,3	71,0	vc (5)	64,5
vc (6)	126,0	124,6	vc (6)	117,6	137,4	vc (6)	96,3
vc (7)	0,00080	0,00095	vc (7)	0,00030	0,00097	vc (7)	0,99500
vc (8)	0,00057	0,00042	vc (8)	0,00084	0,00045	vc (8)	0,99000
vc (9)	1,34x10 ⁵	1,76x10 ⁵	vc (9)	2,48x10 ⁵	4,86x10 ⁵	vc (9)	4,55x10 ⁵
vc (16)	29	35	vc (10)	0,097	0,095	vc (10)	0,991
US	323	229	vc (11)	1,90	2,70	vc (11)	0,65
			vc (12)	9,83x10 ⁵	6,93x10 ⁵	vc (12)	9,41x10 ⁵
			vc (15)	6	6	vc (13)	0,99601
			vc (16)	33	32	vc (14)	2,79x10 ⁵
			US	48	496	vc (15)	4
						vc (16)	36
						vc (18)	11
						vc (19)	0,99400
						US	575

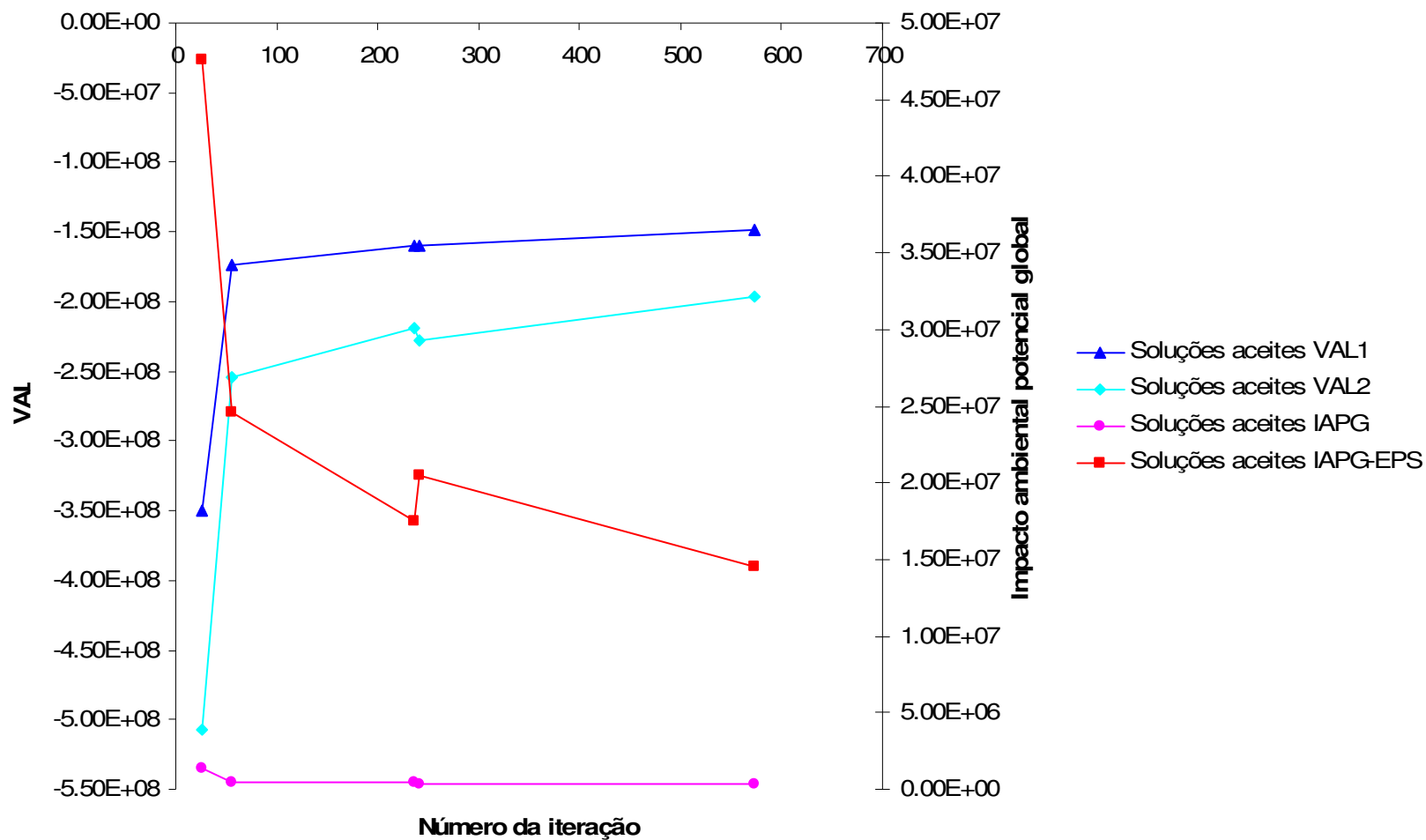


Figura 3.14 Evolução das diferentes grandezas avaliadas para a melhor solução obtida na optimização de VAL1 (pureza>0,990) – GrTBe

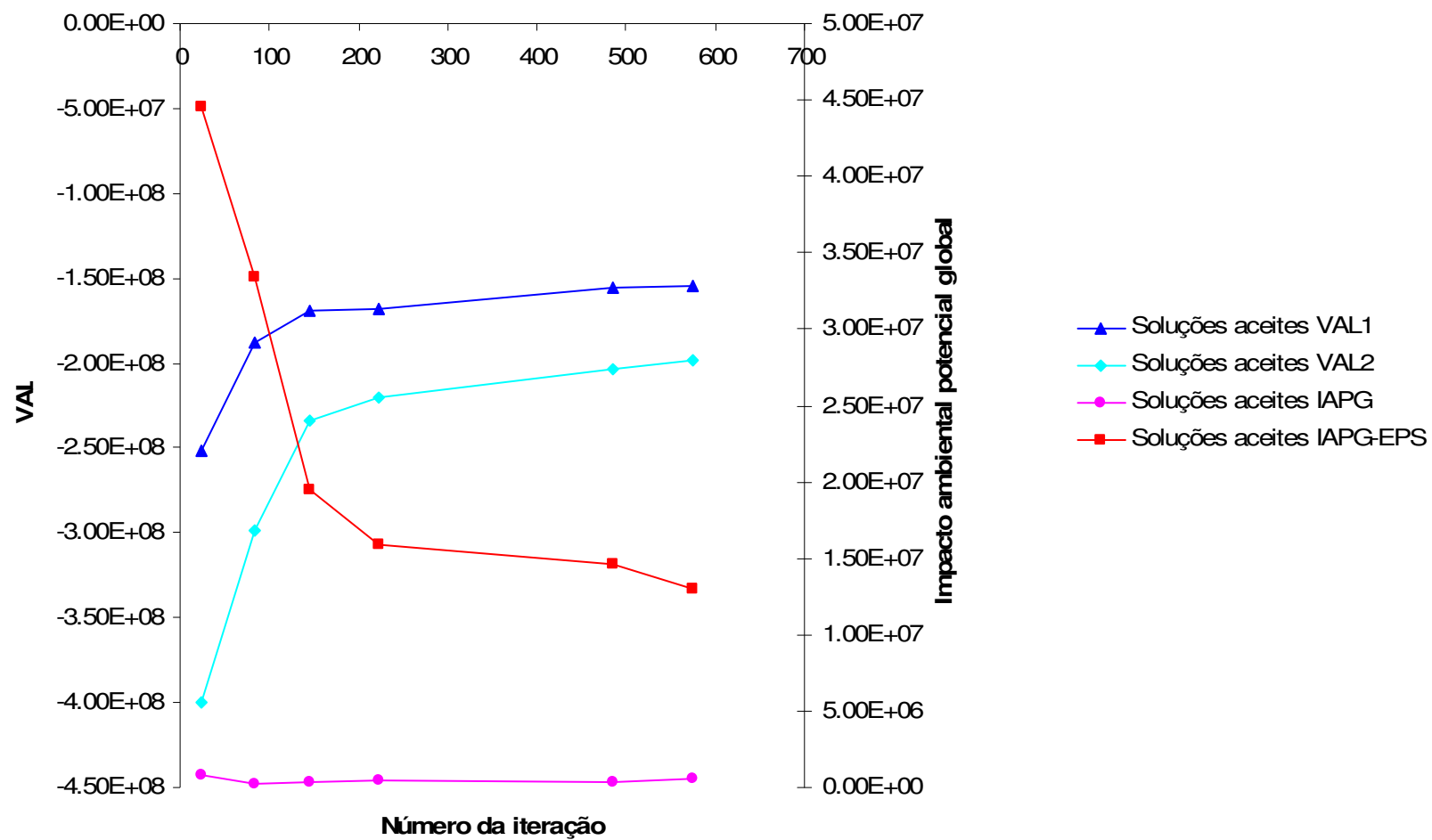


Figura 3.15 Evolução das diferentes grandezas avaliadas para a melhor solução obtida na optimização de VAL2 (pureza>0,990) – GrTBe

Tabela 3.11 Resultados para IAPG (TS)

	A	Ae		E	Ee		GrTBe
IAPG	2,05x10 ⁵	2,53x10 ⁵	IAPG	1,98x10 ⁵	3,19x10 ⁵	IAPG	2,59x10 ⁵
IAPGEPS	1,51x10 ⁷	1,58x10 ⁷	IAPGEPS	2,44x10 ⁷	1,72x10 ⁷	IAPGEPS	3,01x10 ⁷
VAL1	-1,49x10 ⁸	-1,52x10 ⁸	VAL1	-1,73x10 ⁸	-1,90x10 ⁸	VAL1	-1,81x10 ⁸
VAL2	-1,99x10 ⁸	-2,04x10 ⁸	VAL2	-2,54x10 ⁸	-2,47x10 ⁸	VAL2	-2,80x10 ⁸
Pureza	0,949	0,965	Pureza	0,999	1,000	Pureza	1,000
vc (1)	67,5	64,9	vc (1)	39,1	58,7	vc (1)	54,2
vc (2)	2,0	1,9	vc (2)	1,2	1,8	vc (2)	1,6
vc (3)	2,95x10 ⁶	1,78x10 ⁶	vc (3)	2,45x10 ⁶	3,35x10 ⁶	vc (3)	2,01x10 ⁶
vc (4)	0,0082	0,0070	vc (4)	0,0054	0,0086	vc (4)	0,0075
vc (5)	71,7	68,8	vc (5)	48,5	59,4	vc (5)	68,1
vc (6)	109,1	135,9	vc (6)	138,8	113,3	vc (6)	119,0
vc (7)	0,00082	0,00099	vc (7)	0,00099	0,00048	vc (7)	0,99101
vc (8)	0,00066	0,00085	vc (8)	0,00045	0,00036	vc (8)	0,99001
vc (9)	2,38x10 ⁵	1,76x10 ⁵	vc (9)	5,79x10 ⁵	5,58x10 ⁵	vc (9)	4,65x10 ⁵
vc (16)	31	25	vc (10)	0,089	0,081	vc (10)	0,992
US	69	76	vc (11)	1,80	2,20	vc (11)	0,25
			vc (12)	5,90x10 ⁵	9,72x10 ⁵	vc (12)	1,14x10 ⁵
			vc (15)	9	8	vc (13)	0,999
			vc (16)	40	38	vc (14)	1,14x10 ⁵
			US	605	32	vc (15)	3
						vc (16)	26
						vc (18)	9
						vc (19)	0,99900
						US	71

Tabela 3.12 Resultados para IAPG-EPS (TS)

	A	Ae		E	Ee		GrTBe
IAPGEPS	1,47x10 ⁷	1,46x10 ⁷	IAPGEPS	1,53x10 ⁷	1,69x10 ⁷	IAPGEPS	1,44x10 ⁷
IAPG	2,23x10 ⁵	2,53x10 ⁵	IAPG	2,45x10 ⁵	3,30x10 ⁵	IAPG	4,67x10 ⁵
VAL1	-1,57x10 ⁸	-1,46x10 ⁸	VAL1	-1,61x10 ⁸	-1,70x10 ⁸	VAL1	-1,50x10 ⁸
VAL2	-2,06x10 ⁸	-1,94x10 ⁸	VAL2	-2,12x10 ⁸	-2,26x10 ⁸	VAL2	-1,98x10 ⁸
Pureza	0,959	0,956	Pureza	1,000	1,000	Pureza	0,996
vc (1)	59,6	66,7	vc (1)	64,9	53,3	vc (1)	40,0
vc (2)	1,8	2,0	vc (2)	1,9	1,6	vc (2)	1,2
vc (3)	1,91x10 ⁶	2,38x10 ⁶	vc (3)	1,64x10 ⁶	2,68x10 ⁶	vc (3)	3,05x10 ⁶
vc (4)	0,0050	0,0061	vc (4)	0,0055	0,0059	vc (4)	0,0060
vc (5)	62,3	68,8	vc (5)	67,4	54,3	vc (5)	39,1
vc (6)	131,7	117,6	vc (6)	97,8	131,7	vc (6)	107,6
vc (7)	0,00066	0,00083	vc (7)	0,00042	0,00043	vc (7)	0,99499
vc (8)	0,00087	0,00098	vc (8)	0,00084	0,00076	vc (8)	0,99200
vc (9)	1,14x10 ⁵	1,45x10 ⁵	vc (9)	1,03x10 ⁵	5,69x10 ⁵	vc (9)	4,03x10 ⁵
vc (16)	42	29	vc (10)	0,099	0,083	vc (10)	0,994
US	155	36	vc (11)	1,05	4,45	vc (11)	1,15
			vc (12)	4,24x10 ⁵	4,55x10 ⁵	vc (12)	3,21x10 ⁵
			vc (15)	5	8	vc (13)	0,99202
			vc (16)	40	32	vc (14)	1,02x10 ⁶
			US	242	643	vc (15)	3
						vc (16)	29
						vc (18)	8
						vc (19)	0,99300
						US	851

Os resultados de todas as optimizações efectuadas, cinco por função objectivo e para cada configuração são apresentados no apêndice B.2.

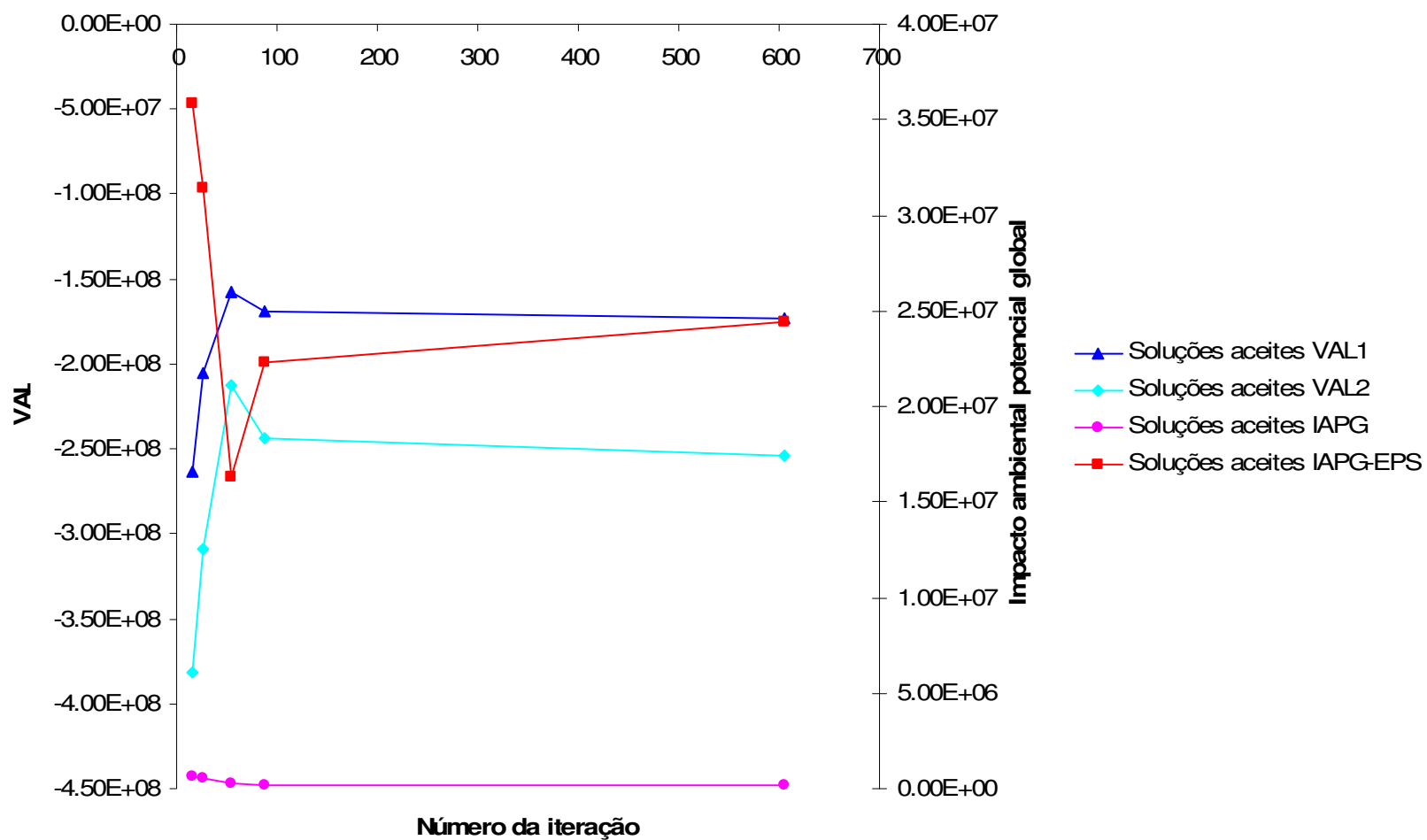


Figura 3.16 Evolução das diferentes grandezas avaliadas para a melhor solução obtida na optimização de IAPG (pureza>0,990) –E

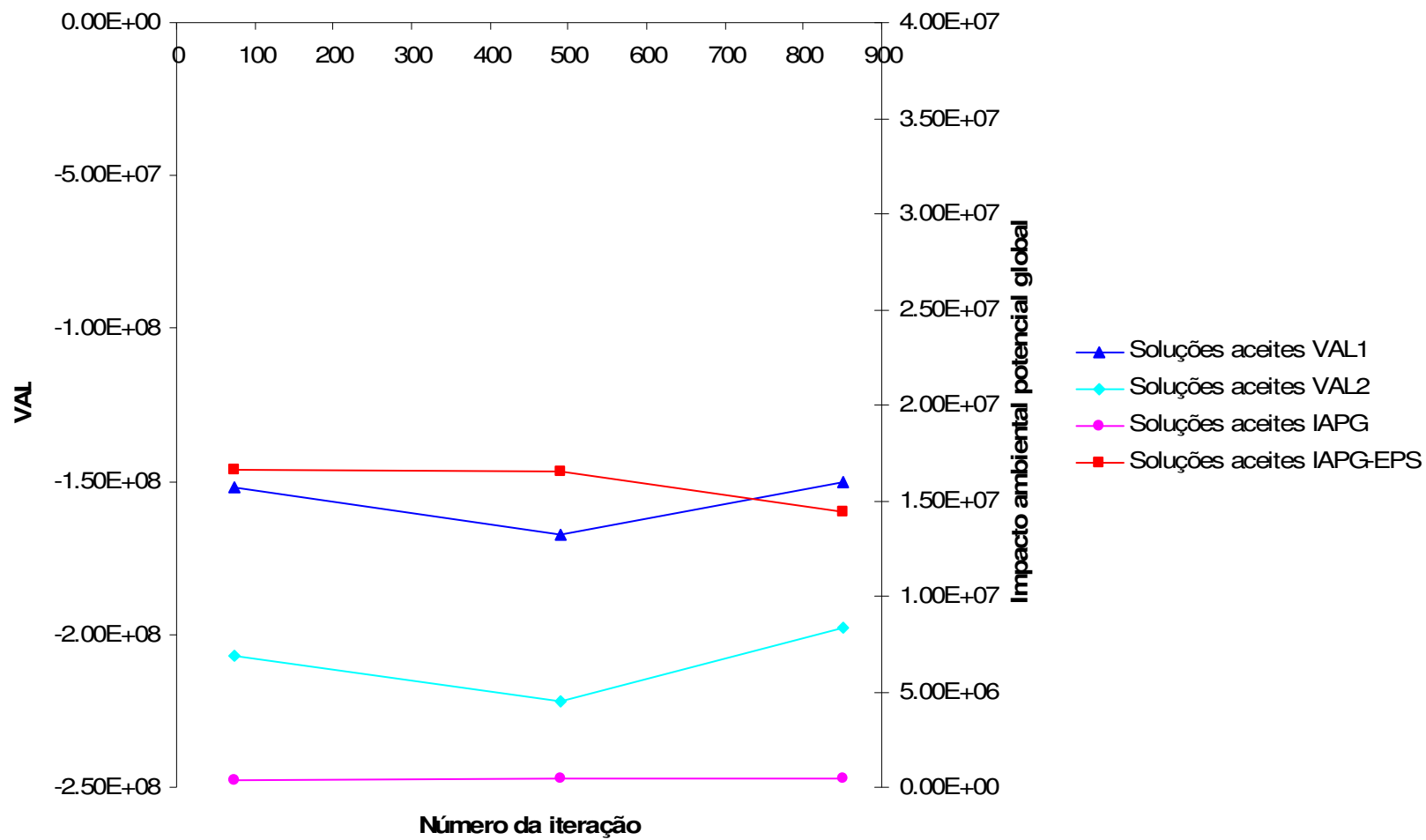


Figura 3.17 Evolução das diferentes grandezas avaliadas para a melhor solução obtida na optimização de IAPG-EPS (pureza>0,990) – GrTBe

Da análise das Tabelas 3.9, 3.10, 3.11 e 3.12 verifica-se que as soluções finais para as configurações A e Ae não permitem obter correntes de benzeno com pureza superior a 0,990. Face a este problema alterou-se o algoritmo da pesquisa Tabu, através da introdução de um factor de penalização na função objectivo para as soluções que não permitem a obtenção de correntes de benzeno com pureza superior a 0,990. Aplicou-se o algoritmo à configuração A e função objectivo VAL2. Os resultados são apresentados no Apêndice B.2, tendo-se verificado que neste caso conseguem-se obter soluções finais com correntes de benzeno de pureza superior a 0,99 (3 optimizações das 5 realizadas estão nesta situação). Contudo, o número de soluções que conseguem atingir este objectivo, pureza da corrente de benzeno igual ou superior a 0,990, é muito reduzido e a solução final corresponde geralmente à única solução que durante o decurso da optimização o atingiu. Refira-se ainda que as soluções que conseguem atingir o objectivo apresentam valores pouco interessantes para a função objectivo quando comparados com os resultados para as configurações E, GrTBe e mesmo Ee.

Apesar da melhoria registada com a pesquisa tabu as soluções da configuração Ee continuam a ter piores valores para todas as funções objectivo (menores valores para VAL1 e VAL2 e valores maiores para IAPG e IAPG-EPS) do que as soluções de E e GrTBe.

As soluções das configurações GrTBe e E apresentam valores para VAL1, VAL2 e IAPG-EPS relativamente próximos nas optimizações com essas funções objectivo, embora as soluções de GrTBe apresentem valores melhores. Quando a função objectivo é IAPG a solução de E apresenta um valor para IAPG claramente superior ao das soluções de GrTBe e Ee, tal como acontecia com o recozimento simulado.

À semelhança do que aconteceu com o recozimento simulado quando se consideraram como funções objectivo VAL1, VAL2 e IAPG-EPS a configuração que conduziu às melhores soluções foi GrTBe, enquanto que quando a função objectivo era IAPG foi a configuração E;

Das Figuras 3.14, 3.15, 3.16 e 3.17 que mostram a evolução das diferentes grandezas para as optimizações que conduziram às melhores soluções segundo VAL1, VAL2, IAPG e IAPG-EPS, é possível verificar que a um aumento de VAL1 e VAL2 corresponde geralmente uma diminuição de IAPG-EPS e IAPG e vice-versa.

As optimizações que conduziram às soluções que apresentam os melhores valores para as funções objectivo VAL1 (objectivo económico), IAPG (objectivo ambiental) e IAPG-EPS (objectivo ambiental), relativas respectivamente às configurações GrTBe, E e novamente GrTBe foram analisadas. Dessa análise foi possível concluir que no caso da optimização com função objectivo VAL1, a solução que apresenta o melhor valor para VAL1 é também a melhor segundo IAPG-EPS não acontecendo o mesmo para IAPG. Na optimização com função objectivo IAPG a solução que apresenta o melhor valor para IAPG não é a melhor segundo VAL1 nem segundo IAPG-EPS. Na optimização com função objectivo IAPG-EPS a solução que conduz ao melhor valor para IAPG-EPS apresenta também o melhor valor para VAL1, havendo soluções que conduzem a melhores valores para IAPG. Estes resultados corroboram o que foi anteriormente dito, isto é, os objectivos económicos e ambientais não são muito divergentes quando se considera a metodologia IAPG-EPS, contrariamente ao que acontece quando se considera a metodologia IAPG.

A pesquisa tabu foi também aplicada às configurações ErTBe5, GrTBe6 e GrTBe7 tendo-se concluído que o algoritmo não evolui, devido à elevada escassez de soluções viáveis. Estes ensaios permitiram, no entanto, concluir que para estas três configurações é possível satisfazer o critério de qualidade estabelecido (pureza da corrente de benzeno superior a 99,0%). Contudo, se fosse necessário proceder à sua optimização ter-se-ia de utilizar um programa de optimização que efectuassem um relaxamento das restrições. Para ErTBe5, por exemplo, verificou-se que a incorporação de algumas das restrições operacionais existentes para esta

configuração, na geração de novas soluções, permite obter um maior número de soluções viáveis.

Comparando os resultados da aplicação dos dois algoritmos verifica-se que de uma forma geral, para todas as configurações a pesquisa tabu apresenta melhores soluções, contudo para as configurações E e GrTBe essa melhoria não é muito acentuada. No caso da configuração Ee a melhoria constatada é significativa.

As melhores soluções para as funções objectivo VAL1 e IAPG-EPS foram obtidas para a configuração GrTBe usando a pesquisa tabu. Para a função objectivo VAL2 ambos os algoritmos obtiveram soluções (configuração GrTBe) que apresentam o mesmo valor para VAL2. Para a função objectivo IAPG a melhor solução foi obtida para a configuração E usando o recozimento simulado.

Analisando todas as soluções não é possível indicar uma solução que seja a melhor em todos os critérios. Contudo, as soluções que apresentam os melhores valores para VAL1, VAL2 e IAPG-EPS são da configuração GrTBe. A solução que apresenta o melhor valor para IAPG é proveniente da configuração E.

3 Optimização multi-objectivo – recozimento simulado modificado

3.1 Introdução

A optimização procura encontrar uma ou mais soluções possíveis que correspondam a valores extremos de um ou mais objectivos. A necessidade de encontrar essas soluções óptimas advém principalmente da necessidade de fabricar ao mínimo custo, poluir o menos possível ou conseguir a máxima fiabilidade entre outros.

A maior parte dos problemas reais envolvem naturalmente mais de um objectivo, muitas das vezes divergentes, não existindo uma solução que contemple simultaneamente valores extremos para os vários objectivos. Uma solução extrema para um dos objectivos implica um comprometimento dos outros. Diferentes soluções podem, portanto, traduzir diferentes compromissos (*trade-offs*) para os vários objectivos.

Enquanto num problema de optimização monobjectivo se procura uma única solução, excepto para alguns problemas de optimização multimodais, na optimização multi-objectivo tal pode não acontecer.

Na resolução de problemas de optimização multi-objectivo podem-se distinguir duas abordagens, a primeira hierarquiza primeiro os objectivos, usando essa hierarquização, por exemplo, para formar uma função objectivo composta e transformando o problema de optimização num problema monobjectivo e, a segunda, procura determinar várias soluções compromisso (pertencentes à frente de Pareto) e depois escolher uma dessas soluções usando informação de nível mais elevado.

Na primeira abordagem é de referir que a solução é muito dependente do vector preferência de objectivos utilizado para formar a função composta. Uma mudança neste vector resultará eventualmente numa solução diferente. Dado que este vector é estabelecido *à priori*, sem conhecimento das possíveis consequências esta abordagem é mais subjectiva (Deb, 2001). Claro que no exemplo dado é possível construir diferentes vectores e, portanto, diferentes funções compostas e consequentemente obter soluções compromisso distintas, embora tal diversidade de soluções não esteja garantida.

A forma clássica de resolver um problema de optimização multi-objectivo é seguir a abordagem que considera um vector preferência para hierarquizar múltiplos objectivos. Dado que a procura e os métodos de optimização clássicos usam uma estratégia de ponto para ponto, onde uma solução em cada iteração é modificada para uma solução diferente e melhor (geralmente), o resultado final da utilização de um método de optimização clássico é uma única solução óptima. O desenvolvimento de métodos baseados na hierarquização foi motivado pelo facto dos métodos de optimização disponíveis conseguirem apenas encontrar uma única solução. Contudo a área da optimização modificou-se através da introdução de algoritmos de optimização não clássicos e estocásticos, como por exemplo os algoritmos genéticos que permitem a obtenção de uma população de soluções (Deb, 2001).

Como já referido muitos dos algoritmos transformam o problema de optimização multi-objectivo num problema de optimização monobjectivo a partir de procedimentos definidos pelo decisor. O método da soma ponderada considera diferentes pesos para os vários objectivos, convertendo múltiplos objectivos num único. Neste método, o vector pesos é definido pelo decisor o que o torna algo subjectivo, apresentando ainda a desvantagem de ser incapaz de encontrar soluções óptimas compromisso em problemas com uma região óptima de Pareto não convexa. O método das restrições ϵ , por seu lado, consegue resolver esta desvantagem convertendo todas as funções objectivo excepto uma em restrições. Contudo, apresenta também o problema da subjectividade uma vez que é necessário definir limites para restringir os objectivos. Outra forma de resolver problemas não convexos é minimizar uma métrica

Tchebycheff construída usando vários objectivos, mas este método também requer um vector de pesos que evidencie a importância dos vários objectivos. Em relação ao método da soma ponderada pode referir-se o trabalho de Kim e Weck (2006) com o desenvolvimento de um método que evita algumas das desvantagens apresentadas pela soma ponderada. Uma aplicação do método das restrições ϵ é o trabalho desenvolvido por Fadel e Li (2002).

Para além dos métodos acima mencionados podem referir-se ainda os seguintes métodos: o método de Benson (Benson et al., 1998; Ehrgott, 2000), o método do valor da função (Keeney e Raiffa, 1993), a programação por objectivos (Deb, 1998) e os métodos interactivos de que é exemplo o *Interactive Surrogate Worth Trade-off*, ISWT (Chankong et al., 1985).

Para alguns destes algoritmos existem teoremas que provam que a solução óptima obtida através da resolução do problema de optimização convertido em monobjectivo é uma das soluções óptimas de Pareto o que os torna interessantes. Por outro lado, estes algoritmos têm geralmente de ser utilizados muitas vezes, esperando-se a obtenção de uma solução óptima de Pareto diferente de cada vez, o que não está garantido. É de realçar a dificuldade inerente a estes métodos, nomeadamente na definição dos parâmetros necessários para a resolução dos problemas de optimização (Deb, 2001).

Existem ainda outros métodos que não foram referidos anteriormente, como por exemplo o método da intersecção do limite normal (NBI) (Das e Dennis, 1998), aplicado a um problema não linear genérico. Para além destes métodos de índole mais ortodoxa existem outros, ditos estocásticos, que convém considerar, nomeadamente o recozimento simulado (SA), a pesquisa Tabu (TS) e os algoritmos evolucionários (que incluem os algoritmos genéticos). Existem algoritmos baseados nestes métodos que procuram obter o conjunto óptimo de Pareto.

Os métodos evolucionários consideram na sua génese populações de pontos, o que permite a obtenção da frente de Pareto de uma só vez, sendo frequentemente utilizados em optimização multi-objectivo. Destacam-se os trabalhos de Srinivas e Deb em 1995 com o desenvolvimento do algoritmo NSGA (*nondominated sorting genetic algorithm*), Rajesh et al. em 2001 aplicando o NSGA a problemas de optimização multi-objectivo a instalações industriais de hidrogénio, Deb et al. em 2002 com o NSGA-II, Anderson et al. com optimização multi-objectivo numa central de incineração em 2005, Bhutani et al. em 2006 na modelação, simulação e optimização multi-objectivo de uma unidade industrial e Dietz et al. em 2006 com a optimização multi-objectivo em instalações de funcionamento não contínuo.

Em relação à pesquisa Tabu refira-se o trabalho de Jaeggi et al., 2006 que compara os algoritmos de pesquisa tabu desenvolvidos com o algoritmo genético NSGA –II.

Os métodos baseados no recozimento simulado para optimização multi-objectivo apresentam algumas vantagens, nomeadamente o facto de não precisarem de derivadas, resolverem facilmente problemas com funções contínuas e problemas combinatórios e permitirem obter várias soluções óptimas numa só optimização.

A comparação dos resultados obtidos na optimização monobjectivo, usando critérios económicos e ambientais com os resultados da optimização multi-objectivo, utilizando o recozimento simulado, reveste-se de particular importância pois permitirá avaliar a qualidade das soluções encontradas por cada uma das abordagens.

Como algoritmos baseados no recozimento simulado, SA, podem referir-se o recozimento simulado multi-objectivo (MOSA) desenvolvido Ulungu et al. (1999), recozimento simulado multi-objectivo desenvolvido por Suppaitnarm (SMOSA), recozimento simulado de Pareto (PSA) e os algoritmos de recozimento simulado multi-objectivo PDMOSA e WMOSA desenvolvidos por Suman (2003) para problemas com restrições.

No método MOSA, é usada uma estratégia de hierarquização de critérios, com projecção do espaço objectivo multidimensional num espaço monodimensional usando

uma soma ponderada. Diferentes funções de hierarquização conduzem a paradigmas de projecção diferentes.

O algoritmo SMOSA, utiliza o conceito de arquivo das soluções óptimas de Pareto conjuntamente com a estratégia de retorno à base considerando uma solução do conjunto de Pareto. Não considera um vector de pesos no critério de aceitação e utiliza múltiplas temperaturas (uma por objectivo).

Segundo Suman (2004) no PSA (*Pareto Simulated Annealing*) Czyzak et al. (1994) e Czyzak e Jaszkievicz (1998) modificaram o procedimento de Ulungu et al. (1999) através da introdução do conceito de soluções interactivas. Em cada iteração deste procedimento um conjunto de soluções, denominado a amostra geradora, é usado para controlar os pesos dos objectivos na probabilidade de aceitação múltipla, para assegurar uma boa dispersão das soluções geradoras.

O algoritmo PDMOSA introduz uma estratégia de determinação das soluções mais capazes em relação à dominância de Pareto enquanto que o algoritmo WMOSA tem como característica mais relevante a incorporação das restrições no algoritmo principal.

Objectivos do subcapítulo

- desenvolvimento de um algoritmo baseado no recozimento simulado (SA) para resolução do problema de optimização multi-objectivo, considerando objectivos económicos e ambientais;
- comparação dos resultados obtidos pelas optimização monobjectivo e multi-objectivo.

3.2 Problema de otimização multi-objectivo

3.2.1 Formulação

Um problema de otimização multi-objectivo pode ser formulado da seguinte forma:

$$\min / \max f_n(x) \quad n = 1, \dots, N$$

s.a.

$$\begin{aligned} g_j(x) &\leq 0 & j = 1, \dots, J \\ h_k(x) &= 0 & k = 1, \dots, K \end{aligned} \quad (3.6)$$

$$x_i^{\text{limite inferior}} \leq x_i \leq x_i^{\text{limite superior}} \quad i = 1, \dots, m$$

As funções $f_n(x)$ são as diferentes funções objectivo, podendo cada uma ser maximizada ou minimizada, x é um vector de variáveis decisão em que cada uma das variáveis está limitada superiormente e inferiormente. $g_j(x)$ são as restrições e $h_k(x)$ são as ligações do problema.

3.2.2 Características

Se todas as funções objectivo e restrições são lineares o problema é linear multi-objectivo (MOLP) e tal como os problemas de programação linear tem muitas propriedades teóricas. Contudo, se uma das funções objectivo ou uma das restrições é não linear, o problema é não linear multi-objectivo (MONLP) e, frequentemente, não existem provas de convergência para as técnicas usadas. De referir que a maior parte dos problemas reais são deste tipo (Deb, 2001).

3.2.3 Soluções óptimas de Pareto e dominância

No caso de objectivos conflituosos o problema de otimização multi-objectivo resultante origina várias soluções óptimas, denominadas soluções óptimas de Pareto, sendo que nenhuma destas soluções pode ser considerada melhor do que as outras. O conjunto destas soluções, denomina-se por conjunto ótimo de Pareto e a curva formada pela ligação destas soluções é a chamada frente de Pareto.

Um conjunto ótimo de Pareto proporciona uma gama de opções de projecto e de operação para os projectistas e favorece, portanto, a possibilidade de encontrar processos mais eficientes.

Muitos dos algoritmos de otimização multi-objectivo utilizam o conceito de dominância. Nestes algoritmos duas soluções são comparadas procurando determinar se alguma domina a outra ou não. Da verificação da relação de dominância entre duas soluções pode resultar uma das seguintes três possibilidades:

- a solução 1 domina a solução 2;

- a solução 1 é dominada pela solução 2;
- as soluções 1 e 2 não se dominam uma à outra.

Esta verificação permite em última instância a determinação do conjunto óptimo de Pareto.

As propriedades da relação de dominância são as seguintes (Cormen et al., 1990):

- não é reflexiva, uma dada solução não se domina a si própria;
- não é simétrica, porque o facto de uma solução, p dominar uma solução q , não implica que a solução q domine a solução p , ou seja, $p \succ q$ não implica $q \succ p$;
- não é anti-simétrica, dado que se a relação não é simétrica também não pode ser anti-simétrica;
- transitiva, se $p \succ q$ e $q \succ r$ então $p \succ r$.

3.3 Algoritmo SA proposto

De referir que se num problema multi-objectivo as funções objectivo não evidenciam um conflito, a solução para qualquer objectivo é a mesma pelo que o domínio de Pareto convergirá para uma solução. Neste caso uma técnica de optimização monobjectivo será mais apropriada (Halsall-Whitney e Thibault, 2006). Contudo pode não ser óbvio que os dois objectivos não se opõem um ao outro (Deb, 2001).

Dado que se verificou que existe um maior conflito entre os critérios económicos e os critérios ambientais quando se consideram os impactos IAPG (ver capítulo 3), consideraram-se VAL1 e IAPG como funções objectivo no problema de optimização multi-objectivo.

As principais características do algoritmo proposto são a criação de um arquivo de soluções (espera-se que no final sejam soluções óptimas de Pareto) que vão sendo actualizadas no decurso da optimização e um critério de aceitação completamente diferente (Figura 3.28). A optimização é feita em função de um objectivo mas o critério de aceitação é modificado, de forma a privilegiar as soluções que traduzem movimentos na direcção da melhoria do outro objectivo. Assim um movimento que melhora as duas funções objectivo é aceite como nova solução com probabilidade 1, sendo posteriormente verificada a relação de dominância com as outras soluções que existem no arquivo. Se no arquivo existir uma solução que a domine, a nova solução continua a ser utilizada no algoritmo de optimização mas é excluída do arquivo de soluções óptimas. No caso de dominar uma solução do arquivo, substitui essa solução no arquivo. Se não dominar nem for dominada é adicionada ao arquivo.

Se um movimento melhora o primeiro objectivo e piora o segundo é rejeitado, embora seja verificada a relação de dominância relativamente às soluções do arquivo. Se piora o primeiro é aceite com uma probabilidade P , calculada da forma indicada no capítulo 3.

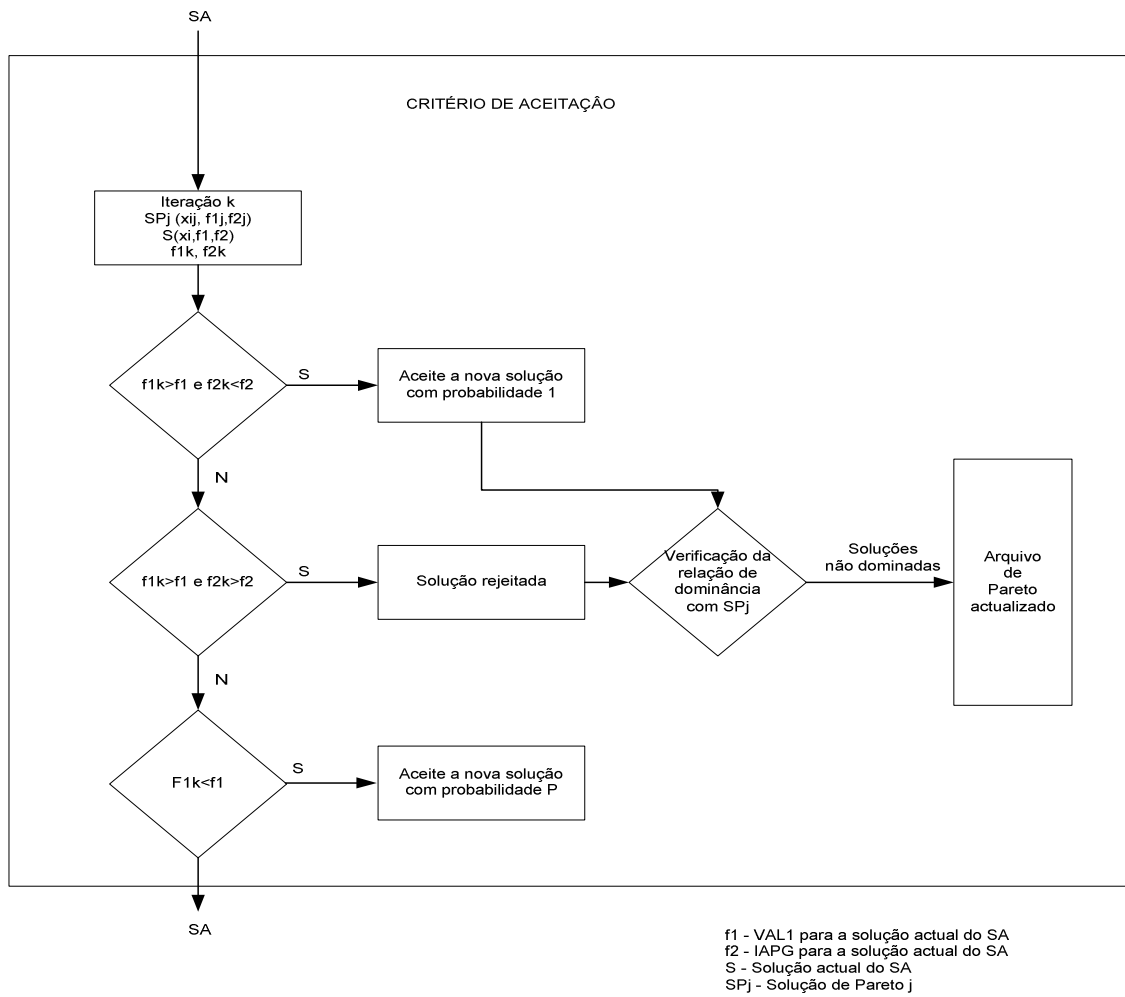


Figura 3.18 Detalhe do critério de aceitação no SA multi-objectivo

3.4 Resultados e discussão

O recozimento simulado multi-objectivo foi aplicado às configurações E, Ee e GrTBe considerando VAL1 e IAPG como funções objectivo e um número de iterações igual ao das optimizações monobjectivo. Para cada configuração foram realizadas 10 optimizações, 5 que consideraram como primeira função objectivo VAL1 e 5 que consideraram em primeiro lugar IAPG. Desta forma é possível verificar se o facto da optimização ser efectuada em função de uma determinada função objectivo influencia os resultados finais. Na Tabela 3.14 são apresentados a título ilustrativo os resultados para a configuração E considerando como primeira função objectivo VAL1. Os resultados das restantes optimizações podem ser consultados no Apêndice B3. Das 10 optimizações efectuadas para a configuração E é possível verificar que o número de soluções não dominadas obtidas por optimização não difere significativamente. Geralmente são obtidas 3 soluções não dominadas embora existam optimizações que tenham obtido um número inferior de soluções, tal como pode ser verificado na Tabela 3.13. Para a configuração GrTBe foi detectada uma maior variação no número de soluções não dominadas obtidas por optimização, em especial para as optimizações que consideraram como primeira função objectivo VAL1. No conjunto total de optimizações realizadas, o número mais elevado de soluções não dominadas por optimização é 4, embora o número de soluções não dominadas obtido nas optimizações que consideraram VAL1 como primeira função objectivo seja geralmente inferior. Para a configuração Ee foi geralmente obtida uma solução por optimização. Refira-se que analisando todas as soluções obtidas pelas optimizações realizadas para cada configuração é possível verificar que para a configuração E apenas 6 soluções são realmente não dominadas, para a configuração GrTBe apenas 7 e para Ee apenas duas (Tabela 3.13). O algoritmo multi-objectivo SA aplicado permitiu obter várias soluções óptimas de Pareto para as configurações E e GrTBe, contudo o seu número não é muito elevado. Para a configuração Ee apenas foram obtidas duas soluções não dominadas. Para esta configuração as soluções interessantes são raras, tal como já referido anteriormente.

Tabela 3.13 Soluções não dominadas obtidas nas optimizações multi-objectivo

E					
	1ª Otimização	2ª Otimização	3ª Otimização	4ª Otimização	5ª Otimização
Optimização VAL1	2	1	3	3	3
Optimização IAPG	2	1	3	2	3
Final	6				
Ee					
	1ª Otimização	2ª Otimização	3ª Otimização	4ª Otimização	5ª Otimização
Optimização VAL1	1	1	1	1	1
Optimização IAPG	1	1	1	2	1
Final	2				
GrTBe					
	1ª Otimização	2ª Otimização	3ª Otimização	4ª Otimização	5ª Otimização
Optimização VAL1	2	4	3	1	2
Optimização IAPG	3	4	3	4	2
Final	7				

Para cada configuração foi calculado o desvio percentual para VAL1 e IAPG das várias soluções finais obtidas nas optimizações relativamente ao melhor valor encontrado para VAL1 e IAPG (assinalado a azul nas Tabelas 3.15, 3.16 e 3.17). Segue-se uma coluna onde se apresenta o desvio percentual médio para cada função objectivo, calculado como a média aritmética dos desvios percentuais anteriormente referidos. De seguida é calculado o desvio percentual médio conjunto, média aritmética dos desvios percentuais para cada função objectivo. Foram também calculados os desvios percentuais médios relativos a cada função objectivo e os desvios percentuais médios conjunto mas usando apenas as soluções não dominadas (assinaladas a vermelho nas Tabelas 3.15, 3.16 e 3.17). Para a configuração Ee não se calculou o desvio percentual médio conjunto para as soluções não dominadas, uma vez que são apenas duas.

Para a configuração E o desvio percentual médio conjunto para as duas séries de optimizações é praticamente igual quando se consideram as soluções não dominadas, ou seja, otimizar usando VAL1 ou IAPG como primeira função objectivo não afecta significativamente a qualidade das soluções obtidas. Contudo, quando se consideram todas as soluções os resultados são diferentes (otimizar segundo IAPG conduz a um desvio percentual médio conjunto menos elevado).

Para a configuração GrTBe acontece o oposto os desvios percentuais médios conjuntos são mais próximos quando se consideram todas as soluções. Optimizar segundo IAPG conduz a desvios menores. Refira-se ainda que os desvios percentuais médios conjuntos são geralmente superiores aos da configuração E.

Para a configuração Ee o desvio percentual médio conjunto é bastante elevado, contudo otimizar segundo VAL1 conduz a desvios menores. O desvio percentual médio conjunto é muito superior aos das configurações E e GrTBe. Refira-se, no entanto, que quando se comparam as duas soluções não dominadas (1 de cada conjunto de optimizações) os desvios são bastante menores.

Tabela 3.14 Resultados das cinco otimizações multi-objectivo considerando VAL1 como a primeira função objectivo – Configuração E

Optimização	1		2	3			4			5		
VAL1	-1,74x10 ⁸	-1,60x10 ⁸	-1,61x10 ⁸	-1,62x10 ⁸	-1,68x10 ⁸	-1,56x10 ⁸	-1,67x10 ⁸	-1,59x10 ⁸	-1,65x10 ⁸	-1,59x10 ⁸	-1,66x10 ⁸	-1,58x10 ⁸
IAPG	2,23x10 ⁵	2,34x10 ⁵	2,19x10 ⁵	2,28x10 ⁵	2,03x10 ⁵	2,33x10 ⁵	1,99x10 ⁵	2,24x10 ⁵	2,20x10 ⁵	2,25x10 ⁵	1,97x10 ⁵	2,49x10 ⁵
VAL2	-2,50x10 ⁸	-2,19x10 ⁸	-2,16x10 ⁸	-2,25x10 ⁸	-2,39x10 ⁸	-2,13x10 ⁸	-2,44x10 ⁸	-2,17x10 ⁸	-2,31x10 ⁸	-2,12x10 ⁸	-2,39x10 ⁸	-2,12x10 ⁸
IAPG-EPS	2,30x10 ⁷	1,79x10 ⁷	1,65x10 ⁷	1,89x10 ⁷	2,16x10 ⁷	1,71x10 ⁷	2,32x10 ⁷	1,77x10 ⁷	2,00x10 ⁷	1,59x10 ⁷	2,19x10 ⁷	1,63x10 ⁷
Pureza	0,999	0,999	0,999	0,999	0,999	0,999	0,999	0,999	1,000	0,999	0,999	1,000
Nºsucessos	3		5	4			5			8		
vc (1)	61,7	61,7	57,9	37,7	60,6	57,9	49,4	44,6	50,5	64,9	39,8	53,7
vc (2)	1,9	1,9	1,7	1,1	1,8	1,7	1,5	1,3	1,5	1,9	1,2	1,6
vc (3)	1,25x10 ⁶	1,85x10 ⁶	2,84x10 ⁶	2,90x10 ⁶	2,63x10 ⁶	2,90x10 ⁶	2,63x10 ⁶	2,84x10 ⁶	2,99x10 ⁶	1,73x10 ⁶	3,14x10 ⁶	2,48x10 ⁶
vc (4)	0,0086	0,0076	0,0077	0,0066	0,0054	0,0088	0,0088	0,0051	0,0090	0,0092	0,0057	0,0072
vc (5)	71,3	67,7	62,3	41,9	68,9	62,3	58,7	48,5	56,9	69,5	47,3	56,3
vc (6)	135,3	98,6	129,1	116,8	135,9	87,9	103,0	91,1	139,4	99,6	122,4	109,9
vc (7)	0,00054	0,00060	0,00052	0,00064	0,00076	0,00061	0,00068	0,00100	0,00036	0,00050	0,00068	0,00043
vc (8)	0,00093	0,00060	0,00059	0,00048	0,00048	0,00067	0,00094	0,00036	0,00047	0,00076	0,00037	0,00047
vc (9)	9,50x10 ⁵	6,89x10 ⁵	3,45x10 ⁵	3,64x10 ⁵	2,99x10 ⁵	3,45x10 ⁵	5,32x10 ⁵	4,20x10 ⁵	9,23x10 ⁵	1,03x10 ⁵	2,52x10 ⁵	3,45x10 ⁵
vc (10)	0,092	0,085	0,095	0,094	0,092	0,100	0,062	0,095	0,082	0,089	0,097	0,098
vc (11)	3,10	3,29	3,43	1,06	3,48	3,48	1,25	4,43	4,05	1,82	0,72	1,82
vc (12)	5,97x10 ⁵	6,62x10 ⁵	5,13x10 ⁵	9,87x10 ⁵	9,41x10 ⁵	6,62x10 ⁵	5,50x10 ⁵	6,62x10 ⁵	9,50x10 ⁵	9,23x10 ⁵	9,97x10 ⁵	8,85x10 ⁵
vc (15)	8	7	8	9	9	7	9	6	8	9	6	9
vc (16)	35	37	37	28	24	27	28	33	41	32	27	29
Iteração	264	128	129	113	50	159	76	40	521	390	90	57

Tabela 3.15 Desempenho do algoritmo multi-objectivo SA – Configuração E

Número da Optimização														Todas as soluções		Soluções não dominadas	
		1ª	1ª	2ª	3ª	3ª	3ª	4ª	4ª	4ª	5ª	5ª	5ª	Desvio percentual médio relativo a cada função objectivo	Desvio percentual médio conjunto	Desvio percentual médio relativo a cada função objectivo	Desvio percentual médio conjunto
Optimização VAL1	VAL1	12,3	3,2	3,9	4,5	8,4	0,6	7,7	2,6	6,5	2,6	7,1	1,9	5,1	9,2	3,5	9,0
	IAPG	13,2	18,8	11,2	15,7	3,0	18,3	1,0	13,7	11,7	14,2	0,0	26,4	13,4		14,4	
Optimização IAPG	IAPG	5,8	0,0	3,9	3,2	3,9	0,0	5,8	6,5		6,5	3,9	1,9	4,1	7,7	3,0	8,5
	VAL1	0,0	26,4	15,2	10,7	7,1	26,4	8,6	4,1		3,6	9,6	13,2	11,4		14,0	

Tabela 3.16 Desempenho do algoritmo multi-objectivo SA – Configuração Ee

Número da Optimização								Todas as soluções	
		1ª	2ª	3ª	4ª	4ª	5ª	Desvio percentual médio relativo a cada função objectivo	Desvio percentual médio conjunto
Optimização VAL1	VAL1	31,4	147,4	0,0	31,4		40,6	62,7	99,0
	IAPG	92,6	425,1	17,1	29,8		111,7	135,3	
Optimização IAPG	IAPG	126,9	9,1	126,9	133,1	128,6	26,3	91,8	188,6
	VAL1	298,0	0,0	344,8	277,9	411,7	95,0	285,5	

Tabela 3.17 Desempenho do algoritmo multi-objectivo SA – Configuração GrTBe

Número da Optimização		1ª	1ª	1ª	2ª	2ª	2ª	2ª	3ª	3ª	3ª	4ª	4ª	4ª	4ª	5ª	5ª	Todas as soluções		Soluções não dominadas	
																		Desvio percentual médio relativo a cada função objectivo	Desvio percentual médio conjunto	Desvio percentual médio relativo a cada função objectivo	Desvio percentual médio conjunto
Optimização VAL1	VAL1	1,3	4,6		3,3	9,8	0,0	2,6	0,7	0,7	17,0	1,3				9,8	0,7	4,7	16,6	8,8	18,7
	IAPG	43,2	15,4		15,8	15,1	61,0	23,6	47,9	12,7	12,0	18,5				13,5	64,1	28,6		28,6	
Optimização IAPG	IAPG	3,9	0,7	17,6	20,3	1,3	9,8	13,7	8,5	26,8	9,2	8,5	25,5	17,0	28,8	7,2	11,1	13,1	14,9	12,3	14,4
	VAL1	19,3	58,7	10,8	1,5	22,0	18,5	5,4	27,8	12,4	15,1	17,4	4,2	9,7	0,0	20,5	5,8	16,6		16,6	

Procedeu-se à análise dos resultados das tabelas anteriores e dos resultados apresentados nos Apêndices B1 e B3. Para a configuração E, é possível verificar que na optimização multi-objectivo muitas das optimizações conduziram a três soluções distintas, potenciais soluções óptimas de Pareto. A comparação de todas as soluções da optimização multi-objectivo mediante VAL1 permite concluir que das 12 soluções obtidas apenas 4 são não dominadas, ou seja, soluções óptimas de Pareto no contexto das optimizações efectuadas. A comparação de todas as soluções da optimização multi-objectivo mediante IAPG permite concluir que das 11 soluções obtidas apenas 5 são não dominadas, ou seja, soluções óptimas de Pareto no contexto das optimizações efectuadas. Da análise conjunta dos dois conjuntos de resultados provenientes das optimizações multi-objectivo, conclui-se que das 9 soluções não dominadas apenas 6 são realmente não dominadas (1 proveniente das optimizações mediante VAL1 e 5 proveniente de IAPG). Comparando as soluções de Pareto obtidas pela optimização multi-objectivo com as soluções obtidas através de optimização monobjectivo pelo SA, com as funções objectivo VAL1 e IAPG, concluiu-se que apenas uma solução obtida na optimização monobjectivo é não dominada (proveniente de IAPG). A melhor solução obtida na optimização monobjectivo usando o recozimento simulado, considerando como função objectivo VAL1, é uma solução dominada, enquanto a melhor solução obtida segundo IAPG é não dominada; esta última solução é a melhor sob o ponto de vista ambiental.

Para a configuração GrTBe é possível verificar que, na optimização multi-objectivo algumas das optimizações conduziram a quatro soluções distintas, potenciais soluções óptimas de Pareto. A comparação de todas as soluções da optimização multi-objectivo mediante VAL1 permite concluir que das 12 soluções obtidas apenas 3 são não dominadas, ou seja, soluções óptimas de Pareto no contexto das optimizações efectuadas. A comparação de todas as soluções da optimização multi-objectivo mediante IAPG permite concluir que das 16 soluções obtidas 10 são não dominadas, ou seja, soluções óptimas de Pareto no contexto das optimizações efectuadas. Da análise conjunta dos dois conjuntos de resultados provenientes das optimizações multi-objectivo, conclui-se que das 13 soluções não dominadas apenas 7 são realmente não dominadas (2 proveniente das optimizações mediante VAL1 e 5 proveniente de IAPG). Comparando as soluções de Pareto com as soluções obtidas através de optimização monobjectivo pelo SA, com as funções objectivo VAL1 e IAPG, conclui-se que duas soluções obtidas na optimização monobjectivo considerando IAPG como função objectivo são não dominadas, dominando inclusive soluções não dominadas obtidas segundo optimização multi-objectivo. Existe ainda uma solução não dominada proveniente das optimizações monobjectivo considerando VAL1 como função objectivo. A melhor solução obtida na optimização monobjectivo usando o recozimento simulado, considerando como função objectivo VAL1, é uma solução dominada, enquanto a melhor solução obtida segundo IAPG é não dominada; esta última solução é a melhor sob o ponto de vista ambiental.

A aplicação do algoritmo multi-objectivo à configuração Ee conduz geralmente a apenas a uma única solução por optimização. A comparação de todas as soluções da optimização multi-objectivo mediante VAL1 permite concluir que das 5 soluções obtidas apenas 1 é não dominada. A comparação de todas as soluções da optimização multi-objectivo mediante IAPG permite concluir que das 5 soluções obtidas apenas 1 é não dominada. Comparando estas duas soluções verifica-se que elas são realmente não dominadas. Comparando estas soluções com as soluções obtidas através de optimização monobjectivo pelo SA, com as funções objectivo VAL1 e IAPG, concluiu-se que todas as soluções obtidas na optimização monobjectivo são dominadas. Em termos de optimização multi-objectivo os resultados para esta configuração podem não ser muito interessantes uma vez que o número de soluções não dominadas obtidas é pequeno, no entanto, as soluções com interesse para esta

configuração são raras. Para além disso, comparando as soluções obtidas com as da optimização monobjectivo constata-se que as soluções finais obtidas na optimização multi-objectivo apresentam geralmente valores superiores para VAL1 e valores menores para IAPG.

Relativamente às optimizações monobjectivo que consideraram a função objectivo VAL2, que engloba objectivos económicos e ambientais, é possível verificar que para a configuração E a melhor solução encontrada pela optimização monobjectivo é dominada. Para a configuração GrTBe a melhor solução encontrada pela optimização monobjectivo é não dominada; é a solução que apresenta melhor valor para VAL1. Para a configuração Ee a melhor solução encontrada pela optimização monobjectivo é não dominada. Para as configurações E e GrTBe existem soluções não dominadas nas optimizações monobjectivo com VAL2 como função objectivo, que dominam inclusive soluções não dominadas obtidas segundo optimização multi-objectivo (1 para E e 2 para GrTBe). Também para a configuração Ee existe uma solução das optimizações monobjectivo que consideraram a função objectivo VAL2 que é não dominada dominando inclusivamente uma das soluções não dominadas obtidas segundo optimização multi-objectivo

A aplicação do recozimento simulado multi-objectivo às configurações E e GrTBe permitiu obter várias soluções óptimas de Pareto para cada uma das configurações, contudo o seu número não é muito elevado (para a configuração Ee apenas foram obtidas duas soluções não dominadas). A comparação dos resultados da optimização monobjectivo com a optimização multiobjectivo permitiu verificar que a optimização monobjectivo com função objectivo VAL2 produz resultados interessantes, uma vez que para todas as configurações conduziu a soluções que dominam soluções não dominadas da optimização multi-objectivo. A optimização monobjectivo usando IAPG como função objectivo também conseguiu obter soluções interessantes.

4 Conclusões

4.1 Optimização monobjectivo

Dos resultados das optimizações efectuadas é possível concluir que os dois algoritmos, recozimento simulado e pesquisa Tabu, tiveram geralmente um bom desempenho para as configurações A, Ae e E, apresentando desvios percentuais médios relativamente baixos. Em relação à configuração GrTBe os algoritmos tiveram um desempenho que oscilou geralmente entre o razoável (desvio percentual médio entre 5 e 10%) e o fraco (desvio percentual médio superior a 10%). Para a configuração Ee ambos os algoritmos tiveram um desempenho fraco, embora a pesquisa Tabu tenha sido melhor, apresentando sempre desvios percentuais médios muito superiores a 10%, com excepção do par Ee/VAL1 na pesquisa Tabu que obteve um desvio percentual médio de 6,7%. Refira-se ainda que de uma forma geral, ambos os algoritmos, tiveram pior desempenho nas funções objectivo ambientais.

Os dois algoritmos de optimização conduziram a soluções com valores para as funções objectivo muito semelhantes excepto para a configuração Ee, em que a pesquisa Tabu conseguiu atingir soluções significativamente melhores que o recozimento simulado, o que pode ser explicado pelo facto de se basear na memória.

Quando se aplicou o recozimento simulado e a pesquisa Tabu sem factor de penalização, as configurações A e Ae conduziram sempre a soluções finais que não cumpriam o critério de qualidade (pureza da corrente de benzeno igual ou superior a 0,990). No decurso das optimizações conseguiram apresentar algumas soluções em que esse critério é satisfeito, mas são raras e claramente inferiores às soluções provenientes de E e GrTBe. Relativamente a Ee essa inferioridade não é tão evidente existindo algumas soluções de A e Ae superiores a algumas de Ee (apêndices B.1 e B.2). A utilização de um algoritmo de pesquisa Tabu modificado, com um factor de penalização na função objectivo, permite a obtenção de soluções finais com correntes de benzeno cuja pureza é superior a 0,990 mas do ponto de vista económico e ambiental essas soluções são pouco interessantes corroborando os resultados obtidos pelo recozimento simulado e pela pesquisa Tabu sem factor de penalização.

Relativamente à configuração Ee verificou-se que as soluções que conduzem a correntes processuais de caudais razoáveis no decurso das optimizações são raras, sendo estas as que podem ter interesse económico e ambiental. Contudo, verifica-se que estas soluções, que são geralmente soluções finais, quando encontradas, apresentam valores para as funções objectivo piores (menores valores para VAL1 e VAL2 e maiores valores para IAPG e IAPG-EPS) do que as soluções das configurações E e GrTBe.

Para ambos os algoritmos e para as funções objectivo VAL1, VAL2 e IAPG-EPS as soluções da configuração GrTBe foram as que conduziram aos melhores valores para essas funções objectivo. Também para ambos os algoritmos, as soluções que apresentaram os melhores resultados para a função objectivo IAPG são da configuração E. Refira-se que na metodologia IAPG-EPS o impacto devido à emissão de CO₂ tem um peso maior no cálculo do impacto ambiental potencial global. As emissões resultantes da reutilização energética interna ou externa de determinadas correntes foram sempre contabilizadas (ex.: purga), por isso as configurações/soluções que originam caudais menos elevados para a corrente de benzeno, produzem caudais maiores para essas correntes, originando emissões maiores de CO₂, contudo essas configurações/soluções não são penalizadas pela metodologia IAPG. O caudal da corrente de benzeno das soluções obtidas nas optimizações que usaram a função objectivo IAPG-EPS é superior aos das soluções das optimizações com a função objectivo IAPG. Apesar das duas metodologias

apresentarem um padrão evolutivo semelhante no decurso das optimizações, podem conduzir a soluções óptimas distintas.

Verifica-se ainda que os objectivos económicos e ambientais não são muito divergentes, em especial quando se considera a metodologia EPS para determinação dos impactos ambientais.

A configuração GrTBe é comum a Douglas (1988) e os resultados obtidos permitiram confirmar que esta é uma boa opção económica e também ambiental.

4.2 Optimização multi-objectivo

Com este algoritmo é possível obter várias soluções potenciais óptimas de Pareto, contudo o seu número é relativamente diminuto, o que não permite provavelmente a obtenção da frente de Pareto. Tem, no entanto, a vantagem de permitir obter mais de uma solução o que pode ser vantajoso em relação à optimização monobjectivo. A aplicação do algoritmo de optimização multi-objectivo à configuração Ee apenas conduziu à obtenção de duas soluções não dominadas. No entanto, para esta configuração as soluções com interesse são raras. O algoritmo multi-objectivo SA proposto apresenta um desempenho razoável para a configuração E (desvio percentual médio conjunto <10%) e fraco para as configurações GrTBe e Ee.

Para as configurações E e GrTBe e considerando todas as optimizações realizadas para cada configuração, as optimizações com IAPG como primeira função objectivo contribuíram com mais soluções não dominadas para o conjunto final de soluções não dominadas.

Conclui-se também que a configuração GrTBe conduziu a um número ligeiramente superior de soluções não dominadas, 7, enquanto a configuração E obteve 6.

Comparando a optimização monobjectivo SA com a optimização multi-objectivo conclui-se que existem soluções não dominadas da optimização multi-objectivo que são melhores que a melhor solução encontrada na optimização monobjectivo com VAL1 como função objectivo, para todas as configurações. Convém referir, no entanto, que em relação aos valores para VAL1, o desvio registado entre as melhores soluções da optimização monobjectivo e as soluções não dominadas provenientes da optimização multiobjectivo que são melhores é inferior a 1,5%, excepto para a configuração Ee. Por outro lado, e para as configurações E e GrTBe, as melhores soluções obtidas na optimização monobjectivo SA com IAPG como função objectivo são soluções não dominadas e apresentam o melhor valor para IAPG (a solução da configuração Ee é dominada).

Os resultados obtidos na optimização monobjectivo considerando VAL2 (critério misto) como função objectivo foram bastante positivos em especial para a configuração GrTBe, dado que permitiram a obtenção de algumas soluções que são não dominadas e que são melhores do que algumas das soluções obtidas pela optimização multi-objectivo.

Refira-se ainda que na optimização multi-objectivo a configuração GrTBe (comum a Douglas (1988)) continua a apresentar o melhor valor para VAL1 e que o melhor valor para IAPG é o da configuração E.

5 Bibliografia

Aarts, E. H. L. e Laarhoven, P. J. M. v. (1985). "Statistical cooling: a general approach to combinatorial optimization problems." *Philips J. Res.* **40**: 193-226.

Anderson, S. R., Kadiramanathan, V., Chipperfield, A., Sharifi, V. e Swithenbank, J. (2005). "Multi-objective optimization of operational variables in a waste incineration plant." *Computers & Chemical Engineering* **29**: 1121-1130.

Bakshi, B. R. (2002). "A thermodynamic framework for ecologically conscious process systems engineering." *Computers and Chemical Engineering* **26**: 269-282.

Benson, H. P., Lee, D. e McClure, J. P. (1998). "Global Optimization in Practice: An Application to Interactive Multiple Objective Linear Programming." *Journal of Global Optimization* **12**: 353 - 372.

Bhutani, N., Ray, A. K. e Rangaiah, G. P. (2006). "Modeling, Simulation, and Multi-objective Optimization of an Industrial Hydrocracking Unit." *Ind. Eng. Chem. Res.* **45**: 1354-1372.

Blum, C. e Roli, A. (2003). "Metaheuristics in Combinatorial Optimization: Overview and Conceptual Comparison." *ACM Computing Surveys* **35**: 268-308.

Brennecke, J. F. e Stadtherr, M. A. (2002). "A Course in Environmentally Conscious Chemical Process Engineering." *Computers and Chemical Engineering* **26**: 307-318.

Cano-Ruiz, J. A. e McRae, G. J. (1998). "Environmentally conscious chemical process design." *Ann. Rev. Energy Environ.* **23**: 499-523.

Cardoso, M. F., Salcedo, R. L. e Azevedo, S. F. (1994). "Nonequilibrium simulated annealing: a faster approach to combinatorial minimization." *Ind. Eng. Chem. Res.* **33**: 1908-1918.

Cardoso, M. F., Salcedo, R. L. e Azevedo, S. F. d. (1996). "The Simplex-Simulated Annealing Approach to Continuous Non-Linear Optimization." *Computers and Chemical Engineering* **20**: 1065-1080.

Cardoso, M. F., Salcedo, R. L., Azevedo, S. F. d. e Barbosa, D. (1997). "A simulated annealing approach to the solution of minlp problems." *Computers and Chemical Engineering* **21**: 1349-1364.

Cavin, L., Fischer, U., Mosat, A. e Hungerbuhler, K. (2005). "Batch process optimization in a multipurpose plant using Tabu Search with a design-space diversification." *Computers and Chemical Engineering* **29**: 1770-1786.

Chankong, V., Haimes, Y. Y., Thadathil, J. e Zionts, S. (1985). *Multiple Criteria Optimization: A State-of-the-Art Review*. Lecture Notes in Economics and Mathematical Systems Berlin, Springer – Verlag.

Cormen, T. H., Leiserson, C. E. e Rivest, R. L. (1990). *Introduction to Algorithms*. New Delhi, Prentice-Hall.

Das, H., Cummings, P. T. e LeVan, M. D. (1990). "Scheduling of serial multiproduct batch processes via simulated annealing." *Computers and Chemical Engineering* **14**: 1351-1362.

Das, I. e Dennis, J. (1998). "Normal Boundary Intersection: A New Method for Generating The Pareto Surface in Nonlinear Multicriteria Optimization Problems." *SIAM Journal on Optimization* **8**: 631-657.

Deb, K. (1998). *Non-linear Goal Programming Using Multi-Objective Genetic Algorithms*. Dortmund, University of Dortmund.

Deb, K. (2001). *Multi-Objective Optimization using Evolutionary Algorithms*. Chichester, John Wiley & Sons, Ltd.

Deb, K., Pratap, A., Agarwal, S. e Meyarivan, T. (2002). "A Fast and Elitist Multi-objective Genetic Algorithm: NSGA-II." *IEEE Trans.Evol. Comput.* **6**(2): 182-197.

Dietz, A., Azzaro-Pantel, C., Pibouleau, L. e Domenech, S. (2006). "Multiobjective optimization for multiproduct batch plant design under economic and environmental considerations." *Computers and Chemical Engineering* **30**: 599-613.

Dolan, W. B., Cummings, P. T. e Van, M. D. L. (1990). "Algorithmic efficiency of simulated annealing for heat exchanger network design." *Computers and Chemical Engineering* **14**: 1039-1050.

Ehrgott, M. (2000). *Multicriteria Optimization*. Berlin, Springer.

Faber, R., Jockenhovel, T. e Tsatsaronis, G. (2005). "Dynamic optimization with simulated annealing." *Computers and Chemical Engineering* **29**: 273-290.

Fadel, G. e Li, Y. (2002). "Approximating the Pareto Curve to Help Solve Biojective Design Problems." *Struct. Multidisc. Optim.* **23**: 280 – 296.

Glauber, R. J. (1963). "Time-dependent statistics of the Ising model." *J. Math. Phys* **4**: 294-307.

Glover, F. (1986). "Future paths for integer programming and links to artificial intelligence." *Computers and Operations Reserach* **13**: 533-549.

Glover, F. (1990). "Tabu Search: A Tutorial." *Interfaces* **20**: 74-94.

Halsall-Whitney, H. e Thibault, J. (2006). "Multi-objective optimization for chemical processes and controller design: Approximating and classifying the Pareto domain." *Computers & Chemical Engineering* **30**: 1155-1168.

Hanke, M. e Li, P. (2000). "Simulated annealing for the optimization of batch distillation processes." *Computers and Chemical Engineering* **24**: 1-8.

Jaeggi, D. M., Parks, G. T., Kipouros, T. e Clarkson, P. J. (2006). "The development of a multi-objective Tabu Search algorithm for continuous optimisation problems." *European Journal of Operational Research: In Press, Corrected Proof*.

Keeney, R. L. e Raiffa, H. (1993). *Decisions with Multiple Objectives : Preferences and Value Tradeoffs* Cambridge, Cambridge University Press.

Kim, I. Y. e Weck, O. L. (2006). "Adaptative weighted sum method for multiobjective optimization: a new method for Pareto front generation." *Struct. Multidisc. Optim.* **31**: 105-116.

- Kirkpatrick, S., C. D. Gelatt, J. e Vecchi, M. P. (1983). "Optimization by simulated annealing." *Science* **220**: 671-680.
- Ku, H. e Karimi, I. (1991). "An evaluation of simulated annealing for batch process scheduling." *Ind. Eng. Chem. Res.* **30**: 163-169.
- Laarhoven, P. J. M. v. e Aarts, E. H. L. (1987). *Simulated Annealing: Theory and Applications*. Dordrecht D Reidel Publishing Company.
- Lin, B. e Miller, D. C. (2004). "Tabu search algorithm for chemical process optimization." *Computers and Chemical Engineering* **28**: 2287-2306.
- Metropolis, N., Rosenbluth, A., Rosenbluth, M., Teller, A. e Teller, E. (1953). "Equation of state calculations by fast computing machines." *J. Chem. Phys.* **21**: 1087-1092.
- Patel, A. N., Mah, R. S. H. e I.A.Karimi (1991). "Preliminary design of multiproduct noncontinuous plants using simulated annealing." *Computers and Chemical Engineering* **15**: 451-469.
- Press, W. H. e Teukolsky, S. A. (1991). "Simulated Annealing Optimization Over Continuous Spaces." *Computers in Physics*: 426-429.
- Press, W. H., Teukolsky, S. A., Vetterling, W. T. e Flannery, B. P. (1992). *Numerical recipes in C*. New York, Cambridge University Press.
- Rajesh, J. K., Gupta, S. K., Rangaiah, G. P. e Ray, A. K. (2001). "Multiobjective optimization of industrial hydrogen plants " *Chem. Eng. Sci.* **56**: 999-1010.
- Srinivas, N. e Deb, K. (1995). "Multi-Objective Function Optimization using Non Dominated Sorting Genetic Algorithms." *Evol. Comput.* **2**(3): 221 – 248.
- Stefanis, S. K., Livingston, A. G. e Pistikopoulos, E. N. (1995). "Minimizing the environmental impact of process plants: a process system methodology." *Computers and Chemical Engineering* **19, Suppl.**: 39-44.
- Suman, B. (2003). "Simulated Annealing - Based Multiobjective Algorithms and their Application for System Reliability." *Eng. Opt.* **35**: 391 – 416.
- Suppaitnarm, A., Seffen, K. A., Parks, G. T. e Clarkson, P. J. (2000). "Simulated annealing: An alternative approach to true multiobjective optimization." *Engineering optimization* **33**(1): 59 – 85.
- Ulungu, L. E., Teghem, J., Fortemps, P. H. e Tuytens, D. (1999). "MOSA method: A tool for solving multiobjective combinatorial optimization problems." *Journal of Multi-Criteria Decision Analysis* **8**: 221 – 236.
- Wang, C., Quan, H. e Xu, X. (1999). "Optimal design of multiproduct batch chemical process using tabu search." *Computers and Chemical Engineering* **23**: 427-437.

APÊNDICES

Os apêndices deste capítulo estão no CD.

B1. Resultados Recozimento Simulado

B2. Resultados Pesquisa Tabu

B3. Resultados Multi-objectivo Recozimento Simulado

Capítulo 4

**Robustez e Operabilidade: análise de soluções resultantes da
otimização de processos químicos**

Nomenclatura

D_p	domínio dos parâmetros incertos	
F_1	flexibilidade	
F_2	desempenho operacional	
F_3	indicador económico	
F_4	indicador ambiental	
g	funções restrição que devem ser satisfeitas para viabilizar a operação da instalação	
h	funções ligação	
IAPG	impacto ambiental potencial global	
IAPG-EPS	impacto ambiental potencial global (metodologia EPS)	[ELU/ano]
Q_{Benzeno}	caudal da corrente de benzeno	[mol/s]
Q_H	caudal da corrente de hidrogénio	[mol/s]
R	robustez	
$r(\theta)$	restrições do problema	
u	variável escalar	
v_a	vector variáveis de controlo ajustáveis	
VAL1	valor actualizado líquido sem inclusão dos custos dos impactos ambientais EPS	[€]
VAL2	valor actualizado líquido com inclusão dos custos dos impactos ambientais EPS	[€]
v_e	vector variáveis de estado	
v_{pc}	vector variáveis de projecto contínuas	
v_{pi}	vector variáveis de projecto inteiras	

Letras gregas

χ	função avaliação da viabilidade
δm	desvio máximo nos parâmetros incertos atingível por uma dada configuração
θ	vector dos parâmetros incertos
ψ_v	função viabilidade

Índices

m1	ligação
m2	restrição

ÍNDICE

1	Introdução	1
2	Análise da robustez.....	7
2.1	Critérios propostos.....	7
2.2	Soluções a analisar	8
3	Aplicação às diferentes configurações e condições operatórias do caso de estudo	9
3.1	Critérios usados	9
3.2	Soluções analisadas.....	9
3.3	Resultados e discussão	10
4	Conclusões	17
5	Bibliografia	19
APÊNDICES		
C1. Resultados Análise da Robustez		

Índice de figuras

Figura 4.1 Desvio VAL1 versus a flexibilidade para a configuração E	12
Figura 4.2 Desvio VAL1 versus a flexibilidade para a configuração GrTBe	12
Figura 4.3 Desvio IAPG versus a flexibilidade para a configuração E.....	13
Figura 4.4 Desvio IAPG versus a flexibilidade para a configuração GrTBe	13
Figura 4.5 Desvio IAPG-EPS versus a flexibilidade para a configuração E	13
Figura 4.6 Desvio IAPG-EPS versus a flexibilidade para a configuração GrTBe.....	14
Figura 4.7 Desvio Q_{Benzeno} versus a flexibilidade para a configuração E	14
Figura 4. 8 Desvio Q_{Benzeno} versus a flexibilidade para a configuração GrTBe.....	14
Figura 4.9 Desvio pureza da corrente de benzeno versus a flexibilidade para a configuração GrTBe	15

Índice de tabelas

Tabela 4.1 Variação dos parâmetros incertos	9
Tabela 4.2 Avaliação da robustez: parâmetros incertos	10
Tabela 4.3 Resultados para análise da robustez da solução E – IAPG-EPS (SA)	10
Tabela 4.4 Resultados para análise da robustez da solução GrTBe – VAL1 (TS).....	11

1 Introdução

Actualmente acentua-se a necessidade para tornar as unidades industriais mais flexíveis para responder eficazmente à dinâmica dos mercados das matérias-primas e dos produtos. Porém as instalações são cada vez mais complexas e interligadas, quer interna quer externamente e existe uma crescente pressão em termos de eficiência, segurança, ambiente, etc.

Significa isto que para além de objectivos económicos e ambientais é também importante considerar outros critérios, nomeadamente a robustez (flexibilidade).

O termo robustez é algo complexo e pode englobar vários aspectos, tais como, a flexibilidade, a permutabilidade, a controlabilidade, a operabilidade, etc.

A flexibilidade pode ser definida de várias formas, mas em geral refere-se à gama das condições de operação, normalmente em estado estacionário, que uma dada configuração pode acomodar (Bogle et al., 2000).

A permutabilidade refere-se à capacidade que uma instalação tem em mover-se entre condições alternativas de estado estacionário (Bogle et al., 2000).

A controlabilidade diz respeito à capacidade que uma dada configuração tem, usualmente incluindo o sistema de controlo, para manter condições operatórias seguras e estáveis após perturbações (Bogle et al., 2000).

A operabilidade é definida por alguns autores (Konukman e Akman, 2005) de acordo com o processo em causa, estabelecendo objectivos processuais. No entanto, para outros tem um aspecto mais abrangente e integrador, considerando a estabilidade, a optimalidade, a selecção de medições e de variáveis manipuláveis, flexibilidade e controlabilidade (Bahri et al., 1996).

Neste trabalho a robustez englobará aspectos relacionados com a flexibilidade, com a operabilidade no sentido mais restrito e com critérios económicos e ambientais.

Os aspectos relacionados com a robustez podem ser considerados como mais uma função objectivo numa abordagem multi-objectivo (económica, ambiental e de robustez), com as dificuldades inerentes uma vez que não é fácil expressar matematicamente diferentes valências que no seu conjunto contribuem para a robustez. Em alternativa a robustez pode ser considerada numa abordagem sequencial, isto é, analisando a robustez das soluções obtidas por optimização de processos químicos com outras funções objectivo.

As fontes de incerteza num processo podem ser internas (propriedades físicas, coeficientes de transferência, etc.) ou externas (qualidade das matérias-primas, procura dos produtos, preços, etc.).

As incertezas paramétricas podem ser caracterizadas através de limites, inferior e superior, (caso determinístico) ou de forma mais geral, através de funções de distribuição probabilística (caso estocástico).

Para o caso determinístico, dois problemas de flexibilidade podem ser identificados para uma dada configuração: i) o problema do teste de flexibilidade, onde o objectivo é estabelecer se uma dada configuração é fiável na gama especificada para os parâmetros incertos; ii) o problema do índice de flexibilidade onde o objectivo é obter uma medida da flexibilidade de uma configuração determinando a gama máxima para os parâmetros, que pode ser tolerada.

No caso da incerteza estocástica, o problema de análise de flexibilidade pode ser pensado como a avaliação da probabilidade de operação fiável de uma dada configuração.

A consideração da incerteza no projecto e operação dá origem a objectivos de projecto diferentes: i) seleccionar as configurações que optimizam um indicador económico ou outro enquanto asseguram um grau fixo de flexibilidade (utilizando o índice de flexibilidade ou fazendo uma análise de flexibilidade); ii) seleccionar uma configuração

que tenha um grau óptimo de flexibilidade, ou seja, estabelecer os *trade-offs* entre objectivos económicos ou outros e flexibilidade.

Ierapetritou et al. (1996) propõem a seguinte classificação para os tipos de incertezas em modelos processuais:

i) Incerteza - inerente ao modelo

Inclui constantes cinéticas, propriedades físicas e coeficientes de transferência; geralmente conduz a problemas de optimização com objectivo económico ou outro assegurando um determinado grau de flexibilidade;

ii) Incerteza - inerente ao processo

Flutuações em caudais e temperaturas caem nesta categoria; conduz a problemas de optimização na procura da configuração com grau óptimo de flexibilidade;

iii) Incerteza externa

Disponibilidade de matérias-primas, procura de produtos, preços, condições ambientais; conduz a problemas de optimização com qualquer um dos objectivos anteriormente referidos;

iv) Incerteza discreta

Descreve a disponibilidade de equipamento ou qualquer evento pontual aleatório; conduz a problemas de optimização com objectivo económico ou outro assegurando um determinado grau de flexibilidade.

Todas as instalações de processo estão sujeitas a incertezas e variações durante as fases de projecto e operação. Assim, é muito importante quantificar a capacidade de um sistema ser operado de forma fiável na presença de incertezas (isto é, efectuar uma análise de flexibilidade) e ter métodos sistemáticos para projectar sistemas que sejam simultaneamente económicos e flexíveis.

Existem alguns trabalhos que podem ser referidos nesta área, nomeadamente a revisão da análise de flexibilidade e problemas de projecto (Grossmann e Morari, 1983), o teste de viabilidade e o projecto para um grau fixo de flexibilidade (Halemane e Grossmann, 1983). Foram também desenvolvidos algoritmos de bifurcação e limite para estes problemas (Ostrovsky et al., 1996; Ostrovsky et al., 2000). Em 1985 pode destacar-se o trabalho de Swaney e Grossmann (1985 a e b) no desenvolvimento do índice de flexibilidade e de algoritmos de enumeração de vértices. Como alternativas à metodologia para medir a flexibilidade anteriormente mencionada, podem-se referir os trabalhos realizados por Chacon-Mondragon e Himmelblau (1996) e por Ierapetritou (2001), a primeira baseada nos controlos fiáveis e a segunda no volume da figura convexa contida na região operacional viável. Grossmann e Floudas (1987) desenvolveram formulações MINLP para o teste de viabilidade e problemas de índices de flexibilidade, tendo Floudas et al. (1999) apresentado a optimização global para estas formulações. Raspanti et al. (2000) trabalharam também com estas formulações MINLP fazendo a agregação das restrições. Podem-se ainda referir os trabalhos em flexibilidade estocástica de sistemas lineares com parâmetros normalmente distribuídos (Straub e Grossmann, 1990), em flexibilidade estocástica de sistemas não lineares (Straub e Grossmann, 1993) e no projecto e avaliação simultânea da flexibilidade estocástica em sistemas não lineares (Pistikopoulos e Ierapetritou, 1995). Convém ainda referir os trabalhos apresentados por Bansal et al. (2000 e 2002) no desenvolvimento de uma estrutura de programação paramétrica para o teste de viabilidade, índice de flexibilidade, optimização de processos e flexibilidade estocástica de sistemas lineares e não lineares.

Teste de viabilidade

Dados valores nominais para os parâmetros incertos, θ^N , para os desvios nos sentidos positivo e negativo, $\Delta\theta^+$ e $\Delta\theta^-$, respectivamente e um conjunto de restrições $r(\theta) \leq 0$ (que podem incluir equações que relacionam os parâmetros incertos se eles não forem independentes), o teste de viabilidade para um problema consiste em determinar, para uma dada configuração, se existe pelo menos um conjunto de variáveis de controlo que podem ser escolhidas durante a operação que satisfazem todas as restrições para qualquer valor possível dos parâmetros incertos (Bansal et al., 2002).

Representando matematicamente, a avaliação da viabilidade (Halemane e Grossmann, 1983), χ :

$$\chi(v_{pc}, v_{pi}) = \max_{\theta \in D_p} \psi_v(\theta, v_{pc}, v_{pi}) \quad (4.1)$$

sendo o domínio dos parâmetros incertos, D_p :

$$D_p = \{\theta \mid \theta^N - \Delta\theta^- \leq \theta \leq \theta^N + \Delta\theta^+, r(\theta) \leq 0\} \quad (4.2)$$

e em que $\psi_v(\theta, v_{pc}, v_{pi})$ é chamada a função de viabilidade, correspondendo a

$$\psi_v(\theta, v_{pc}, v_{pi}) = \min_{v_e, v_a, u} u \quad (4.3)$$

s.a.

$$h_{m1}(v_e, v_a, \theta, v_{pc}, v_{pi}) = 0, \quad m1 \in M1 \quad (4.4)$$

$$g_{m2}(v_e, v_a, \theta, v_{pc}, v_{pi}) \leq u, \quad m2 \in M2 \quad (4.5)$$

$m1 = 1$, número de ligações
 $m2 = 1$, número de restrições

A equação 4.4 representa as equações do modelo, ligações, e a equação 4.5 as desigualdades, restrições, que devem ser satisfeitas para viabilizar a operação da instalação. v_e constitui o vector das variáveis de estado, v_a o das variáveis de controlo ajustáveis, θ o dos parâmetros incertos, v_{pc} o das variáveis de projecto contínuas e v_{pi} o das variáveis de projecto inteiras. u é uma variável escalar. Para um dado valor de θ , o valor de Ψ_v , determinado como indicado (utilizando a variável u), indica a extensão da (in)viabilidade de operação para o projecto (v_{pc}, v_{pi}) e para esse ponto, θ . Um valor negativo para Ψ_v indica uma região finita de viabilidade e um valor positivo indica inviabilidade. O valor de Ψ_v pode ser interpretado como sendo uma boa medida da (in)viabilidade de operação no ponto θ escolhido. A equação 4.1 conduz a um ponto θ

crítico que maximiza Ψ_v , para o qual o projecto (v_{pc}, v_{pi}) tem o menor grau de viabilidade (se $\Psi_v \leq 0$) ou o maior grau de inviabilidade (se $\Psi_v > 0$).

Se $\chi(v_{pc}, v_{pi}) \leq 0$, então pode ser assegurada a viabilidade de operação para todo o $\theta \in D_P$.

Índice de flexibilidade

O índice de flexibilidade (Swaney e Grossmann, 1985a e b), corresponde ao maior desvio, δm , de qualquer um dos desvios esperados, $\Delta\theta^+$ e $\Delta\theta^-$, para os parâmetros incertos que uma dada configuração pode suportar em operação viável. Ou seja:

$$F_1(v_{pc}, v_{pi}) = \max(\delta m), \quad (4.6)$$

s.a.

$$\max_{\theta \in D_P(\delta m)} \Psi_v(\theta, v_{pc}, v_{pi}) \leq 0 \quad (4.7)$$

$$D_P(\delta m) = \{\theta \mid \theta^N - \delta m \Delta\theta^- \leq \theta \leq \theta^N + \delta m \Delta\theta^+, r(\theta) \leq 0\} \\ \delta m \geq 0 \quad (4.8)$$

Quando $F_1=1$ isso significa que a configuração tem a flexibilidade que satisfaz exactamente as restrições mais fortes do sistema (neste caso, o teste de viabilidade dá $\chi(v_{pc}, v_{pi}) = 0$).

Relativamente à operabilidade e considerando o âmbito mais restrito podem ser estabelecidas metas de qualidade, de produção e/ou de funcionamento. Por exemplo, Konukman e Akman (2005) estudaram a operabilidade (controlo em estado estacionário) do processo turbo expansão do gás natural, estabelecendo que quando há uma perturbação na alimentação de gás natural, a recuperação do etano deve ser mantida ao nível desejado utilizando para isso as variáveis manipuláveis da rede de permutadores do processo. O problema de operabilidade foi colocado como um problema de minimização da norma do desvio da recuperação de etano relativamente ao *set point* e sujeito aos limites das variáveis manipuláveis, considerando perturbações na temperatura e pressão da corrente de alimentação de gás natural.

A avaliação económica e ambiental deve também ser considerada na avaliação da robustez, uma vez que diferentes condições, nomeadamente nos parâmetros incertos, poderão eventualmente causar variações significativas nos indicadores económicos e ambientais. Como exemplos de indicadores que podem ser usados referem-se o Valor Actualizado Líquido e o Impacto Ambiental Potencial Global. Para além desta avaliação económica e ambiental também é importante a avaliação em termos operacionais, através da utilização de metas de qualidade e de produção, uma vez que as variações nos parâmetros incertos também podem afectar significativamente essas metas.

Assim a análise da robustez de um sistema, configurações e/ou soluções, na presença de incertezas, deverá incorporar não só a flexibilidade mas também indicadores operacionais, económicos e ambientais o que permitirá projectar/seleccionar sistemas que sejam robustos, isto é, flexíveis e cujos indicadores económicos, ambientais e operacionais, não sofram variações acentuadas quando surgem variações nos parâmetros incertos.

Objectivos do capítulo

- análise da robustez das diferentes configurações e condições operatórias resultantes de um processo de optimização, incluindo nessa análise a flexibilidade, questões de desempenho operacional, critérios económicos e ambientais.

2 Análise da robustez

Na análise da robustez das soluções provenientes da optimização monobjectivo, podem ser estudados, tal como referido anteriormente, aspectos relacionados com a flexibilidade, com a operabilidade no sentido mais restrito, como por exemplo cumprimento de metas de qualidade e de produção, critérios económicos e ambientais. Desta forma a robustez permitirá a análise do desempenho económico e ambiental, face à variação dos parâmetros incertos, o que poderá permitir a selecção de configurações e/ou soluções robustas não só em termos processuais mas também económicos e ambientais. Poderão dessa forma ser privilegiadas soluções cujos indicadores económicos e ambientais não se alterem significativamente com as variações nos parâmetros incertos.

Swaney e Grossman (1985a e 1985b) apresentaram um índice escalar de flexibilidade que é uma medida da região operacional viável no espaço dos parâmetros incertos. O índice de flexibilidade, F_1 define o máximo hiper-rectângulo que pode ser expandido em torno do ponto nominal na região viável. Os lados do hiper-rectângulo são proporcionais aos desvios esperados. O hiper-rectângulo pode ser definido em termos de uma variável escalar δ_m de acordo com a Equação 4.8.

O número total de direcções para N parâmetros incertos é 2^N . Deste modo se existirem dois parâmetros incertos o número de direcções será igual a quatro (+++, ++, --+ e ---). O objectivo é proceder-se a uma maximização para cada direcção, sendo depois escolhido o mínimo das várias direcções. Geometricamente corresponde a encontrar a direcção para a qual a distância para o limite da região de operação viável é mais pequena.

Dado que se está a utilizar um simulador modular vai ser necessário proceder à enumeração dos vértices. Num processo iterativo pode começar-se por fixar o índice de flexibilidade num valor relativamente pequeno (0,25), de seguida proceder à enumeração dos vértices correspondentes às direcções a considerar, efectuando as respectivas simulações. A simulação desse conjunto de vértices permitirá verificar se a flexibilidade fixada foi satisfeita (isto é, se a operação é viável) e determinar o valor dos indicadores económicos (ex.: VAL1) e ambientais (ex.: IAPG e IAPG-EPS) para os pontos operacionais. Nestes pontos operacionais pode também ser avaliado o desempenho operacional, utilizando nomeadamente critérios de qualidade e de produção. Se a flexibilidade fixada tiver sido satisfeita procede-se ao incremento do índice de flexibilidade, repetindo o procedimento anteriormente exposto. Refira-se que nesta análise as variáveis manipuláveis que possam existir não serão ajustadas, o que constitui uma situação mais desfavorável.

2.1 Critérios propostos

A robustez pode ser analisada considerando várias componentes: critérios de qualidade como, por exemplo, a pureza ou caudal de uma corrente, critérios económicos, critérios ambientais e flexibilidade. Embora a robustez dependa dos vários factores enumerados anteriormente é difícil expressar matematicamente essa dependência. Para além do facto destas grandezas serem completamente diferentes, o que provavelmente obrigaria a um processo de normalização, ainda existe o problema adicional de decidir qual a importância de cada uma delas para a robustez, ou seja o estabelecimento de pesos para obter um indicador de robustez. A análise das várias grandezas que contribuem para a robustez constitui desta forma um método alternativo.

$$R = f(F_1, F_2, F_3, F_4) \quad (4.9)$$

Em que,

R – robustez

F_1 = *flexibilidade*, calculada segundo a metodologia apresentada por Swaney e Grossman (1985a e 1985b)

F_2 = *desempenho operacional*; ex.: pureza e/ou caudal de uma corrente

F_3 = *indicador económico*; ex.: VAL1

F_4 = *indicador ambiental*; ex.: IAPG e/ou APG-EPS

2.2 Soluções a analisar

Para determinar a flexibilidade segundo a metodologia apresentada por Swaney e Grossman (1985a e 1985b) são geradas soluções a partir da solução nominal (neste caso óptima), situadas nos vértices de um hiper-rectângulo que se vai expandindo e cuja dimensionalidade depende do número de parâmetros incertos. Para N parâmetros incertos existirão 2^N direcções.

3 Aplicação às diferentes configurações e condições operatórias do caso de estudo

Para análise da robustez usaram-se as soluções das configurações E, Ee e GrTBe que no processo de optimização monobjectivo do capítulo 3 conduziram aos melhores valores para as optimizações com funções objectivo VAL1, VAL2, IAPG E IAPG-EPS, utilizando o recozimento simulado e a pesquisa Tabu (Tabelas 3.3, 3.4, 3.5, 3.6, 3.9, 3.10, 3.11 e 3.12). Foram, portanto analisadas 24 soluções, 8 de cada configuração.

3.1 Critérios usados

A robustez foi analisada considerando critérios ligados ao desempenho operacional (pureza e caudal da corrente de benzeno), critérios económicos (VAL1), critérios ambientais (IAPG e IAPG-EPS) e flexibilidade calculada segundo a metodologia apresentada por Swaney e Grossman (1985a e 1985b).

3.2 Soluções analisadas

Para determinar a flexibilidade segundo Swaney e Grossman (1985a e 1985b) é necessário testar outras soluções a partir de uma solução inicial. As soluções iniciais serão as resultantes das optimizações monobjectivo, para as quais se pretende avaliar a robustez. Neste caso considerou-se como causas de incerteza externas o caudal da corrente de hidrogénio e a percentagem de metano nessa corrente, por geralmente serem as que podem mais facilmente sofrer variações. As soluções para avaliação da robustez foram determinadas considerando as variáveis iguais às da solução de optimização, com excepção do caudal da corrente de hidrogénio e da percentagem de metano nessa corrente que serão variadas de acordo com a tabela que se segue. Serão, portanto, avaliadas no máximo 32 novas soluções em torno da solução de optimização também designada por solução nominal, correspondendo a uma variação de 40% nos parâmetros incertos ($F_1=2,00$).

Tabela 4.1 Variação dos parâmetros incertos

	Percentagens avaliadas																
%Caudal	-20,0	-17,5	-15,0	-12,5	-10,0	-7,5	-5,0	-2,5	0	2,5	5,0	7,5	10,0	12,5	15,0	17,5	20,0
%Metano	-20,0	-17,5	-15,0	-12,5	-10,0	-7,5	-5,0	-2,5	0	2,5	5,0	7,5	10,0	12,5	15,0	17,5	20,0

Para exemplificar, se o caudal da corrente de hidrogénio da solução encontrada no processo de optimização for designado por Q_H , serão avaliadas soluções em quatro direcções distintas conforme exemplificado na Tabela 4.2 para os casos em que há variações percentuais de 2,5 e 5,0% nos parâmetros incertos

De referir, que neste caso os parâmetros incertos não são independentes um do outro.

Tabela 4.2 Avaliação da robustez: parâmetros incertos

Direcções	++	+-	-+	--
Caudal da corrente de hidrogénio	$Q_H(1+0,025)$	$Q_H(1+0,025)$	$Q_H(1-0,025)$	$Q_H(1-0,025)$
Caudal de metano	$Q_H(1+0,025) \ 0,03 \ (1+0,025)$	$Q_H(1+0,025) \ 0,03 \ (1-0,025)$	$Q_H(1-0,025) \ 0,03 \ (1+0,025)$	$Q_H(1-0,025) \ 0,03 \ (1-0,025)$
Caudal da corrente de hidrogénio	$Q_H(1+0,050)$	$Q_H(1+0,050)$	$Q_H(1-0,050)$	$Q_H(1-0,050)$
Caudal de metano	$Q_H(1+0,050) \ 0,03 \ (1+0,050)$	$Q_H(1+0,050) \ 0,03 \ (1-0,050)$	$Q_H(1-0,050) \ 0,03 \ (1+0,050)$	$Q_H(1-0,050) \ 0,03 \ (1-0,050)$

3.3 Resultados e discussão

Dada a dificuldade já referida de expressar matematicamente a robustez, optou-se pela análise das várias grandezas que contribuem para a robustez. A determinação da flexibilidade conjuntamente com a análise dos valores das outras grandezas VAL1, IAPG, IAPG-EPS, pureza da corrente de benzeno e caudal da corrente de benzeno permitiu analisar a robustez das diferentes soluções encontradas pela optimização de processos químicos. De seguida, são apresentados, a título ilustrativo, os resultados obtidos para as soluções mais flexíveis das configurações E e GrTBe (Tabelas 4.3 e 4.4). Os resultados para as restantes soluções analisadas podem ser consultados no Apêndice C1.

Solução E da optimização SA - função objectivo IAPG-EPS

Tabela 4.3 Resultados para análise da robustez da solução E – IAPG-EPS (SA)

Direcção	Flexibilidade	Pureza	VAL1	IAPG	IAPG-EPS	Q_{Benzeno} (mol/s)
	0	0,999	$-1,53 \times 10^8$	$2,28 \times 10^5$	$1,53 \times 10^7$	28,6
++	0,25	0,999	$-1,56 \times 10^8$	$2,57 \times 10^5$	$1,59 \times 10^7$	28,2
+-	0,25	0,999	$-1,56 \times 10^8$	$2,57 \times 10^5$	$1,59 \times 10^7$	28,2
-+	0,25	0,999	$-1,54 \times 10^8$	$2,14 \times 10^5$	$1,65 \times 10^7$	26,9
--	0,25	0,999	$-1,54 \times 10^8$	$2,14 \times 10^5$	$1,65 \times 10^7$	26,9
++	0,5	0,999	$-1,67 \times 10^8$	$3,01 \times 10^5$	$1,95 \times 10^7$	24,1
+-	0,5	0,999	$-1,67 \times 10^8$	$3,01 \times 10^5$	$1,95 \times 10^7$	24,1
-+	0,5	0,999	$-1,58 \times 10^8$	$2,03 \times 10^5$	$1,88 \times 10^7$	23,8
--	0,5	0,999	$-1,58 \times 10^8$	$2,03 \times 10^5$	$1,87 \times 10^7$	23,8
++	0,75	0,999	$-1,74 \times 10^8$	$3,24 \times 10^5$	$2,18 \times 10^7$	21,4
+-	0,75	0,999	$-1,74 \times 10^8$	$3,24 \times 10^5$	$2,17 \times 10^7$	21,4
-+	0,75	0,999	$-1,62 \times 10^8$	$1,96 \times 10^5$	$2,11 \times 10^7$	20,7
--	0,75	0,999	$-1,62 \times 10^8$	$1,96 \times 10^5$	$2,10 \times 10^7$	20,7
++	1	0,999	$-1,88 \times 10^8$	$3,69 \times 10^5$	$2,61 \times 10^7$	16,4
+-	1	0,999	$-1,88 \times 10^8$	$3,69 \times 10^5$	$2,60 \times 10^7$	16,4
-+	1	Não convergiu				
--	1	Não convergiu				

Solução GrTBe da otimização TS - função objectivo VAL1

Tabela 4.4 Resultados para análise da robustez da solução GrTBe – VAL1 (TS)

Direcção	Flexibilidade	Pureza	VAL1	IAPG	IAPG-EPS	Q _{Benzeno} (mol/s)
	0	0,998	-1,48x10 ⁸	3,40x10 ⁵	1,46x10 ⁷	30,0
++	0,25	0,998	-1,47x10 ⁸	3,79x10 ⁵	1,36x10 ⁷	31,5
+-	0,25	0,998	-1,47x10 ⁸	3,70x10 ⁵	1,37x10 ⁷	31,2
-+	0,25	0,999	-1,50x10 ⁸	3,13x10 ⁵	1,59x10 ⁷	28,1
--	0,25	0,999	-1,50x10 ⁸	3,13x10 ⁵	1,59x10 ⁷	28,1
++	0,50	0,997	-1,48x10 ⁸	4,38x10 ⁵	1,31x10 ⁷	32,6
+-	0,50	0,997	-1,48x10 ⁸	4,39x10 ⁵	1,30x10 ⁷	32,6
-+	0,50	0,999	-1,55x10 ⁸	2,92x10 ⁵	1,77x10 ⁷	25,6
--	0,50	0,999	-1,56x10 ⁸	2,89x10 ⁵	1,79x10 ⁷	25,2
++	0,75	0,996	-1,49x10 ⁸	4,91x10 ⁵	1,29x10 ⁷	33,0
+-	0,75	0,996	-1,50x10 ⁸	4,88x10 ⁵	1,29x10 ⁷	33,0
-+	0,75	0,999	-1,57x10 ⁸	2,81x10 ⁵	1,93x10 ⁷	23,5
--	0,75	0,999	-1,57x10 ⁸	2,79x10 ⁵	1,95x10 ⁷	23,1
++	1,00	0,994	-1,54x10 ⁸	6,16x10 ⁵	1,34x10 ⁷	33,5
+-	1,00	0,995	-1,53x10 ⁸	5,78x10 ⁵	1,31x10 ⁷	33,3
-+	1,00	0,999	-1,60x10 ⁸	2,72x10 ⁵	2,12x10 ⁷	21,1
--	1,00	0,999	-1,59x10 ⁸	2,74x10 ⁵	2,06x10 ⁷	21,8
++	1,25	0,992	-1,59x10 ⁸	7,49x10 ⁵	1,44x10 ⁷	33,4
+-	1,25	não convergiu				
-+	1,25	0,999	-1,63x10 ⁸	2,66x10 ⁵	2,28x10 ⁷	19,0
--	1,25	0,999	-1,63x10 ⁸	2,67x10 ⁵	2,26x10 ⁷	19,1

Dos resultados obtidos verifica-se que muitas das soluções encontradas pelos algoritmos de optimização apresentam uma flexibilidade reduzida. Apenas 7 soluções em 24 conseguem atingir uma flexibilidade igual ou superior a 0,25.

Das 8 soluções encontradas pelos algoritmos de optimização monobjectivo para a configuração E, 4 apresentam flexibilidade nula, 3 uma flexibilidade de 0,5 e 1 uma flexibilidade de 0,75.

As soluções da configuração Ee são muito pouco flexíveis, uma vez que todas as 8 soluções testadas apresentam flexibilidade nula.

Das 8 soluções nominais testadas, resultantes da optimização monobjectivo para a configuração GrTBe, 5 apresentam flexibilidade nula, 2 flexibilidade igual a 0,25 e 1 flexibilidade igual a 1.

A configuração E conduziu a um maior número de soluções flexíveis (4 das 7 soluções que apresentam flexibilidade diferente de zero são desta configuração), seguindo-se a configuração GrTBe (contribui com 3 soluções).

Refira-se que para uma flexibilidade igual 1 a variação correspondente nos parâmetros incertos é de 20% em torno do valor nominal, o que constitui uma percentagem significativa. Portanto, uma configuração que obtenha uma flexibilidade de 1 é capaz de operar em condições extremamente desfavoráveis, pelo que se considerou como

limite máximo $F = 2$. Uma solução testada é inviável quando não existe convergência ou quando infringe restrições.

Foram calculados os desvios percentuais, relativamente à solução nominal, para a pureza da corrente de benzeno, VAL1, IAPG, IAPG-EPS e caudal da corrente de benzeno para as diferentes soluções geradas, a partir de cada uma das soluções provenientes da otimização monobjectivo e cuja flexibilidade é igual ou superior a 0,25 (Apêndice C1). Desvios negativos para VAL1, IAPG e IAPG-EPS significam melhores valores para essas grandezas enquanto desvios negativos para a pureza e caudal da corrente traduzem purezas e caudais mais baixos. De seguida apresentam-se os gráficos que mostram os desvios calculados (em percentagem) para cada uma das grandezas em função da flexibilidade (Figuras 4.1 a 4.9). Para cada conjunto de pontos foi feito um ajuste linear, utilizando o coeficiente de correlação, para evidenciar a tendência evolutiva dos desvios das várias grandezas.

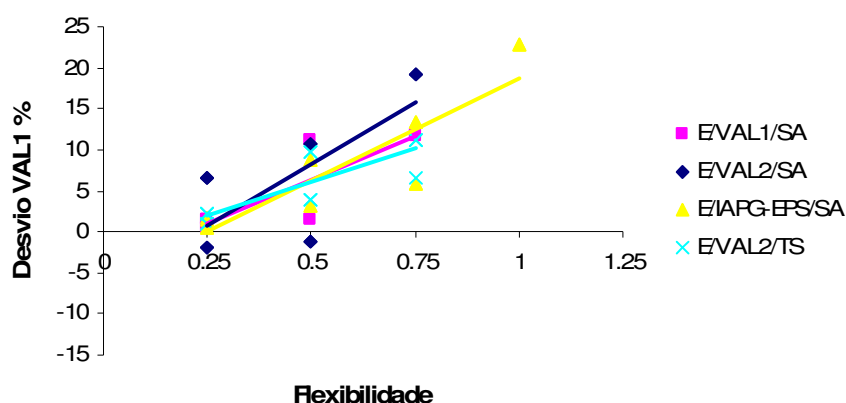


Figura 4.1 Desvio VAL1 versus a flexibilidade para a configuração E

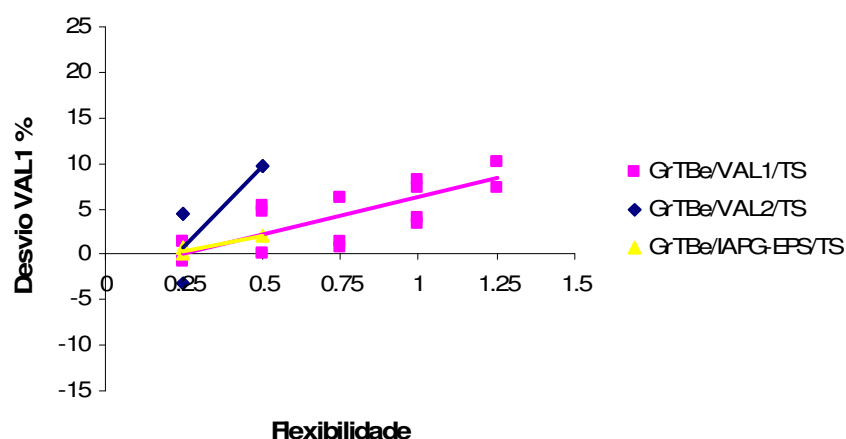


Figura 4.2 Desvio VAL1 versus a flexibilidade para a configuração GrTBe

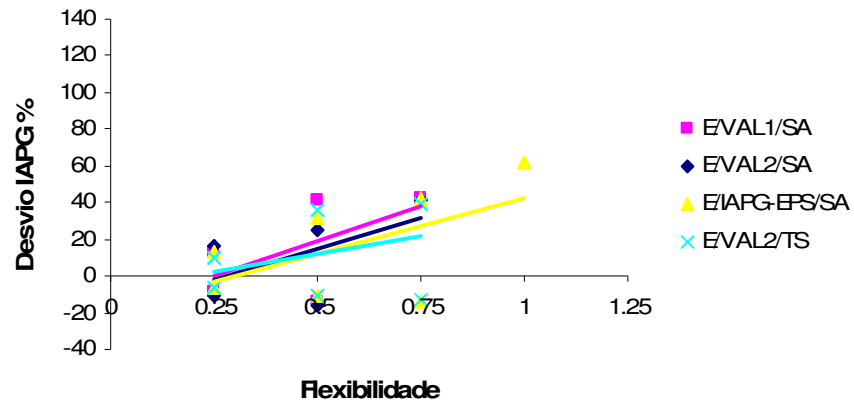


Figura 4.3 Desvio IAPG versus a flexibilidade para a configuração E

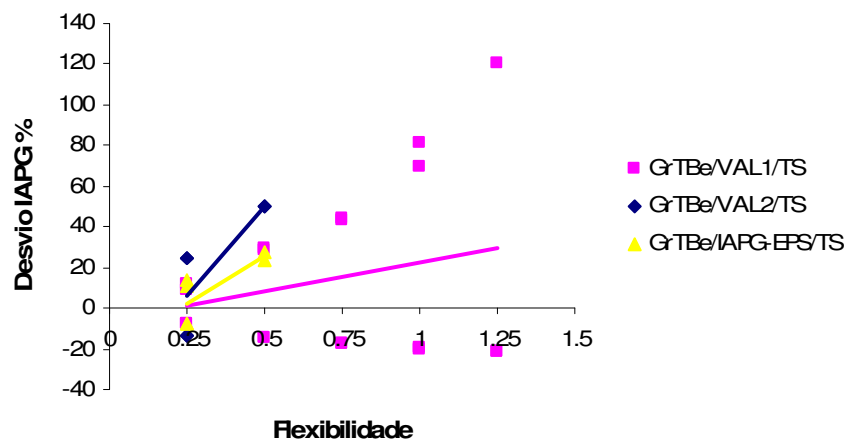


Figura 4.4 Desvio IAPG versus a flexibilidade para a configuração GrTBe

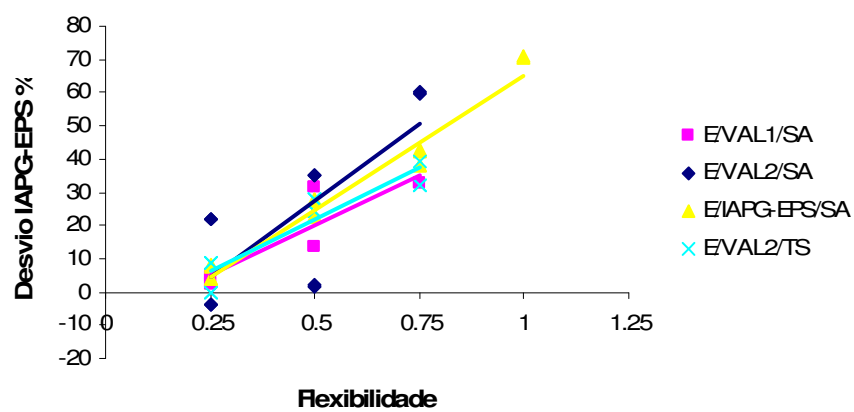


Figura 4.5 Desvio IAPG-EPS versus a flexibilidade para a configuração E

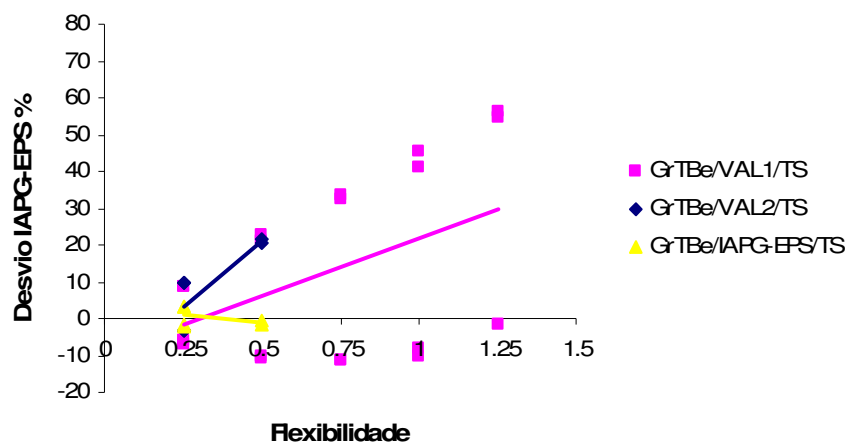


Figura 4.6 Desvio IAPG-EPS versus a flexibilidade para a configuração GrTBe

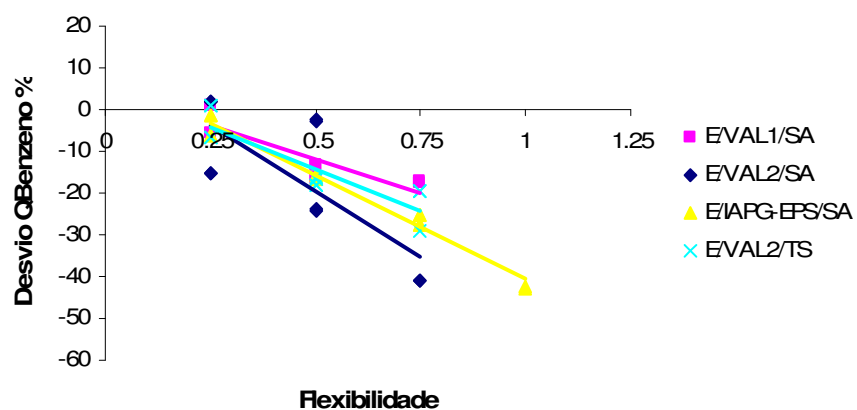


Figura 4.7 Desvio Q_{Benzeno} versus a flexibilidade para a configuração E

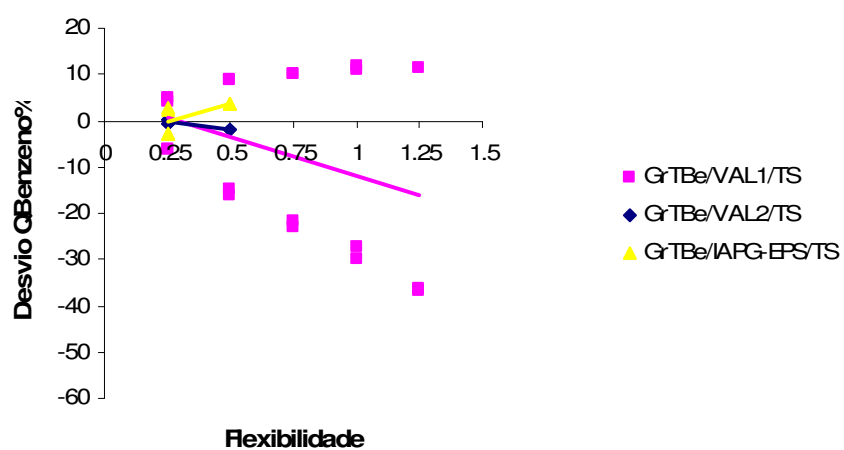


Figura 4.8 Desvio Q_{Benzeno} versus a flexibilidade para a configuração GrTBe

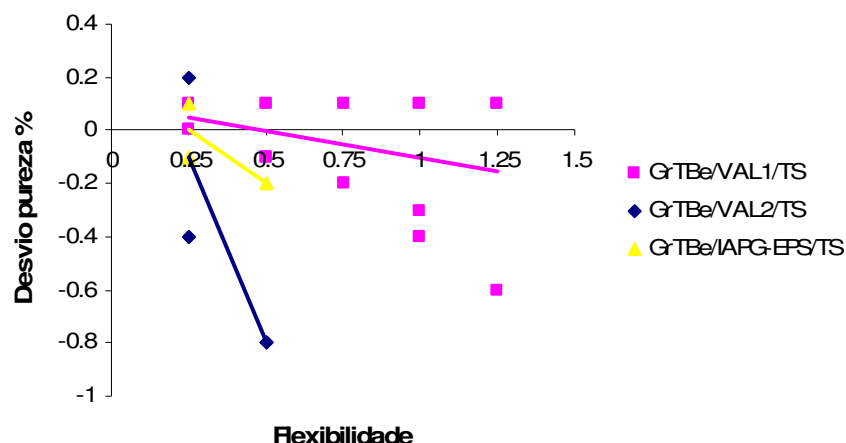


Figura 4.9 Desvio pureza da corrente de benzeno versus a flexibilidade para a configuração GrTBe

Para as soluções óptimas da configuração E, as soluções geradas na análise da flexibilidade apresentam geralmente um pior desempenho económico (VAL1) e ambiental segundo a metodologia IAPG-EPS (Figuras 4.1 e 4.5). Em relação à metodologia IAPG as soluções geradas apresentam valores melhores e piores, consoante a direcção do primeiro factor incerto (caudal da corrente de hidrogénio) (Figura 4.3). A solução E/VAL2/SA embora apresente algumas soluções com valores melhores para VAL1 evidencia a mesma tendência. As soluções geradas conduzem geralmente a caudais menores para a corrente de benzeno (Figura 4.7). Relativamente à pureza da corrente de benzeno não foi registada qualquer variação, pelo que não é apresentado o gráfico correspondente.

Relativamente às soluções flexíveis da configuração GrTBe as soluções geradas apresentam, regra geral, valores piores para VAL1, ou seja, um pior desempenho económico (Figura 4.2). Em relação aos aspectos ambientais existem soluções com valores melhores e piores do que os da solução nominal, qualquer que seja a metodologia embora sejam geralmente divergentes em sentido, pelos motivos explicados no capítulo 3 – as soluções que apresentam caudais menores para a corrente de benzeno são penalizadas pela metodologia IAPG-EPS (Figuras 4.4, 4.6 e Apêndice C1), pelo que às soluções que apresentam maiores caudais para a corrente de benzeno está associado um melhor desempenho ambiental segundo esta metodologia. As soluções que conduzem a maiores caudais da corrente de benzeno envolvem geralmente maiores caudais processuais o que tem como consequência um aumento dos impactos ambientais segundo IAPG. Relativamente a VAL1 verifica-se que quando os caudais da corrente de benzeno são maiores o desvio (geralmente desfavorável) é menor do que quando caudais da corrente de benzeno são menores, apesar de caudais processuais mais elevados implicarem custos mais elevados. Para o caudal da corrente de benzeno foram, portanto, registados valores maiores e menores que o da solução nominal (Figura 4.8). Relativamente à pureza embora se verifique alguma variação o valor é geralmente superior ao mínimo exigido (0,990) (Figura 4.9). A pureza é geralmente mais elevada para as soluções que apresentam caudais menores para a corrente de benzeno.

A partir das várias figuras apresentadas e dos ajustes efectuados é possível constatar que à medida que a flexibilidade aumenta os desvios para as várias grandezas também aumentam. Verifica-se ainda que essa tendência vai no sentido de um pior desempenho económico, ambiental e operacional.

As soluções da configuração E são as mais flexíveis dado que apresentam geralmente valores superiores para a flexibilidade (das 4 soluções flexíveis 1 tem flexibilidade 0,75

e as restantes flexibilidade 0,5), embora a solução mais flexível ($F=1,00$) seja da configuração GrTBe. No entanto, as outras soluções flexíveis da configuração GrTBe apresentam o valor mínimo para a flexibilidade ($F=0,25$).

As soluções da configuração GrTBe encontradas pela pesquisa tabu são mais flexíveis que as obtidas pelo recozimento simulado (todas as soluções flexíveis foram obtidas pela pesquisa Tabu), acontecendo o inverso para a configuração E (3 das 4 soluções flexíveis foram obtidas pelo recozimento simulado).

As variações registadas para os critérios económicos e ambientais relativas às soluções da configuração E são da mesma ordem de grandeza da configuração GrTBe, embora geralmente superiores e mais desfavoráveis, tal como pode ser verificado nas figuras anteriores. Relativamente ao caudal de benzeno a variação registada para a configuração E é mais desfavorável que a verificada para a configuração GrTBe. A configuração E não apresenta contudo variações da pureza da corrente de benzeno.

4 Conclusões

O método proposto para analisar a robustez permitiu determinar quais as configurações e condições operatórias mais robustas, através do cálculo da flexibilidade e de indicadores económicos, ambientais e de desempenho operacional. Dos resultados obtidos é possível concluir que muitas das soluções encontradas pela optimização monobjectivo não são flexíveis, uma vez que 17 das 24 soluções testadas apresentam flexibilidade igual a zero.

As soluções da configuração E são as mais flexíveis quer em número (4 das 7 soluções flexíveis são da configuração E) quer qualitativamente, dado que apresentam geralmente valores para a flexibilidade iguais ou superiores às das soluções das outras configurações. Segue-se a configuração GrTBe que tem 3 soluções flexíveis, uma das quais é a solução que apresenta o melhor valor para a flexibilidade ($F=1$), embora as outras duas soluções apresentem apenas o valor mínimo para a flexibilidade ($F=0,25$). Todas as soluções da configuração E têm flexibilidade nula.

Analisando os valores para o critério económico VAL1, é possível concluir que as soluções geradas a partir das soluções óptimas apresentam geralmente um pior desempenho económico, isto é, valores inferiores para VAL1.

Sob o ponto de vista ambiental as soluções geradas em torno das soluções óptimas da configuração E apresentam geralmente um pior desempenho ambiental segundo a metodologia IAPG-EPS, devido ao facto dos caudais da corrente de benzeno serem menores do que os das soluções nominais. Segundo IAPG as soluções geradas apresentam valores melhores e piores, consoante a direcção do primeiro factor incerto. Para a configuração GrTBe as soluções geradas apresentam valores melhores e piores do que os das soluções nominais, para ambas as metodologias, o mesmo acontecendo para o caudal da corrente de benzeno.

Concluiu-se também que à medida que a flexibilidade aumenta os desvios para as várias grandezas também aumentam, tendencialmente para um pior desempenho económico, ambiental e operacional.

As soluções da configuração GrTBe encontradas pela pesquisa tabu são mais flexíveis que as obtidas pelo recozimento simulado, acontecendo o inverso para a configuração E.

As soluções da configuração E são bastante robustas, uma vez que não apresentam variações na pureza da corrente de benzeno, possuem elevada flexibilidade e embora os critérios económico e ambientais variem, essas variações são da mesma ordem de grandeza das da configuração GrTBe, embora geralmente superiores e mais desfavoráveis. A configuração GrTBe constitui, portanto, uma opção a ter em conta especialmente no caso em que seja permitida alguma variação na pureza da corrente de benzeno e porque permite obter caudais superiores para a corrente de benzeno. Esta configuração GrTBe, comum a Douglas (1988), provou ser também uma boa opção em termos de robustez.

5 Bibliografia

Bahri, P, A., Bandoni, A, e Romagnoli, J, (1996), "Operability Assessment in Chemical Plants," Computers and Chemical Engineering **20**, **Suppl,2**: S787-S792.

Bansal, V., Perkins, J, D, e Pistikopoulos, E, N, (2000), "Flexibility analysis and design of linear systems by parametric programming," AIChE Journal **46**(2): 335-354.

Bansal, V., Perkins, J, D, e Pistikopoulos, E, N, (2002), "Flexibility analysis and design using a parametric programming framework," AIChE Journal **48**(12): 2851-2868.

Bogle, D., Engell, Ross&Pistikopoulos, Binder&Marquardt, Petersen&Skogestad, Mathison, Backx&Marquardt e Hovd&Skogestad (2000), State of the Art of Research in Flexibility, Operability & Dynamics.

Chacon-Mondragon, O, L, e Himmelblau, D, M, (1996), "Integration of flexibility and control in process design," Computers and Chemical Engineering **20**(4): 447-452.

Floudas, C. A., Gumus, Z. H. e Ierapetritou, M. G. (1999). Global Optimization in Design Under Uncertainty: Feasibility Test and Flexibility Index Problems AIChE Meeting, Dallas.

Floudas, C. A., Gumus, Z. H. e Ierapetritou, M. G. (2001). "Global Optimization in Design Under Uncertainty: Feasibility Test and Flexibility Index Problems " Ind.Eng.Chem.Res. **40**: 4267-4282.

Grossmann, I, E, e Floudas, C, A, (1987), "Active constraint strategy for flexibility analysis in chemical processes," Computers and Chemical Engineering **11**(6): 675-693.

Grossmann, I, E, e Morari, M, (1983), Operability, Resiliency and Flexibility - Process Design Objectives for a Changing World, Proceedings of 2nd International Conference on Foundations of Computer-Aided Process Design, A, W, Westeberg and H, H, Chien, eds.

Halemane, K, P, e Grossmann, I, E, (1983), "Optimal Process Design Under Uncertainty," AIChE J, **29**: 425-433.

Ierapetritou, M. G., Acevedo, J. e Pistikopoulos, E. N. (1996). "An Optimization Approach for Process Engineering Problems Under Uncertainty." Computers & Chemical Engineering **20**: 703-709.

Ierapetritou, M, G, (2001), "New approach for quantifying process feasibility: Convex and 1-D quasi-convex regions," AIChE Journal **47**(6): 1407-1417.

Konukman, A, E, S, e Akman, U, (2005), "Flexibility and operability analysis of a Hen-integrated natural gas expander plant," Chemical Engineering Science **60**: 7057-7074.

Ostrovsky, G, M., Volin, Y, M, e Senyavin, M, M, (1996), "An approach to solving a two-stage optimization problem under uncertainty," Computers and Chemical Engineering **21**: 317-325.

Ostrovsky, G, M., Achenie, L, E, K., Wang, Y, e Volin, Y, M, (2000), "A new algorithm for computing process flexibility," Ind, Eng, Chem, Res, **39**: 2368-2377.

Pistikopoulos, E, N, e Ierapetritou, M, G, (1995), "Novel approach for optimal process

design under uncertainty," Computers and Chemical Engineering **19**(10): 1089-1110.

Raspanti, C, G., Bandoni, J, A, e Biegler, L, T, (2000), "New strategies for flexibility analysis and design under uncertainty," Computers and Chemical Engineering **24**(9-10): 2193-2209.

Straub, D. A. e Grossmann, I. E. (1990). "Integrated stochastic metric of flexibility for systems with discrete state and continuous parameter uncertainties." Computers and Chemical Engineering **14**(9): 967-985.

Straub, D, A, e Grossmann, I, E, (1993), "Design optimization of stochastic flexibility," Computers and Chemical Engineering **17**(4): 339-354.

Swaney, R, E, e Grossmann, I, E, (1985a), "An index for operational flexibility in chemical process design, Part I: Formulation and theory," AIChE Journal **31**(4): 621-630.

Swaney, R, E, e Grossmann, I, E, (1985b), "An index for operational flexibility in chemical process design, Part II: Computational algorithms," AIChE Journal **31**(4): 631-641.

APÊNDICES

O apêndice deste capítulo está no CD.

C1. Resultados Análise da Robustez

Capítulo 5

Conclusões e trabalho futuro

ÍNDICE

1	Conclusões	1
2	Trabalho futuro	3

1 Conclusões

Aplicando a metodologia apresentada no capítulo 2 é possível construir, através de um procedimento hierárquico/heurístico a hiperestrutura do problema, por consideração de todas ou algumas das decisões alternativas mais promissoras em cada etapa do processo de geração. À hiperestrutura são aplicadas regras heurísticas que promovem um refinamento do espaço de procura, eliminando dessa forma configurações inviáveis, pouco interessantes e/ou tecnicamente inadequadas. A etapa seguinte provoca, por outro lado, uma expansão do espaço de procura, através da consideração de alternativas processuais, às configurações da hiperestrutura que não foram eliminadas, que contemplam a integração energética. Desta forma é definido o espaço de procura, resolvendo de forma aproximada o problema inteiro. O resultado final foi um conjunto de configurações às quais foi depois aplicado o desenho estatístico. Desta etapa resultaram 30 configurações, das quais 10 são comuns a Douglas (1988).

A aplicação do desenho estatístico ao conjunto anterior, utilizando requisitos de qualidade que podem ser restrições operacionais, permitiu identificar as configurações que se encontravam no espaço viável de procura, isto é, que capazes de cumprir o(s) requisito(s) de qualidade estabelecido(s). Permitiu também identificar as configurações que evidenciaram não conseguir cumprir esses requisitos. Existem, no entanto, algumas configurações para as quais a aplicação do desenho estatístico não foi conclusiva, nomeadamente configurações para as quais existem restrições operacionais adicionais o que provoca posteriormente a infracção de outras restrições, e configurações complexas em que o número de interligações/equipamentos é muito elevado. A aplicação desta etapa permitiu a eliminação de 6 configurações. Das restantes 24 configurações, 21 foram automaticamente seleccionadas (9 comuns a Douglas(1988)), 2 atingiram o critério de qualidade mas infringiram restrições (1 comum a Douglas (1988) e 1 para a qual não se obteve resultados).

O desenho estatístico foi também usado para proceder à seriação das configurações que cumpriram o requisito de qualidade, seleccionando dessa forma as configurações mais promissoras, usando critérios económicos (VAL1), ambientais (IAPG e IAPG-EPS) e mistos (VAL2). Para isso foi desenvolvida uma metodologia, IAPG, para determinar o impacto ambiental potencial global. Mediante os resultados obtidos foram seleccionadas 5 configurações entre as quais uma, GrTBe, comum a Douglas (1988).

As 5 configurações seleccionadas foram depois optimizadas usando duas meta-heurísticas, recozimento simulado e pesquisa Tabu, considerando critérios económicos (VAL1), ambientais (IAPG e IAPG-EPS) e mistos (VAL2) numa perspectiva de optimização monobjectivo. Para as configurações A, Ae e E o desempenho dos dois algoritmos pode ser considerado bom, dado que o desvio percentual médio é baixo. Para a configuração GrTBe o desempenho oscilou entre o razoável e o fraco e para a configuração Ee foi fraco. Foi ainda possível concluir que a aplicação de um critério de convergência que provocasse a paragem do algoritmo se não houvesse alteração da solução durante uma certa percentagem de iterações (40% do total de iterações) não seria muito vantajoso no caso da pesquisa Tabu, pois implicaria que numa percentagem significativa de optimizações não se obteria a solução final obtida, contrariamente ao que aconteceria com o recozimento simulado.

Relativamente às configurações estudadas foi possível concluir que duas das configurações, A e Ae, demonstraram ser pouco interessantes pois as soluções finais obtidas não cumpriam o requisito de qualidade, pureza da corrente de benzeno superior a 0,990, embora existissem algumas soluções no decurso das optimizações

que o cumprissem. As soluções obtidas no decurso das optimizações apresentavam, no entanto, valores para as funções objectivo pouco atractivos. Para estas configurações foi aplicado um algoritmo pesquisa Tabu modificado, com um factor penalização para as soluções que não cumpriam o requisito de qualidade, pureza da corrente de benzeno superior a 0,990. Os resultados permitiram concluir que embora as soluções finais obtidas por este algoritmo cumprissem geralmente o requisito de qualidade eram pouco interessantes económica e ambientalmente, corroborando os resultados obtidos pelo recozimento simulado e pesquisa Tabu sem penalização. Concluiu-se também que os algoritmos recozimento simulado e pesquisa Tabu produziram resultados semelhantes para duas das restantes configurações, E e GrTBe, embora os da pesquisa Tabu sejam ligeiramente melhores. Em relação à outra configuração Ee, a pesquisa Tabu permitiu obter resultados claramente superiores. Para esta configuração as soluções que conduzem a caudais razoáveis são raras, sendo estas as que interessam económica e ambientalmente. Os resultados obtidos para esta configuração são inferiores aos das configurações E e GrTBe, para todas as funções objectivo. A configuração GrTBe, comum a Douglas (1988) é a que apresenta as melhores soluções nas optimizações com funções objectivo VAL1, VAL2 e IAPG-EPS. A configuração E apresenta melhores soluções para as optimizações com função objectivo IAPG porque as soluções com menores caudais para a corrente de benzeno não são penalizadas por esta metodologia.

Concluiu-se que as metodologias usadas para determinar o impacto ambiental potencial global não diferem significativamente em termos evolutivos embora possam pontualmente apresentar diferenças significativas, devido aos motivos anteriormente expostos. Podem, portanto, conduzir a soluções óptimas diferentes.

Verificou-se também que os objectivos económicos e ambientais não são muito divergentes, particularmente quando se considera a metodologia EPS para determinar o impacto ambiental potencial global.

As configurações E, Ee e GrTBe foram também optimizadas usando um algoritmo recozimento simulado multi-objectivo, que utiliza um arquivo de soluções não dominadas e um critério de aceitação completamente diferente. Foram consideradas duas funções objectivo, uma económica (VAL1) e outra ambiental (IAPG). Com este algoritmo foi possível obter várias soluções não dominadas para as configurações E e GrTBe (para a configuração Ee apenas se obteve duas soluções não dominadas). Considerando o conjunto final de Pareto de cada destas configurações e comparando-o com os resultados das optimizações monobjectivo usando recozimento simulado concluiu-se que as optimizações multi-objectivo conduziram a resultados ligeiramente melhores do que as optimizações monobjectivo realizadas com a função objectivo VAL1. Por outro lado, as soluções obtidas nas optimizações monobjectivo com função objectivo IAPG são soluções não dominadas, excepto para a configuração Ee. Para a configuração E o desempenho do algoritmo foi razoável e fraco para as configurações GrTBe e Ee.

Através da comparação do conjunto de Pareto de cada das configurações E, Ee e GrTBe com os resultados das optimizações monobjectivo com função objectivo VAL2 (critério misto) concluiu-se que usando esta função objectivo mista foi possível obter soluções melhores do que as obtidas pelas optimizações multi-objectivo, particularmente para a configuração GrTBe.

Na optimização multi-objectivo a configuração GrTBe, comum a Douglas (1988) continuou a ser economicamente a melhor solução e a configuração E a melhor ambientalmente o que está de acordo com os resultados da optimização monobjectivo.

Para as soluções obtidas para as configurações E, Ee e GrTBe segundo optimização monobjectivo para as várias funções objectivo, analisou-se a robustez, determinando a flexibilidade e a variação registada em alguns indicadores operacionais (caudal e pureza da corrente de benzeno), económicos (VAL1) e ambientais (IAPG e IAPG-EPS). Concluiu-se que a configuração Ee e respectivas soluções não são robustas, dado que apresentam sempre uma flexibilidade nula. As soluções da configuração E são bastante robustas, dado que possuem elevada flexibilidade, não apresentam variações na pureza da corrente de benzeno (contrariamente ao que acontece com GrTBe), embora apresentem variações nos critérios económicos e ambientais, geralmente maiores e mais desfavoráveis do que as registadas para a configuração GrTBe. A configuração GrTBe permite obter caudais superiores para a corrente de benzeno e constitui também uma boa opção em termos de robustez. Concluiu-se também que à medida que a flexibilidade aumenta o desempenho operacional, económico e ambiental tende a piorar.

2 Trabalho futuro

- Desenvolvimento e aplicação de regras heurísticas ligadas à química verde para consideração no processo de concepção, nomeadamente na construção da hiperestrutura e refinamento do espaço de procura;
- Aplicação do desenho estatístico incluindo as matrizes ortogonais de Taguchi a processos industriais, quer na fase de concepção de processos quer em etapas parcelares, como, por exemplo na avaliação de diferentes alternativas de integração energética;
- Desenvolvimento de índices de segurança para avaliação de configurações e condições operatórias nas diferentes fases de projecto, procurando dessa forma satisfazer mais um requisito necessário para um funcionamento integrado das unidades industriais;
- Desenvolvimento de índices de sustentabilidade para a avaliação de configurações, considerando não só critérios económicos e ambientais mas também critérios sociais;
- Desenvolvimento de critérios mistos (económicos, ambientais, de robustez, de segurança, etc.);
- Desenvolvimento de algoritmos de optimização multi-objectivo baseados na pesquisa Tabu.

A1. Experimentação factorial

Nomenclatura

F1 - Razão molar de reagentes
F2 - Volume do reactor
F3 - Pressão no flash
F4 - Fracção molar de benzeno na purga
F5 - Caudal da purga
F6 - Fracção molar de benzeno na corrente de fundo da coluna 2
F7 - Fracção molar de tolueno na corrente de topo da coluna 2
F8 - Pressão de operação da coluna 2
F9 - Número de pratos da coluna 2
F10 - Caudal fixo da coluna 2
F11 - Fracção molar de tolueno no rectificador
F12 - Número de pratos do rectificador
F13 - Fracção molar de tolueno da coluna 3
F14 - Fracção molar de bifenilo da coluna 3
F15 - Pressão de operação da coluna 3
F16 - Número de pratos da coluna 3
F17 - Fracção molar de benzeno da coluna 1
F18 - Razão de refluxo da coluna 1
F19 - Pressão de operação da coluna 1
F20 - Número de pratos da coluna 1
 g_A - graus de liberdade do factor A
 g_B - graus de liberdade do factor B
 g_{AB} - graus de liberdade da interacção dos factores A e B
 g_{MO} - graus de liberdade da matriz ortogonal
 k_A - número de níveis para o factor A
N - número total de ensaios

Índice de tabelas

Tabela A 1.1 Plano Plackett-Burman N=12 – Grupo A.....	4
Tabela A 1.2 Plano Plackett-Burman N=12 – Grupo C	5
Tabela A 1.3 Plano fraccionado de dois níveis 2_{III}^{12-8} N=16 – Grupo CR	6
Tabela A 1.4 Plano fraccionado de dois níveis 2_{III}^{14-10} N=16 – Grupo DC	7
Tabela A 1.5 Plano fraccionado de dois níveis 2_{III}^{13-9} N=16 – Grupo E	8
Tabela A 1.6 Plano Plackett-Burman N=20 – Grupo G	9

Introdução

Existem basicamente duas situações de desenvolvimento de produto e/ou processo, que aplicadas a processos químicos podem ser descritas da seguinte forma: uma consiste em encontrar um(s) certo(s) parâmetro(s) que aperfeiçoe(m) determinada característica de desempenho, conduzindo a um valor aceitável ou óptimo; uma segunda situação corresponde a descobrir um projecto alternativo ou material que proporcione o mesmo desempenho (Ross, 1988).

Existem várias abordagens para investigar os efeitos de diferentes parâmetros. A mais simples metodologia é variar um factor de cada vez, sendo a sua limitação mais importante o facto de não se poder observar a interacção entre factores. Economicamente é pouco atraente à medida que o número de parâmetros aumenta devido, por exemplo, aos custos associados aos reagentes, sendo de referir que o tempo dispendido se torna também significativo.

Um plano factorial completo conduz na maioria das situações de engenharia a um número elevado de experiências devido ao elevado número de factores envolvido (ex.: 6 factores com 2 níveis exigiriam 64 experiências), permitindo, no entanto, determinar todos os efeitos e interacções. Contudo limitações económicas e de tempo condicionam a utilização deste tipo de planos. Existem métodos mais expeditos que utilizam matrizes ortogonais e que permitem com um menor número de ensaios tirar algumas conclusões, nomeadamente determinar quais os factores que são significativos usando para isso a análise da variância (ANOVA), sendo designados por métodos de crivagem. Como planos de desenho factorial de crivagem referem-se os planos fraccionados de dois níveis e os planos de Plackett-Burman. O número de ensaios de um plano fraccionado é uma potência de 2 enquanto nos planos de Plackett-Burman é um múltiplo de 4 (SAS Institute Inc. , 1989-2003).

A ortogonalidade significa que o efeito de um factor não influencia na estimativa de outro factor (Ross, 1988).

Etapas no projecto, execução e análise de um plano experimental:

- Definição dos objectivos
- Seleção de factores e/ou interacções para avaliação
- Seleção do número de níveis para os factores
- Seleção da matriz ortogonal
- Atribuição de factores e/ou interacções às colunas
- Realização de ensaios
- Análise de resultados
- Confirmação

(Ross, 1988)

Definição dos objectivos

A primeira fase é estabelecer os objectivos que se pretendem atingir, definindo o critério de qualidade: nominal é melhor ou menor é melhor ou maior é melhor.

Seleção de factores, níveis e matriz ortogonal

A seleção dos factores a estudar depende da resposta que se pretende obter. Assim no plano inicial devem serem incluídos todos os factores que se supõe terem influência na característica ou desempenho pretendido, uma vez que o objectivo dos primeiros planos experimentais é frequentemente encontrar os factores que realmente contribuem para essa característica ou desempenho (crivagem).

Existem dois tipos de parâmetros que podem influenciar a resposta: parâmetros contínuos (temperatura, pressão, etc.) e discretos (material A ou B, etc.). Se apenas estão envolvidos parâmetros contínuos basta considerar 2 níveis para cada factor no plano inicial (Ross, 1988). De referir que nível designa o valor ou estado atribuído a um factor numa experiência.

A selecção da matriz ortogonal depende do número de factores e interacções de interesse e do número de níveis para cada factor. Estes dois itens determinam os graus de liberdade exigidos. O número mínimo de graus de liberdade exigido num plano é igual ao somatório dos graus de liberdade de todos os factores e interacções, em que:

- os graus de liberdade para cada factor são iguais ao número de níveis menos 1,

$$g_A = k_A - 1 \quad (\text{A } 1.1)$$

- o número de graus de liberdade de uma interacção é $g_{AB} = g_A \times g_B$.

A matriz ortogonal seleccionada deve ter um número de graus de liberdade, g_{MO} , igual ou superior ao somatório referido, em que:

$$g_{MO} = N - 1 \quad (\text{A } 1.2)$$

N - número total de ensaios;

Atribuição de factores e/ou interacções às colunas e execução de ensaios

Depois de terem sido atribuídos factores às colunas o passo seguinte é a realização das experiências de forma aleatória. Cada linha corresponde a uma experiência e as condições em que será realizada é indicada pelos valores de cada linha; estes valores poderão estar codificados (-1, 0, +1, etc.), assim -1 poderá indicar por exemplo o valor de uma temperatura correspondente ao nível inferior e +1 poderá ser o nível superior desse mesmo factor. O número mínimo de amostras a testar em cada conjunto de condições experimentais é um, no entanto, quanto maior o número de réplicas maior a qualidade da informação. No caso da utilização de um simulador considerou-se que o número mínimo é suficiente, porque os resultados que se obtêm nos vários ensaios para as mesmas condições são muito semelhantes.

Análise de resultados

A análise dos resultados produz informação, uma resultante de cálculos aritméticos como os efeitos principais dos factores, as condições óptimas e a estimativa do desempenho nas condições óptimas, e outra que envolve cálculo estatístico como o intervalo de confiança, os testes de significância e a influência relativa dos factores.

Confirmação

Uma etapa muito importante a efectuar, dado que permite a verificação das conclusões.

Planos experimentais

Tabela A 1.1 Plano Plackett-Burman N=12 – Grupo A

Ensaio		F1	F2	F3	F4	F5	F6	F7	F8	F9
1	+++++++	1,5	5000,0	486	0,01	275	0,001	0,001	150	42
2	-++++--	1	5000,0	50	0,01	275	0001	0,0003	15	22
3	--++++-	1	3000,0	486	0,005	275	0,001	0,001	15	22
4	+---+++-	1,5	3000,0	50	0,01	100	0,001	0,001	150	22
5	-+++-----	1	5000,0	50	0,005	275	0,0003	0,001	150	42
6	---+-----	1	3000,0	486	0,005	100	0,001	0,0003	150	42
7	---+-----	1	3000,0	50	0,01	100	0,0003	0,001	15	42
8	+---+---+	1,5	3000,0	50	0,005	275	0,0003	0,0003	150	22
9	++---+---	1,5	5000,0	50	0,005	100	0,001	0,0003	15	42
10	+++---+--	1,5	5000,0	486	0,005	100	0,0003	0,001	15	22
11	-+++---+-	1	5000,0	486	0,01	100	0,0003	0,0003	150	22
12	+-----+	1,5	3000,0	486	0,01	275	0,0003	0,0003	15	42

Tabela A 1.2 Plano Plackett-Burman N=12 – Grupo C

Ensaio		F1	F2	F3	F4	F5	F6	F7	F8	F10	F9
1	+++++++	1,5	5000,0	486	0,01	275	0,001	0,001	150	280	42
2	-+---+	1	5000,0	50	0,01	275	0,001	0,0003	15	100	42
3	--++++-	1	3000,0	486	0,005	275	0,001	0,001	15	100	22
4	+---++++-	1,5	3000,0	50	0,01	100	0,001	0,001	150	100	22
5	-+---++++-	1	5000,0	50	0,005	275	0,0003	0,001	150	280	22
6	--+---++++	1	3000,0	486	0,005	100	0,001	0,0003	150	280	42
7	---+---+++	1	3000,0	50	0,01	100	0,0003	0,001	15	280	42
8	+---+---++	1,5	3000,0	50	0,005	275	0,0003	0,0003	150	100	42
9	++---+---+	1,5	5000,0	50	0,005	100	0,001	0,0003	15	280	22
10	+++---+---+	1,5	5000,0	486	0,005	100	0,0003	0,001	15	100	42
11	-++++---+	1	5000,0	486	0,01	100	0,0003	0,0003	150	100	22
12	+++++---+	1,5	3000,0	486	0,01	275	0,0003	0,0003	15	280	22

Tabela A 1.3 Plano fraccionado de dois níveis 2_{III}¹²⁻⁸ N=16 – Grupo CR

Ensaio		F1	F2	F3	F4	F5	F6	F7	F8	F10	F11	F9	F12
1	----+--+---	1	3000,0	50	0,005	275	0,0003	0,0003	150	100	0,001	42	10
2	---+---+---	1	3000,0	50	0,01	100	0,001	0,001	15	280	0,0003	22	10
3	--+++++---	1	3000,0	486	0,005	100	0,001	0,001	15	100	0,001	42	22
4	---+---+---	1	3000,0	486	0,01	275	0,0003	0,0003	150	280	0,0003	22	22
5	-+-----+	1	5000,0	50	0,005	100	0,001	0,0003	150	280	0,0003	42	22
6	-+-----+	1	5000,0	50	0,01	275	0,0003	0,001	15	100	0,001	22	22
7	---+---+---	1	5000,0	486	0,005	275	0,0003	0,001	15	280	0,0003	42	10
8	---+---+---	1	5000,0	486	0,01	100	0,001	0,0003	150	100	0,001	22	10
9	+-----+	1,5	3000,0	50	0,005	100	0,0003	0,001	150	280	0,001	22	22
10	+-----+	1,5	3000,0	50	0,01	275	0,001	0,0003	15	100	0,0003	42	22
11	+-----+	1,5	3000,0	486	0,005	275	0,001	0,0003	15	280	0,001	22	10
12	+-----+	1,5	3000,0	486	0,01	100	0,0003	0,001	150	100	0,0003	42	10
13	++-----	1,5	5000,0	50	0,005	275	0,001	0,001	150	100	0,0003	22	10
14	++-----	1,5	5000,0	50	0,01	100	0,0003	0,0003	15	280	0,001	42	10
15	+++-----	1,5	5000,0	486	0,005	100	0,0003	0,0003	15	100	0,0003	22	22
16	+++++++	1,5	5000,0	486	0,01	275	0,001	0,001	150	280	0,001	42	22

Tabela A 1.4 Plano fraccionado de dois níveis 2_{III}¹⁴⁻¹⁰ N=16 – Grupo DC

Ensaio		F1	F2	F3	F4	F5	F6	F7	F8	F10	F13	F14	F15	F9	F16
1	-----+++++	1	3000,0	50	0,005	275	0,0003	0,0003	150	100	0,001	0,001	15	42	12
2	---+++++-----	1	3000,0	50	0,01	100	0,001	0,001	15	280	0,0003	0,0003	15	42	12
3	--+++++-----	1	3000,0	486	0,005	100	0,001	0,001	15	100	0,001	0,001	150	22	5
4	---+++++-----	1	3000,0	486	0,01	275	0,0003	0,0003	150	280	0,0003	0,0003	150	22	5
5	-+++++-----	1	5000,0	50	0,005	100	0,001	0,0003	150	280	0,0003	0,001	150	22	12
6	-+++++-----	1	5000,0	50	0,01	275	0,0003	0,001	15	100	0,001	0,0003	150	22	12
7	---+++++-----	1	5000,0	486	0,005	275	0,0003	0,001	15	280	0,0003	0,001	15	42	5
8	---+++++-----	1	5000,0	486	0,01	100	0,001	0,0003	150	100	0,001	0,0003	15	42	5
9	+-----+++++	1,5	3000,0	50	0,005	100	0,0003	0,001	150	280	0,001	0,0003	150	42	5
10	+-----+++++	1,5	3000,0	50	0,01	275	0,001	0,0003	15	100	0,0003	0,001	150	42	5
11	+-----+++++	1,5	3000,0	486	0,005	275	0,001	0,0003	15	280	0,001	0,0003	15	22	12
12	+-----+++++	1,5	3000,0	486	0,01	100	0,0003	0,001	150	100	0,0003	0,001	15	22	12
13	++-----+	1,5	5000,0	50	0,005	275	0,001	0,001	150	100	0,0003	0,0003	15	22	5
14	++-----+	1,5	5000,0	50	0,01	100	0,0003	0,0003	15	280	0,001	0,001	15	22	5
15	++-----+	1,5	5000,0	486	0,005	100	0,0003	0,0003	15	100	0,0003	0,0003	150	42	12
16	+++++	1,5	5000,0	486	0,01	275	0,001	0,001	150	280	0,001	0,001	150	42	12

Tabela A 1.5 Plano fraccionado de dois níveis 2_{III}¹³⁻⁹ N=16 – Grupo E

Ensaio		F1	F2	F3	F4	F5	F6	F7	F8	F17	F18	F19	F9	F20
1	----+---+---+	1	3000,0	50	0,005	275	0,0003	0,0003	150	0.06	5	150	22	10
2	---+---+---+	1	3000,0	50	0,01	100	0,001	0,001	15	0.1	0,25	15	22	10
3	--+---+---+	1	3000,0	486	0,005	100	0,001	0,001	15	0.06	5	150	42	3
4	---+++---+	1	3000,0	486	0,01	275	0,0003	0,0003	150	0.1	0,25	15	42	3
5	-+---+---+	1	5000,0	50	0,005	100	0,001	0,0003	150	0.1	0,25	150	42	3
6	-+---+---+	1	5000,0	50	0,01	275	0,0003	0,001	15	0.06	5	15	42	3
7	---+---+---+	1	5000,0	486	0,005	275	0,0003	0,001	15	0.1	0,25	150	22	10
8	---+---+---+	1	5000,0	486	0,01	100	0,001	0,0003	150	0.06	5	15	22	10
9	+-----+	1,5	3000,0	50	0,005	100	0,0003	0,001	150	0.1	5	15	42	10
10	+-----+	1,5	3000,0	50	0,01	275	0,001	0,0003	15	0.06	0,25	150	42	10
11	+---+---+---	1,5	3000,0	486	0,005	275	0,001	0,0003	15	0.1	5	15	22	3
12	+---+---+---	1,5	3000,0	486	0,01	100	0,0003	0,001	150	0.06	0,25	150	22	3
13	+-----+	1,5	5000,0	50	0,005	275	0,001	0,001	150	0.06	0,25	15	22	3
14	+---+---+---	1,5	5000,0	50	0,01	100	0,0003	0,0003	15	0.1	5	150	22	3
15	+++-----+	1,5	5000,0	486	0,005	100	0,0003	0,0003	15	0.06	0,25	15	42	10
16	+++++++	1,5	5000,0	486	0,01	275	0,001	0,001	150	0.1	5	150	42	10

Tabela A 1.6 Plano Plackett-Burman N=20 – Grupo G

Ensaio		F1	F2	F3	F4	F5	F6	F7	F8	F17	F18	F19	F13	F15	F9	F20	F16	F14
1	+++++	1,5	5000,0	486	0,01	275	0,001	0,001	150	0.1	5	150	0,001	150	42	10	12	0,001
2	-+-----+	1	5000,0	50	0,005	275	0,001	0,001	150	0.06	5	15	0,001	15	22	3	5	0,001
3	--+-----+	1	3000,0	486	0,005	100	0,001	0,001	150	0.1	0,25	150	0,0003	150	22	3	5	0,0003
4	+---+-----+	1,5	3000,0	50	0,01	100	0,0003	0,001	150	0.1	5	15	0,001	15	42	3	5	0,0003
5	++---+-----+	1,5	5000,0	50	0,005	275	0,0003	0,0003	150	0.1	5	150	0,0003	150	22	10	5	0,0003
6	-++---+-----+	1	5000,0	486	0,005	100	0,001	0,0003	15	0.1	5	150	0,001	15	42	3	12	0,0003
7	--++---+-----+	1	3000,0	486	0,01	100	0,0003	0,001	15	0.06	5	150	0,001	150	22	10	5	0,001
8	---++---+-----+	1	3000,0	50	0,01	275	0,0003	0,0003	150	0.06	0,25	150	0,001	150	42	3	12	0,0003
9	----++---+-----+	1	3000,0	50	0,005	275	0,001	0,0003	15	0.1	0,25	15	0,001	150	42	10	5	0,001
10	+----++---+-----+	1,5	3000,0	50	0,005	100	0,001	0,001	15	0.06	5	15	0,0003	150	42	10	12	0,0003
11	-+----++---+-----+	1	5000,0	50	0,005	100	0,0003	0,001	150	0.06	0,25	150	0,0003	15	42	10	12	0,001
12	++----++---+-----+	1,5	3000,0	486	0,005	100	0,0003	0,0003	150	0.1	0,25	15	0,001	15	22	10	12	0,001
13	-++----++---+-----+	1	5000,0	50	0,01	100	0,0003	0,0003	15	0.1	5	15	0,0003	150	22	3	12	0,001
14	+++----++---+-----+	1,5	3000,0	486	0,005	275	0,0003	0,0003	15	0.06	5	150	0,0003	15	42	3	5	0,001
15	++++----++---+-----+	1,5	5000,0	50	0,01	100	0,001	0,0003	15	0.06	0,25	150	0,001	15	22	10	5	0,0003
16	+++++----++---+-----+	1,5	5000,0	486	0,005	275	0,0003	0,001	15	0.06	0,25	15	0,001	150	22	3	12	0,0003
17	++++++----++---+-----+	1,5	5000,0	486	0,01	100	0,001	0,0003	150	0.06	0,25	15	0,0003	150	42	3	5	0,001
18	-+++++----++---+-----+	1	5000,0	486	0,01	275	0,0003	0,001	15	0.1	0,25	15	0,0003	15	42	10	5	0,0003
19	--+++++----++---+-----+	1	3000,0	486	0,01	275	0,001	0,0003	150	0.06	5	15	0,0003	15	22	10	12	0,0003
20	+-----++---+-----+	1,5	3000,0	50	0,01	275	0,001	0,001	15	0.1	0,25	150	0,0003	15	22	3	12	0,001

Bibliografia

Ross, P. J. (1988). Aplicações das Técnicas Taguchi na Engenharia da Qualidade, McGrawHill.

SAS Institute Inc. (1989-2003). JMP 5.0.1.2.

A2. Caso de estudo

Nomenclatura

p_B – pressão parcial do benzeno

p_D – pressão parcial do bifenilo

p_H – pressão parcial do hidrogénio

p_T – pressão parcial do tolueno

r_1 – velocidade de reacção para a primeira reacção

r_2 – velocidade de reacção para a segunda reacção

T - temperatura

Índice de figuras

Figura A2.1 Configuração As	1
Figura A2.2 Configuração ArTB	1
Figura A2.3 Configuração Ae	1
Figura A2.4 Configuração ArTBe	1
Figura A2.5 Configuração Cs	2
Figura A2.6 Configuração CrTB	2
Figura A2.7 Configuração Ce	2
Figura A2.8 Configuração CrTBe	2
Figura A2.9 Configuração CsR	2
Figura A2.10 Configuração CrTBR	2
Figura A2.11 Configuração CeR	3
Figura A2.12 Configuração CrTBeR	3
Figura A2.13 Configuração DrTB	3
Figura A2.14 Configuração DrTBe	3
Figura A2.15 Configuração Es	3
Figura A2.16 Configuração ErTB	3
Figura A2.17 Configuração Ee	4
Figura A2.18 Configuração ErTBe	4
Figura A2.19 Configuração ErTBe2	4
Figura A2.20 Configuração ErTBe3	4
Figura A2.21 Configuração ErTBe4	4
Figura A2.22 Configuração ErTBe5	4
Figura A2.23 Configuração GrTB	5
Figura A2.24 Configuração GrTBe	5
Figura A2.25 Configuração GrTBe2	5
Figura A2.26 Configuração GrTBe3	5
Figura A2.27 Configuração GrTBe4	5
Figura A2.28 Configuração GrTBe5	5
Figura A2.29 Configuração GrTBe6	6
Figura A2.30 Configuração GrTBe7	6

Reacção

As leis de velocidade são função das pressões parciais do tolueno, p_T , hidrogénio, p_H , benzeno, p_B , e bifenilo, p_D e da temperatura (Lei de Arrhenius). O subproduto bifenilo é produzido por uma reacção de equilíbrio (Luyben et al., 1999).

$$r_1 = 3,6858 \times 10^6 \exp(-25\,616/T) p_{T p_H}^{0,5} \quad (\text{A } 2.1)$$

$$r_2 = 5,987 \times 10^4 \exp(-25\,616/T) p_B^2 - 2,553 \times 10^5 \exp(-25\,616/T) p_D p_H \quad (\text{A } 2.2)$$

As reacções homogéneas decorrem a uma temperatura entre 894 K (abaixo desta temperatura a velocidade de reacção é muito baixa) e 978 K (acima desta temperatura ocorre craqueamento em quantidade apreciável), sendo a pressão no reactor de $3,447 \times 10^6$ Pa. É necessário um excesso de hidrogénio (valor sugerido por Douglas (1988) para a razão hidrogénio/aromáticos: 5/1) para evitar a produção de coque e a corrente de saída do reactor tem de ser rapidamente arrefecida a 894 K para evitar novamente a produção de coque, pelo que uma parte da corrente líquida proveniente do separador vapor-líquido é misturada com esta corrente.

Configurações

Grupo A

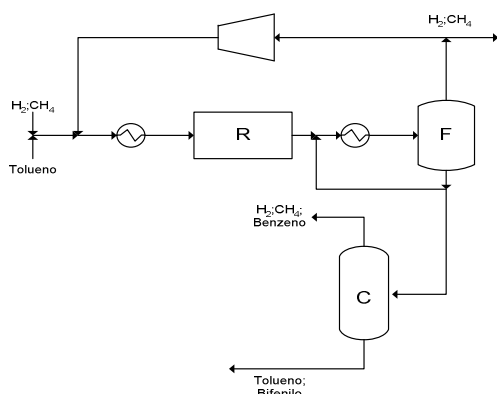


Figura A2.1 Configuração As

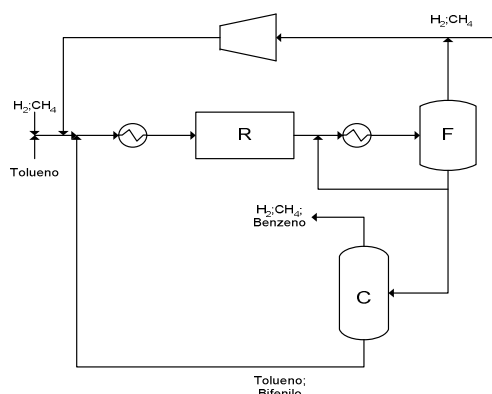


Figura A2.2 Configuração ArTB

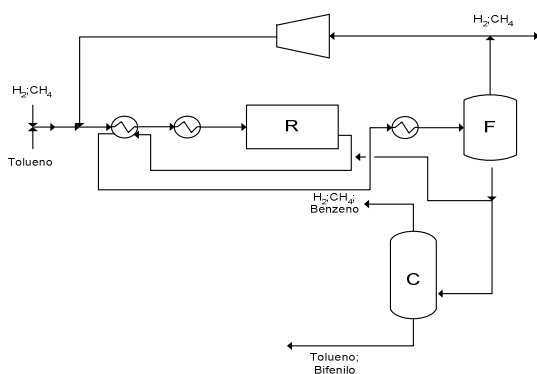


Figura A2.3 Configuração Ae

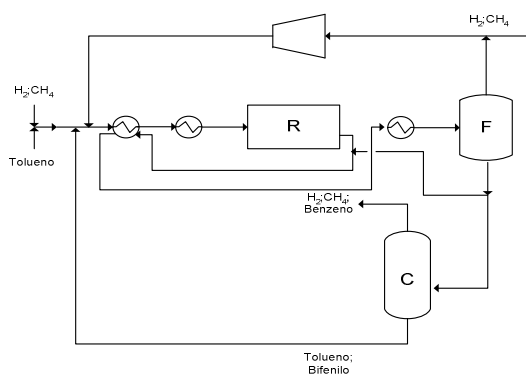


Figura A2.4 Configuração ArTBc

Grupo C

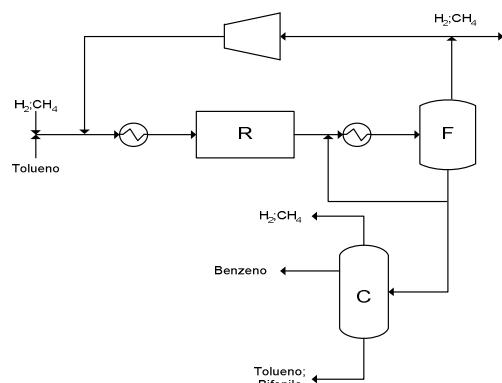


Figura A2.5 Configuração Cs

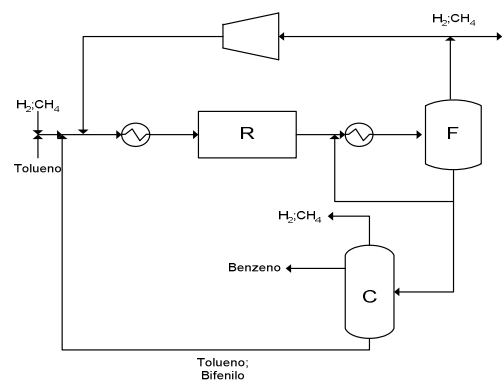


Figura A2.6 Configuração CrTB

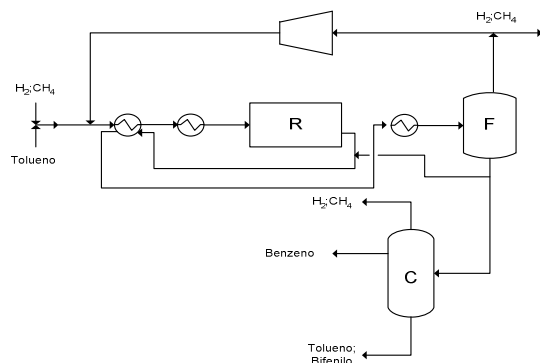


Figura A2.7 Configuração Ce

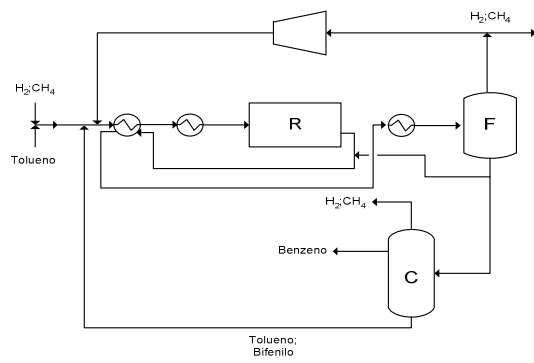


Figura A2.8 Configuração CrTBe

Grupo CR

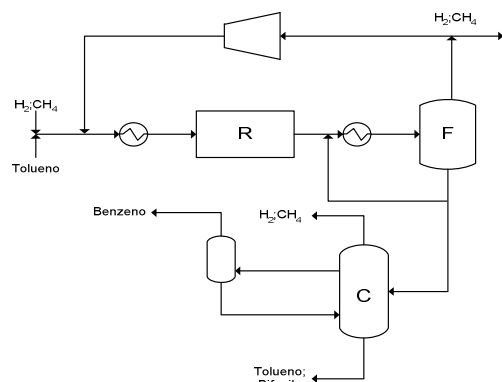


Figura A2.9 Configuração CsR

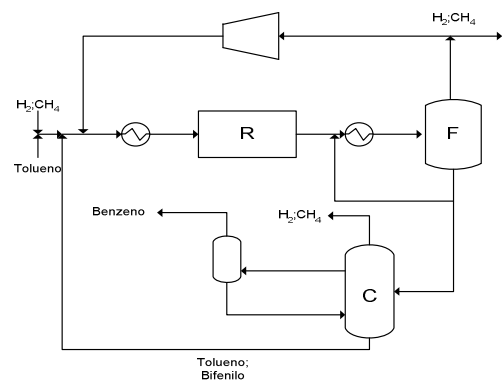


Figura A2.10 Configuração CrTBR

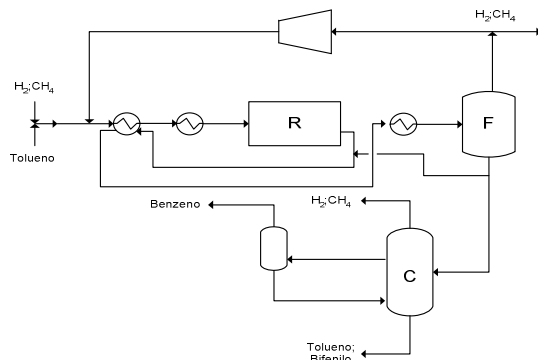


Figura A2.11 Configuração CeR

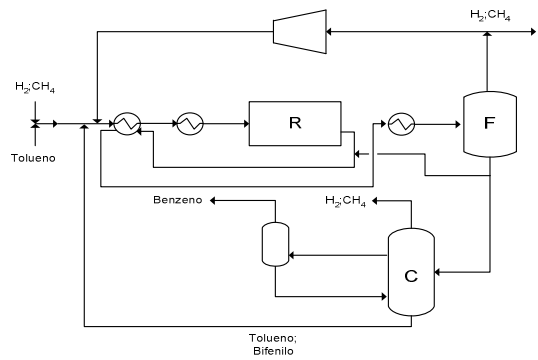


Figura A2.12 Configuração CrTBeR

Grupo DC

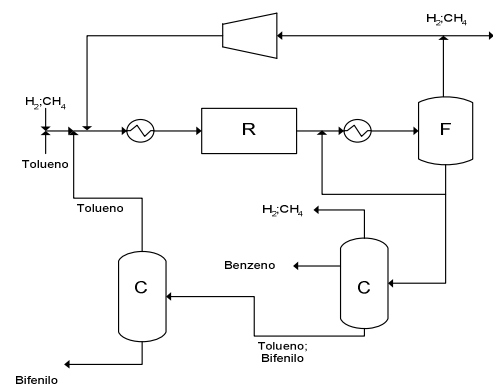


Figura A2.13 Configuração DrTB

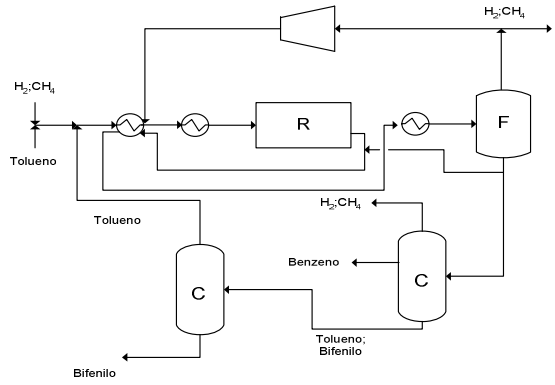


Figura A2.14 Configuração DrTBe

Grupo E

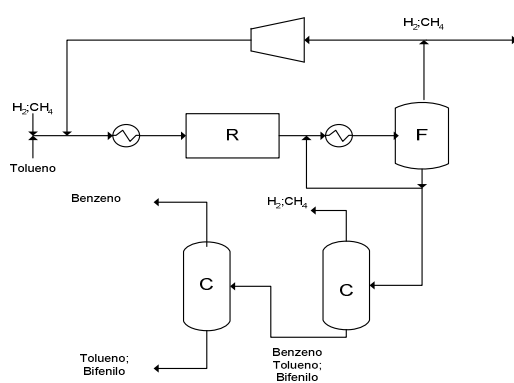


Figura A2.15 Configuração Es

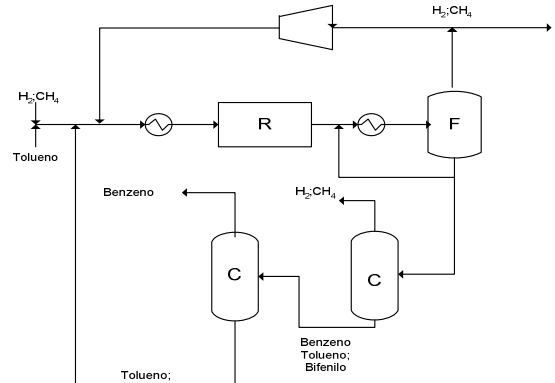


Figura A2.16 Configuração ErTB

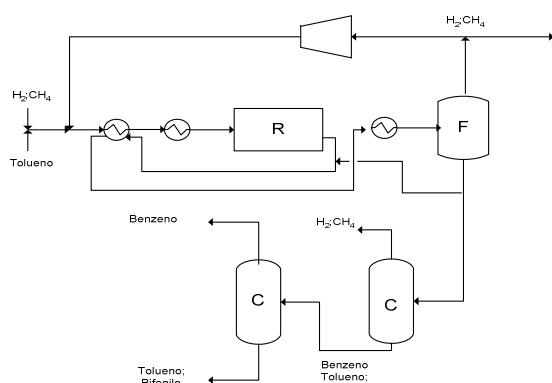


Figura A2.17 Configuração Ee

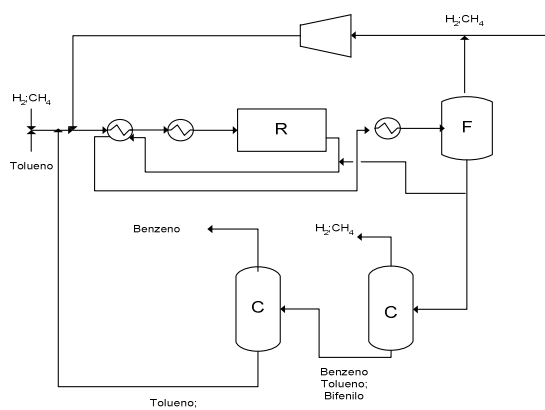


Figura A2.18 Configuração ErTBe

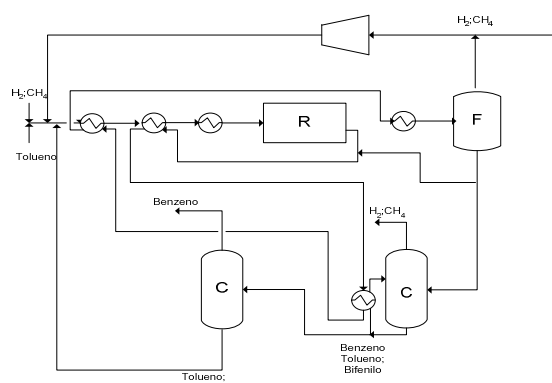


Figura A2.19 Configuração ErTBe2

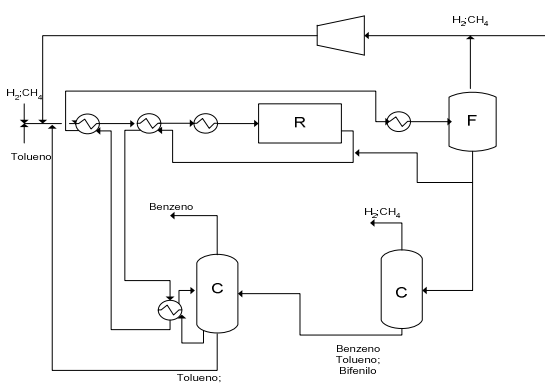


Figura A2.20 Configuração ErTBe3

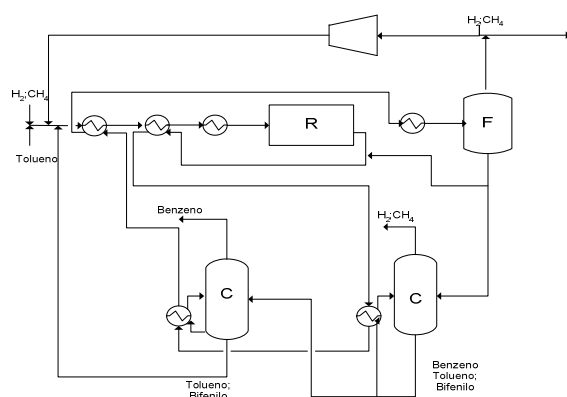


Figura A2.21 Configuração ErTBe4

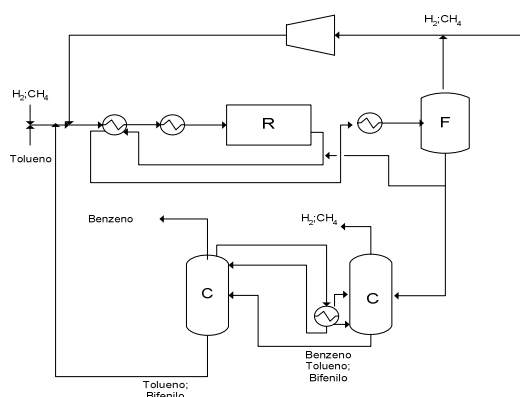


Figura A2.22 Configuração ErTBe5

Grupo G

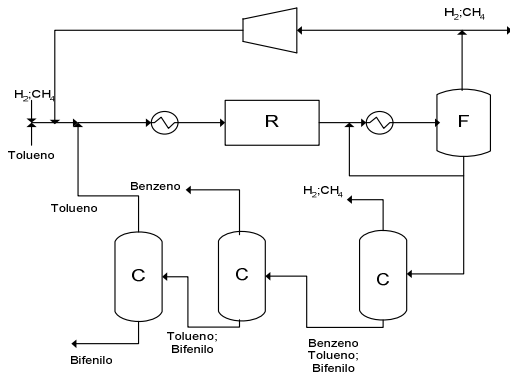


Figura A2.23 Configuração GrTB

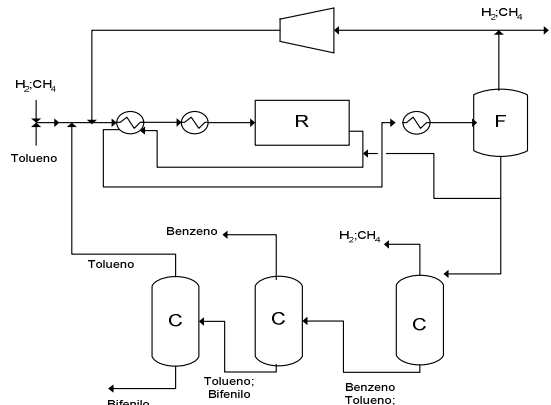


Figura A2.24 Configuração GrTBe

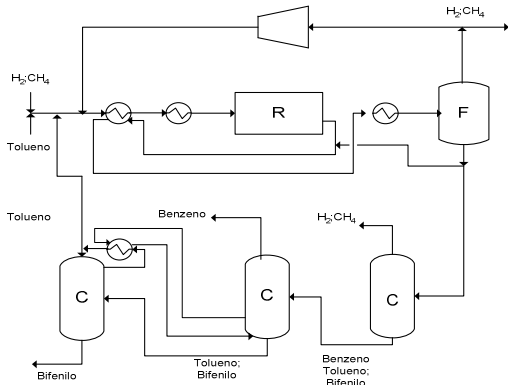


Figura A2.25 Configuração GrTBe2

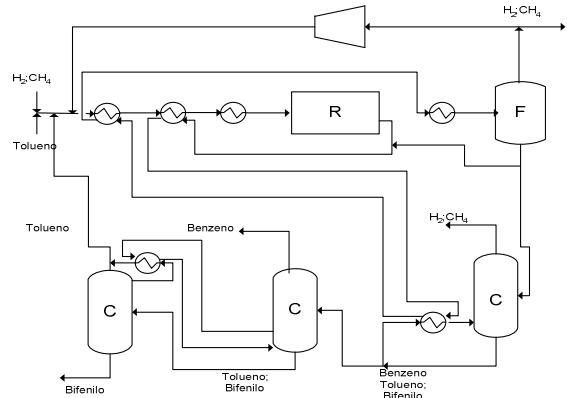


Figura A2.26 Configuração GrTBe3

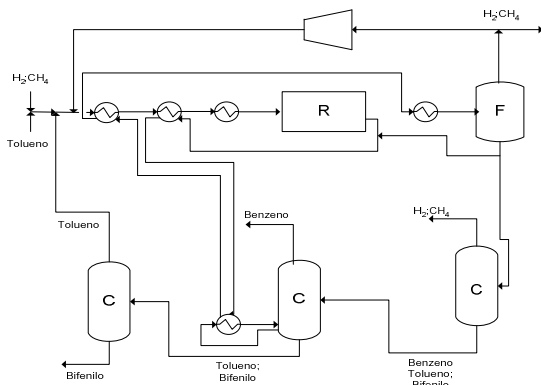


Figura A2.27 Configuração GrTBe4

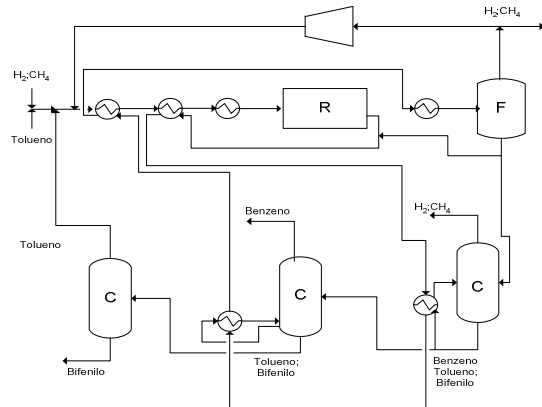


Figura A2.28 Configuração GrTBe5

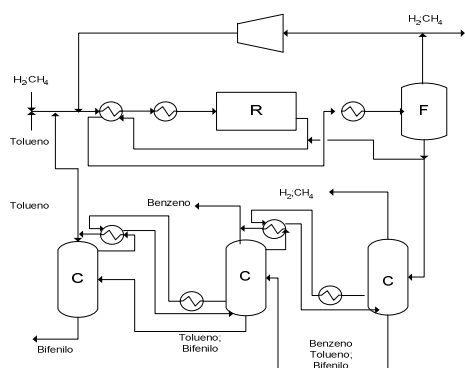


Figura A2.29 Configuração GrTBe6

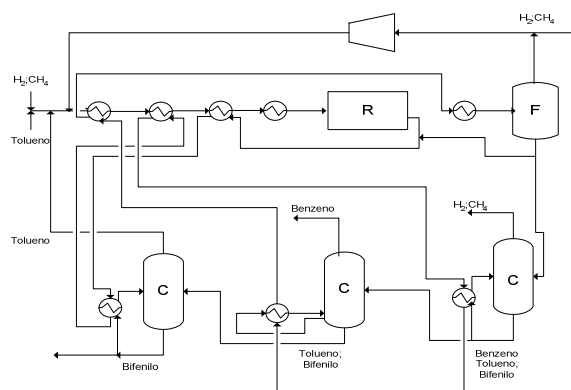
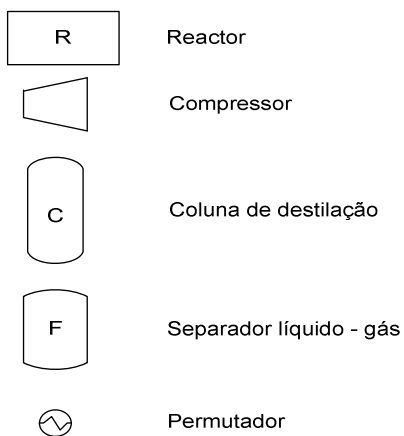


Figura A2.30 Configuração GrTBe7

Legenda:



Bibilografia

Douglas, J. M. (1988). Conceptual Design of Chemical Processes. Singapore, McGraw-Hill Chemical Engineering Series.

Luyben, W. L., Tyréus, B. D. e Luyben, M. L. (1999). Plantwide Process Control. New York, McGraw-Hill.

A3. Avaliação económica

Nomenclatura

A – área	[ft ²]
bhp – potência	[hp]
C ₁ – custo da caldeira	[€]
C ₂ – custo do compressor	[€]
C ₃ – custo do reactor	[€]
C ₄ – custo das colunas	[€]
C ₅ – custo dos permutadores	[€]
C _{eq} – custo do equipamento	[€]
C _n – custo anual total	[€/ano]
d – depreciação linear anual	[€/ano]
D – diâmetro	[ft]
F _c – factor final para cálculo do custo do equipamento	
F _d – factor correspondente à categoria do equipamento	
F _m – factor correspondente ao material do equipamento	
F _p – factor correspondente à pressão de operação do equipamento	
H – altura	[ft]
i – taxa de actualização anual do dinheiro (constante)	
M – massa molecular no fundo da coluna	
NP – número de pratos na coluna	
P _{op} – pressão de operação da coluna	[psia]
Q – calor transferido	[Btu/h]
R – factor de conversão de USD para €	
t – tempo de vida útil do equipamento	[anos]
T _F – temperatura no fundo da coluna	[°F]
T _{c1} – temperatura de entrada do fluido frio	[°F]
T _{c2} – temperatura de saída do fluido frio	[°F]
T _{h1} – temperatura de saída do fluido quente	[°F]
T _{h2} – temperatura de entrada do fluido quente	[°F]
T _v – temperatura do vapor	[°F]
U – coeficiente global de transferência de calor	[Btu/(hft ² °F)]
V – caudal molar de vapor	[lbmol/h]

Letras gregas

ΔT_{lm} – média logarítmica da diferença de temperatura	[°F]
Φ – taxa de impostos	

Acrónimos

M&S – Índice Marshall-Swift

Índice de tabelas

Tabela A 3.1 Calores de combustão	1
Tabela A 3.2 Preços dos diferentes compostos	1
Tabela A 3.3 Custo das matérias-primas	1
Tabela A 3.4 Custo das utilidades.....	2
Tabela A 3.5 Rubricas que contribuem para o cálculo do custo anual total (Peters et al., 2003).....	2
Tabela A 3.6 Coeficientes globais de transferência de calor.....	5
Tabela A 3.7 Determinação do capital total.....	6

Receitas

O preço do benzeno foi calculado tendo por base o valor fornecido pela Galp (373,7 €/t). Para o cálculo do valor equivalente a “fuel” das diferentes correntes foram utilizados os calores de combustão para cada componente e o preço do fuel.

Caso a energia resultante da combustão das correntes utilizadas como combustível, seja excedentária relativamente às necessidades internas, utilização preferencial, supõe-se que é possível a venda a outras empresas dessas correntes. O preço é calculado atendendo ao seu conteúdo energético e ao preço do fuel.

Tabela A 3.1 Calores de combustão

	Benzeno	Bifenilo	Hidrogénio	Metano	Tolueno
Calor de combustão (kcal/mol)	749,42	1494	57,7979	191,759	892,42

Tabela A 3.2 Preços dos diferentes compostos

	Benzeno	Benzeno como fuel	Bifenilo como fuel	Hidrogénio como fuel	Metano como fuel	Tolueno como fuel
Preço €/mol	0,029146	0,010216	0,020367	0,00078794	0,0026142	0,012166

Custos de operação

Matérias-primas

O custo do tolueno foi calculado tendo por base o preço do benzeno e considerando que é rentável produzir o benzeno se o preço deste for superior em 30 cêntimos ao do tolueno expresso em USD/gallon (EPA, 1994). Relativamente ao hidrogénio utilizou-se o valor fornecido pela Galp (147,9 €/t Hidrogénio).

Tabela A 3.3 Custo das matérias-primas

	Tolueno	Hidrogénio¹
Custo €/mol	0,028074	0,00029584

Utilidades²

Para o custo do fuel, da água de arrefecimento, da electricidade e do vapor de baixa, média e alta pressão usaram-se os valores fornecidos pela Galp.

¹ A corrente de hidrogénio contém como impureza metano (3%).

² O consumo de energia eléctrica pelas bombas é pequeno relativamente ao total consumido, pelo que o esse consumo não foi incluído.

Tabela A 3.4 Custo das utilidades

	Fuel	Água de arrefecimento	Electricidade	Vapor de baixa pressão	Vapor de média pressão	Vapor de alta pressão
Custo	0,0032561 €/mol	0,016 €/m ³	0,041 €/kWh	11,46 €/t	12,51 €/t	13,05 €/t

Relativamente à água de arrefecimento o calor específico médio utilizado foi de 4,183 kJ/kg K e a massa volúmica média foi de 995,24 kg/m³.

Custo anual total (C_n)

Tabela A 3.5 Rubricas que contribuem para o cálculo do custo anual total (Peters et al., 2003)

I. Custos de produção	
Matérias-primas	Calculado
Mão de obra	10 – 20 % de C_n
Supervisão	10 – 20 % dos custos da mão de obra
Serviços	Calculado
Manutenção	2 -10 % do capital fixo
Materiais para operação	0,5 -1% capital fixo
Laboratório	10 - 20 % dos custos da mão de obra
Patentes	0 – 6% de C_n
Impostos locais	1 – 4 % do capital fixo
Seguros	0,4 - 1 % do capital fixo
Financiamento	0 – 10 % do capital total
Despesas gerais fabris	5 – 15 % de C_n
II. Despesas gerais	15 – 25 % de C_n

Foi considerado o valor médio para todas estas rubricas.

Custos de capital

Equipamento principal

Para o cálculo do custo do equipamento foram usadas as correlações indicadas por Douglas (1988) e o índice M&S correspondente ao segundo trimestre de 2004 para a categoria designada por “petroleum products” (ChemEng, 2004). Para os permutadores usaram-se os coeficientes globais de transferência de calor calculados a partir dos dados disponíveis na bibliografia para este processo (Krajnc e Glavic, 1995).

Caldeira

$$C_1 = \left(\frac{M \& S}{280} \right) 5,52 \times 10^3 Q^{0,85} F_C R \quad (\text{A 3.1})$$

$$20 \times 10^6 < Q < 300 \times 10^6 \quad (\text{Btu/h})$$

$$F_C = F_d + F_m + F_p$$

De acordo com as opções existentes e aplicáveis ao caso estudado:

$F_d = 1$ (process heater)

$F_m = 0,75$ (stainless)

$F_p = 0,1$ (1000 psia)

$F_C = 1+0,75+0,1 = 1,85$

Compressor

$$C_2 = \left(\frac{M \& S}{280} \right) 517,5 (bhp)^{0,82} F_C R \quad (A\ 3.2)$$

$30 < bhp < 10\ 000$ (horsepower)

$F_C = F_d$

De acordo com as opções existentes e aplicáveis ao caso estudado:

$F_d = 1$ (centrifugal compressor)

$F_C = 1$

Reactor

$$C_3 = \left(\frac{M \& S}{280} \right) 101,9 D^{1,066} H^{0,82} F_C R \quad (A\ 3.3)$$

D, H (ft)

$F_C = F_m \times F_p$

De acordo com as opções existentes e aplicáveis ao caso estudado:

$F_m = 3,67$ (stainless)

$F_p = 1,60$ (600 psia)

$F_C = 5,872$

Coluna

$$C_4 = \left(\frac{M \& S}{280} \right) 101,9 D^{1,066} H^{0,82} F_C R \quad (A\ 3.4)$$

D, H (ft)

$F_C = F_m \times F_p$

De acordo com as opções existentes e aplicáveis ao caso estudado:

$F_m = 3,67$ (stainless)

$F_p = 1,60$ (600 psia)

$F_C = 5,872$

em que:

$$H = 2 \times NP + 15$$

$$A = 2,124 \times 10^{-4} \sqrt{M(T_F + 460) \frac{15}{P_{op}}} V \quad (\text{A 3.5})$$

$$D = \sqrt{\frac{4A}{\pi}}$$

A	área
NP	número de pratos
M	massa molecular no fundo da coluna
T _F	temperatura no fundo da coluna
P _{op}	pressão de operação
V	caudal molar de vapor

Permutadores

$$C_5 = \left(\frac{M \& S}{280} \right) 101,3 A^{1,066} F_C R \quad (\text{A 3.6})$$

$$200 < A < 5\,000 \text{ ft}^2$$

$$F_C = (F_d + F_p) F_m$$

De acordo com as opções existentes e aplicáveis ao caso estudado:

$$F_d = 1,35 \text{ (reebulidores) ou } F_d = 1,00 \text{ (outros)}$$

$$F_m = 3,75 \text{ (stainless)}$$

$$F_p = 0,52 \text{ (800 psia)}$$

$$F_C = 7,0125 \text{ (reebulidores) ou } F_C = 5,7 \text{ (outros)}$$

Os coeficientes de transferência de calor globais são calculados tendo por base os valores apresentados por Krajnc e Glavic (1995). Na tabela A3.6 são indicados os valores usados.

No cálculo da diferença logarítmica média foram utilizadas as seguintes expressões:

- caso geral

$$\Delta T_{lm} = \frac{(T_{h2} - T_{c2}) - (T_{h1} - T_{c1})}{\ln \left(\frac{T_{h2} - T_{c2}}{T_{h1} - T_{c1}} \right)} \quad (\text{A 3.7})$$

- condensadores

$$\Delta T_{lm} = \frac{T_{c2} - T_{c1}}{\ln\left(\frac{T - T_{c1}}{T - T_{c2}}\right)} \quad (\text{A 3.8})$$

- reebulidores

$$\Delta T_{lm} = T_v - T \quad (\text{A 3.9})$$

Tabela A 3.6 Coeficientes globais de transferência de calor

Permutador	Coeficiente global de transferência de calor, U Btu/(hft ² °F)
E2 – arrefecimento anterior ao flash	101,072*
E3 – arrefecimento da corrente de benzeno	114,798*
E4 – Aproveitamento energético imediatamente antes do reactor	30,819*
E5 - Aproveitamento energético energético imediatamente antes de E4	30,819
E6 – Aproveitamento energético - Reebulidor da coluna 1	184,916*
E7 – Aproveitamento energético – Reebulidor da coluna 2	184,916*
E8 – Condensador coluna 2 na permuta reebulidor coluna 1/condensador da coluna 2	159,927*
E9 – Reebulidor coluna 1 na permuta reebulidor coluna 1/condensador da coluna 2	159,927
E10 – Reebulidor coluna 2 na permuta reebulidor coluna 2/condensador da coluna 3	159,927
E11 – Condensador coluna 3 na permuta reebulidor coluna 2/condensador da coluna 3	159,927
E12 – Aproveitamento energético – Reebulidor da coluna 3	184,916
E13 - Aproveitamento energético imediatamente antes de E5	30,819

* Dados retirados directamente da bibliografia

Total

O capital total inclui para além do custo do equipamento muitas outras rubricas, como por exemplo, instrumentação, edifícios, etc., que deverão ser contempladas na determinação do capital total. Para determinar o capital total existem várias metodologias, neste caso seguiu-se a sugerida por (Peters et al., 2003) considerando os vários factores existentes para as diferentes rubricas na determinação do capital total.

De referir que nesta metodologia os diferentes custos são indexados ao custo total do equipamento³. Com base nos custos do equipamento é possível determinar os custos totais de investimento.

Tabela A 3.7 Determinação do capital total

	Percentagem %
Custos directos	
Equipamento entregue	100
instalação do equipamento	47
instrumentação e controlo	36
tubagens (instaladas)	68
instalação eléctrica	11
edifícios (incluindo serviços)	18
arranjos exteriores (arruamentos ,etc.)	10
instalações utilitárias	70
Total custos directos	360
Custos Indirectos	
engenharia e supervisão	33
despesas de construção	41
despesas legais	4
remuneração do contratador	22
contingência	44
Total custos indirectos	144
Capital fixo	504
Capital para operação (cerca de 15% do capital total)	89
Total	593

4

Depreciação

Considerou-se que o valor do equipamento decresce linearmente com o tempo ao longo do tempo de recuperação. O valor residual nestas condições é zero. Para este método, o período de recuperação para fábricas químicas é de 9,5 anos pelo que se considerou 10 anos (Peters et al., 2003).

$$d = \frac{C_{eq}}{t} \quad (A\ 3.10)$$

d – depreciação linear anual

C_{eq} – custo do equipamento

t – tempo de vida útil do equipamento

A taxa de actualização anual, i, considerada foi de 15% e a taxa relativa a impostos, Φ , de 34%.

³ De referir que as bombas e o *flash* não foram incluídos na determinação do custo total de equipamento, porque o seu custo é pequeno em relação ao custo dos restantes equipamentos.

⁴ Os dados da tabela A3.7 foram extraídos do Peters et al. (2003) e são relativos a uma fábrica que processa fluidos; estão referidos a equipamento entregue enquanto as correlações são apenas para compra, pelo que se considerou para o custo da entrega 10% do custo de compra do equipamento, como indicado no Peters et al. (2003).

Bibliografia

ChemEng (2004). "Economic Indicators." **August**: 72.

Douglas, J. M. (1988). Conceptual Design of Chemical Processes. Singapore, McGraw-Hill Chemical Engineering Series.

EPA (1994). "Locating and estimating air emissions from sources of toluene."

Krajnc, M. e Glavic, P. (1995). "The influence of different temperature contributions on heat integrated structure." Trans IChemE **73**(Part A).

Peters, M. S., Timmerhaus, K. D. e West, R. E. (2003). Plant Design and Economics for Chemical Engineers. Boston, McGraw-Hill.

A4. Avaliação ambiental

Nomenclatura

E – caudal mássico de compostos orgânicos voláteis emitido [kg/h]
f – factor de emissão médio [kg/h/fonte]
 m_{cov} – fracção mássica de cov's na corrente que utiliza o equipamento

Índice de figuras

Figura A 4.1 Análise do ciclo de vida – inventário	1
Figura A 4.2 Produção de benzeno -inventário	2
Figura A 4.3 Fluxograma da hidrodealquilação do benzeno.....	3

Índice de tabelas

Tabela A 4.1 Inventário da hidrodealquilação do benzeno	4
Tabela A 4.2 Indexação de equipamento ao número de bombas	5
Tabela A 4.3 Factores de emissão para equipamento	5
Tabela A 4.4 Emissões para o ar	6
Tabela A 4.5 Factores de emissão para a queima do fuel na caldeira	6
Tabela A 4.6 Factores de emissão para a produção de vapor e energia eléctrica	6
Tabela A 4.7 Categorias de impactos	7
Tabela A 4.8 Valores normalizados para os compostos de interesse	7
Tabela A 4.9 Índices para os diferentes elementos.....	8

Introdução

A análise do ciclo de vida envolve três etapas:

- 1- inventário dos resíduos, emissões e utilização de matérias-primas e energia associados a todo o ciclo de vida de um produto desde a extracção das matérias-primas até ao destino final;
- 2- uma avaliação dos impactos ambientais associados aos resíduos, emissões e utilização de matérias-primas e energia;
- 3- uma análise para melhoria onde se elaboram/sugerem mecanismos para reduzir os impactos ambientais adversos (Allen e Rosselot, 1997).

O inventário a realizar poderá ter por base o esquema da Figura A 4.1.

O objectivo, contudo, não é proceder a uma análise de ciclo de vida mas sim a uma avaliação dos impactos directamente decorrentes da produção de benzeno (hidrodealquilação do tolueno) para cada configuração e conjunto de valores para as variáveis a ela associados.

A atenção focar-se-á, portanto, numa única etapa (Figura A 4.2)

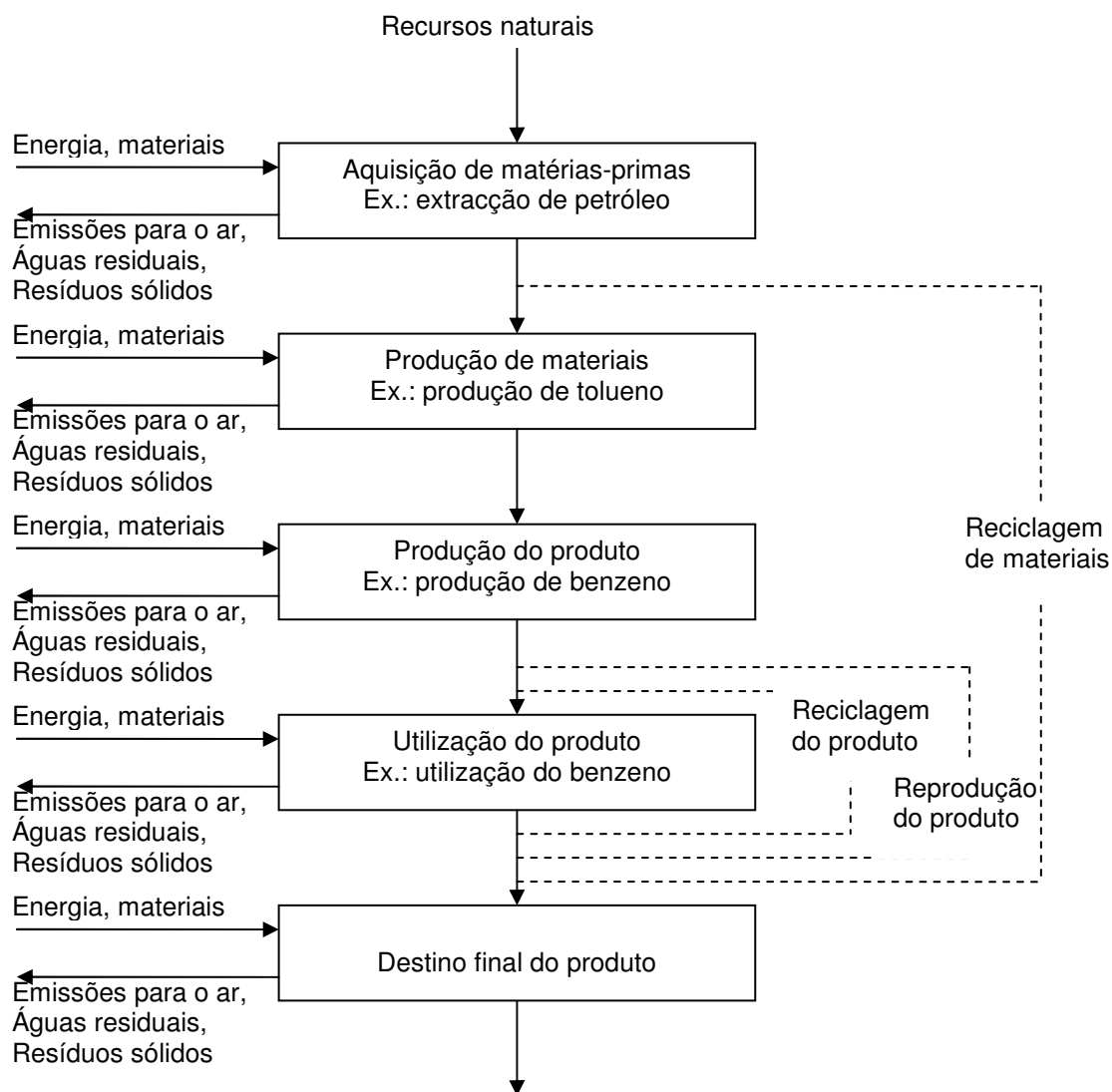


Figura A 4.1 Análise do ciclo de vida – inventário

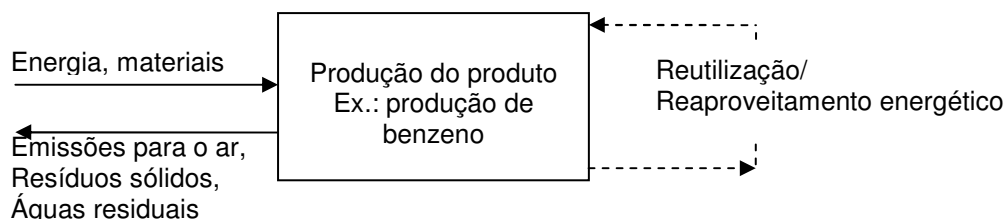


Figura A 4.2 Produção de benzeno -inventário

Para efectuar uma avaliação de impactos ambientais é necessário:

- seleccionar as categorias de impactos, indicadores de categoria e modelos;
- classificar as diferentes substâncias/compostos inventariados em cada categoria;
- caracterizar, isto é, calcular o resultado do indicador para cada categoria;
- normalizar, isto é, calcular a magnitude do indicador relativamente a um valor de referência,
- agregar, as várias categorias; poderão ser agrupadas tendo em conta, por exemplo, o tipo de dano causado: na saúde humana, no ecossistema, etc.;
- ponderar, isto é, atribuir um determinado peso a cada uma das categorias ou grupo de categorias mediante a importância de cada uma delas;
- avaliar os resultados.

De referir que os três primeiros passos são obrigatórios quando se procede a uma avaliação de impactos ambientais no âmbito de uma análise de ciclo de vida segundo a norma ISO14042:2000. Os restantes passos são opcionais.

Inventário

O processo de hidrodealquilação pode ser esquematizado da seguinte forma:

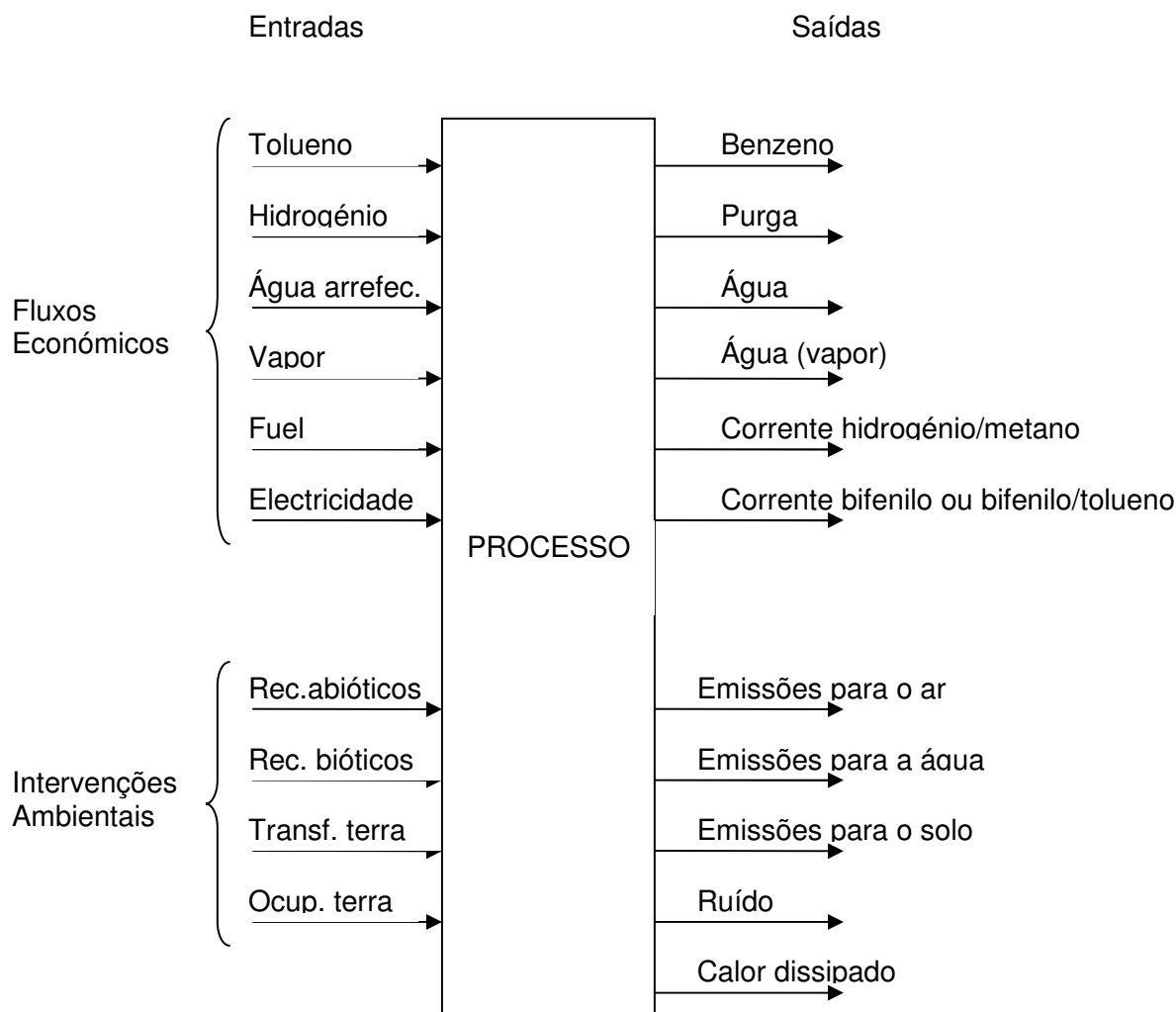


Figura A 4.3 Fluxograma da hidrodealquilação do benzeno

De referir que no documento de referência, no âmbito da IPPC, para este tipo de indústria (European Commission, Fevereiro 2003) refere-se que para este processo não existem emissões significativas para a água e para o solo, pelo que não serão consideradas. Relativamente ao ruído e ao calor não é possível nesta fase dispor de dados sobre esse assuntos pelo que também não serão considerados.

Assim para esta etapa poder-se-á construir uma tabela que reflecta o inventário a realizar:

Tabela A 4.1 Inventário da hidrodealquilação do benzeno

	Classe	Unidade
Energia	Carvão Fuel Gás Hidroeléctrica Nuclear Outra	MJ
Matérias- primas	Tolueno Hidrogénio	kg
Emissões para o ar	Benzeno Bifenilo Hidrogénio Metano Tolueno Dióxido de carbono Água Dióxido de enxofre Óxidos de azoto PM ₁₀	kg

De realçar que se considerou não existirem emissões directas para o ambiente, as emissões existentes são fugitivas ou emissões que resultam da queima como combustível de correntes secundárias que existem no processo, considerando então a combustão completa de todos os constituintes dessas correntes, o que constitui uma simplificação. As emissões fugitivas são descargas não intencionais do processo provenientes do equipamento. Qualquer equipamento que pode potencialmente ter fugas, nomeadamente, bombas, flanges, válvulas, é uma fonte de emissões fugitivas; uma refinaria ou indústria petroquímica pode ter cerca de 250 000 unidades do equipamento referido, tornando impraticável a medição das emissões em cada fonte, sendo que neste caso como se está ainda na fase de projecto seria de qualquer das formas impossível fazer essas medições.

Para estimar as emissões fugitivas existem vários métodos mas para este caso o mais adequado é aquele que utiliza factores de emissão. De acordo com o método desenvolvido pela US EPA torna-se necessário contar todas as potenciais fontes de fugas e aplicar um factor de emissão médio de acordo com a fórmula:

$$E = m_{\text{cov}} f \quad (\text{A } 4.1)$$

em que

E – caudal emitido de cov's por um equipamento (kg/h)

m_{cov} – fracção mássica de cov's na corrente que utiliza o equipamento

f – factor de emissão médio

Para a determinação do número de fontes consideraram-se diagramas de projecto e de instrumentação de unidades fabris semelhantes e a metodologia sugerida por (InfoMil, 2000) (Tabela A 4.2). Esta metodologia conduziu a um maior número de fontes (situação mais desfavorável).

Na Tabela A4.3 apresentam-se os valores para os factores de emissão para cada equipamento, de acordo com o tipo de fluido em serviço e para a Indústria da Síntese de compostos químicos orgânicos (Allen e Rosselot, 1997).

Tabela A 4.2 Indexação de equipamento ao número de bombas

Equipamento	Rácio para uma bomba
Bombas	1
Válvulas	32
Falanges	135
Válvulas de segurança	1
Open-end lines	1,5

Tabela A 4.3 Factores de emissão para equipamento

Emissões fugitivas			
Equipamento	Número	Tipo	Emissão g/h/fonte
Vedantes de Bombas	1	Líquido leve	19,9 (L)
		Líquido pesado	8,62
		Líquido	-
Válvulas	32	Hidrocarboneto gasoso	5,97
		Líquido leve	4,03
		Líquido pesado	0,23
		Hidrogénio	-
		Todos	-
Flanges	135	Todos	1,83
Válvulas de segurança	1	Hidrocarboneto gasoso	104
		Líquido	7
		Todos	-
Openend lines	1,5	Todos	1,7

Com base no número de fontes estimado, nos factores de emissão e nos caudais de alimentação a utilizar estimou-se que as emissões fugitivas serão de 0,02% do caudal de cada corrente existente, considerando a situação mais desfavorável.

As emissões para o ar podem ser classificadas em três grupos de acordo com a sua origem Tabela A 4.4.

Tabela A 4.4 Emissões para o ar

Emissões	Compostos	Local	Causa
Fugitivas	Benzeno, Bifenilo, Hidrogénio, Metano, Tolueno	Na instalação	Fugas
Subprodutos	Dióxido de carbono, Água	Na instalação ou noutras unidades	Emissões resultantes da queima da purga
	Dióxido de carbono, Água	Na instalação ou noutras unidades	Emissões resultantes da queima da corrente da corrente de topo da primeira coluna
	Dióxido de carbono, Água	Na instalação ou noutras unidades	Emissões resultantes da queima da corrente de saída de bifenilo ou bifenilo/tolueno
Energia	Dióxido de carbono, Dióxido de enxofre, Óxidos de azoto, PM ₁₀	Na instalação ou noutras unidades	Emissões resultantes da queima do fuel na caldeira, produção de vapor e produção de energia eléctrica

Para calcular as emissões resultantes da queima do fuel utilizaram-se os valores publicados pela Comissão Europeia (IER, Novembro 1997), indicados na tabela seguinte.

Tabela A 4.5 Factores de emissão para a queima do fuel na caldeira

Composto	Factores de emissão
CO ₂	858 kg/MWh
SO ₂	1,207 kg/MWh
NO _x	0,814 kg/MWh
PM ₁₀	0,018 kg/MWh

Para a determinação das emissões resultantes da produção de vapor e de energia eléctrica consideraram-se os valores publicados pela Comissão Europeia (Martins et al., Janeiro 1998), indicados na tabela que se segue.

Tabela A 4.6 Factores de emissão para a produção de vapor e energia eléctrica

Composto	Factores de emissão
CO ₂	690,4 kg/MWh
SO ₂	0,794 kg/MWh
NO _x	1,892 kg/MWh
PM ₁₀	0,258 kg/MWh

Categorias de impactos

As categorias de impactos que foram consideradas estão indicadas na tabela seguinte.

Tabela A 4.7 Categorias de impactos

Categorias de impactos	Escala	Modelo	Compostos de referência	Compostos emitidos ou necessários (inventário)
Mudanças climáticas	Global	Guinée	CO ₂	CO ₂ CH ₄
Acidificação	Regional Local	Guinée	SO ₂	NO _x SO ₂
Eutrofização	Local	Guinée	PO ₄ ³⁻	NO _x
Formação fotoquímica de compostos	Local	Guinée	etileno	C ₆ H ₆ ; CH ₄ C ₇ H ₈ ; SO ₂
Saúde humana/Cancerígenos	Local	ICHEME	benzeno	C ₆ H ₆
Depleção de recursos	Global Regional Local	Guinée	antimônio	Fuel

Caracterização e normalização

Dada a importância de se obter um único valor para os impactos ambientais foi necessário proceder à normalização adoptando para isso a estratégia do WAR (Young e Cabezas, 1999), isto é dividir o valor de cada composto pelo valor médio determinado a partir do total de compostos considerados para aquela categoria Tabela A 4.8.

Tabela A 4.8 Valores normalizados para os compostos de interesse

Subs.	Mudanças climáticas	Acidificação	Eutrofização	Formação fotoquímica de compostos	Saúde humana/Cancerígenos	Depleção de recursos	Utilização energia PEI/MWh
C ₆ H ₆				0,454069834	0,011856		
C ₁₀ H ₁₂							
H ₂							
CH ₄	0,005159162			0,012497335			
C ₇ H ₈				1,326800387			
CO ₂	0,000245674						
NO _x		0,664031621	0,207311089				
SO ₂		0,948616601		0,099978679			
PM ₁₀							
Crude						1,49x10 ⁻²⁰	
Energia							2,650778 ¹

²

¹ Este valor foi calculado considerando pesos iguais a 1

² Os valores dos indicadores para os diferentes compostos foram retirados da bibliografia (Guinée 2002, ICHEME)

Ponderação

Dado não haver nenhum local escolhido para a implantação da fábrica considerou-se que o peso das diferentes categorias era igual e, portanto, o peso atribuído a cada categoria é igual a 1.

Poderá ser efectuada uma análise de sensibilidade, determinando qual a importância dos pesos usados na ponderação. No entanto, a análise de sensibilidade pode ser substituída pela aplicação de uma abordagem orientada para o ponto final, como o Eco-indicator 99 ou o sistema EPS (Guinée, 2002).

Sistema EPS

Os índices do sistema EPS para os diferentes elementos são apresentados na tabela seguinte.

Tabela A 4.9 Índices para os diferentes elementos

Elemento	Impacto Ambiental Potencial ELU/kg
Benzeno	3,65
Bifenilo	0
Metano	2,72
Tolueno	1,95
Dióxido de carbono	0,108
NOx	2,13
Dióxido de enxofre	3,27
PM10	36
Crude	0,506

Bibliografia

Allen, D. T. e Rosselot, K. S. (1997). Pollution Prevention for Chemical Processes. New York, John Wiley & Sons, Inc.

European_Commission (Fevereiro 2003). Integrated Pollution Prevention and Control (IPPC). Reference Document on Best Available Techniques in the Large Volume Organic Chemical Industry.

Guinée, J. B. (2002). Handbook on life cycle assessment. Operational guide to the ISO standards. Dordrecht, Kluwer Academic Publishers.

IER (Novembro 1997). ExternE National Implementation Germany.

InfoMil (2000). DUTCH NOTES ON BAT FOR THE LARGE VOLUME ORGANIC CHEMICAL INDUSTRY.

Martins, A., Fernandes, M., Rodrigues, V. e Ramos, T. (Janeiro 1998). The National Implementation in the EU of the Externe accounting Framework.

Young, D. M. e Cabezas, H. (1999). "Designing sustainable processes with simulation: the waste reduction (WAR) algorithm." Computers and Chemical Engineering **23**: 1477-1491.

A5. Resultados

Nomenclatura

IAPG - Impacto ambiental potencial global

IAPG_EPS - Impacto ambiental potencial global mediante metodologia EPS

VAL1 - Valor Actualizado Líquido

VAL2 - Valor Actualizado Líquido com inclusão dos custos dos impactos ambientais
EPS

Índice de tabelas

Tabela A 5.1 Resultado para a configuração As (1, 2, 3 e 4 ^a séries)	2
Tabela A 5.2 Resultado para a configuração Ae (1, 2, 3 e 4 ^a séries)	2
Tabela A 5.3 Resultado para a configuração ArTB (1, 2, 3 e 4 ^a séries).....	2
Tabela A 5.4 Resultado para a configuração ArTBe (1, 2, 3 e 4 ^a séries).....	2
Tabela A 5.5 Resultado para a configuração Cs (1, 2, 3 e 4 ^a séries)	3
Tabela A 5.6 Resultado para a configuração Ce (1, 2, 3 e 4 ^a séries)	3
Tabela A 5.7 Resultado para a configuração CrTB (1, 2, 3 e 4 ^a séries)	3
Tabela A 5.8 Resultado para a configuração CrTBe (1, 2, 3 e 4 ^a séries)	3
Tabela A 5.9 Resultado para a configuração CR (1, 2, 3 e 4 ^a séries)	4
Tabela A 5.10 Resultado para a configuração CRe (1, 2, 3 e 4 ^a séries).....	4
Tabela A 5.11 Resultado para a configuração CrTBR (1, 2, 3 e 4 ^a séries).....	5
Tabela A 5.12 Resultado para a configuração CrTBeR (1, 2, 3 e 4 ^a séries).....	5
Tabela A 5.13 Resultado para a configuração DrTB (1, 2, 3 e 4 ^a séries)	6
Tabela A 5.14 Resultado para a configuração DrTBe (1, 2, 3 e 4 ^a séries)	6
Tabela A 5.15 Resultado para a configuração Es (1, 2, 3 e 4 ^a séries)	7
Tabela A 5.16 Resultado para a configuração Ee (1, 2, 3 e 4 ^a séries)	7
Tabela A 5.17 Resultado para a configuração ErTB (1, 2, 3 e 4 ^a séries).....	8
Tabela A 5.18 Resultado para a configuração ErTBe (1, 2, 3 e 4 ^a séries).....	8
Tabela A 5.19 Resultado para a configuração ErTBe2 (1, 2, 3 e 4 ^a séries).....	9
Tabela A 5.20 Resultado para a configuração ErTBe3 (1, 2, 3 e 4 ^a séries).....	9
Tabela A 5.21 Resultado para a configuração ErTBe4 (1, 2, 3 e 4 ^a séries).....	10
Tabela A 5.22 Resultado para a configuração ErTBe5 (1, 2, 3 e 4 ^a séries).....	10
Tabela A 5.23 Resultado para a configuração GrTB (1, 2, 3 e 4 ^a séries)	11
Tabela A 5.24 Resultado para a configuração GrTBe (1, 2, 3 e 4 ^a séries)	11
Tabela A 5.25 Resultado para a configuração GrTBe2 (1, 2, 3 e 4 ^a séries)	12
Tabela A 5.26 Resultado para a configuração GrTBe3 (1, 2, 3 e 4 ^a séries)	12
Tabela A 5.27 Resultado para a configuração GrTBe4 (1, 2, 3 e 4 ^a séries)	13
Tabela A 5.28 Resultado para a configuração GrTBe5 (1, 2, 3 e 4 ^a séries)	13
Tabela A 5.29 Resultado para a configuração GrTBe6 (1, 2, 3 e 4 ^a séries)	14
Tabela A 5.30 Resultado para a configuração GrTBe7 (1, 2, 3 e 4 ^a séries)	14
Tabela A 5.31 Resultado para as configurações do grupo A (5 ^a série)	16
Tabela A 5.32 Resultado para as configurações do grupo C (5 ^a série)	16
Tabela A 5.33 Resultado para as configurações do grupo CR (5 ^a série).....	17
Tabela A 5.34 Resultado para as configurações do grupo DC (5 ^a série).....	17
Tabela A 5.35 Resultado para as configurações do grupo E (5 ^a série)	18
Tabela A 5.36 Resultado para as configurações do grupo E (5 ^a série)	18
Tabela A 5.37 Resultado para as configurações do grupo G (5 ^a série)	19
Tabela A 5.38 Resultado para as configurações do grupo G (5 ^a série)	19
Tabela A 5.39 Resultado para as configurações do grupo A (6 ^a série)	21
Tabela A 5.40 Resultado para as configurações do grupo C (6 ^a série)	21
Tabela A 5.41 Resultado para as configurações do grupo CR (6 ^a série).....	22
Tabela A 5.42 Resultado para as configurações do grupo DC (6 ^a série).....	22
Tabela A 5.43 Resultado para as configurações do grupo E (6 ^a série)	23
Tabela A 5.44 Resultado para as configurações do grupo E (6 ^a série)	23
Tabela A 5.45 Resultado para as configurações do grupo G (6 ^a série)	24
Tabela A 5.46 Resultado para as configurações do grupo G (6 ^a série)	24

Resultados das séries 1, 2, 3 e 4¹

¹ Nas tabelas que se seguem é indicada a pureza da corrente de benzeno para os diferentes ensaios e séries.

Tabela A 5.1 Resultado para a configuração As (1, 2, 3 e 4ª séries)

As				
Ensaio	Série1	Série 2	Série 3	Série 4
1	0,927	0,906	0,917	0,927
2		0,986	0,990	0,992
3		0,899	0,924	0,943
4				
5		0,984	0,989	0,991
6	0,848	0,848	0,859	0,866
7				
8				
9				
10	0,891	0,877	0,886	0,891
11				
12	0,908	0,891	0,899	0,908

Tabela A 5.3 Resultado para a configuração ArTB (1, 2, 3 e 4ª séries)

ArTB				
Ensaio	Série1	Série 2	Série 3	Série 4
1	0,812	0,745	0,777	0,812
2		0,928	0,964	
3				
4				
5		0,908	0,959	0,970
6	0,588	0,588	0,575	0,566
7	0,857	0,857	0,908	0,927
8				
9	0,928	0,901	0,918	0,928
10	0,651	0,633	0,642	0,651
11				
12	0,755	0,704	0,721	0,755

Tabela A 5.2 Resultado para a configuração Ae (1, 2, 3 e 4ª séries)

Ae				
Ensaio	Série1	Série 2	Série 3	Série 4
1	0,924	0,906	0,916	0,924
2		0,986	0,990	0,992
3		0,899	0,924	0,943
4				
5		0,984	0,989	0,991
6	0,845	0,845	0,859	0,866
7				
8				
9				
10	0,891	0,877	0,886	0,891
11				
12	0,912	0,894	0,902	0,912

Tabela A 5.4 Resultado para a configuração ArTBe (1, 2, 3 e 4ª séries)

ArTBe								
Ensaio	Série1		Série 2		Série 3		Série 4	
1			0,675					
2								
3								
4								
5					0,963		1	0,970
6	0,533		0,533		0,466			0,468
7	0,819		0,819		0,889			0,915
8								
9	0,912		0,865		0,896			0,912
10	0,582		0,563		0,557			0,582
11								
12	0,684	2	0,625		0,639		2	0,684

Tabela A 5.5 Resultado para a configuração Cs (1, 2, 3 e 4ª séries)

Cs				
Ensaio	Série1	Série 2	Série 3	Série 4
1				
2		0,978	0,972	0,985
3		0,748	0,749	0,764
4				
5				
6				
7				
8				
9				
10	0,483	0,536	0,504	0,483
11				
12				

Tabela A 5.7 Resultado para a configuração CrTB (1, 2, 3 e 4ª séries)

CrTB				
Ensaio	Série1	Série 2	Série 3	Série 4
1		0,684		
2		0,955	0,972	0,978
3			0,727	
4				
5				
6				
7	0,365	0,365		
8	0,989	0,988	0,988	0,989
9				
10	0,693	0,696	0,693	0,693
11				
12				

Tabela A 5.6 Resultado para a configuração Ce (1, 2, 3 e 4ª séries)

Ce				
Ensaio	Série1	Série 2	Série 3	Série 4
1				
2		0,980	0,974	0,989
3			0,748	
4				
5				
6				
7				
8				
9				
10	0,481	0,540	0,501	0,481
11				
12				

Tabela A 5.8 Resultado para a configuração CrTBe (1, 2, 3 e 4ª séries)

CrTBe				
Ensaio	Série1	Série 2	Série 3	Série 4
1				
2				
3				
4				
5				
6				
7				
8	0,988	0,986	0,987	0,988
9				
10	0,656	0,647	0,647	0,656
11				
12				

Tabela A 5.9 Resultado para a configuração CR (1, 2, 3 e 4ª séries)

CsR				
Ensaio	Série1	Série 2	Série 3	Série 4
1				
2				
3	0,944	0,944	0,951	0,954
4				
5				
6		0,999	0,999	0,999
7				0,946
8				
9				
10	0,997	0,996	0,996	0,997
11				
12	0,991	0,990	0,991	0,991
13	1,000			1,000
14				
15				
16				

Tabela A 5.10 Resultado para a configuração CRe (1, 2, 3 e 4ª séries)

CRe				
Ensaio	Série1	Série 2	Série 3	Série 4
1				
2				
3	0,945	0,945	0,951	0,954
4				
5				
6		0,999	0,999	0,999
7				0,945
8				
9				
10	0,997 1	0,996 1	0,996 1	0,997 1
11				
12	0,991	0,990	0,991	0,991
13	1,000 1			1,000 1
14				
15				
16				

Tabela A 5.11 Resultado para a configuração CrTBR (1, 2, 3 e 4ª séries)

CrTBR				
Ensaio	Série1	Série 2	Série 3	Série 4
1		0,993	0,993	0,992
2				
3	0,855	0,855	0,905	0,922
4				
5	0,994	0,994	0,996	0,996
6		0,999	0,999	0,999
7			0,866	
8				
9				
10	0,991	0,988	0,990	0,991
11				
12	0,980	0,971	0,976	0,980
13				
14	0,992	0,993	0,991	0,992
15	0,999	0,999	0,999	0,999
16	0,973	0,965	0,970	0,973

Tabela A 5.12 Resultado para a configuração CrTBeR (1, 2, 3 e 4ª séries)

CrTBeR				
Ensaio	Série1	Série 2	Série 3	Série 4
1				0,993 1
2				
3			0,905	0,920
4				
5	0,994	0,994	0,996	0,996
6			0,999 1	0,999
7				
8				
9				
10	0,992	0,989	0,991	0,992
11				
12	0,979	0,970	0,975	0,979
13				
14	0,992	0,989	0,991	0,992
15	0,999	0,998	0,998	0,999
16		0,964	0,971	

Tabela A 5.13 Resultado para a configuração DrTB (1, 2, 3 e 4ª séries)

DrTB				
Ensaio	Série1	Série 2	Série 3	Série 4
1				0,992
2				
3				
4				
5				
6		0,772		0,777
7		0,806	0,801	0,888
8	0,955	0,955	0,966	0,969
9				
10				
11				
12				
13				
14				
15	0,854	0,850	0,852	0,854
16				

Tabela A 5.14 Resultado para a configuração DrTBe (1, 2, 3 e 4ª séries)

DrTBe				
Ensaio	Série1	Série 2	Série 3	Série 4
1				
2				
3				
4				
5				
6				
7		0,803	1	0,885
8			0,961	0,967
9				
10				
11				
12				
13				
14				
15	0,831	0,810	0,821	0,831
16				

Tabela A 5.15 Resultado para a configuração Es (1, 2, 3 e 4ª séries)

Es				
Ensaio	Série1	Série 2	Série 3	Série 4
1				
2				
3				0,991
4				
5				
6				
7		0,999	0,999	0,999
8				
9				
10				
11	1,000	1,000	1,000	1,000
12				
13				
14	0,990		0,990	0,990
15				
16	0,999	0,999	0,999	0,999

Tabela A 5.16 Resultado para a configuração Ee (1, 2, 3 e 4ª séries)

Ee				
Ensaio	Série1	Série 2	Série 3	Série 4
1				
2				
3	0,989	0,989		
4				
5				
6				
7		0,999 2		0,999
8				
9				
10				
11	1,000	1,000	1,000	1,000
12				
13				
14				
15				
16		0,999	0,999	

Tabela A 5.17 Resultado para a configuração ErTB (1, 2, 3 e 4ª séries)

ErTB				
Ensaio	Série1	Série 2	Série 3	Série 4
1				
2	0,999	0,999	0,999	0,999
3	0,987	0,987	0,980	0,978
4				
5	0,959	0,959	0,969	
6				
7				
8				
9	0,999		0,999	0,999
10				
11	1,000	1,000	1,000	1,000
12				
13				
14	0,972		0,971	0,972
15				
16	0,999	0,999	0,999	0,999

Tabela A 5.18 Resultado para a configuração ErTBe (1, 2, 3 e 4ª séries)

ErTBe				
Ensaio	Série1	Série 2	Série 3	Série 4
1				
2	0,999	0,999	0,999	0,999
3				0,977
4				
5				
6				
7				
8				
9	0,999		0,999	0,999
10				
11			1,000	
12				
13				
14	0,970	0,966	0,968	0,970
15				
16	0,999	0,999		0,999

Tabela A 5.19 Resultado para a configuração ErTBe2 (1, 2, 3 e 4ª séries)

ErTBe2				
Ensaio	Série1	Série 2	Série 3	Série 4
1				
2			0,999	0,999
3				0,978
4				
5				
6				
7				
8				
9	0,999			0,999
10				
11	1,000		1,000	1,000
12				
13				
14	0,971			0,971
15				
16	0,999	0,999		0,999

Tabela A 5.20 Resultado para a configuração ErTBe3 (1, 2, 3 e 4ª séries)

ErTBe3				
Ensaio	Série1	Série 2	Série 3	Série 4
1				
2			0,999	0,999
3				0,978
4				
5				
6				
7				
8				
9	0,999		0,999	0,999
10				
11	1,000		1,000	1,000
12				
13				
14	0,973		0,973	0,973
15				
16	0,999	0,999		0,999

Tabela A 5.21 Resultado para a configuração ErTBe4 (1, 2, 3 e 4ª séries)

ErTBe4				
Ensaio	Série1	Série 2	Série 3	Série 4
1				
2			0,999	0,999
3				0,978
4				
5				
6				
7				
8				
9	0,999		0,999	0,999
10				
11	1,000		1,000	1,000
12				
13				
14	0,973		0,973	0,973
15				
16	0,999	0,999		0,999

Tabela A 5.22 Resultado para a configuração ErTBe5 (1, 2, 3 e 4ª séries)

ErTBe5							
Ensaio	Série1		Série 2		Série 3		Série 4
1							
2	0,999	1	0,999	1	0,999	1	0,999 1
3					0,990	1	0,990 1
4							
5					0,998	1	0,999 1
6							
7							
8							
9	0,999	1	0,999	1	0,999	1	0,999 1
10							
11	1,000	1	1,000	1	1,000	1	1,000 1
12							
13							
14	0,999	1			0,999	1	0,999 1
15	1,000	1					1,000 1
16	0,999	1			0,999	1	0,999 1

Tabela A 5.23 Resultado para a configuração GrTB (1, 2, 3 e 4ª séries)

GrTB Ensaio	Série1	Série 2	Série 3	Série 4
1				
2				
3				
4	0,997	0,997	0,997	0,997
5				
6				
7				
8				
9				
10	0,999	0,999	0,999	0,999
11				
12				
13				
14	0,988		0,987	0,988
15				
16				
17				
18		0,999	1	0,999
19				
20				

Tabela A 5.24 Resultado para a configuração GrTBe (1, 2, 3 e 4ª séries)

GrTBe Ensaio	Série1	Série 2	Série 3	Série 4
1				
2				
3				
4	0,997	1	0,997	1
5				
6				
7				
8				
9				
10				
11				
12				
13				
14				
15				
16				
17				
18				
19				
20				

Tabela A 5.25 Resultado para a configuração GrTBe2 (1, 2, 3 e 4ª séries)

GrTBe2	
Ensaio	
Série1	Série 2
Série 3	Série 4
1	0,999 1
2	
3	
4	
5	
6	0,985 2
7	
8	
9	
10	
11	0,999 1 0,999 1 0,999 1
12	
13	0,998 0,998 0,998 0,998
14	
15	
16	
17	
18	
19	
20	

Tabela A 5.26 Resultado para a configuração GrTBe3 (1, 2, 3 e 4ª séries)

GrTBe3						
Ensaio	Série1		Série 2		Série 3	Série 4
1	0,999	1	0,999	1		0,999 1
2						
3						
4						
5						
6						0,986 2
7						
8						
9						
10						
11						
12						
13						0,998
14						
15						
16						
17						
18						
19						
20						

Tabela A 5.27 Resultado para a configuração GrTBe4 (1, 2, 3 e 4ª séries)

GrTBe4				
Ensaio	Série1	Série 2	Série 3	Série 4
1				
2				
3				
4	0,997	0,997	0,997	0,997
5				
6				
7				
8				
9				
10				
11				
12				
13				
14				
15				
16				
17				
18				
19				
20				

Tabela A 5.28 Resultado para a configuração GrTBe5 (1, 2, 3 e 4ª séries)

GrTBe5				
Ensaio	Série1	Série 2	Série 3	Série 4
1				
2				
3				
4	0,997	0,997	0,997	0,997
5				
6				
7				
8				
9				
10				
11				
12				
13				
14				
15				
16				
17				
18				
19				
20				

Tabela A 5.29 Resultado para a configuração GrTBe6 (1, 2, 3 e 4ª séries)

GrTBe6				
Ensaio	Série1	Série 2	Série 3	Série 4
1				
2				
3				
4				
5				
6				
7				
8				
9				
10				
11				
12				
13				1,000 1
14				
15				
16		0,999 1		
17				
18				
19				
20		0,998 1	0,998 1	

Tabela A 5.30 Resultado para a configuração GrTBe7 (1, 2, 3 e 4ª séries)

GrTBe7				
Ensaio	Série1	Série 2	Série 3	Série 4
1				
2				
3				
4				
5				
6				
7				
8				
9				
10				
11				
12				
13				
14				
15				
16				
17				
18				
19				
20				

Resultados da série 5²

² Nas tabelas que se seguem é indicada a pureza da corrente de benzeno para os diferentes ensaios e séries

Tabela A 5.31 Resultado para as configurações do grupo A (5ª série)

Ensaio	As	Ae	ArTB	ArTBe
1			0,801	
2				
3				
4				
5				
6	0,844	0,841	0,588	
7	0,940	0,941	1 0,763	0,703
8	0,946	0,948	1 0,843	
9	0,982	0,981	1 0,914	0,895
10	0,857	0,857	0,617	0,553
11	0,854	0,854	0,607	
12	0,878	0,885	0,722	0,642 1

Tabela A 5.32 Resultado para as configurações do grupo C (5ª série)

Ensaio	Cs	Ce	CrTB	CrTBe	C
1					
2					
3					
4				0,955	
5					
6					
7					
8			0,821	0,540	
9					
10			0,715	0,624	
11			0,853		
12					

Tabela A 5.33 Resultado para as configurações do grupo CR (5ª série)

Ensaio	CsR	CRe	CrTBR	CrTBRe
1				
2				
3				
4				
5	0,997	0,997	1	
6				
7				
8				
9				
10	0,996	0,996	1	
11				
12				
13				
14	0,962	1	0,963	1
15				
16				

Tabela A 5.34 Resultado para as configurações do grupo DC (5ª série)

Ensaio	DrTB	DrTBe
1		
2		
3		
4		
5		
6		
7		
8	0,971	
9		
10		
11		
12	0,757	
13	0,987	
14		
15		
16		

Tabela A 5.35 Resultado para as configurações do grupo E (5ª série)

Ensaio	Es	Ee	ErTB	ErTBe
1				
2			0,976	
3			0,983	
4				
5	0,992		0,992	
6				
7				
8				
9			0,788	1
10			0,989	1
11			0,995	1
12				
13				
14	0,902		0,902	
15			0,892	0,870
16			0,996	1 0,992 1

Tabela A 5.36 Resultado para as configurações do grupo E (5ª série)

Ensaio	ErTBe2	ErTBe3	ErTBe4	ErTBe5
1				
2				
3				
4				
5				
6				
7				
8				
9		0,819	1	0,819 1
10		0,992	1	0,991 1 0,988 1
11	0,990	1	0,993	1 0,993 1 0,990 1
12				
13				
14		0,898	0,898	
15	0,875	0,875	0,875	0,883 1
16	0,997	1	0,996	1 0,997 1 0,995 1

Tabela A 5.37 Resultado para as configurações do grupo G (5ª série)

Ensaio	GrTB		GrTBe		GrTBe2		GrTBe3	
1	0,995	1	0,996	1	0,992	1	0,996	1
2								
3								
4	0,844							
5	0,951	1	0,961	1				
6								
7								
8								
9								
10	0,976	1						
11	0,854	1						
12	0,858		0,851					
13	0,902		0,900	1				
14	0,906							
15			0,989	1				
16	0,947		0,969					
17	0,990		0,991					
18								
19								
20	0,992		0,993	1				

Tabela A 5.38 Resultado para as configurações do grupo G (5ª série)

Ensaio	GrTBe4		GrTBe5		GrTBe6		GrTBe7	
1	0,996	1	0,996	1				
2								
3								
4								
5	0,952	1	0,961	1				
6								
7								
8								
9								
10								
11								
12	0,851		0,851					
13	0,900		0,900					
14								
15	0,989	1	0,989	1				
16	0,970		0,970					
17	0,990		0,990					
18								
19								
20	0,991		0,993					

Resultados da série 6³

³ Nas tabelas que se seguem é indicada a pureza da corrente de benzeno para os diferentes ensaios e séries

Tabela A 5.39 Resultado para as configurações do grupo A (6ª série)

Ensaio	As	Ae	ArTB	ArTBe
1			0,801	
2	0,992	0,992	0,972	
3	0,944	0,944		
4				
5	0,988	0,992	0,965	
6	0,861	0,861	0,564	0,472
7	0,939		0,814	0,785
8	0,946	0,948	1 0,843	
9	0,982	0,981	1 0,914	0,895
10	0,857	0,857	0,617	0,553
11	0,876	0,876	0,675	0,605
12	0,878	0,885	0,722	0,642 1

Tabela A 5.40 Resultado para as configurações do grupo C (6ª série)

Ensaio	Cs	Ce	CrTB	CrTBe
1				
2				
3		0,999		
4				0,955
5				
6				
7				
8			0,821	0,540
9				
10			0,715	0,624
11			0,787	0,711
12				

Tabela A 5.41 Resultado para as configurações do grupo CR (6ª série)

Ensaio	CsR		CeR	CrTBR		CrTBRe
1						
2						
3						
4						
5	0,996		0,996	1	0,982	
6						
7						
8						
9						
10	0,996		0,996	1		
11						
12						
13						
14	0,962	1	0,963	1	0,898	1
15						
16						

Tabela A 5.42 Resultado para as configurações do grupo DC (6ª série)

Ensaio	DrTB	DrTBe
1	0,982	
2		
3		
4		
5		
6	0,980	0,967
7		
8	0,973	0,966
9		
10		
11		
12	0,757	
13	0,987	
14		
15		
16		

Tabela A 5.43 Resultado para as configurações do grupo E (6ª série)

Ensaio	Es	Ee	ErTB	ErTBe
1				
2			0,983 1	0,979
3			0,981	0,979
4	0,996	0,997		
5		0,989	0,989	
6			0,992	
7				
8				
9			0,788 1	
10			0,989 1	
11			0,995 1	
12				
13				
14	0,902		0,902	
15			0,892	0,870
16			0,996 1	0,992 1

Tabela A 5.44 Resultado para as configurações do grupo E (6ª série)

Ensaio	ErTBe2	ErTBe3	ErTBe4	ErTBe5
1				
2				
3	0,982	0,979	0,982	
4				
5		0,989	0,989	
6				
7				
8				
9		0,819 1	0,819 1	
10		0,992 1	0,991 1	0,988 1
11	0,990 1	0,993 1	0,993 1	0,990 1
12				
13				
14		0,898	0,898	
15	0,875	0,875	0,875	0,883 1
16	0,997 1	0,996 1	0,997 1	0,995 1

Tabela A 5.45 Resultado para as configurações do grupo G (6ª série)

Ensaio	GrTB	GrTBe	GrTBe2	GrTBe3
1	0,995	1	0,996	1
2				
3				
4	0,844			
5	0,951	1	0,961	1
6	0,986		0,986	
7				
8	0,966		0,993	
9				
10	0,976	1		
11	0,873	1	0,888	1
12	0,858		0,851	
13			0,888	1
14	0,906			
15			0,989	1
16	0,947		0,969	
17	0,990		0,991	
18				
19	0,999	1	0,999	1
20	0,992		0,993	1

Tabela A 5.46 Resultado para as configurações do grupo G (6ª série)

Ensaio	GrTBe4	GrTBe5	GrTBe6	GrTBe7
1	0,996	1	0,996	1
2				
3				
4				
5	0,952	1	0,961	1
6	0,984		0,986	
7				
8	0,996		0,996	
9				
10				
11				
12	0,851		0,851	
13	0,878		0,889	
14				
15	0,989	1	0,989	1
16	0,970		0,970	
17	0,990		0,990	
18				
19				
20	0,991		0,993	

- 1 Infracção de restrições de temperatura
2 Não cumpre o $\Delta T_{\min} = 5 \text{ K}$

B1. Recozimento simulado

Nomenclatura

C_M	valor mais desfavorável encontrado para a função objectivo	[€]
Desvio	desvio percentual calculado em relação ao melhor valor encontrado para VAL2	
F_c	factor para determinação da temperatura inicial, baseado no valor mais desfavorável para a função objectivo	
IAPG	impacto ambiental potencial global	
IAPG-EPS	impacto ambiental potencial global (metodologia EPS)	[ELU/ano]
K	número de ciclos	
N_{it}	número da iteração	
N_{suc}	número de sucessos	
N_v	número de iterações em cada ciclo	
P_t	percentagem de iterações efectuadas sem haver alteração da solução	
Pureza	pureza da corrente de benzeno	
Suc0,99	numero de soluções em que a pureza da corrente de benzeno é superior a 0,99	
U_s	número da iteração correspondente ao último sucesso	
VAL1	valor actualizado líquido sem inclusão dos custos dos impactos ambientais EPS	[€]
VAL2	valor actualizado líquido com inclusão dos custos dos impactos ambientais EPS	[€]
vc (1)	caudal de hidrogénio	[mol/s]
vc (2)	caudal de metano	[mol/s]
vc (3)	pressão do flash	[Pa]
vc (4)	fracção molar de benzeno na purga	
vc (5)	caudal da purga	[mol/s]
vc (6)	volume do reactor	[m ³]
vc (7)	fracção molar de tolueno da coluna 2	
vc (8)	fracção molar de benzeno da coluna 2	
vc (9)	pressão da coluna 2	[Pa]
vc (10)	fracção molar de benzeno da coluna 1	
vc (11)	razão de refluxo da coluna 1	
vc (12)	pressão da coluna 1	[Pa]
vc (13)	fracção molar de bifenilo da coluna 3	
vc (14)	pressão da coluna 3	[Pa]
vc (15)	número de pratos da coluna 1	
vc (16)	número de pratos da coluna 2	
vc (17)	número de pratos rectificador	
vc (18)	número de pratos da coluna 3	
vc (19)	fracção molar de tolueno da coluna 3	
vc (20)	fracção molar de tolueno no rectificador	
vc (21)	caudal fixo da coluna 2	[mol/s]

Letras gregas

α	constante do protocolo de arrefecimento

Índice de tabelas

Tabela B 1.1 Ensaios de optimização para escolha dos parâmetros SA – varrimento inicial	1
Tabela B 1.2 Ensaios de optimização para escolha dos parâmetros SA – após selecção dos valores de F_c e α	2
Tabela B 1.3 Ensaios de optimização para escolha dos parâmetros SA – Solução inicial variável	3
Tabela B 1.4 Ensaios de optimização para escolha dos parâmetros SA – número de ciclos igual a 50 e solução inicial variável	3
Tabela B 1.5 Percentagem de iterações em que não houve alteração da solução durante as optimizações	4
Tabela B 1.6 Resultados para a configuração A, função objectivo VAL1	1.6
Tabela B 1.7 Resultados para a configuração Ae, função objectivo VAL1	1.7
Tabela B 1.8 Resultados para a configuração E, função objectivo VAL1	1.8
Tabela B 1.9 Resultados para a configuração Ee, função objectivo VAL1	1.9
Tabela B 1.10 Resultados para a configuração GrTBe, função objectivo VAL1	1.10
Tabela B 1.11 Resultados para a configuração A, função objectivo VAL2	1.11
Tabela B 1.12 Resultados para a configuração Ae, função objectivo VAL2	1.12
Tabela B 1.13 Resultados para a configuração E, função objectivo VAL2	1.13
Tabela B 1.14 Resultados para a configuração Ee, função objectivo VAL2	1.14
Tabela B 1.15 Resultados para a configuração GrTBe, função objectivo VAL2	1.15
Tabela B 1.16 Resultados para a configuração A, função objectivo IAPG	1.16
Tabela B 1.17 Resultados para a configuração Ae, função objectivo IAPG	1.17
Tabela B 1.18 Resultados para a configuração E, função objectivo IAPG	1.18
Tabela B 1.19 Resultados para a configuração Ee, função objectivo IAPG	1.19
Tabela B 1.20 Resultados para a configuração GrTBe, função objectivo IAPG	1.20
Tabela B 1.21 Resultados para a configuração A, função objectivo IAPG-EPS	1.21
Tabela B 1.22 Resultados para a configuração Ae, função objectivo IAPG-EPS	1.22
Tabela B 1.23 Resultados para a configuração E, função objectivo IAPG-EPS	1.23
Tabela B 1.24 Resultados para a configuração Ee, função objectivo IAPG-EPS	1.24
Tabela B 1.25 Resultados para a configuração GrTBe, função objectivo IAPG-EPS	1.25

Parâmetros

Para estudar e seleccionar os parâmetros usou-se a configuração A e a função objectivo VAL2.

Tabela B 1.1 Ensaio de optimização para escolha dos parâmetros SA – varrimento inicial

	Fc	α	N_v	K	VAL2	Pureza	Suc0,99	Nsuc	Desvio
S. final Melhor S.	0,01	0,9	18	16	-2,10x10 ⁸	0,959	0	5	8,0
S. final Melhor S.	0,01	0,9	18	26	-2,04x10 ⁸	0,953	0	8	4,8
S. final Melhor S.	0,01	0,9	28	16	-2,04x10 ⁸	0,927	0	2	4,5
S. final Melhor S.	0,01	0,9	28	26	-1,96x10 ⁸	0,938	0	11	0,8
S. final Melhor S.	0,01	0,95	18	16	-2,12x10 ⁸	0,926	0	3	8,7
S. final Melhor S.	0,01	0,95	18	26	-2,02x10 ⁸	0,959	0	9	3,8
S. final Melhor S.	0,01	0,95	28	16	-1,95x10 ⁸	0,945	0	6	0,0
S. final Melhor S.	0,01	0,95	28	26	-2,03x10 ⁸	0,950	0	10	4,2
S. final Melhor S.	0,1	0,9	18	16	-2,16x10 ⁸	0,955	0	32	10,8
S. final Melhor S.	0,1	0,9	18	26	-2,29x10 ⁸	0,977	0	36	17,3
S. final Melhor S.	0,1	0,9	28	16	-2,04x10 ⁸	0,947	0	51	4,9
S. final Melhor S.	0,1	0,9	28	26	-2,20x10 ⁸	0,959	0	38	12,9
S. final Melhor S.	0,1	0,95	18	16	-2,94x10 ⁸	0,973	0	57	51,0
S. final Melhor S.	0,1	0,95	18	26	-2,18x10 ⁸	0,975	0	58	11,8
S. final Melhor S.	0,1	0,95	28	16	-3,25x10 ⁸	0,885	0	44	66,9
S. final Melhor S.	0,1	0,95	28	26	-2,12x10 ⁸	0,971	0	74	8,8

Em que $T_0 = F_c * C_M$

Depois da analisada a tabela anterior prosseguiram-se os ensaios escolhendo 0,1 para o valor de Fc e 0,9 para α porque parecem ser os valores mais favoráveis, atendendo aos valores de VAL2 e ao número de sucessos.

Tabela B 1.2 Ensaio de optimização para escolha dos parâmetros SA – após selecção dos valores de Fc e α

	Fc	α	Nv	K	VAL2	Pureza	Suc0,99	Nsuc	Desvio
S. final	0,1	0,9	18	16	-2,23x10 ⁸	0,984	0	39	14,2
Melhor S.					-1,97x10 ⁸	0,943			0,9
S. final	0,1	0,9	18	16	-2,42x10 ⁸	0,955	0	32	24,4
Melhor S.					-2,04x10 ⁸	0,917			4,8
S. final	0,1	0,9	18	21	-2,14x10 ⁸	0,975	0	44	10,1
Melhor S.					-2,06x10 ⁸	0,955			5,5
S. final	0,1	0,9	18	21	-2,09x10 ⁸	0,969	0	19	7,3
Melhor S.					-2,06x10 ⁸	0,943			5,6
S. final	0,1	0,9	18	26	-2,00x10 ⁸	0,958	0	26	2,4
Melhor S.					-2,00x10 ⁸	0,958			2,4
S. final	0,1	0,9	18	26	-2,02x10 ⁸	0,948	0	36	3,9
Melhor S.					-2,02x10 ⁸	0,948			3,9
S. final	0,1	0,9	28	16	-2,51x10 ⁸	0,956	0	44	28,6
Melhor S.					-1,96x10 ⁸	0,942			0,8
S. final	0,1	0,9	28	16	-2,77x10 ⁸	0,947	0	63	42,0
Melhor S.					-2,08x10 ⁸	0,971			6,8
S. final	0,1	0,9	28	21	-2,05x10 ⁸	0,942	0	48	5,0
Melhor S.					-2,05x10 ⁸	0,942			5,0
S. final	0,1	0,9	28	21	-2,02x10 ⁸	0,951	0	63	3,8
Melhor S.					-2,02x10 ⁸	0,951			3,8
S. final	0,1	0,9	28	26	-2,04x10 ⁸	0,944	0	45	4,8
Melhor S.					-2,02x10 ⁸	0,957			3,6
S. final	0,1	0,9	28	26	-2,02x10 ⁸	0,945	0	57	3,6
Melhor S.					-1,98x10 ⁸	0,945			1,6

Concluiu-se da tabela anterior que os parâmetros devem ter os seguintes valores, uma vez que correspondem a melhores valores para VAL2:

Fc = 0,1

α = 0,9

Nv = 18 = 2 x número de variáveis

K = 26

Na tabela seguinte apresentam-se os resultados com os valores seleccionados para os parâmetros e fazendo variar a solução inicial.

Tabela B 1.3 Ensaios de optimização para escolha dos parâmetros SA – Solução inicial variável

	Fc	α	Nv	K	VAL2	Pureza	Suc0,99	Nsuc	Desvio
S. final	0,1	0,9	18	26	-2,13x10 ⁸	0,925	0	21	9,1
Melhor S.					-2,05x10 ⁸	0,932			4,9
S. final	0,1	0,9	18	26	-1,99x10 ⁸	0,923	0	32	2,3
Melhor S.					-1,99x10 ⁸	0,923			2,3

Comparando os resultados da tabela B1.3 com os resultados das optimizações da tabela B1.2, que consideram os mesmos valores para os parâmetros Fc, α , Nv e K conclui-se que os resultados não são dependentes da solução inicial.

Fizeram-se ainda mais algumas optimizações aumentando o número de ciclos para 50 e alterando o valor de Fc para 1 para verificar se os resultados melhorariam significativamente.

Tabela B 1.4 Ensaios de optimização para escolha dos parâmetros SA – número de ciclos igual a 50 e solução inicial variável

	Fc	α	Nv	K	VAL2	Pureza	Suc0,99	Nsuc	Desvio
S. final	0,1	0,9	18	50	-2,03E+0 ⁸	0,929	0	30	3,2
Melhor S.					-2,01E+0 ⁸	0,945			4,4
S. final	0,1	0,9	18	50	-2,01x10 ⁸	0,958	0	27	2,9
Melhor S.					-2,01x10 ⁸	0,958			2,9
S. final	0,1	0,9	18	50	-2,00x10 ⁸	0,954	1	43	2,9
Melhor S.					-2,00x10 ⁸	0,954			2,9
S. final	1	0,9	18	50	-2,00x10 ⁸	0,933	1	201	2,5
Melhor S.					-1,97x10 ⁸	0,943			0,9
S. final	1	0,9	18	50	-2,29x10 ⁸	0,949	2	220	17,7
Melhor S.					-2,02x10 ⁸	0,945			3,7

Da tabela anterior concluiu-se que aumentando a temperatura inicial e o número de ciclos para 50 os resultados não melhoraram significativamente, aliás algumas optimizações realizadas com Fc = 0,1 e K = 26 produziram melhores soluções.

De seguida é apresentada uma tabela que mostra o número da iteração, Nit, em que houve alteração da solução (novo sucesso) e a percentagem de iterações efectuadas sem haver alteração da solução, Pt, para as optimizações que consideraram Fc = 0,1, α = 0,9 e Nv = 18 e K = 26 ou K = 50 (as 4 primeiras optimizações efectuaram 26 ciclos – 468 iterações e as três últimas efectuaram 50 ciclos – 900 iterações). Desta tabela é possível concluir que se fosse considerado um critério de convergência que parasse a optimização se não houvesse alteração da solução durante cerca de 40% do número total de iterações, duas das três optimizações que efectuaram 50 ciclos parariam antes de completar os 50 ciclos. Para estas duas optimizações o último sucesso foi atingido antes de completarem o vigésimo sexto ciclo. De referir que as soluções das optimizações que efectuaram 50 ciclos, incluindo a que não pararia com o critério de convergência, não são melhores que todas as outras encontradas quando o número de ciclos é igual a 26.

Tabela B 1.5 Percentagem de iterações em que não houve alteração da solução durante as otimizações

1ª		2ª		3ª		4ª		1ª		2ª		3ª	
otimização		otimização		otimização		otimização		otimização		otimização		otimização	
K = 26 ciclos								K = 50 ciclos					
Nit	Pt %	Nit	Pt %	Nit	Pt %	Nit	Pt %	Nit	Pt %	Nit	Pt %	Nit	Pt %
3	0,4	2	0,2	5	0,9	11	2,1	2	0,1	3	0,2	2	0,1
4	0,2	7	1,1	8	0,6	12	0,2	11	1,0	10	0,8	5	0,3
7	0,6	11	0,9	18	2,1	13	0,2	23	1,3	12	0,2	7	0,2
8	0,2	13	0,4	42	5,1	22	1,9	39	1,8	13	0,1	8	0,1
10	0,4	21	1,7	91	10,5	25	0,6	41	0,2	14	0,1	18	1,1
15	1,1	25	0,9	105	3,0	40	3,2	42	0,1	15	0,1	20	0,2
20	1,1	33	1,7	106	0,2	42	0,4	44	0,2	17	0,2	21	0,1
24	0,9	35	0,4	119	2,8	43	0,2	56	1,3	18	0,1	29	0,9
26	0,4	37	0,4	122	0,6	55	2,6	88	3,6	21	0,3	48	2,1
35	1,9	54	3,6	123	0,2	68	2,8	89	0,1	24	0,3	76	3,1
97	13,2	58	0,9	134	2,4	70	0,4	94	0,6	27	0,3	92	1,8
99	0,4	59	0,2	138	0,9	71	0,2	97	0,3	32	0,6	101	1,0
115	3,4	60	0,2	148	2,1	74	0,6	98	0,1	42	1,1	137	4,0
116	0,2	62	0,4	158	2,1	79	1,1	101	0,3	44	0,2	159	2,4
126	2,1	64	0,4	172	3,0	84	1,1	105	0,4	56	1,3	169	1,1
141	3,2	65	0,2	184	2,6	86	0,4	107	0,2	57	0,1	178	1,0
191	10,7	70	1,1	250	14,1	87	0,2	109	0,2	58	0,1	192	1,6
195	0,9	81	2,4	270	4,3	90	0,6	132	2,6	60	0,2	204	1,3
223	6,0	87	1,3	282	2,6	91	0,2	133	0,1	61	0,1	208	0,4
233	2,1	88	0,2	347	13,9	93	0,4	148	1,7	67	0,7	211	0,3
238	1,1	90	0,4	355	1,7	95	0,4	150	0,2	76	1,0	248	4,1
276	8,1	107	3,6		24,1	97	0,4	153	0,3	78	0,2	259	1,2
280	0,9	110	0,6			145	10,3	159	0,7	81	0,3	275	1,8
328	10,3	120	2,1			174	6,2	162	0,3	85	0,4	371	10,7
366	8,1	141	4,5			219	9,6	169	0,8	103	2,0	379	0,9
453	18,6	143	0,4			244	5,3	185	1,8	105	0,2	400	2,3
	3,2	146	0,6			245	0,2	259	8,2	111	0,7	452	5,8
		158	2,6			256	2,4	260	0,1	112	0,1		49,8
		161	0,6			274	3,8	264	0,4	118	0,7		
		202	8,8			328	11,5	387	13,7	131	1,4		
		203	0,2			354	5,6		57,0	135	0,4		
		253	10,7			355	0,2			188	5,9		
		255	0,4				24,1			191	0,3		
		281	5,6							219	3,1		
		391	23,5							224	0,6		
		431	8,5							238	1,6		
			7,9							255	1,9		
										273	2,0		
										280	0,8		
										353	8,1		
										617	29,3		
										833	24,0		
										858	2,8		
											4,7		

Resultados das optimizações

Tabela B 1.6 Resultados para a configuração A, função objectivo VAL1

	1ª optimização		2ª optimização		3ª optimização		4ª optimização		5ª optimização	
VAL1	-1,50x10 ⁸		-1,56x10 ⁸	-1,51x10 ⁸	-1,65x10 ⁸	-1,52x10 ⁸	-1,57x10 ⁸	-1,51x10 ⁸	-1,50x10 ⁸	
VAL2	-2,04x10 ⁸		-2,10x10 ⁸	-2,02x10 ⁸	-2,30x10 ⁸	-2,10x10 ⁸	-2,08x10 ⁸	-2,06x10 ⁸	-2,03x10 ⁸	
IAPG	2,15x10 ⁵		2,34x10 ⁵	2,18x10 ⁵	2,88x10 ⁵	2,62x10 ⁵	2,44x10 ⁵	2,30x10 ⁵	2,11x10 ⁵	
IAPG-EPS	1,64x10 ⁷		1,63x10 ⁷	1,56x10 ⁷	1,96x10 ⁷	1,74x10 ⁷	1,56x10 ⁷	1,64x10 ⁷	1,59x10 ⁷	
Pureza	0,941		0,969	0,961	0,922	0,917	0,954	0,957	0,940	
Suc0,99	1		0		0		0		0	
Nsuc	27		36		26		28		23	
vc (1)	45,7		57,4	60,6	44,6	40,4	58,5	55,8	52,1	
vc (2)	1,4		1,7	1,8	1,3	1,2	1,8	1,7	1,6	
vc (3)	2,39x10 ⁶		1,40x10 ⁶	1,94x10 ⁶	3,20x10 ⁶	3,17x10 ⁶	2,36x10 ⁶	1,94x10 ⁶	2,90x10 ⁶	
vc (4)	0,0072		0,0080	0,0074	0,0069	0,0069	0,0086	0,0062	0,0098	
vc (5)	49,1		61,7	64,7	42,5	40,1	61,1	59,9	55,7	
vc (6)	86,1		91,7	88,3	124,0	88,9	135,9	85,0	105,4	
vc (7)	0,00074		0,00071	0,00096	0,00092	0,00062	0,00050	0,00061	0,00036	
vc (8)	0,00072		0,00096	0,00044	0,00077	0,00080	0,00032	0,00074	0,00097	
vc (9)	2,25x10 ⁵		3,64x10 ⁵	1,97x10 ⁵	2,90x10 ⁵	3,83x10 ⁵	4,85x10 ⁵	5,78x10 ⁵	1,68x10 ⁵	
vc (16)	32		41	26	36	41	39	41	29	
US	394		429		428		380		249	

1

Suc0,99 1ª optimização

VLA1	-1,94x10 ⁸
VAL2	-2,73x10 ⁸
IAPG	3,95x10 ⁵
IAPG-EPS	2,38x10 ⁷
Pureza	0,991
vc (1)	65,4
vc (2)	2,0
vc (3)	3,45x10 ⁵
vc (4)	0,0092
vc (5)	66,5
vc (6)	88,9
vc (7)	0,00076
vc (8)	0,00077
vc (9)	3,27x10 ⁵
vc (16)	38

¹ Os valores a preto são as soluções finais e os valores a vermelho correspondem às melhores soluções encontradas durante as optimizações efectuadas. Quando não é apresentada a melhor solução significa que a solução final é a melhor solução.

Tabela B 1.7 Resultados para a configuração Ae, função objectivo VAL1

	1ª optimização		2ª optimização		3ª optimização		4ª optimização		5ª optimização	
VLA1	-1,45x10 ⁸		-1,49x10 ⁸		-1,46x10 ⁸		-1,44x10 ⁸		-1,53x10 ⁸	-1,45x10 ⁸
VAL2	-1,98x10 ⁸		-2,06x10 ⁸		-2,02x10 ⁸		-1,97x10 ⁸		-2,11x10 ⁸	-1,97x10 ⁸
IAPG	2,64x10 ⁵		3,14x10 ⁵		2,61x10 ⁵		2,62x10 ⁵		3,26x10 ⁵	2,59x10 ⁵
IAPG-EPS	1,59x10 ⁷		1,71x10 ⁷		1,69x10 ⁷		1,57x10 ⁷		1,73x10 ⁷	1,57x10 ⁷
Pureza	0,940		0,953		0,925		0,947		0,953	0,952
Suc0,99	1		0		0		0		0	
Nsuc	29		19		22		19		32	
vc (1)	55,8		60,6		38,2		56,9		65,4	68,6
vc (2)	1,7		1,8		1,1		1,7		2,0	2,1
vc (3)	3,11x10 ⁶		2,42x10 ⁶		2,75x10 ⁶		2,63x10 ⁶		2,48x10 ⁶	2,69x10 ⁶
vc (4)	0,0091		0,0084		0,0098		0,0076		0,0050	0,0064
vc (5)	58,7		61,7		40,1		59,9		65,3	72,5
vc (6)	122,8		92,3		96,8		92,9		110,5	122,8
vc (7)	0,00038		0,00092		0,00057		0,00057		0,00058	0,00100
vc (8)	0,00077		0,00080		0,00071		0,00070		0,00082	0,00036
vc (9)	3,83x10 ⁵		4,57x10 ⁵		1,03x10 ⁵		3,27x10 ⁵		5,23x10 ⁵	8,38x10 ⁵
vc (16)	28		29		29		38		39	35
US	384		388		327		430		309	

Suc0,99 1ª optimização

VLA1	-1,89x10 ⁸
VAL2	-2,57x10 ⁸
IAPG	4,33x10 ⁵
IAPG-EPS	2,07x10 ⁷
Pureza	0,991
vc (1)	63,8
vc (2)	1,9
vc (3)	3,45x10 ⁵
vc (4)	0,0091
vc (5)	65,3
vc (6)	126,9
vc (7)	0,00090
vc (8)	0,00073
vc (9)	8,95x10 ⁵
vc (16)	41

Tabela B 1.8 Resultados para a configuração E, função objectivo VAL1

	1ª optimização		2ª optimização		3ª optimização		4ª optimização		5ª optimização	
VLA1	-1,60x10 ⁸	-1,59x10 ⁸	-1,79x10 ⁸	-1,58x10 ⁸	-1,73x10 ⁸	-1,57x10 ⁸	-2,19x10 ⁸	-1,59x10 ⁸	-1,59x10 ⁸	
VAL2	-2,23x10 ⁸	-2,14x10 ⁸	-2,57x10 ⁸	-2,14x10 ⁸	-2,39x10 ⁸	-2,12x10 ⁸	-3,19x10 ⁸	-2,15x10 ⁸	-2,10x10 ⁸	
IAPG	2,23x10 ⁵	2,48x10 ⁵	3,43x10 ⁵	2,89x10 ⁵	2,49x10 ⁵	2,49x10 ⁵	4,52x10 ⁵	2,53x10 ⁵	2,37x10 ⁵	
IAPG-EPS	1,92x10 ⁷	1,67x10 ⁷	2,36x10 ⁷	1,68x10 ⁷	2,00x10 ⁷	1,65x10 ⁷	3,00x10 ⁷	1,67x10 ⁷	1,55x10 ⁷	
Pureza	0,999	1,000	0,999	1,000	0,999	0,999	1,000	0,999	0,999	
Suc0,99	Todas		Todas		Todas		Todas		Todas	
Nsuc	46		50		60		47		62	
vc (1)	52,6	62,7	55,3	63,8	45,7	59,5	43,6	58,5	64,3	
vc (2)	1,6	1,9	1,7	1,9	1,4	1,8	1,3	1,8	1,9	
vc (3)	3,23x10 ⁶	2,27x10 ⁶	2,90x10 ⁶	2,96x10 ⁶	7,65x10 ⁵	2,78x10 ⁶	3,02x10 ⁶	2,51x10 ⁶	2,03x10 ⁶	
vc (4)	0,0087	0,0056	0,0096	0,0058	0,0084	0,0084	0,0088	0,0098	0,0079	
vc (5)	58,7	67,1	53,3	65,3	52,7	62,9	34,1	62,3	67,7	
vc (6)	108,7	116,2	85,0	90,1	131,3	103,6	123,4	128,5	108,7	
vc (7)	0,00093	0,00035	0,00097	0,00041	0,00052	0,00066	0,00043	0,00059	0,00083	
vc (8)	0,00099	0,00085	0,00066	0,00054	0,00054	0,00068	0,00089	0,00093	0,00059	
vc (9)	1,02x10 ⁶	8,58x10 ⁵	1,88x10 ⁵	8,95x10 ⁵	4,01x10 ⁵	2,34x10 ⁵	1,88x10 ⁵	1,02x10 ⁶	2,71x10 ⁵	
vc (10)	0,090	0,091	0,077	0,092	0,074	0,082	0,078	0,099	0,098	
vc (11)	3,67	4,05	0,92	4,24	4,05	4,19	4,10	1,72	2,44	
vc (2)	8,20x10 ⁵	8,11x10 ⁵	8,67x10 ⁵	7,55x10 ⁵	9,41x10 ⁵	1,02x10 ⁶	1,03x10 ⁶	5,03x10 ⁵	7,83x10 ⁵	
vc (15)	8	7	7	10	8	7	8	7	5	
vc (16)	38	40	28	40	40	25	40	38	42	
US	545		623		673		609		596	

Tabela B 1.9 Resultados para a configuração Ee, função objectivo VAL1

	1ª optimização		2ª optimização		3ª optimização		4ª optimização		5ª optimização	
VLA1	-4,60x10 ⁸	-4,05x10 ⁸	-4,92x10 ⁸		-4,04x10 ⁸		-3,90x10 ⁸		-4,58x10 ⁸	-4,20x10 ⁸
VAL2	-6,23x10 ⁸	-5,57x10 ⁸	-6,71x10 ⁸		-5,47x10 ⁸		-5,31x10 ⁸		-6,25x10 ⁸	-5,71x10 ⁸
IAPG	2,60x10 ⁶	1,37x10 ⁶	2,36x10 ⁶		1,53x10 ⁶		1,38x10 ⁶		1,54x10 ⁶	1,70x10 ⁶
IAPG-EPS	4,92x10 ⁷	4,59x10 ⁷	5,42x10 ⁷		4,31x10 ⁷		4,26x10 ⁷		5,05x10 ⁷	4,56x10 ⁷
Pureza	0,997	0,999	0,999		1,000		0,999		1,000	1,000
Suc0,99	Todas		Todas		Todas		Todas		Todas	
Nsuc	14		9		5		7		8	
vc (1)	50,5	58,5	78,2		38,8		81,4		43,0	75,0
vc (2)	1,5	1,8	2,3		1,2		2,4		1,3	2,3
vc (3)	3,35x10 ⁶	2,81x10 ⁶	3,08x10 ⁶		3,29x10 ⁶		3,29x10 ⁶		2,48x10 ⁶	3,11x10 ⁶
vc (4)	0,0100	0,0059	0,0057		0,0088		0,0054		0,0052	0,0058
vc (5)	33,5	50,9	62,3		28,2		71,8		34,8	65,3
vc (6)	112,1	120,6	94,5		132,5		135,3		96,8	95,1
vc (7)	0,00066	0,00065	0,00071		0,00045		0,00081		0,00041	0,00039
vc (8)	0,00031	0,00031	0,00083		0,00056		0,00078		0,00092	0,00030
vc (9)	6,99x10 ⁵	6,72x10 ⁵	6,25x10 ⁵		1,22x10 ⁵		2,05x10 ⁵		6,34x10 ⁵	4,94x10 ⁵
vc (10)	0,064	0,088	0,095		0,088		0,066		0,073	0,094
vc (11)	1,39	4,24	3,00		3,34		4,86		3,20	4,10
vc (2)	3,64x10 ⁵	9,97x10 ⁵	1,78x10 ⁵		6,81x10 ⁵		1,03x10 ⁶		3,45x10 ⁵	1,68x10 ⁵
vc (15)	3	7	3		7		6		8	6
vc (16)	38	38	27		26		29		32	39
US	301		363		159		80		376	

Tabela B 1.10 Resultados para a configuração GrTBe, função objectivo VAL1

	1ª optimização		2ª optimização		3ª optimização		4ª optimização		5ª optimização	
VLA1	-1,61x10 ⁸	-1,55x10 ⁸	-1,62x10 ⁸	-1,60x10 ⁸	-1,60x10 ⁸	-1,54x10 ⁸	-1,57x10 ⁸		-1,70x10 ⁸	-1,59x10 ⁸
VAL2	-2,24x10 ⁸	-2,15x10 ⁸	-2,24x10 ⁸	-2,25x10 ⁸	-2,27x10 ⁸	-2,04x10 ⁸	-2,15x10 ⁸		-2,44x10 ⁸	-2,05x10 ⁸
IAPG	3,05x10 ⁵	2,90x10 ⁵	4,45x10 ⁵	3,44x10 ⁵	3,09x10 ⁵	4,70x10 ⁵	3,66x10 ⁵		4,25x10 ⁵	5,64x10 ⁵
IAPG-EPS	1,90x10 ⁷	1,80x10 ⁷	1,90x10 ⁷	1,98x10 ⁷	2,01x10 ⁷	1,51x10 ⁷	1,77x10 ⁷		2,25x10 ⁷	1,40x10 ⁷
Pureza	0,999	1,000	0,995	0,999	1,000	0,997	0,999		1,000	0,995
Suc0,99	10		13		11		5		12	
Nsuc	13		15		12		13		12	
vc (1)	39,8	57,9	43,0	59,5	54,7	57,9	48,4		47,3	43,0
vc (2)	1,2	1,7	1,3	1,8	1,6	1,7	1,4		1,4	1,3
vc (3)	2,33x10 ⁶	2,63x10 ⁶	2,66x10 ⁶	3,14x10 ⁶	2,87x10 ⁶	3,32x10 ⁶	3,26x10 ⁶		1,34x10 ⁶	2,00x10 ⁶
vc (4)	0,0090	0,0060	0,0076	0,0058	0,0060	0,0099	0,0072		0,0057	0,0081
vc (5)	44,3	62,9	42,5	62,9	59,9	57,5	49,7		51,5	41,3
vc (6)	128,5	93,9	111,5	124,0	122,4	125,6	121,8		100,8	111,1
vc (7)	0,99558	0,99540	0,99216	0,99288	0,99891	0,99693	0,99270		0,99252	0,99297
vc (8)	0,99729	0,99270	0,99108	0,99567	0,99135	0,99000	0,99396		0,99693	0,99306
vc (9)	2,52x10 ⁵	3,45x10 ⁵	7,09x10 ⁵	2,34x10 ⁵	6,15x10 ⁵	6,62x10 ⁵	7,55x10 ⁵		7,64x10 ⁵	1,88x10 ⁵
vc (10)	0,995	0,997	0,992	0,994	0,996	0,997	0,997		0,997	0,997
vc (11)	0,72	1,87	3,48	4,29	2,58	0,77	2,77		1,15	0,44
vc (12)	1,03x10 ⁶	9,87x10 ⁵	8,20x10 ⁵	6,52x10 ⁵	3,08x10 ⁵	7,55x10 ⁵	4,39x10 ⁵		1,68x10 ⁵	5,78x10 ⁵
vc (13)	0,99684	0,99549	0,99162	0,99486	0,99396	0,99783	0,99180		0,99828	0,99864
vc (14)	5,13x10 ⁵	3,83x10 ⁵	3,92x10 ⁵	8,38x10 ⁵	9,87x10 ⁵	8,48x10 ⁵	1,03x10 ⁵		6,52x10 ⁵	4,57x10 ⁵
vc (15)	4	4	3	3	3	4	3		3	4
vc (16)	27	36	35	24	30	36	27		34	25
vc (18)	12	8	7	6	7	6	8		6	7
vc (19)	0,99882	0,99675	0,99531	0,99324	0,99432	0,99837	0,99837		0,99450	0,99324
US	693		778		815		740		868	

Tabela B 1.11 Resultados para a configuração A, função objectivo VAL2

	1ª optimização		2ª optimização		3ª optimização		4ª optimização		5ª optimização	
VLA2	-2,06x10 ⁸		-2,30x10 ⁸	-2,09x10 ⁸	-2,03x10 ⁸		-2,12x10 ⁸	-2,04x10 ⁸	-2,05x10 ⁸	
VAL1	-1,55x10 ⁸		-1,65x10 ⁸	-1,53x10 ⁸	-1,51x10 ⁸		-1,56x10 ⁸	-1,51x10 ⁸	-1,51x10 ⁸	
IAPG	2,20x10 ⁵		3,04x10 ⁵	2,52x10 ⁵	2,23x10 ⁵		2,29x10 ⁵	2,17x10 ⁵	2,30x10 ⁵	
IAPG-EPS	1,55x10 ⁷		1,94x10 ⁷	1,68x10 ⁷	1,54x10 ⁷		1,71x10 ⁷	1,59x10 ⁷	1,60x10 ⁷	
Pureza	0,941		0,940	0,924	0,939		0,920	0,944	0,953	
Suc0,99	0		0		0		0		0	
Nsuc	39		36		31		36		21	
vc (1)	46,8		62,2	42,5	55,8		41,4	49,4	59,5	
vc (2)	1,4		1,9	1,3	1,7		1,2	1,5	1,8	
vc (3)	2,48x10 ⁶		3,32x10 ⁶	3,05x10 ⁶	3,11x10 ⁶		3,26x10 ⁶	2,51x10 ⁶	2,33x10 ⁶	
vc (4)	0,0086		0,0100	0,0082	0,0083		0,0100	0,0087	0,0072	
vc (5)	49,1		62,3	42,5	58,7		44,3	52,7	63,5	
vc (6)	140,0		131,9	100,8	123,4		134,3	100,8	107,1	
vc (7)	0,00099		0,00093	0,00068	0,00038		0,00043	0,00050	0,00091	
vc (8)	0,00062		0,00049	0,00067	0,00078		0,00055	0,00084	0,00082	
vc (9)	1,88x10 ⁵		6,52x10 ⁵	2,43x10 ⁵	3,83x10 ⁵		5,69x10 ⁵	1,97x10 ⁵	8,76x10 ⁵	
vc (16)	37		35	42	40		38	33	40	
US	425		401		443		413		467	

Tabela B 1.12 Resultados para a configuração Ae, função objectivo VAL2

	1ª optimização		2ª optimização		3ª optimização		4ª optimização		5ª optimização	
VLA2	-2,11x10 ⁸	-1,96x10 ⁸	-2,04x10 ⁸	-1,95x10 ⁸	-1,96x10 ⁸		-1,98x10 ⁸		-2,04x10 ⁸	-1,90x10 ⁸
VAL1	-1,52x10 ⁸	-1,45x10 ⁸	-1,52x10 ⁸	-1,45x10 ⁸	-1,44x10 ⁸		-1,45x10 ⁸		-1,49x10 ⁸	-1,40x10 ⁸
IAPG	3,27x10 ⁵	2,56x10 ⁵	2,56x10 ⁵	2,58x10 ⁵	2,72x10 ⁵		2,82x10 ⁵		3,12x10 ⁵	2,50x10 ⁵
IAPG-EPS	1,80x10 ⁷	1,53x10 ⁷	1,57x10 ⁷	1,51x10 ⁷	1,58x10 ⁷		1,61x10 ⁷		1,66x10 ⁷	1,51x10 ⁷
Pureza	0,928	0,952	0,948	0,939	0,944		0,944		0,928	0,937
Suc0,99	0		0		0		0		0	
Nsuc	19		19		17		15		13	
vc (1)	43,0	68,6	56,3	59,0	63,8		63,8		47,3	59,5
vc (2)	1,3	2,1	1,7	1,8	1,9		1,9		1,4	1,8
vc (3)	2,93x10 ⁶	2,81x10 ⁶	2,51x10 ⁶	3,20x10 ⁶	3,23x10 ⁶		3,23x10 ⁶		3,02x10 ⁶	3,35x10 ⁶
vc (4)	0,0088	0,0082	0,0064	0,0072	0,0095		0,0095		0,0052	0,0073
vc (5)	42,5	71,8	59,3	61,1	66,5		66,5		46,7	62,3
vc (6)	116,8	110,5	140,0	137,2	128,1		128,1		138,8	94,5
vc (7)	0,00083	0,00078	0,00084	0,00078	0,00066		0,00036		0,00049	0,00071
vc (8)	0,00086	0,00041	0,00094	0,00092	0,00064		0,00064		0,00056	0,00039
vc (9)	7,09x10 ⁵	4,20x10 ⁵	4,57x10 ⁵	4,85x10 ⁵	8,76x10 ⁵		8,76x10 ⁵		6,99x10 ⁵	2,34x10 ⁵
vc (16)	40	38	30	33	38		38		37	32
US	367		268		465		292		422	

Tabela B 1.13 Resultados para a configuração E, função objectivo VAL2

	1ª optimização		2ª optimização		3ª optimização		4ª optimização		5ª optimização	
VLA2	-2,22x10 ⁸	-2,13x10 ⁸	-2,33x10 ⁸	-2,27x10 ⁸	-2,18x10 ⁸	-2,15x10 ⁸	-2,21x10 ⁸		-2,09x10 ⁸	
VAL1	-1,64x10 ⁸	-1,58x10 ⁸	-1,67x10 ⁸	-1,64x10 ⁸	-1,64x10 ⁸	-1,58x10 ⁸	-1,62x10 ⁸		-1,56x10 ⁸	
IAPG	2,24x10 ⁵	2,10x10 ⁵	3,54x10 ⁵	2,58x10 ⁵	2,45x10 ⁵	2,73x10 ⁵	2,47x10 ⁵		2,46x10 ⁵	
IAPG-EPS	1,77x10 ⁷	1,64x10 ⁷	1,97x10 ⁷	1,90x10 ⁷	1,60x10 ⁷	1,72x10 ⁷	1,76x10 ⁷		1,59x10 ⁷	
Pureza	0,999	1,000	0,999	1,000	0,999	0,999	0,999		1,000	
Suc0,99	Todas		Todas		Todas		Todas		Todas	
Nsuc	25		40		29		52		34	
vc (1)	52,1	48,9	52,1	65,9	67,5	51,6	53,1		59,5	
vc (2)	1,6	1,5	1,6	2,0	2,0	1,5	1,6		1,8	
vc (3)	1,85x10 ⁶	2,75x10 ⁶	2,33x10 ⁶	2,87x10 ⁶	1,67x10 ⁶	2,42x10 ⁶	1,46x10 ⁶		3,32x10 ⁶	
vc (4)	0,0062	0,0060	0,0088	0,0086	0,0086	0,0060	0,0098		0,0068	
vc (5)	57,5	52,7	53,3	71,8	71,8	53,9	58,1		60,5	
vc (6)	135,3	112,1	91,7	139,4	132,5	86,1	104,8		93,5	
vc (7)	0,00097	0,00048	0,00058	0,00030	0,00068	0,00096	0,00052		0,00040	
vc (8)	0,00070	0,00038	0,00051	0,00031	0,00066	0,00094	0,00066		0,00059	
vc (9)	5,69x10 ⁵	1,68x10 ⁵	8,67x10 ⁵	9,13x10 ⁵	5,23x10 ⁵	6,62x10 ⁵	7,18x10 ⁵		1,59x10 ⁵	
vc (10)	0,091	0,063	0,097	0,099	0,086	0,096	0,090		0,089	
vc (11)	1,25	0,44	1,58	4,53	2,39	1,96	3,29		1,48	
vc (2)	6,99x10 ⁵	4,20x10 ⁵	5,50x10 ⁵	9,78x10 ⁵	7,27x10 ⁵	9,87x10 ⁵	9,32x10 ⁵		5,97x10 ⁵	
vc (15)	7	8	6	7	8	7	6		9	
vc (16)	39	41	32	31	35	29	40		33	
US	396		582		661		507		479	

Tabela B 1.14 Resultados para a configuração Ee, função objectivo VAL2

	1ª optimização		2ª optimização		3ª optimização		4ª optimização		5ª optimização	
VLA2	-5,54x10 ⁸		-2,25x10 ⁸		-5,94x10 ⁸		-5,90x10 ⁸		-5,23x10 ⁸	
VAL1	-4,02x10 ⁸		-1,70x10 ⁸		-4,42x10 ⁸		-4,36x10 ⁸		-3,77x10 ⁸	
IAPG	1,51x10 ⁶		3,23E+0 ⁵		2,18x10 ⁶		1,69x10 ⁶		1,23x10 ⁶	
IAPG-EPS	4,59x10 ⁷		1,66x10 ⁷		4,60x10 ⁷		4,64x10 ⁷		4,41x10 ⁷	
Pureza	0,999		0,999		0,999		0,999		0,999	
Suc0,99	Todas		Todas		Todas		Todas			
Nsuc	9		5		3		11		6	
vc (1)	38,2		68,1		56,9		65,9		60,1	
vc (2)	1,1		2,0		1,7		2,0		1,8	
vc (3)	3,26x10 ⁶		3,20x10 ⁶		3,35x10 ⁶		3,20x10 ⁶		2,78x10 ⁶	
vc (4)	0,0072		0,0054		0,0075		0,0066		0,0066	
vc (5)	28,8		69,5		44,3		54,5		53,9	
vc (6)	133,7		90,7		88,9		134,7		137,2	
vc (7)	0,00066		0,00079		0,00097		0,00098		0,00059	
vc (8)	0,00057		0,00073		0,00052		0,00049		0,00073	
vc (9)	9,41x10 ⁵		1,01x10 ⁶		2,25x10 ⁵		4,85x10 ⁵		4,11x10 ⁵	
vc (10)	0,095		0,089		0,062		0,088		0,073	
vc (11)	4,19		2,44		2,01		4,38		2,01	
vc (2)	8,58x10 ⁵		5,78x10 ⁵		1,02x10 ⁶		6,99x10 ⁵		4,48x10 ⁵	
vc (15)	8		9		8		8		5	
vc (16)	34		40		33		29		28	
US	338		122		36		589		204	

Tabela B 1.15 Resultados para a configuração GrTBe, função objectivo VAL2

	1ª optimização		2ª optimização		3ª optimização		4ª optimização		5ª optimização	
VAL2	-2,27x10 ⁸	-1.98x10 ⁸	-2,07x10 ⁸		-2,69x10 ⁸	-2,11x10 ⁸	-2,15x10 ⁸		-2,32x10 ⁸	
VAL1	-1,71x10 ⁸	-1,48x10 ⁸	-1,56x10 ⁸		-1,75x10 ⁸	-1,53x10 ⁸	-1,57x10 ⁸		-1,67x10 ⁸	
IAPG	7,30x10 ⁵	3,45x10 ⁵	3,28x10 ⁵		2,75x10 ⁵	3,41x10 ⁵	3,66x10 ⁵		3,38x10 ⁵	
IAPG-EPS	1,69x10 ⁷	1,51x10 ⁷	1,55x10 ⁷		2,84x10 ⁷	1,74x10 ⁷	1,77x10 ⁷		1,97x10 ⁷	
Pureza	0,997	0,999	0,999		1,000	0,999	0,999		1,000	
Suc0,99	6		8		11		6		12	
Nsuc	8		8		11		6		13	
vc (1)	70,7	53,1	70,7		53,1	57,9	48,4		62,2	
vc (2)	2,1	1,6	2,1		1,6	1,7	1,4		1,9	
vc (3)	2,48x10 ⁶	3,32x10 ⁶	2,57x10 ⁶		3,20x10 ⁶	3,11x10 ⁶	3,26x10 ⁶		1,16x10 ⁶	
vc (4)	0,0088	0,0060	0,0080		0,0096	0,0052	0,0072		0,0098	
vc (5)	69,5	55,1	72,5		63,5	60,5	49,7		67,1	
vc (6)	120,0	114,9	137,6		96,4	104,2	121,8		107,1	
vc (7)	0,99342	0,99765	0,99873		0,99693	0,99450	0,99279		0,99234	
vc (8)	0,99657	0,99234	0,99531		0,99738	0,99459	0,99396		0,99504	
vc (9)	5,41x10 ⁵	1,02x10 ⁶	2,71x10 ⁵		5,60x10 ⁵	9,60x10 ⁵	7,55x10 ⁵		2,34x10 ⁵	
vc (10)	0,999	0,998	0,996		0,998	0,992	0,997		0,996	
vc (11)	3,15	0,92	3,38		2,10	2,29	2,77		3,48	
vc (2)	1,41x10 ⁵	7,27x10 ⁵	3,08x10 ⁵		3,54x10 ⁵	5,03x10 ⁵	4,39x10 ⁵		2,43x10 ⁵	
vc (13)	0,99864	0,99819	0,99765		0,99153	0,99567	0,99180		0,99783	
vc (14)	7,74x10 ⁵	8,58x10 ⁵	3,64x10 ⁵		1,03x10 ⁵	8,01x10 ⁵	1,03x10 ⁵		6,99x10 ⁵	
vc (15)	3	4	3		3	3	3		3	
vc (16)	40	33	30		37	34	27		34	
vc (18)	6	11	7		7	7	8		7	
vc (19)	0,99720	0,99630	0,99207		0,99666	0,99549	0,99837		0,99279	
US	739		543		748		375		816	

Tabela B 1.16 Resultados para a configuração A, função objectivo IAPG

	1ª optimização		2ª optimização		3ª optimização		4ª optimização		5ª optimização	
IAPG	$2,42 \times 10^5$	$2,34 \times 10^5$	$2,21 \times 10^5$		$3,56 \times 10^5$	$2,27 \times 10^5$	$2,37 \times 10^5$	$2,37 \times 10^5$	$2,85 \times 10^5$	$2,28 \times 10^5$
IAPG-EPS	$1,74 \times 10^7$	$1,63 \times 10^7$	$1,52 \times 10^7$		$2,31 \times 10^7$	$1,52 \times 10^7$	$1,65 \times 10^7$	$1,68 \times 10^7$	$1,70 \times 10^7$	$1,65 \times 10^7$
VAL1	$-1,58 \times 10^8$	$-1,56 \times 10^8$	$-1,48 \times 10^8$		$-1,86 \times 10^8$	$-1,49 \times 10^8$	$-1,50 \times 10^8$	$-1,52 \times 10^8$	$-1,70 \times 10^8$	$-1,51 \times 10^8$
VAL2	$-2,16 \times 10^8$	$-2,10 \times 10^8$	$-1,98 \times 10^8$		$-2,63 \times 10^8$	$-2,00 \times 10^8$	$-2,05 \times 10^8$	$-2,08 \times 10^8$	$-2,26 \times 10^8$	$-2,06 \times 10^8$
Pureza	0,935	0,969	0,951		0,953	0,955	0,945	0,933	0,985	0,933
Suc0,99	0		0		0					
Nsuc	30		39		25		19		28	
vc (1)	37,2	57,4	65,9		43,6	67,5	59,5	44,1	62,2	44,1
vc (2)	1,1	1,7	2,0		1,3	2,0	1,8	1,3	1,9	1,3
vc (3)	$2,21 \times 10^6$	$1,40 \times 10^6$	$2,72 \times 10^6$		$1,73 \times 10^6$	$2,63 \times 10^6$	$2,78 \times 10^6$	$2,78 \times 10^6$	$6,45 \times 10^5$	$2,78 \times 10^6$
vc (4)	0,0080	0,0080	0,0068		0,0094	0,0092	0,0060	0,0093	0,0092	0,0093
vc (5)	39,5	61,7	69,5		41,3	70,7	63,5	46,7	65,9	46,7
vc (6)	138,8	91,7	86,1		131,9	88,9	99,2	103,0	128,5	103,0
vc (7)	0,00075	0,00071	0,00093		0,00074	0,00064	0,00030	0,00043	0,00096	0,00097
vc (8)	0,00096	0,00096	0,00065		0,00056	0,00099	0,00043	0,00049	0,00099	0,00049
vc (9)	$5,03 \times 10^5$	$3,64 \times 10^5$	$4,76 \times 10^5$		$4,29 \times 10^5$	$2,62 \times 10^5$	$8,76 \times 10^5$	$5,13 \times 10^5$	$4,66 \times 10^5$	$5,13 \times 10^5$
vc (16)	41	41	37		38	38	41	35	30	35
US	465		422		380		401		374	

Tabela B 1.17 Resultados para a configuração Ae, função objectivo IAPG

	1ª optimização		2ª optimização		3ª optimização		4ª optimização		5ª optimização	
IAPG	$2,92 \times 10^5$	$2,53 \times 10^5$	$2,67 \times 10^5$		$2,85 \times 10^5$	$2,48 \times 10^5$	$2,76 \times 10^5$	$2,66 \times 10^5$	$2,48 \times 10^5$	
IAPG-EPS	$1,63 \times 10^7$	$1,53 \times 10^7$	$1,52 \times 10^7$		$1,71 \times 10^7$	$1,51 \times 10^7$	$1,65 \times 10^7$	$1,73 \times 10^7$	$1,54 \times 10^7$	
VAL1	$-1,49 \times 10^8$	$-1,49 \times 10^8$	$-1,43 \times 10^8$		$-1,57 \times 10^8$	$-1,43 \times 10^8$	$-1,54 \times 10^8$	$-1,48 \times 10^8$	$-1,42 \times 10^8$	
VAL2	$-2,03 \times 10^8$	$-2,00 \times 10^8$	$-1,94 \times 10^8$		$-2,13 \times 10^8$	$-1,93 \times 10^8$	$-2,09 \times 10^8$	$-2,05 \times 10^8$	$-1,93 \times 10^8$	
Pureza	0,950	0,959	0,942		0,979	0,938	0,966	0,927	0,942	
Suc0,99	0		0		0		0		0	
Nsuc	40		29		29		27		24	
vc (1)	53,1	63,8	64,9		49,4	59,5	56,9	37,7	65,4	
vc (2)	1,6	1,9	1,9		1,5	1,8	1,7	1,1	2,0	
vc (3)	$2,27 \times 10^6$	$2,24 \times 10^6$	$3,23 \times 10^6$		$7,65 \times 10^5$	$3,35 \times 10^6$	$1,52 \times 10^6$	$2,57 \times 10^6$	$3,35 \times 10^6$	
vc (4)	0,0066	0,0094	0,0054		0,0081	0,0084	0,0070	0,0084	0,0074	
vc (5)	55,1	67,1	67,1		53,3	62,3	60,5	40,1	68,9	
vc (6)	134,3	114,3	139,4		93,5	119,6	140,4	117,8	113,3	
vc (7)	0,00059	0,00062	0,00056		0,00091	0,00065	0,00092	0,00082	0,00092	
vc (8)	0,00064	0,00036	0,00089		0,00075	0,00052	0,00067	0,00052	0,00094	
vc (9)	$8,38 \times 10^5$	$1,03 \times 10^5$	$8,11 \times 10^5$		$1,97 \times 10^5$	$2,34 \times 10^5$	$6,34 \times 10^5$	$3,27 \times 10^5$	$5,23 \times 10^5$	
vc (16)	34	39	39		28	41	31	30	41	
US	293		428		434		397		157	

Tabela B 1.18 Resultados para a configuração E, função objectivo IAPG

	1ª optimização		2ª optimização		3ª optimização		4ª optimização		5ª optimização	
IAPG	$2,10 \times 10^5$	$2,09 \times 10^5$	$2,53 \times 10^5$	$2,19 \times 10^5$	$2,14 \times 10^5$	$2,04 \times 10^5$	$2,89 \times 10^5$	$2,40 \times 10^5$	$1,89 \times 10^5$	
IAPG-EPS	$2,37 \times 10^7$	$2,21 \times 10^7$	$1,93 \times 10^7$	$1,65 \times 10^7$	$2,13 \times 10^7$	$2,35 \times 10^7$	$2,34 \times 10^7$	$1,55 \times 10^7$	$2,59 \times 10^7$	
VAL1	$-1,66 \times 10^8$	$-1,66 \times 10^8$	$-1,64 \times 10^8$	$-1,61 \times 10^8$	$-1,64 \times 10^8$	$-1,71 \times 10^8$	$-1,71 \times 10^8$	$-1,57 \times 10^8$	$-1,71 \times 10^8$	
VAL2	$-2,44 \times 10^8$	$-2,39 \times 10^8$	$-2,27 \times 10^8$	$-2,15 \times 10^8$	$-2,34 \times 10^8$	$-2,49 \times 10^8$	$-2,49 \times 10^8$	$-2,08 \times 10^8$	$-2,57 \times 10^8$	
Pureza	1,000	0,999	0,999	0,999	1,000	0,999	0,999	0,999	1,000	
Suc0,99	39		30		37					
Nsuc	39		30		38		34		46	
vc (1)	51,6	48,9	37,7	57,9	53,7	42,0	60,1	67,0	47,3	
vc (2)	1,5	1,5	1,1	1,7	1,6	1,3	1,8	2,0	1,4	
vc (3)	$3,32 \times 10^6$	$3,08 \times 10^6$	$2,09 \times 10^6$	$2,90 \times 10^6$	$1,97 \times 10^6$	$2,57 \times 10^6$	$3,29 \times 10^6$	$1,40 \times 10^6$	$3,11 \times 10^6$	
vc (4)	0,0052	0,0080	0,0065	0,0074	0,0053	0,0086	0,0100	0,0054	0,0071	
vc (5)	60,5	56,9	41,9	62,3	61,7	50,9	67,7	70,7	58,1	
vc (6)	95,1	119,0	100,2	126,9	88,9	139,4	136,6	85,4	108,7	
vc (7)	0,00031	0,00100	0,00059	0,00061	0,00047	0,00091	0,00082	0,00089	0,00043	
vc (8)	0,00092	0,00052	0,00045	0,00068	0,00040	0,00031	0,00031	0,00089	0,00050	
vc (9)	$7,18 \times 10^5$	$1,01 \times 10^6$	$4,29 \times 10^5$	$3,45 \times 10^5$	$4,94 \times 10^5$	$5,87 \times 10^5$	$7,92 \times 10^5$	$2,05 \times 10^5$	$5,32 \times 10^5$	
vc (10)	0,090	0,084	0,094	0,099	0,098	0,099	0,092	0,099	0,089	
vc (11)	4,19	1,10	3,72	3,48	4,05	2,15	0,49	1,87	2,62	
vc (2)	$1,01 \times 10^6$	$1,02 \times 10^6$	$9,87 \times 10^5$	$6,15 \times 10^5$	$7,92 \times 10^5$	$9,78 \times 10^5$	$7,09 \times 10^5$	$5,97 \times 10^5$	$8,58 \times 10^5$	
vc (15)	7	8	10	7	9	8	9	8	9	
vc (16)	26	31	28	31	29	31	23	30	29	
US	458		564		360		519		668	

Tabela B 1.19 Resultados para a configuração Ee, função objectivo IAPG

	1ª optimização		2ª optimização		3ª optimização		4ª optimização		5ª optimização	
IAPG	$6,50 \times 10^5$		$1,53 \times 10^6$		$3,51 \times 10^5$		$1,56 \times 10^6$		$1,08 \times 10^6$	
IAPG-EPS	$3,58 \times 10^7$		$5,29 \times 10^7$		$1,91 \times 10^7$		$4,41 \times 10^7$		$4,17 \times 10^7$	
VAL1	$-2,48 \times 10^8$		$-5,65 \times 10^8$		$-1,84 \times 10^8$		$-4,16 \times 10^8$		$-3,48 \times 10^8$	
VAL2	$-3,67 \times 10^8$		$-7,40 \times 10^8$		$-2,47 \times 10^8$		$-5,62 \times 10^8$		$-4,86 \times 10^8$	
Pureza	0,999		0,999		0,999		0,999		0,999	
Suc0,99	12		6		4		5			
Nsuc	12		7		4		5		7	
vc (1)	65,4		42,5		57,9		61,1		52,6	
vc (2)	2,0		1,3		1,7		1,8		1,6	
vc (3)	$1,25 \times 10^6$		$1,82 \times 10^6$		$3,32 \times 10^6$		$3,20 \times 10^6$		$2,90 \times 10^6$	
vc (4)	0,0054		0,0078		0,0099		0,0071		0,0057	
vc (5)	64,7		35,9		57,5		50,9		46,7	
vc (6)	132,5		130,9		140,4		137,6		140,4	
vc (7)	0,00082		0,00083		0,00084		0,00096		0,00076	
vc (8)	0,00052		0,00048		0,00030		0,00038		0,00046	
vc (9)	$6,15 \times 10^5$		$6,81 \times 10^5$		$6,62 \times 10^5$		$1,59 \times 10^5$		$3,36 \times 10^5$	
vc (10)	0,100		0,084		0,093		0,069		0,088	
vc (11)	4,86		4,81		0,77		2,72		1,06	
vc (2)	$7,27 \times 10^5$		$4,85 \times 10^5$		$7,55 \times 10^5$		$5,97 \times 10^5$		$1,59 \times 10^5$	
vc (15)	8		6		5		6		6	
vc (16)	38		39		37		27		30	
US	507		275		126		99		226	

Tabela B 1.20 Resultados para a configuração GrTBe, função objectivo IAPG

	1ªoptimização		2ªoptimização		3ªoptimização		4ªoptimização		5ªoptimização	
IAPG	$3,80 \times 10^5$	$2,96 \times 10^5$	$3,02 \times 10^5$	$2,95 \times 10^5$	$3,16 \times 10^5$	$2,65 \times 10^5$	$3,30 \times 10^5$	$2,50 \times 10^5$	$3,17 \times 10^5$	$2,89 \times 10^5$
IAPG-EPS	$2,84 \times 10^7$	$3,37 \times 10^7$	$3,45 \times 10^7$	$2,75 \times 10^7$	$2,12 \times 10^7$	$2,49 \times 10^7$	$2,43 \times 10^7$	$3,47 \times 10^7$	$2,92 \times 10^7$	$3,36 \times 10^7$
VAL1	$-1,90 \times 10^8$	$-1,90 \times 10^8$	$-1,92 \times 10^8$	$-1,81 \times 10^8$	$-1,64 \times 10^8$	$-1,67 \times 10^8$	$-1,68 \times 10^8$	$-1,89 \times 10^8$	$-1,81 \times 10^8$	$-1,89 \times 10^8$
VAL2	$-2,84 \times 10^8$	$-3,02 \times 10^8$	$-3,06 \times 10^8$	$-2,72 \times 10^8$	$-2,34 \times 10^8$	$-2,50 \times 10^8$	$-2,48 \times 10^8$	$-3,03 \times 10^8$	$-2,78 \times 10^8$	$-3,01 \times 10^8$
Pureza	0,999	1,000	0,998	1,000	0,999	1,000	1,000	0,998	0,999	0,999
Suc0,99	Todas		20		15		15		11	
Nsuc	12		24		18		16		14	
vc (1)	64,3	57,9	44,1	48,9	65,4	55,8	55,8	49,4	60,1	44,6
vc (2)	1,9	1,7	1,3	1,5	2,0	1,7	1,7	1,5	1,8	1,3
vc (3)	$1,01 \times 10^6$	$2,18 \times 10^6$	$1,94 \times 10^6$	$1,19 \times 10^6$	$2,42 \times 10^6$	$3,14 \times 10^6$	$3,29 \times 10^6$	$3,26 \times 10^6$	$1,91 \times 10^6$	$1,91 \times 10^6$
vc (4)	0,0079	0,0058	0,0056	0,0074	0,0062	0,0082	0,0100	0,0061	0,0058	0,0070
vc (5)	67,7	68,9	51,5	59,9	70,1	64,7	61,1	65,3	67,7	54,5
vc (6)	133,7	131,9	104,2	131,9	120,6	85,4	124,0	122,4	117,2	103,0
vc (7)	0,99684	0,99297	0,99369	0,99657	0,99774	0,99711	0,99162	0,99333	0,99432	0,99333
vc (8)	0,99378	0,99540	0,99846	0,99279	0,99198	0,99423	0,99468	0,99423	0,99144	0,99081
vc (9)	$2,71 \times 10^5$	$1,31 \times 10^5$	$3,92 \times 10^5$	$8,01 \times 10^5$	$3,36 \times 10^5$	$1,68 \times 10^5$	$9,04 \times 10^5$	$5,03 \times 10^5$	$7,92 \times 10^5$	$4,39 \times 10^5$
vc (10)	0,993	0,999	0,992	0,992	0,991	0,994	0,999	0,990	0,992	0,993
vc (11)	2,44	4,48	0,72	3,05	4,95	0,72	3,34	2,86	3,76	1,82
vc (2)	$7,83 \times 10^5$	$4,20 \times 10^5$	$1,02 \times 10^6$	$2,99 \times 10^5$	$8,48 \times 10^5$	$3,54 \times 10^5$	$3,27 \times 10^5$	$6,43 \times 10^5$	$9,32 \times 10^5$	$8,76 \times 10^5$
vc (13)	0,99450	0,99000	0,99432	0,99279	0,99702	0,99747	0,99090	0,99009	0,99207	0,99144
vc (14)	$8,58 \times 10^5$	$4,20 \times 10^5$	$8,01 \times 10^5$	$2,62 \times 10^5$	$5,03 \times 10^5$	$4,01 \times 10^5$	$4,76 \times 10^5$	$3,18 \times 10^5$	$6,89 \times 10^5$	$4,66 \times 10^5$
vc (15)	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3
vc (16)	42	27	26	32	24	27	23	41	31	33
vc (18)	7	8	10	8	10	8	7	9	7	12
vc (19)	0,99297	0,99900	0,99144	0,99027	0,99477	0,99648	0,99828	0,99036	0,99270	0,99810
US	830		823		813		881		670	

Tabela B 1.21 Resultados para a configuração A, função objectivo IAPG-EPS

	1ªoptimização		2ªoptimização		3ªoptimização		4ªoptimização		5ªoptimização	
IAPG_EPS	1,54x10 ⁷		1,61x10 ⁷		1,62x10 ⁷	1,55x10 ⁷	1,91x10 ⁷	1,64x10 ⁷	1,63x10 ⁷	1,57x10 ⁷
IAPG	2,44x10 ⁵		2,60x10 ⁵		2,28x10 ⁵	2,00x10 ⁵	2,88x10 ⁵	2,54x10 ⁵	2,48x10 ⁵	2,14x10 ⁵
VAL1	-1,58x10 ⁸		-1,57x10 ⁸		-1,55x10 ⁸	-1,51x10 ⁸	-1,66x10 ⁸	-1,58x10 ⁸	-1,64x10 ⁸	-1,52x10 ⁸
VAL2	-2,09x10 ⁸		-2,10x10 ⁸		-2,09x10 ⁸	-2,02x10 ⁸	-2,29x10 ⁸	-2,12x10 ⁸	-2,18x10 ⁸	-2,04x10 ⁸
Pureza	0,963		0,973		0,954	0,924	0,966	0,935	0,972	0,944
Suc0,99	0		0		1		0		0	
Nsuc	70		64		86		85		71	
vc (1)	67,5		67,0		54,7	45,2	66,5	55,8	49,4	49,4
vc (2)	2,0		2,0		1,6	1,4	2,0	1,7	1,5	1,5
vc (3)	2,03x10 ⁶		1,37x10 ⁶		2,21x10 ⁶	3,08x10 ⁶	1,73x10 ⁶	3,26x10 ⁶	1,10x10 ⁶	2,51x10 ⁶
vc (4)	0,0086		0,0066		0,0088	0,0054	0,0057	0,0064	0,0080	0,0092
vc (5)	70,7		70,1		58,7	47,9	67,7	55,7	52,7	52,7
vc (6)	133,7		90,7		134,3	141,6	85,4	135,3	140,4	117,8
vc (7)	0,00084		0,00066		0,00082	0,00099	0,00068	0,00052	0,00071	0,00096
vc (8)	0,00071		0,00087		0,00038	0,00094	0,00058	0,00031	0,00036	0,00055
vc (9)	5,23x10 ⁵		4,94x10 ⁵		5,97x10 ⁵	1,41x10 ⁵	1,50x10 ⁵	1,88x10 ⁵	1,97x10 ⁵	1,97x10 ⁵
vc (16)	39		39		34	34	35	40	32	33
US	456		428		385		414		395	

Suc0,99 3ªoptimização

IAPG_EPS	3,33x10 ⁷
IAPG	6,86x10 ⁵
VAL1	-2,33x10 ⁸
VAL2	-3,43x10 ⁸
Pureza	0,991
vc (1)	70,2
vc (2)	2,1
vc (3)	3,45x10 ⁵
vc (4)	0,0068
vc (5)	68,9
vc (6)	134,3
vc (7)	0,00096
vc (8)	0,00045
vc (9)	8,58x10 ⁵
vc (16)	29

Tabela B 1.22 Resultados para a configuração Ae, função objectivo IAPG-EPS

	1ª optimização		2ª optimização		3ª optimização		4ª optimização		5ª optimização	
IAPG_EPS	1,69x10 ⁷	1,57x10 ⁷	1,72x10 ⁷	1,54x10 ⁷	1,75x10 ⁷	1,52x10 ⁷	1,65x10 ⁷	1,51x10 ⁷	1,49x10 ⁷	
IAPG	3,08x10 ⁵	2,76x10 ⁵	2,98x10 ⁵	2,52x10 ⁵	2,97x10 ⁵	2,53x10 ⁵	2,54x10 ⁵	2,50x10 ⁵	2,56x10 ⁵	
VAL1	-1,54x10 ⁸	-1,53x10 ⁸	-1,45x10 ⁸	-1,47x10 ⁸	-1,53x10 ⁸	-1,45x10 ⁸	-1,46x10 ⁸	-1,40x10 ⁸	-1,48x10 ⁸	
VAL2	-2,10x10 ⁸	-2,05x10 ⁸	-2,02x10 ⁸	-1,98x10 ⁸	-2,10x10 ⁸	-1,96x10 ⁸	-2,01x10 ⁸	-1,90x10 ⁸	-1,97x10 ⁸	
Pureza	0,975	0,958	0,917	0,943	0,954	0,957	0,944	0,937	0,957	
Suc0,99	0		0		0		0		0	
Nsuc	19		21		13		24		16	
vc (1)	57,4	57,9	40,4	65,4	46,2	67,0	45,7	59,5	64,3	
vc (2)	1,7	1,7	1,2	2,0	1,4	2,0	1,4	1,8	1,9	
vc (3)	1,01x10 ⁶	1,94x10 ⁶	3,17x10 ⁶	3,35x10 ⁶	1,82x10 ⁶	2,42x10 ⁶	2,27x10 ⁶	3,35x10 ⁶	2,33x10 ⁶	
vc (4)	0,0056	0,0057	0,0069	0,0090	0,0080	0,0082	0,0074	0,0073	0,0089	
vc (5)	60,5	60,5	40,1	68,9	49,1	70,7	49,1	62,3	66,5	
vc (6)	100,2	141,0	88,9	113,3	112,1	102,4	95,7	94,5	119,0	
vc (7)	0,00092	0,00059	0,00062	0,00092	0,00078	0,00082	0,00074	0,00071	0,00100	
vc (8)	0,00074	0,00044	0,00080	0,00094	0,00085	0,00085	0,00072	0,00039	0,00095	
vc (9)	8,85x10 ⁵	5,13x10 ⁵	3,83x10 ⁵	5,23x10 ⁵	3,08x10 ⁵	2,05x10 ⁵	1,97x10 ⁵	2,34x10 ⁵	1,13x10 ⁵	
vc (16)	34	34	41	41	23	32	30	32	31	
US	326		395		378		416		291	

Tabela B 1.23 Resultados para a configuração E, função objectivo IAPG-EPS

	1ª optimização		2ª optimização		3ª optimização		4ª optimização		5ª optimização	
IAPG_EPS	1,94x10 ⁷	1,53x10 ⁷	1,80x10 ⁷	1,78x10 ⁷	1,53x10 ⁷		1,55x10 ⁷		2,33x10 ⁷	1,66x10 ⁷
IAPG	2,85x10 ⁵	2,28x10 ⁵	2,90x10 ⁵	2,63x10 ⁵	2,49x10 ⁵		2,50x10 ⁵		1,90x10 ⁵	2,19x10 ⁵
VAL1	-1,64x10 ⁸	-1,53x10 ⁸	-1,65x10 ⁸	-1,66x10 ⁸	-1,55x10 ⁸		-1,62x10 ⁸		-1,70x10 ⁸	-1,57x10 ⁸
VAL2	-2,28x10 ⁸	-2,04x10 ⁸	-2,24x10 ⁸	-2,25x10 ⁸	-2,06x10 ⁸		-2,13x10 ⁸		-2,47x10 ⁸	-2,12x10 ⁸
Pureza	0,999	0,999	0,999	0,999	0,999		0,999		0,999	1,000
Suc0,99	48		43		47		52		60	
Nsuc	48		43		47		52		60	
vc (1)	42,0	67,0	52,6	36,6	67,5		67,5		52,6	48,9
vc (2)	1,3	2,0	1,6	1,1	2,0		2,0		1,6	1,5
vc (3)	3,35x10 ⁶	3,17x10 ⁶	1,94x10 ⁶	1,94x10 ⁶	3,14x10 ⁶		2,03x10 ⁶		2,51x10 ⁶	2,30x10 ⁶
vc (4)	0,0098	0,0060	0,0099	0,0088	0,0050		0,0086		0,0100	0,0062
vc (5)	44,9	70,1	53,9	38,3	68,9		70,7		62,3	52,7
vc (6)	107,7	100,8	98,6	140,4	110,5		133,7		128,5	96,4
vc (7)	0,00058	0,00099	0,00074	0,00089	0,00093		0,00084		0,00090	0,00043
vc (8)	0,00057	0,00048	0,00038	0,00039	0,00076		0,00071		0,00093	0,00094
vc (9)	4,66x10 ⁵	4,94x10 ⁵	4,57x10 ⁵	2,80x10 ⁵	3,27x10 ⁵		5,23x10 ⁵		2,99x10 ⁵	1,68x10 ⁵
vc (10)	0,092	0,098	0,098	0,099	0,094		0,077		0,099	0,084
vc (11)	2,29	2,77	2,62	3,38	1,58		1,25		1,72	1,10
vc (2)	9,23x10 ⁵	9,13x10 ⁵	8,29x10 ⁵	8,95x10 ⁵	9,13x10 ⁵		7,74x10 ⁵		5,03x10 ⁵	1,02x10 ⁶
vc (15)	7	8	8	9	7		9		7	7
vc (16)	26	37	34	30	30		39		31	30
US	555		423		442		453		552	

Tabela B 1.24 Resultados para a configuração Ee, função objectivo IAPG-EPS

	1ª optimização		2ª optimização		3ª optimização		4ª optimização		5ª optimização	
IAPG_EPS	$4,43 \times 10^7$		$3,60 \times 10^7$		$4,30 \times 10^7$		$4,45 \times 10^7$		$5,78 \times 10^7$	$5,42 \times 10^7$
IAPG	$1,60 \times 10^6$		$6,68 \times 10^5$		$9,66 \times 10^5$		$1,61 \times 10^6$		$3,49 \times 10^6$	$1,58 \times 10^6$
VAL1	$-3,97 \times 10^8$		$-2,56 \times 10^8$		$-3,52 \times 10^8$		$-3,97 \times 10^8$		$-5,96 \times 10^8$	$-5,24 \times 10^8$
VAL2	$-5,44 \times 10^8$		$-3,75 \times 10^8$		$-4,95 \times 10^8$		$-5,45 \times 10^8$		$-7,87 \times 10^8$	$-7,04 \times 10^8$
Pureza	0,999		0,999		0,999		1,000		0,999	0,999
Suc0.99	Todas		Todas		Todas		Todas		Todas	
Nsuc	10		12		8		13		18	
vc (1)	81,4		42,0		63,8		81,4		75,0	61,7
vc (2)	2,4		1,3		1,9		2,4		2,3	1,9
vc (3)	$3,29 \times 10^6$		$9,76 \times 10^5$		$1,34 \times 10^6$		$3,29 \times 10^6$		$3,17 \times 10^6$	$1,34 \times 10^6$
vc (4)	0,0051		0,0082		0,0089		0,0051		0,0064	0,0092
vc (5)	71,8		40,7		62,9		71,8		43,7	57,5
vc (6)	90,1		114,9		103,0		90,1		90,1	92,9
vc (7)	0,00081		0,00077		0,00096		0,00042		0,00071	0,00055
vc (8)	0,00050		0,00091		0,00048		0,00050		0,00078	0,00094
vc (9)	$2,05 \times 10^5$		$2,43 \times 10^5$		$9,69 \times 10^5$		$4,76 \times 10^5$		$2,05 \times 10^5$	$2,71 \times 10^5$
vc (10)	0,075		0,095		0,093		0,098		0,086	0,069
vc (11)	3,29		3,58		2,82		4,81		2,86	4,53
vc (2)	$3,45 \times 10^5$		$2,52 \times 10^5$		$2,52 \times 10^5$		$8,20 \times 10^5$		$4,11 \times 10^5$	$4,76 \times 10^5$
vc (15)	6		6		6		5		8	6
vc (16)	25		39		40		32		38	39
US	508		339		650		593		576	

Tabela B 1.25 Resultados para a configuração GrTBe, função objectivo IAPG-EPS

	1ªoptimização		2ªoptimização		3ªoptimização		4ªoptimização		5ªoptimização	
IAPG_EPS	1,82x10 ⁷	1,48x10 ⁷	1,68x10 ⁷	1,68x10 ⁷	2,27x10 ⁷	2,13x10 ⁷	1,57x10 ⁷	1,55x10 ⁷	1,63x10 ⁷	
IAPG	3,39x10 ⁵	5,64x10 ⁵	4,93x10 ⁵	6,59x10 ⁵	6,94x10 ⁵	6,31x10 ⁵	4,59x10 ⁵	5,71x10 ⁵	6,10x10 ⁵	
VAL1	-1,56x10 ⁸	-1,68x10 ⁸	-1,58x10 ⁸	-1,94x10 ⁸	-1,83x10 ⁸	-1,82x10 ⁸	-1,63x10 ⁸	-1,63x10 ⁸	-1,77x10 ⁸	
VAL2	-2,16x10 ⁸	-2,17x10 ⁸	-2,14x10 ⁸	-2,50x10 ⁸	-2,58x10 ⁸	-2,52x10 ⁸	-2,15x10 ⁸	-2,15x10 ⁸	-2,31x10 ⁸	
Pureza	1,000	0,997	0,998	0,997	0,995	0,997	0,998	0,999	0,999	
Suc0.99	6		Todas		5		Todas		7	
Nsuc	11		8		9		7		13	
vc (1)	48,9	52,1	43,0	68,6	35,6	43,6	48,4	64,9	61,7	
vc (2)	1,5	1,6	1,3	2,1	1,1	1,3	1,4	1,9	1,9	
vc (3)	2,30x10 ⁶	7,05x10 ⁵	1,88x10 ⁶	4,05x10 ⁵	1,16x10 ⁶	5,55x10 ⁵	1,16x10 ⁶	2,06x10 ⁶	8,26x10 ⁵	
vc (4)	0,0062	0,0052	0,0076	0,0067	0,0056	0,0099	0,0050	0,0070	0,0066	
vc (5)	52,7	52,1	43,7	68,3	34,8	44,9	49,1	64,1	61,1	
vc (6)	96,4	102,0	90,1	134,3	132,5	86,7	117,8	114,9	118,4	
vc (7)	0,99171	0,99252	0,99450	0,99765	0,99126	0,99279	0,99054	0,99306	0,99513	
vc (8)	0,99819	0,99459	0,99612	0,99441	0,99576	0,99432	0,99360	0,99846	0,99837	
vc (9)	1,01x10 ⁶	5,97x10 ⁵	8,48x10 ⁵	6,06x10 ⁵	5,03x10 ⁵	7,55x10 ⁵	7,09x10 ⁵	1,03x10 ⁶	2,71x10 ⁵	
vc (10)	0,995	0,992	0,997	0,993	0,995	0,997	0,991	0,998	0,995	
vc (11)	1,10	0,63	0,30	3,91	1,96	2,77	3,67	2,72	2,34	
vc (2)	1,02x10 ⁶	5,03x10 ⁵	6,99x10 ⁵	5,97x10 ⁵	3,54x10 ⁵	1,50x10 ⁵	3,27x10 ⁵	7,18x10 ⁵	8,38x10 ⁵	
vc (13)	0,99693	0,99423	0,99702	0,99090	0,99756	0,99180	0,99441	0,99441	0,99243	
vc (14)	1,41x10 ⁵	3,18x10 ⁵	5,50x10 ⁵	2,43x10 ⁵	9,41x10 ⁵	6,25x10 ⁵	3,54x10 ⁵	5,03x10 ⁵	5,97x10 ⁵	
vc (15)	4	4	4	4	3	3	3	4	4	
vc (16)	30	34	32	34	35	23	34	30	34	
vc (18)	7	7	6	7	6	8	11	6	10	
vc (19)	0,99423	0,99792	0,99567	0,99108	0,99009	0,99387	0,99180	0,99612	0,99450	
US	732		785		850		865		825	

B2. Pesquisa Tabu

Nomenclatura

Desvio	desvio percentual calculado em relação ao melhor valor encontrado para VAL2	
IAPG	impacto ambiental potencial global	
IAPG-EPS	impacto ambiental potencial global (metodologia EPS)	[ELU/ano]
Lt	limite para promover estratégia de intensificação	
M	número total de iterações	
M_i	número total de soluções avaliadas	
N_{suc}	número de soluções aceites	
N_u	número de soluções avaliadas em cada iteração	
Pureza	pureza da corrente de benzeno	
Suc0,99	número de soluções em que a pureza da corrente de benzeno é superior a 0,99	
Us	número da avaliação correspondente ao último sucesso	
VAL1	valor actualizado líquido sem inclusão dos custos dos impactos ambientais EPS	[€]
VAL2	valor actualizado líquido com inclusão dos custos dos impactos ambientais EPS	[€]
vc (1)	caudal de hidrogénio	[mol/s]
vc (2)	caudal de metano	[mol/s]
vc (3)	pressão do flash	[Pa]
vc (4)	fracção molar de benzeno na purga	
vc (5)	caudal da purga	[mol/s]
vc (6)	volume do reactor	[m ³]
vc (7)	fracção molar de tolueno da coluna 2	
vc (8)	fracção molar de benzeno da coluna 2	
vc (9)	pressão da coluna 2	[Pa]
vc (10)	fracção molar de benzeno da coluna 1	
vc (11)	razão de refluxo da coluna 1	
vc (12)	pressão da coluna 1	[Pa]
vc (13)	fracção molar de bifenilo da coluna 3	
vc (14)	pressão da coluna 3	[Pa]
vc (15)	número de pratos da coluna 1	
vc (16)	número de pratos da coluna 2	
vc (17)	número de pratos rectificador	
vc (18)	número de pratos da coluna 3	
vc (19)	fracção molar de tolueno da coluna 3	
vc (20)	fracção molar de tolueno no rectificador	
vc (21)	caudal fixo da coluna 2	[mol/s]

Índice de tabelas

Tabela B 2.1 Ensaios de otimização para escolha dos parâmetros TS – varrimento inicial	1
Tabela B 2.2 Ensaios de otimização para escolha dos parâmetros TS – ensaios adicionais....	1
Tabela B 2.3 Resultados para a configuração A, função objectivo VAL1	3
Tabela B 2.4 Resultados para a configuração Ae, função objectivo VAL1	4
Tabela B 2.5 Resultados para a configuração E, função objectivo VAL1	5
Tabela B 2.6 Resultados para a configuração Ee, função objectivo VAL1	6
Tabela B 2.7 Resultados para a configuração GrTBe, função objectivo VAL1	7
Tabela B 2.8 Resultados para a configuração A, função objectivo VAL2.....	8
Tabela B 2.9 Resultados para a configuração Ae, função objectivo VAL2	9
Tabela B 2.10 Resultados para a configuração E, função objectivo VAL2	10
Tabela B 2.11 Resultados para a configuração Ee, função objectivo VAL2	11
Tabela B 2.12 Resultados para a configuração GrTBe, função objectivo VAL2	12
Tabela B 2.13 Resultados para a configuração A, função objectivo IAPG.....	13
Tabela B 2.14 Resultados para a configuração Ae, função objectivo IAPG.....	14
Tabela B 2.15 Resultados para a configuração E, função objectivo IAPG.....	15
Tabela B 2.16 Resultados para a configuração Ee, função objectivo IAPG.....	16
Tabela B 2.17 Resultados para a configuração GrTBe, função objectivo IAPG	17
Tabela B 2.18 Resultados para a configuração A, função objectivo IAPG-EPS	18
Tabela B 2.19 Resultados para a configuração Ae, função objectivo IAPG-EPS	19
Tabela B 2.20 Resultados para a configuração E, função objectivo IAPG-EPS	20
Tabela B 2.21 Resultados para a configuração Ee, função objectivo IAPG-EPS	21
Tabela B 2.22 Resultados para a configuração GrTBe, função objectivo IAPG-EPS	22
Tabela B 2.23 Resultados para as soluções geradas a partir das melhores soluções de E, Ee e GrTBe - função objectivo VAL1	23
Tabela B 2.24 Resultados para as soluções geradas a partir das melhores soluções de E, Ee e GrTBe - função objectivo IAPG-EPS	24
Tabela B 2.25 Percentagem de soluções inviáveis e/ou que infringiram restrições nas otimizações das configurações E, Ee e GrTBe.....	25
Tabela B 2.26 Resultados da configuração A, função objectivo VAL2 usando pesquisa Tabu com Penalização	25

Parâmetros

Dado que o número total de iterações não será muito elevado é necessário promover estratégias de intensificação. Após um certo número de iterações (serão estudados dois casos, 150 e 300) o algoritmo escolhe a melhor solução da lista tabu de frequência como nova solução. O número de iterações M , é obtido dividindo o número total de avaliações, M_i , pelo número de soluções geradas em cada iteração, N_u . Para a determinação dos parâmetros da pesquisa tabu usaram-se a configuração A e a função objectivo VAL2. Mediante a escolha efectuada para os valores dos parâmetros do recozimento simulado o número total de iterações para a configuração A será de 468, pelo que se utilizou este número para efectuar alguns ensaios, dado que será este o valor considerado uma vez que se pretende comparar os dois métodos. Foram também realizados alguns ensaios considerando valores acima e abaixo deste número de iterações para ver se os valores para VAL2 difeririam significativamente.

Tabela B2.1 Ensaios de optimização para escolha dos parâmetros TS – varrimento inicial

N_u	M_i	M	L_t	VAL2	Pureza	Suc0,99	N_{suc}	Desvio
3	300	100	150	$-2,05 \times 10^8$	0,951	0	2	4,0
3	300	100	150	$-2,00 \times 10^8$	0,933	0	6	1,6
6	300	50	150	$-2,14 \times 10^8$	0,964	0	4	8,7
6	300	50	150	$-2,07 \times 10^8$	0,955	0	3	4,8
3	468	156	150	$-2,00 \times 10^8$	0,951	0	6	1,4
3	468	156	150	$-2,03 \times 10^8$	0,958	0	5	2,9
6	468	78	150	$-2,07 \times 10^8$	0,960	0	5	4,8
6	468	78	150	$-1,98 \times 10^8$	0,950	0	4	0,5
3	600	200	150	$-2,03 \times 10^8$	0,941	0	3	2,9
3	600	200	150	$-2,02 \times 10^8$	0,951	0	3	2,3
6	600	100	150	$-2,07 \times 10^8$	0,939	0	5	4,9
6	600	100	150	$-1,99 \times 10^8$	0,949	0	5	0,8
3	468	156	300	$-2,02 \times 10^8$	0,944	0	4	2,6
3	468	156	300	$-2,03 \times 10^8$	0,942	0	7	3,1

Concluiu-se da tabela anterior que o número de soluções geradas em cada ciclo, N_u , deve ser igual a 3 pois obtiveram-se bons resultados com esse valor. Além disso um valor pequeno para este parâmetro implica que as listas efectuadas serão renovadas mais frequentemente. Dos resultados apresentados também se pode concluir que promover a intensificação após 150 iterações conduz a bons resultados. Pode ainda concluir-se que os resultados não diferem significativamente para as optimizações que consideram um número total de iterações diferente.

Foram ainda realizadas mais 3 optimizações considerando $N_u = 3$, $M_i = 468$ e $L_t = 150$ e partindo da mesma solução inicial, cujos resultados são apresentados na tabela seguinte.

Tabela B2.2 Ensaios de optimização para escolha dos parâmetros TS – ensaios adicionais

N_u	M_i	M	L_t	VAL2	Pureza	Suc0,99	N_{suc}	Desvio
3	468	156	150	$-1,97 \times 10^8$	0,950	1	6	0,0
3	468	156	150	$-2,05 \times 10^8$	0,938	1	3	3,9
3	468	156	150	$-2,08 \times 10^8$	0,962	1	3	5,6

Resultados das optimizações

Tabela B2.3 Resultados para a configuração A, função objectivo VAL1

	1ªoptimização	2ªoptimização	3ªoptimização	4ªoptimização	5ªoptimização
VAL1	-1,53x10 ⁸	-1,50x10 ⁸	-1,52x10 ⁸	-1,48x10 ⁸	-1,52x10 ⁸
VAL2	-2,06x10 ⁸	-2,02x10 ⁸	-2,10x10 ⁸	-2,01x10 ⁸	-2,06x10 ⁸
IAPG	2,15x10 ⁵	2,20x10 ⁵	2,39x10 ⁵	2,08x10 ⁵	2,29x10 ⁵
IAPG-EPS	1,59x10 ⁷	1,58x10 ⁷	1,74x10 ⁷	1,58x10 ⁷	1,65x10 ⁷
Pureza	0,927	0,941	0,936	0,941	0,937
Suc0,99	1	1	0	0	0
Nsuc	3	1	2	3	2
vc (1)	49,8	61,3	40,0	54,2	46,2
vc (2)	1,5	1,8	1,2	1,6	1,4
vc (3)	3,32x10 ⁶	3,28x10 ⁶	2,35x10 ⁶	2,88x10 ⁶	2,71x10 ⁶
vc (4)	0,0067	0,0100	0,0084	0,0077	0,0091
vc (5)	52,8	65,2	42,8	58,0	49,3
vc (6)	111,9	124,6	86,5	89,3	106,3
vc (7)	0,00075	0,00075	0,00076	0,00042	0,00037
vc (8)	0,00085	0,00043	0,00049	0,00030	0,00096
vc (9)	5,38x10 ⁵	7,55x10 ⁵	5,17x10 ⁵	1,86x10 ⁵	3,83x10 ⁵
vc (16)	40	37	31	32	30
US	291	4	138	276	19

Suc0,99

VAL1	-	-
	1,98x10 ⁸	1,79x10 ⁸
VAL2	-	-
	2,79x10 ⁸	2,43x10 ⁸
IAPG	4,37x10 ⁵	3,60x10 ⁵
IAPG-EPS	2,45x10 ⁷	1,92x10 ⁷
Pureza	0,990	0,990
vc (1)	63,1	60,4
vc (2)	1,9	1,8
vc (3)	3,69x10 ⁵	3,69x10 ⁵
vc (4)	0,0070	0,0078
vc (5)	63,0	63,8
vc (6)	99,2	135,9
vc (7)	0,00050	0,00078
vc (8)	0,00100	0,00095
vc (9)	6,00x10 ⁵	1,03x10 ⁶
vc (16)	38	32

Tabela B2.4 Resultados para a configuração Ae, função objectivo VAL1

	1ªoptimização	2ªoptimização	3ªoptimização	4ªoptimização	5ªoptimização
VAL1	-1,47x10 ⁸	-1,43x10 ⁸	-1,49x10 ⁸	-1,46x10 ⁸	-1,45x10 ⁸
VAL2	-1,98x10 ⁸	-1,98x10 ⁸	-2,02x10 ⁸	-2,00x10 ⁸	-1,98x10 ⁸
IAPG	2,50x10 ⁵	2,83x10 ⁵	2,79x10 ⁵	2,78x10 ⁵	2,61x10 ⁵
IAPG-EPS	1,56x10 ⁷	1,65x10 ⁷	1,59x10 ⁷	1,62x10 ⁷	1,61x10 ⁷
Pureza	0,948	0,944	0,953	0,917	0,939
Suc0,99	0	0	1	0	1
Nsuc	4	7	4	2	3
vc (1)	54,3	62,2	59,6	40,9	46,3
vc (2)	1,6	1,9	1,8	1,2	1,4
vc (3)	2,55x10 ⁶	2,95x10 ⁶	2,45x10 ⁶	3,25x10 ⁶	2,61x10 ⁶
vc (4)	0,0096	0,0055	0,0095	0,0076	0,0094
vc (5)	57,2	65,2	60,9	40,6	48,5
vc (6)	119,0	87,8	123,2	119,0	90,7
vc (7)	0,00094	0,00030	0,00031	0,00045	0,00054
vc (8)	0,00068	0,00037	0,00086	0,00064	0,00092
vc (9)	1,65x10 ⁵	9,00x10 ⁵	4,03x10 ⁵	1,34x10 ⁵	1,24x10 ⁵
vc (16)	30	39	34	39	29
US	135	360	273	8	114

Suc0,99

VAL1	-1,71x10 ⁸	-1,67x10 ⁸
VAL2	-2,32x10 ⁸	-2,28x10 ⁸
IAPG	3,43x10 ⁵	3,32x10 ⁵
IAPG-EPS	1,84x10 ⁷	1,84x10 ⁷
Pureza	0,991	0,990
vc (1)	63,1	61,4
vc (2)	1,9	1,8
vc (3)	3,69x10 ⁵	3,69x10 ⁵
vc (4)	0,0068	0,0065
vc (5)	67,4	65,9
vc (6)	124,6	107,7
vc (7)	0,00045	0,00045
vc (8)	0,00052	0,00030
vc (9)	8,38x10 ⁵	8,07x10 ⁵
vc (16)	39	40

Tabela B2.5 Resultados para a configuração E, função objectivo VAL1

	1ª optimização	2ª optimização	3ª optimização	4ª optimização	5ª optimização
VAL1	-1,61x10 ⁸	-1,61x10 ⁸	-1,57x10 ⁸	-1,56x10 ⁸	-1,59x10 ⁸
VAL2	-2,24x10 ⁸	-2,11x10 ⁸	-2,17x10 ⁸	-2,09x10 ⁸	-2,16x10 ⁸
IAPG	2,21x10 ⁵	2,39x10 ⁵	2,06x10 ⁵	2,35x10 ⁵	2,89x10 ⁵
IAPG-EPS	1,90x10 ⁷	1,51x10 ⁷	1,82x10 ⁷	1,59x10 ⁷	1,74x10 ⁷
Pureza	1,000	0,999	0,999	1,000	0,999
Suc0,99	todos	todos	todos	todos	todos
Nsuc	7	4	4	3	5
vc (1)	41,8	68,4	55,1	53,3	57,8
vc (2)	1,2	2,1	1,7	1,6	1,7
vc (3)	2,45x10 ⁶	2,45x10 ⁶	2,98x10 ⁶	2,78x10 ⁶	2,55x10 ⁶
vc (4)	0,0064	0,0090	0,0050	0,0057	0,0069
vc (5)	47,1	71,0	60,8	55,8	59,4
vc (6)	102,0	133,1	90,7	97,8	85,0
vc (7)	0,00038	0,00096	0,00052	0,00031	0,00085
vc (8)	0,00060	0,00090	0,00100	0,00068	0,00080
vc (9)	4,14x10 ⁵	1,45x10 ⁵	3,31x10 ⁵	2,48x10 ⁵	5,48x10 ⁵
vc (10)	0,093	0,094	0,093	0,096	0,092
vc (11)	3,10	3,40	1,65	4,70	4,20
vc (2)	9,10x10 ⁵	7,86x10 ⁵	9,41x10 ⁵	4,76x10 ⁵	5,90x10 ⁵
vc (15)	8	6	6	9	8
vc (16)	40	37	34	38	29
US	637	187	137	353	348

Tabela B2.6 Resultados para a configuração Ee, função objectivo VAL1

	1ª optimização	2ª optimização	3ª optimização	4ª optimização	5ª optimização
VAL1	$-1,86 \times 10^8$	$-1,75 \times 10^8$	$-1,81 \times 10^8$	$-2,04 \times 10^8$	$-1,76 \times 10^8$
VAL2	$-2,54 \times 10^8$	$-2,40 \times 10^8$	$-2,48 \times 10^8$	$-2,92 \times 10^8$	$-2,43 \times 10^8$
IAPG	$3,65 \times 10^5$	$3,60 \times 10^5$	$3,55 \times 10^5$	$5,59 \times 10^5$	$3,50 \times 10^5$
IAPG-EPS	$2,04 \times 10^7$	$1,95 \times 10^7$	$2,00 \times 10^7$	$2,66 \times 10^7$	$2,02 \times 10^7$
Pureza	0,999	0,999	0,999	0,999	0,999
Suc0,99	todos	todos	todos-1	todos	todos
Nsuc	3	4	4	3	4
vc (1)	52,5	65,8	67,6	68,4	68,4
vc (2)	1,6	2,0	2,0	2,1	2,1
vc (3)	$2,72 \times 10^6$	$3,35 \times 10^6$	$3,02 \times 10^6$	$2,45 \times 10^6$	$3,05 \times 10^6$
vc (4)	0,0065	0,0070	0,0082	0,0050	0,0061
vc (5)	52,2	65,9	68,1	68,1	68,1
vc (6)	106,3	127,5	113,3	104,8	92,1
vc (7)	0,00077	0,00092	0,00093	0,00100	0,00097
vc (8)	0,00083	0,00100	0,00041	0,00089	0,00062
vc (9)	$6,52 \times 10^5$	$6,00 \times 10^5$	$4,34 \times 10^5$	$9,41 \times 10^5$	$3,72 \times 10^5$
vc (10)	0,097	0,097	0,089	0,086	0,089
vc (11)	2,15	0,45	3,30	0,90	2,40
vc (2)	$1,00 \times 10^6$	$1,86 \times 10^5$	$8,48 \times 10^5$	$3,41 \times 10^5$	$4,96 \times 10^5$
vc (15)	9	8	10	9	10
vc (16)	38	37	38	29	41
US	246	146	285	469	381

Tabela B2.7 Resultados para a configuração GrTBe, função objectivo VAL1

	1ª optimização	2ª optimização	3ª optimização	4ª optimização	5ª optimização
VAL1	$-1,60 \times 10^8$	$-1,69 \times 10^8$	$-1,59 \times 10^8$	$-1,55 \times 10^8$	$-1,48 \times 10^8$
VAL2	$-2,25 \times 10^8$	$-2,45 \times 10^8$	$-2,14 \times 10^8$	$-2,09 \times 10^8$	$-1,97 \times 10^8$
IAPG	$4,50 \times 10^5$	$2,99 \times 10^5$	$3,37 \times 10^5$	$2,85 \times 10^5$	$3,40 \times 10^5$
IAPG-EPS	$1,94 \times 10^7$	$2,30 \times 10^7$	$1,67 \times 10^7$	$1,62 \times 10^7$	$1,46 \times 10^7$
Pureza	0,999	0,999	1,000	0,999	0,998
Suc0,99	35	29	23	19	27
Nsuc	6	5	4	4	5
vc (1)	57,8	40,0	41,8	61,3	48,9
vc (2)	1,7	1,2	1,2	1,8	1,5
vc (3)	$2,38 \times 10^6$	$3,02 \times 10^6$	$1,34 \times 10^6$	$3,08 \times 10^6$	$3,05 \times 10^6$
vc (4)	0,0086	0,0100	0,0053	0,0073	0,0069
vc (5)	60,8	44,9	45,7	65,2	50,7
vc (6)	87,8	133,1	116,2	134,5	100,6
vc (7)	0,99200	0,99000	0,99601	0,99400	0,99100
vc (8)	0,99400	0,99201	0,99700	0,99402	0,99400
vc (9)	$1,34 \times 10^5$	$2,38 \times 10^5$	$2,07 \times 10^5$	$1,24 \times 10^5$	$3,21 \times 10^5$
vc (10)	0,992	0,993	0,999	0,992	0,991
vc (11)	2,35	1,95	1,00	4,00	0,55
vc (12)	$3,62 \times 10^5$	$7,45 \times 10^5$	$3,93 \times 10^5$	$4,65 \times 10^5$	$2,38 \times 10^5$
vc (13)	0,99200	0,99100	0,99599	0,99600	0,99401
vc (14)	$6,52 \times 10^5$	$7,14 \times 10^5$	$4,65 \times 10^5$	$1,45 \times 10^5$	$2,07 \times 10^5$
vc (15)	3	3	4	3	3
vc (16)	33	42	29	33	30
vc (18)	5	10	8	9	11
vc (19)	0,99799	0,99298	0,99701	0,99000	0,99701
US	779	673	692	812	573

Tabela B2.8 Resultados para a configuração A, função objectivo VAL2

	1ª optimização	2ª optimização	3ª optimização	4ª optimização	5ª optimização
VAL2	$-2,09 \times 10^8$	$-2,00 \times 10^8$	$-2,04 \times 10^8$	$-2,06 \times 10^8$	$-2,10 \times 10^8$
VAL1	$-1,55 \times 10^8$	$-1,51 \times 10^8$	$-1,48 \times 10^8$	$-1,54 \times 10^8$	$-1,54 \times 10^8$
IAPG	$2,49 \times 10^5$	$2,05 \times 10^5$	$2,34 \times 10^5$	$2,43 \times 10^5$	$2,80 \times 10^5$
IAPG-EPS	$1,61 \times 10^7$	$1,46 \times 10^7$	$1,68 \times 10^7$	$1,57 \times 10^7$	$1,69 \times 10^7$
Pureza	0,965	0,951	0,935	0,955	0,966
Suc0,99	0	0	0	0	0
Nsuc	5	6	6	4	5
vc (1)	62,2	63,1	46,2	56,9	68,4
vc (2)	1,9	1,9	1,4	1,7	2,1
vc (3)	$1,74 \times 10^6$	$2,55 \times 10^6$	$2,78 \times 10^6$	$2,18 \times 10^6$	$1,88 \times 10^6$
vc (4)	0,0071	0,0052	0,0089	0,0083	0,0076
vc (5)	65,9	66,6	49,3	59,4	71,7
vc (6)	114,7	126,0	85,0	110,5	85,0
vc (7)	0,00093	0,00080	0,00093	0,00098	0,00041
vc (8)	0,00045	0,00057	0,00083	0,00068	0,00061
vc (9)	$1,01 \times 10^6$	$1,34 \times 10^5$	$7,96 \times 10^5$	$5,38 \times 10^5$	$9,51 \times 10^5$
vc (16)	39	29	39	34	36
US	217	323	207	317	432

Tabela B2.9 Resultados para a configuração Ae, função objectivo VAL2

	1ª optimização	2ª optimização	3ª optimização	4ª optimização	5ª optimização
VAL2	$-1,99 \times 10^8$	$-1,94 \times 10^8$	$-2,02 \times 10^8$	$-1,94 \times 10^8$	$-1,95 \times 10^8$
VAL1	$-1,46 \times 10^8$	$-1,44 \times 10^8$	$-1,44 \times 10^8$	$-1,41 \times 10^8$	$-1,44 \times 10^8$
IAPG	$2,66 \times 10^5$	$2,51 \times 10^5$	$2,84 \times 10^5$	$2,68 \times 10^5$	$2,51 \times 10^5$
IAPG-EPS	$1,60 \times 10^7$	$1,49 \times 10^7$	$1,75 \times 10^7$	$1,58 \times 10^7$	$1,55 \times 10^7$
Pureza	0,956	0,941	0,927	0,938	0,945
Suc0,99	0	0	0	0	1
Nsuc	8	5	4	7	3
vc (1)	66,7	57,8	47,1	60,5	60,5
vc (2)	2,0	1,7	1,4	1,8	1,8
vc (3)	$2,51 \times 10^6$	$3,05 \times 10^6$	$3,28 \times 10^6$	$3,28 \times 10^6$	$3,02 \times 10^6$
vc (4)	0,0094	0,0087	0,0093	0,0060	0,0100
vc (5)	70,3	59,4	50,0	63,0	63,8
vc (6)	103,4	124,6	97,8	102,0	107,7
vc (7)	0,00041	0,00095	0,00050	0,00064	0,00062
vc (8)	0,00091	0,00042	0,00049	0,00089	0,00057
vc (9)	$2,48 \times 10^5$	$1,76 \times 10^5$	$9,83 \times 10^5$	$9,10 \times 10^5$	$1,55 \times 10^5$
vc (16)	24	35	35	40	24
US	444	229	33	127	314

Tabela B2.10 Resultados para a configuração E, função objectivo VAL2

	1ª optimização	2ª optimização	3ª optimização	4ª optimização	5ª optimização
VAL2	-2,10x10 ⁸	-2,09x10 ⁸	-2,12x10 ⁸	-2,06x10 ⁸	-2,19x10 ⁸
VAL1	-1,56x10 ⁸	-1,57x10 ⁸	-1,60x10 ⁸	-1,55x10 ⁸	-1,60x10 ⁸
IAPG	2,29x10 ⁵	2,36x10 ⁵	2,70x10 ⁵	2,22x10 ⁵	2,09x10 ⁵
IAPG-EPS	1,65x10 ⁷	1,55x10 ⁷	1,58x10 ⁷	1,55x10 ⁷	1,76x10 ⁷
Pureza	0,999	0,999	0,999	1,000	0,999
Suc0,99	todos	todos	todos	todos	todos
Nsuc	7	6	5	2	6
vc (1)	45,3	53,3	69,3	66,7	48,0
vc (2)	1,4	1,6	2,1	2,0	1,4
vc (3)	2,85x10 ⁶	3,32x10 ⁶	3,32x10 ⁶	3,32x10 ⁶	2,81x10 ⁶
vc (4)	0,0055	0,0058	0,0082	0,0098	0,0077
vc (5)	47,8	55,1	71,0	70,3	52,9
vc (6)	99,2	130,3	130,3	117,6	116,2
vc (7)	0,00072	0,00076	0,00058	0,00030	0,00071
vc (8)	0,00078	0,00053	0,00073	0,00084	0,00059
vc (9)	3,83x10 ⁵	5,38x10 ⁵	8,89x10 ⁵	2,48x10 ⁵	1,55x10 ⁵
vc (10)	0,084	0,093	0,100	0,097	0,099
vc (11)	0,90	2,50	2,35	1,90	4,10
vc (2)	9,41x10 ⁵	7,96x10 ⁵	3,93x10 ⁵	9,83x10 ⁵	4,24x10 ⁵
vc (15)	7	9	9	6	7
vc (16)	32	39	42	33	30
US	267	607	274	48	594

Tabela B2.11 Resultados para a configuração Ee, função objectivo VAL2

	1ª optimização	2ª optimização	3ª optimização	4ª optimização	5ª optimização
VAL2	-3,28x10 ⁸	-5,88x10 ⁸	-5,81x10 ⁸	-6,00x10 ⁸	-2,14x10 ⁸
VAL1	-2,27x10 ⁸	-4,31x10 ⁸	-4,20x10 ⁸	-4,44x10 ⁸	-1,63x10 ⁸
IAPG	5,36x10 ⁵	1,51x10 ⁶	1,34x10 ⁶	1,45x10 ⁶	2,97x10 ⁵
IAPG-EPS	3,06x10 ⁷	4,76x10 ⁷	4,86x10 ⁷	4,73x10 ⁷	1,54x10 ⁷
Pureza	0,999	1,000	1,000	0,996	0,999
Suc0,99	todos	todos-1	todos	todos	todos-1
Nsuc	7	4	5	3	6
vc (1)	43,6	53,3	39,1	45,3	69,3
vc (2)	1,3	1,6	1,2	1,4	2,1
vc (3)	1,11x10 ⁶	2,75x10 ⁶	2,55x10 ⁶	2,61x10 ⁶	2,78x10 ⁶
vc (4)	0,0060	0,0057	0,0058	0,0069	0,0052
vc (5)	42,7	44,9	31,9	37,0	71,0
vc (6)	135,9	100,6	131,8	138,8	137,4
vc (7)	0,00080	0,00035	0,00030	0,00098	0,00097
vc (8)	0,00068	0,00088	0,00088	0,00081	0,00045
vc (9)	3,21x10 ⁵	5,27x10 ⁵	9,00x10 ⁵	4,65x10 ⁵	4,86x10 ⁵
vc (10)	0,099	0,065	0,094	0,100	0,095
vc (11)	4,60	4,90	3,65	2,15	2,70
vc (2)	5,79x10 ⁵	7,14x10 ⁵	7,45x10 ⁵	4,14x10 ⁵	6,93x10 ⁵
vc (15)	6	5	5	3	6
vc (16)	37	35	35	36	32
US	359	40	579	400	496

Tabela B2.12 Resultados para a configuração GrTBe, função objectivo VAL2

	1ª optimização	2ª optimização	3ª optimização	4ª optimização	5ª optimização
VAL2	-2,40x10 ⁸	-2,06x10 ⁸	-2,15x10 ⁸	-2,11x10 ⁸	-1,98x10 ⁸
VAL1	-1,75x10 ⁸	-1,58x10 ⁸	-1,59x10 ⁸	-1,54x10 ⁸	-1,55x10 ⁸
IAPG	6,25x10 ⁵	6,95x10 ⁵	5,70x10 ⁵	3,72x10 ⁵	6,09x10 ⁵
IAPG-EPS	1,95x10 ⁷	1,46x10 ⁷	1,70x10 ⁷	1,73x10 ⁷	1,30x10 ⁷
Pureza	0,993	0,990	0,993	0,999	0,991
Suc0,99	19	30	20	26	30
Nsuc	4	3	3	3	6
vc (1)	56,9	72,9	37,3	58,7	67,6
vc (2)	1,7	2,2	1,1	1,8	2,0
vc (3)	2,08x10 ⁶	3,05x10 ⁶	2,58x10 ⁶	2,41x10 ⁶	3,05x10 ⁶
vc (4)	0,0051	0,0093	0,0081	0,0087	0,0059
vc (5)	53,6	70,3	36,2	61,6	64,5
vc (6)	127,5	86,5	96,4	92,1	96,3
vc (7)	0,99500	0,99001	0,99400	0,99500	0,99500
vc (8)	0,99200	0,99000	0,99201	0,99500	0,99000
vc (9)	3,72x10 ⁵	7,55x10 ⁵	2,69x10 ⁵	1,02x10 ⁶	4,55x10 ⁵
vc (10)	0,992	0,998	0,992	0,997	0,991
vc (11)	1,55	1,90	4,60	4,85	0,65
vc (2)	4,34x10 ⁵	1,65x10 ⁵	7,34x10 ⁵	3,52x10 ⁵	9,41x10 ⁵
vc (13)	0,99299	0,99900	0,99001	0,99900	0,99601
vc (14)	5,17x10 ⁵	1,34x10 ⁵	8,79x10 ⁵	8,38x10 ⁵	2,79x10 ⁵
vc (15)	3	3	3	3	4
vc (16)	24	37	31	31	36
vc (18)	10	6	8	10	11
vc (19)	0,99302	0,99300	0,99700	0,99899	0,99400
US	662	568	319	354	575

Tabela B2.13 Resultados para a configuração A, função objectivo IAPG

	1ª optimização	2ª optimização	3ª optimização	4ª optimização	5ª optimização
IAPG	$2,06 \times 10^5$	$2,55 \times 10^5$	$2,05 \times 10^5$	$2,13 \times 10^5$	$2,31 \times 10^5$
IAPG-EPS	$1,54 \times 10^7$	$1,68 \times 10^7$	$1,51 \times 10^7$	$1,58 \times 10^7$	$1,65 \times 10^7$
VAL1	$-1,49 \times 10^8$	$-1,64 \times 10^8$	$-1,49 \times 10^8$	$-1,48 \times 10^8$	$-1,54 \times 10^8$
VAL2	$-2,00 \times 10^8$	$-2,19 \times 10^8$	$-1,99 \times 10^8$	$-2,00 \times 10^8$	$-2,09 \times 10^8$
Pureza	0,930	0,968	0,949	0,928	0,958
Suc0,99	0	0	1	0	0
Nsuc	6	4	6	6	6
vc (1)	48,0	42,7	67,5	48,0	61,3
vc (2)	1,4	1,3	2,0	1,4	1,8
vc (3)	$3,02 \times 10^6$	$1,10 \times 10^6$	$2,95 \times 10^6$	$3,25 \times 10^6$	$2,18 \times 10^6$
vc (4)	0,0064	0,0081	0,0082	0,0086	0,0085
vc (5)	50,8	45,0	71,7	50,7	65,9
vc (6)	107,7	130,3	109,1	96,4	111,9
vc (7)	0,00093	0,00096	0,00082	0,00085	0,0004
vc (8)	0,00068	0,00051	0,00066	0,00085	0,00088
vc (9)	$1,76 \times 10^5$	$1,65 \times 10^5$	$2,38 \times 10^5$	$3,00 \times 10^5$	$6,41 \times 10^5$
vc (16)	35	28	31	42	40
US	120	268	69	90	444

Suc0,99

IAPG	$4,29 \times 10^5$
IAPG-EPS	$2,54 \times 10^7$
VAL1	$-2,07 \times 10^8$
VAL2	$-2,91 \times 10^8$
Pureza	0,990
vc (1)	72,0
vc (2)	2,2
vc (3)	$4,02 \times 10^5$
vc (4)	0,0076
vc (5)	71,0
vc (6)	114,7
vc (7)	0,00091
vc (8)	0,00080
vc (9)	$3,62 \times 10^5$
vc (16)	32

Tabela B2.14 Resultados para a configuração Ae, função objectivo IAPG

	1ª optimização	2ª optimização	3ª optimização	4ª optimização	5ª optimização
IAPG	$2,55 \times 10^5$	$2,53 \times 10^5$	$2,67 \times 10^5$	$2,59 \times 10^5$	$2,57 \times 10^5$
IAPG-EPS	$1,61 \times 10^7$	$1,58 \times 10^7$	$1,61 \times 10^7$	$1,51 \times 10^7$	$1,63 \times 10^7$
VAL1	$-1,45 \times 10^8$	$-1,52 \times 10^8$	$-1,51 \times 10^8$	$-1,44 \times 10^8$	$-1,47 \times 10^8$
VAL2	$-1,98 \times 10^8$	$-2,04 \times 10^8$	$-2,04 \times 10^8$	$-1,94 \times 10^8$	$-2,02 \times 10^8$
Pureza	0,929	0,965	0,945	0,940	0,956
Suc0,99	0	1	0	0	0
Nsuc	7	5	3	4	6
vc (1)	46,2	64,9	43,6	61,3	51,6
vc (2)	1,4	1,9	1,3	1,8	1,5
vc (3)	$2,92 \times 10^6$	$1,78 \times 10^6$	$2,11 \times 10^6$	$3,32 \times 10^6$	$1,84 \times 10^6$
vc (4)	0,0053	0,0070	0,0077	0,0094	0,0056
vc (5)	48,6	68,8	45,6	63,0	55,1
vc (6)	120,4	135,9	138,8	121,8	93,5
vc (7)	0,00053	0,00099	0,00098	0,00093	0,00077
vc (8)	0,00074	0,00085	0,00048	0,00077	0,00042
vc (9)	$3,31 \times 10^5$	$1,76 \times 10^5$	$1,97 \times 10^5$	$4,45 \times 10^5$	$1,86 \times 10^5$
vc (16)	33	25	34	39	25
US	256	76	330	19	286

Suc0,99

IAPG	$5,26 \times 10^5$
IAPG-EPS	$2,59 \times 10^7$
VAL1	$-2,07 \times 10^8$
VAL2	$-2,93 \times 10^8$
Pureza	0,991
vc (1)	68,5
vc (2)	2,1
vc (3)	$3,69 \times 10^5$
vc (4)	0,0061
vc (5)	67,4
vc (6)	114,7
vc (7)	0,00048
vc (8)	0,00030
vc (9)	$7,96 \times 10^5$
vc (16)	39

Tabela B2.15 Resultados para a configuração E, função objectivo IAPG

	1ª optimização	2ª optimização	3ª optimização	4ª optimização	5ª optimização
IAPG	$2,02 \times 10^5$	$1,99 \times 10^5$	$2,15 \times 10^5$	$2,10 \times 10^5$	$1,98 \times 10^5$
IAPG-EPS	$2,12 \times 10^7$	$2,01 \times 10^7$	$1,89 \times 10^7$	$2,22 \times 10^7$	$2,44 \times 10^7$
VAL1	$-1,65 \times 10^8$	$-1,61 \times 10^8$	$-1,62 \times 10^8$	$-1,69 \times 10^8$	$-1,73 \times 10^8$
VAL2	$-2,36 \times 10^8$	$-2,28 \times 10^8$	$-2,24 \times 10^8$	$-2,42 \times 10^8$	$-2,54 \times 10^8$
Pureza	0,999	0,999	0,999	0,999	0,999
Suc0,99	todos	todos	todos	todos	todos-1
Nsuc	6	10	4	5	5
vc (1)	60,4	40,9	57,8	42,7	39,1
vc (2)	1,8	1,2	1,7	1,3	1,2
vc (3)	$2,38 \times 10^6$	$3,22 \times 10^6$	$3,08 \times 10^6$	$2,07 \times 10^6$	$2,45 \times 10^6$
vc (4)	0,0070	0,0056	0,0062	0,0057	0,0054
vc (5)	68,8	47,1	63,8	50,8	48,5
vc (6)	106,3	89,3	137,4	130,3	138,8
vc (7)	0,00097	0,00056	0,00078	0,00100	0,00099
vc (8)	0,00035	0,00068	0,00063	0,00080	0,00045
vc (9)	$3,93 \times 10^5$	$1,34 \times 10^5$	$8,79 \times 10^5$	$6,00 \times 10^5$	$5,79 \times 10^5$
vc (10)	0,099	0,100	0,091	0,092	0,089
vc (11)	4,90	3,20	1,75	2,25	1,80
vc (2)	$8,38 \times 10^5$	$8,38 \times 10^5$	$4,24 \times 10^5$	$9,62 \times 10^5$	$5,90 \times 10^5$
vc (15)	8	6	6	7	9
vc (16)	37	32	36	30	40
US	614	474	468	574	605

Tabela B2.16 Resultados para a configuração Ee, função objectivo IAPG

	1ªoptimização	2ªoptimização	3ªoptimização	4ªoptimização	5ªoptimização
IAPG	$1,06 \times 10^6$	$4,25 \times 10^5$	$3,92 \times 10^5$	$1,20 \times 10^6$	$3,19 \times 10^5$
IAPG-EPS	$4,71 \times 10^7$	$2,21 \times 10^7$	$2,11 \times 10^7$	$5,04 \times 10^7$	$1,72 \times 10^7$
VAL1	$-4,29 \times 10^8$	$-2,05 \times 10^8$	$-1,78 \times 10^8$	$-4,49 \times 10^8$	$-1,90 \times 10^8$
VAL2	$-5,85 \times 10^8$	$-2,78 \times 10^8$	$-2,48 \times 10^8$	$-6,16 \times 10^8$	$-2,47 \times 10^8$
Pureza	0,999	0,999	0,999	1,000	1,000
Suc0,99	todos	todos	todos	todos	todos
Nsuc	8	4	5	5	2
vc (1)	62,2	54,2	43,5	66,6	58,7
vc (2)	1,9	1,6	1,3	2,0	1,8
vc (3)	$1,04 \times 10^6$	$2,21 \times 10^6$	$3,08 \times 10^6$	$1,27 \times 10^6$	$3,35 \times 10^6$
vc (4)	0,0097	0,0077	0,0064	0,0057	0,0086
vc (5)	61,6	53,6	42,0	63,1	59,4
vc (6)	126,1	111,9	117,6	121,8	113,3
vc (7)	0,00093	0,00061	0,00080	0,00041	0,00048
vc (8)	0,00081	0,00093	0,00084	0,00100	0,00036
vc (9)	$9,10 \times 10^5$	$8,27 \times 10^5$	$9,62 \times 10^5$	$1,97 \times 10^5$	$5,58 \times 10^5$
vc (10)	0,082	0,093	0,092	0,075	0,081
vc (11)	3,90	3,55	0,70	4,95	2,20
vc (2)	$3,10 \times 10^5$	$4,55 \times 10^5$	$8,17 \times 10^5$	$3,52 \times 10^5$	$9,72 \times 10^5$
vc (15)	6	9	9	9	8
vc (16)	29	33	37	34	38
US	446	387	336	480	32

Tabela B2.17 Resultados para a configuração GrTBe, função objectivo IAPG

	1ª optimização	2ª optimização	3ª optimização	4ª optimização	5ª optimização
IAPG	$2,71 \times 10^5$	$2,59 \times 10^5$	$2,84 \times 10^5$	$2,65 \times 10^5$	$2,77 \times 10^5$
IAPG-EPS	$3,19 \times 10^7$	$3,01 \times 10^7$	$3,13 \times 10^7$	$3,78 \times 10^7$	$3,44 \times 10^7$
VAL1	$-1,86 \times 10^8$	$-1,81 \times 10^8$	$-1,82 \times 10^8$	$-1,99 \times 10^8$	$-1,95 \times 10^8$
VAL2	$-2,91 \times 10^8$	$-2,80 \times 10^8$	$-2,85 \times 10^8$	$-3,24 \times 10^8$	$-3,09 \times 10^8$
Pureza	0,999	1,000	0,999	0,993	1,000
Suc0,99	28	26	24	22	27
Nsuc	3	2	4	1	4
vc (1)	49,8	54,2	43,5	40,9	52,4
vc (2)	1,5	1,6	1,3	1,2	1,6
vc (3)	$2,21 \times 10^6$	$2,01 \times 10^6$	$2,55 \times 10^6$	$2,55 \times 10^6$	$1,47 \times 10^6$
vc (4)	0,0057	0,0075	0,0066	0,0092	0,0050
vc (5)	63,8	68,1	55,8	57,2	68,1
vc (6)	130,3	119,0	99,2	134,5	135,9
vc (7)	0,99201	0,99101	0,99900	0,99201	0,99001
vc (8)	0,99900	0,99001	0,99900	0,99600	0,99400
vc (9)	$5,27 \times 10^5$	$4,65 \times 10^5$	$6,72 \times 10^5$	$5,69 \times 10^5$	$9,93 \times 10^5$
vc (10)	0,994	0,992	0,992	0,991	0,995
vc (11)	1,90	0,25	3,05	1,70	2,60
vc (2)	$3,21 \times 10^5$	$1,14 \times 10^5$	$6,62 \times 10^5$	$8,38 \times 10^5$	$9,51 \times 10^5$
vc (13)	0,99600	0,99900	0,99300	0,99500	0,99700
vc (14)	$5,69 \times 10^5$	$1,14 \times 10^5$	$7,76 \times 10^5$	$5,27 \times 10^5$	$4,65 \times 10^5$
vc (15)	3	3	3	3	4
vc (16)	37	26	35	32	33
vc (18)	9	9	9	11	7
vc (19)	0,99600	0,99900	0,99001	0,99001	0,99600
US	379	71	824	11	364

Tabela B2.18 Resultados para a configuração A, função objectivo IAPG-EPS

	1ª optimização	2ª optimização	3ª optimização	4ª optimização	5ª optimização
IAPG_EPS	$1,51 \times 10^7$	$1,47 \times 10^7$	$1,59 \times 10^7$	$1,58 \times 10^7$	$1,56 \times 10^7$
IAPG	$2,13 \times 10^5$	$2,23 \times 10^5$	$2,32 \times 10^5$	$2,18 \times 10^5$	$2,30 \times 10^5$
VAL1	$-1,54 \times 10^8$	$-1,57 \times 10^8$	$-1,53 \times 10^8$	$-1,56 \times 10^8$	$-1,55 \times 10^8$
VAL2	$-2,04 \times 10^8$	$-2,06 \times 10^8$	$-2,06 \times 10^8$	$-2,08 \times 10^8$	$-2,06 \times 10^8$
Pureza	0,946	0,959	0,947	0,968	0,958
Suc0,99	0	0	1	0	0
Nsuc	3	7	3	4	5
vc (1)	56,9	59,6	53,3	61,4	54,2
vc (2)	1,7	1,8	1,6	1,8	1,6
vc (3)	$2,71 \times 10^6$	$1,91 \times 10^6$	$2,35 \times 10^6$	$1,57 \times 10^6$	$1,94 \times 10^6$
vc (4)	0,0083	0,0050	0,0051	0,0093	0,0086
vc (5)	60,1	62,3	56,5	65,9	57,2
vc (6)	137,4	131,7	133,1	99,2	109,1
vc (7)	0,00043	0,00066	0,00093	0,00073	0,00039
vc (8)	0,00032	0,00087	0,00046	0,00079	0,00059
vc (9)	$1,65 \times 10^5$	$1,14 \times 10^5$	$9,10 \times 10^5$	$1,14 \times 10^5$	$1,45 \times 10^5$
vc (16)	39	42	42	32	28
US	103	155	144	184	219

Suc0,99

IAPG_EPS	$3,59 \times 10^7$
IAPG	$6,40 \times 10^5$
VAL1	$-2,55 \times 10^8$
VAL2	$-3,74 \times 10^8$
Pureza	0,990
vc (1)	72,9
vc (2)	2,2
vc (3)	$4,03 \times 10^5$
vc (4)	0,0085
vc (5)	68,8
vc (6)	110,5
vc (7)	0,00042
vc (8)	0,00090
vc (9)	$6,10 \times 10^5$
vc (16)	36

Tabela B2.19 Resultados para a configuração Ae, função objectivo IAPG-EPS

	1ª optimização	2ª optimização	3ª optimização	4ª optimização	5ª optimização
IAPG_EPS	$1,52 \times 10^7$	$1,57 \times 10^7$	$1,61 \times 10^7$	$1,46 \times 10^7$	$1,62 \times 10^7$
IAPG	$2,65 \times 10^5$	$3,02 \times 10^5$	$2,91 \times 10^5$	$2,53 \times 10^5$	$2,94 \times 10^5$
VAL1	$-1,52 \times 10^8$	$-1,52 \times 10^8$	$-1,58 \times 10^8$	$-1,46 \times 10^8$	$-1,46 \times 10^8$
VAL2	$-2,02 \times 10^8$	$-2,04 \times 10^8$	$-2,11 \times 10^8$	$-1,94 \times 10^8$	$-2,00 \times 10^8$
Pureza	0,966	0,966	0,978	0,956	0,945
Suc0,99	0	0	0	1	0
Nsuc	3	5	8	2	7
vc (1)	67,6	69,3	64,9	66,7	64,0
vc (2)	2,0	2,1	1,9	2,0	1,9
vc (3)	$1,84 \times 10^6$	$1,78 \times 10^6$	$1,01 \times 10^6$	$2,38 \times 10^6$	$3,08 \times 10^6$
vc (4)	0,0079	0,0053	0,0054	0,0061	0,0083
vc (5)	68,8	69,5	68,1	68,8	65,2
vc (6)	123,2	138,8	120,4	117,6	97,8
vc (7)	0,00050	0,00066	0,00095	0,00083	0,00035
vc (8)	0,00069	0,00085	0,00063	0,00098	0,00038
vc (9)	$1,86 \times 10^5$	$8,69 \times 10^5$	$5,07 \times 10^5$	$1,45 \times 10^5$	$2,38 \times 10^5$
vc (16)	37	34	39	29	38
US	142	171	421	36	273

Suc0,99

IAPG_EPS	$4,11 \times 10^7$
IAPG	$8,91 \times 10^5$
VAL1	$-2,57 \times 10^8$
VAL2	$-3,93 \times 10^8$
Pureza	0,990
vc (1)	73,7
vc (2)	2,2
vc (3)	$4,01 \times 10^5$
vc (4)	0,0067
vc (5)	71,0
vc (6)	114,7
vc (7)	0,00057
vc (8)	0,00071
vc (9)	$7,14 \times 10^5$
vc (16)	27

Tabela B2.20 Resultados para a configuração E, função objectivo IAPG-EPS

	1ª optimização	2ª optimização	3ª optimização	4ª optimização	5ª optimização
IAPG_EPS	$1,53 \times 10^7$	$1,54 \times 10^7$	$1,63 \times 10^7$	$1,60 \times 10^7$	$1,69 \times 10^7$
IAPG	$2,45 \times 10^5$	$2,16 \times 10^5$	$2,31 \times 10^5$	$2,56 \times 10^5$	$2,93 \times 10^5$
VAL1	$-1,61 \times 10^8$	$-1,61 \times 10^8$	$-1,56 \times 10^8$	$-1,62 \times 10^8$	$-1,68 \times 10^8$
VAL2	$-2,12 \times 10^8$	$-2,12 \times 10^8$	$-2,10 \times 10^8$	$-2,15 \times 10^8$	$-2,24 \times 10^8$
Pureza	1,000	0,999	0,999	0,999	1,000
Suc0,99	todos	todos	todos	todos	todos-1
Nsuc	7	6	6	4	3
vc (1)	64,9	66,7	60,4	51,6	54,2
vc (2)	1,9	2,0	1,8	1,5	1,6
vc (3)	$1,64 \times 10^6$	$2,28 \times 10^6$	$2,38 \times 10^6$	$2,08 \times 10^6$	$1,47 \times 10^6$
vc (4)	0,0055	0,0069	0,0100	0,0054	0,0076
vc (5)	67,4	71,0	64,5	52,9	56,5
vc (6)	97,8	138,8	85,0	116,2	135,9
vc (7)	0,00042	0,00051	0,00059	0,00070	0,00036
vc (8)	0,00084	0,00055	0,00059	0,00075	0,00083
vc (9)	$1,03 \times 10^5$	$1,03 \times 10^5$	$3,93 \times 10^5$	$2,48 \times 10^5$	$7,14 \times 10^5$
vc (10)	0,099	0,089	0,089	0,088	0,093
vc (11)	1,05	2,10	2,40	3,45	2,40
vc (2)	$4,24 \times 10^5$	$8,17 \times 10^5$	$6,93 \times 10^5$	$9,10 \times 10^5$	$6,62 \times 10^5$
vc (15)	5	8	10	8	8
vc (16)	40	38	38	42	35
US	242	539	339	51	81

Tabela B2.21 Resultados para a configuração Ee, função objectivo IAPG-EPS

	1ª optimização	2ª optimização	3ª optimização	4ª optimização	5ª optimização
IAPG_EPS	$4,14 \times 10^7$	$4,66 \times 10^7$	$2,61 \times 10^7$	$1,69 \times 10^7$	$1,96 \times 10^7$
IAPG	$1,22 \times 10^6$	$1,73 \times 10^6$	$5,44 \times 10^5$	$3,30 \times 10^5$	$3,97 \times 10^5$
VAL1	$-3,55 \times 10^8$	$-4,59 \times 10^8$	$-1,98 \times 10^8$	$-1,70 \times 10^8$	$-2,13 \times 10^8$
VAL2	$-4,92 \times 10^8$	$-6,14 \times 10^8$	$-2,84 \times 10^8$	$-2,26 \times 10^8$	$-2,77 \times 10^8$
Pureza	0,998	0,999	0,999	1,000	0,999
Suc0,99	todos	todos	todos	todos	todos-1
Nsuc	5	3	4	5	6
vc (1)	64,0	36,4	40,9	53,3	56,9
vc (2)	1,9	1,1	1,2	1,6	1,7
vc (3)	$3,25 \times 10^6$	$3,05 \times 10^6$	$2,85 \times 10^6$	$2,68 \times 10^6$	$2,41 \times 10^6$
vc (4)	0,0051	0,0078	0,0060	0,0059	0,0092
vc (5)	56,5	25,4	39,8	54,3	58,7
vc (6)	117,6	117,6	138,8	131,7	140,2
vc (7)	0,00066	0,00087	0,00052	0,00043	0,00085
vc (8)	0,00057	0,00071	0,00056	0,00076	0,00097
vc (9)	$4,76 \times 10^5$	$1,86 \times 10^5$	$3,31 \times 10^5$	$5,69 \times 10^5$	$9,20 \times 10^5$
vc (10)	0,067	0,064	0,088	0,083	0,092
vc (11)	1,20	4,30	2,70	4,45	4,85
vc (2)	$1,86 \times 10^5$	$3,52 \times 10^5$	$7,14 \times 10^5$	$4,55 \times 10^5$	$9,93 \times 10^5$
vc (15)	3	10	10	8	9
vc (16)	34	42	24	32	29
US	397	103	305	643	432

Tabela B2.22 Resultados para a configuração GrTBe, função objectivo IAPG-EPS

	1ª optimização	2ª optimização	3ª optimização	4ª optimização	5ª optimização
IAPG_EPS	$1,44 \times 10^7$	$1,79 \times 10^7$	$1,55 \times 10^7$	$1,75 \times 10^7$	$1,62 \times 10^7$
IAPG	$4,67 \times 10^5$	$7,74 \times 10^5$	$5,12 \times 10^5$	$6,66 \times 10^5$	$3,73 \times 10^5$
VAL1	$-1,50 \times 10^8$	$-1,79 \times 10^8$	$-1,67 \times 10^8$	$-1,75 \times 10^8$	$-1,54 \times 10^8$
VAL2	$-1,98 \times 10^8$	$-2,39 \times 10^8$	$-2,18 \times 10^8$	$-2,33 \times 10^8$	$-2,08 \times 10^8$
Pureza	0,996	0,995	0,999	0,999	1,000
Suc0,99	27	33	25	25	40
Nsuc	3	10	7	4	4
vc (1)	40,0	64,9	50,7	48,9	69,3
vc (2)	1,2	1,9	1,5	1,5	2,1
vc (3)	$3,05 \times 10^6$	$1,84 \times 10^6$	$9,05 \times 10^5$	$1,54 \times 10^6$	$2,38 \times 10^6$
vc (4)	0,0060	0,0072	0,0095	0,0052	0,0087
vc (5)	39,1	60,9	51,5	46,3	72,5
vc (6)	107,6	113,3	99,2	123,2	111,9
vc (7)	0,99499	0,99600	0,99900	0,99800	0,99601
vc (8)	0,99200	0,99599	0,99799	0,99898	0,99900
vc (9)	$4,03 \times 10^5$	$1,97 \times 10^5$	$4,14 \times 10^5$	$9,31 \times 10^5$	$9,51 \times 10^5$
vc (10)	0,994	0,999	0,998	0,994	0,993
vc (11)	1,15	3,15	3,20	2,65	2,55
vc (2)	$3,21 \times 10^5$	$7,14 \times 10^5$	$6,00 \times 10^5$	$3,00 \times 10^5$	$2,48 \times 10^5$
vc (13)	0,99202	0,99500	0,99400	0,99802	0,99202
vc (14)	$1,02 \times 10^6$	$6,62 \times 10^5$	$2,69 \times 10^5$	$4,96 \times 10^5$	$4,86 \times 10^5$
vc (15)	3	4	4	3	3
vc (16)	29	35	41	40	38
vc (18)	8	11	6	8	7
vc (19)	0,99300	0,99600	0,99900	0,99700	0,99502
US	851	733	660	870	362

Tabela B2.23 Resultados para as soluções geradas a partir das melhores soluções de E, Ee e GrTBe - função objectivo VAL1

Soluções	Configuração E				Configuração Ee				Configuração GrTBe			
	VAL1	VAL2	IAPG	IAPG-EPS	VAL1	VAL2	IAPG	IAPG-EPS	VAL1	VAL2	IAPG	IAPG-EPS
Nominal	-1,56x10 ⁸	-2,09x10 ⁸	2,35x10 ⁵	1,59x10 ⁷	-1,75x10 ⁸	-2,40x10 ⁸	3,60x10 ⁵	1,95x10 ⁷	-1,48x10 ⁸	-1,97x10 ⁸	3,40x10 ⁵	1,46x10 ⁷
1^a	Não convergiu				Infringiu restrições				-1,54x10 ⁸	-2,13x10 ⁸	2,92x10 ⁵	1,76x10 ⁷
2^a	Não convergiu				Não convergiu				-1,49x10 ⁸	-1,97x10 ⁸	3,44x10 ⁵	1,46x10 ⁷
3^a	-1,56x10 ⁸	-2,09x10 ⁸	2,35x10 ⁵	1,59x10 ⁷	Não convergiu				-1,48x10 ⁸	-1,97x10 ⁸	3,38x10 ⁵	1,46x10 ⁷
4^a	-1,70x10 ⁸	-2,36x10 ⁸	3,04x10 ⁵	2,00x10 ⁷	Não convergiu				-1,47x10 ⁸	-1,91x10 ⁸	4,39x10 ⁵	1,30x10 ⁷
5^a	-1,56x10 ⁸	-2,09x10 ⁸	2,36x10 ⁵	1,59x10 ⁷	-1,75x10 ⁸	-2,40x10 ⁸	3,63x10 ⁵	1,98x10 ⁷	-1,48x10 ⁸	-1,96x10 ⁸	3,42x10 ⁵	1,46x10 ⁷
6^a	-1,56x10 ⁸	-2,09x10 ⁸	2,35x10 ⁵	1,59x10 ⁷	-1,75x10 ⁸	-2,40x10 ⁸	3,61x10 ⁵	1,96x10 ⁷	-1,48x10 ⁸	-1,97x10 ⁸	3,40x10 ⁵	1,46x10 ⁷
7^a	-1,56x10 ⁸	-2,09x10 ⁸	2,35x10 ⁵	1,59x10 ⁷	-1,75x10 ⁸	-2,40x10 ⁸	3,60x10 ⁵	1,95x10 ⁷	-1,48x10 ⁸	-1,96x10 ⁸	3,37x10 ⁵	1,45x10 ⁷
8^a	-1,56x10 ⁸	-2,09x10 ⁸	2,35x10 ⁵	1,59x10 ⁷	-1,75x10 ⁸	-2,39x10 ⁸	3,59x10 ⁵	1,95x10 ⁷	-1,47x10 ⁸	-1,95x10 ⁸	3,54x10 ⁵	1,43x10 ⁷
9^a	Não convergiu				-1,75x10 ⁸	-2,40x10 ⁸	3,60x10 ⁵	1,95x10 ⁷	Não convergiu			
10^a	-1,56x10 ⁸	-2,09x10 ⁸	2,35x10 ⁵	1,59x10 ⁷	-1,75x10 ⁸	-2,40x10 ⁸	3,60x10 ⁵	1,95x10 ⁷	-1,48x10 ⁸	-1,97x10 ⁸	3,40x10 ⁵	1,46x10 ⁷
11^a	-1,56x10 ⁸	-2,09x10 ⁸	2,35x10 ⁵	1,59x10 ⁷	-1,76x10 ⁸	-2,40x10 ⁸	3,60x10 ⁵	1,95x10 ⁷	Não convergiu			
12^a	Não convergiu				Não convergiu				-1,48x10 ⁸	-1,97x10 ⁸	3,39x10 ⁵	1,46x10 ⁷
13^a	-1,56x10 ⁸	-2,09x10 ⁸	2,35x10 ⁵	1,59x10 ⁷	-1,75x10 ⁸	-2,40x10 ⁸	3,62x10 ⁵	1,96x10 ⁷	-1,48x10 ⁸	-1,97x10 ⁸	3,40x10 ⁵	1,46x10 ⁷
14^a									-1,48x10 ⁸	-1,97x10 ⁸	3,40x10 ⁵	1,46x10 ⁷
15^a									-1,48x10 ⁸	-1,96x10 ⁸	3,40x10 ⁵	1,46x10 ⁷
16^a									-1,48x10 ⁸	-1,97x10 ⁸	3,40x10 ⁵	1,46x10 ⁷
17^a									-1,48x10 ⁸	-1,96x10 ⁸	3,43x10 ⁵	1,45x10 ⁷

Tabela B2.24 Resultados para as soluções geradas a partir das melhores soluções de E, Ee e GrTBe - função objectivo IAPG-EPS

Soluções	Configuração E				Configuração Ee				Configuração GrTBe			
	VAL1	VAL2	IAPG	IAPG-EPS	VAL1	VAL2	IAPG	IAPG-EPS	VAL1	VAL2	IAPG	IAPG-EPS
Nominal	-1,61x10 ⁸	-2,12x10 ⁸	2,44x10 ⁵	1,53x10 ⁷	-1,70x10 ⁸	-2,26x10 ⁸	3,30x10 ⁵	1,69x10 ⁷	-1,50x10 ⁸	-1,98x10 ⁸	4,56x10 ⁵	1,44x10 ⁷
1^a	Não convergiu				Não convergiu				Infringiu restrições			
2^a	-1,61x10 ⁸	-2,12x10 ⁸	2,47x10 ⁵	1,54x10 ⁷	Não convergiu				-1,51x10 ⁸	-2,00x10 ⁸	4,75x10 ⁵	1,46x10 ⁷
3^a	-1,61x10 ⁸	-2,11x10 ⁸	2,44x10 ⁵	1,53x10 ⁷	-1,70x10 ⁸	-2,25x10 ⁸	3,29x10 ⁵	1,68x10 ⁷	-1,50x10 ⁸	-1,97x10 ⁸	4,57x10 ⁵	1,44x10 ⁷
4^a	Infringiu restrições				Não convergiu				-1,53x10 ⁸	-2,01x10 ⁸	5,93x10 ⁵	1,43x10 ⁷
5^a	-1,60x10 ⁸	-2,11x10 ⁸	2,44x10 ⁵	1,54x10 ⁷	Não convergiu				-1,49x10 ⁸	-1,97x10 ⁸	4,63x10 ⁵	1,44x10 ⁷
6^a	-1,61x10 ⁸	-2,12x10 ⁸	2,45x10 ⁵	1,53x10 ⁷	-1,70x10 ⁸	-2,26x10 ⁸	3,31x10 ⁵	1,69x10 ⁷	-1,50x10 ⁸	-1,97x10 ⁸	4,56x10 ⁵	1,44x10 ⁷
7^a	-1,61x10 ⁸	-2,12x10 ⁸	2,44x10 ⁵	1,53x10 ⁷	-1,70x10 ⁸	-2,26x10 ⁸	3,31x10 ⁵	1,69x10 ⁷	-1,50x10 ⁸	-1,97x10 ⁸	4,57x10 ⁵	1,43x10 ⁷
8^a	-1,61x10 ⁸	-2,12x10 ⁸	2,44x10 ⁵	1,53x10 ⁷	-1,70x10 ⁸	-2,25x10 ⁸	3,28x10 ⁵	1,68x10 ⁷	-1,50x10 ⁸	-1,98x10 ⁸	4,61x10 ⁵	1,44x10 ⁷
9^a	Não convergiu				Não convergiu				Infringiu restrições			
10^a	-1,61x10 ⁸	-2,12x10 ⁸	2,44x10 ⁵	1,53x10 ⁷	Não convergiu				-1,50x10 ⁸	-1,98x10 ⁸	4,62x10 ⁵	1,45x10 ⁷
11^a	-1,61x10 ⁸	-2,12x10 ⁸	2,44x10 ⁵	1,53x10 ⁷	Não convergiu				Infringiu restrições			
12^a	Não convergiu				Não convergiu				-1,50x10 ⁸	-1,98x10 ⁸	4,55x10 ⁵	1,44x10 ⁷
13^a	-1,61x10 ⁸	-2,11x10 ⁸	2,44x10 ⁵	1,53x10 ⁷	-1,71x10 ⁸	-2,29x10 ⁸	3,45x10 ⁵	1,74x10 ⁷	-1,50x10 ⁸	-1,98x10 ⁸	4,58x10 ⁵	1,44x10 ⁷
14^a									-1,50x10 ⁸	-1,98x10 ⁸	4,56x10 ⁵	1,44x10 ⁷
15^a									-1,50x10 ⁸	-1,98x10 ⁸	4,62x10 ⁵	1,45x10 ⁷
16^a									-1,50x10 ⁸	-1,98x10 ⁸	4,58x10 ⁵	1,45x10 ⁷
17^a									-1,50x10 ⁸	-1,97x10 ⁸	4,55x10 ⁵	1,44x10 ⁷

Tabela B2.25 Percentagem de soluções inviáveis e/ou que infringiram restrições nas optimizações das configurações E, Ee e GrTBe

	E	Ee	GrTBe	E	Ee	GrTBe
	VAL1			VAL2		
1ª Optimização	77,8	82,1	89,0	76,8	83,3	90,7
2ª Optimização	77,4	82,4	89,7	79,4	84,5	89,4
3ª Optimização	79,9	83,1	88,8	73,5	85,1	88,2
4ª Optimização	77,4	84,0	89,6	78,7	83,9	87,4
5ª Optimização	76,5	85,4	88,5	79,0	80,8	87,3
	IAPG			IAPG-EPS		
	E	Ee	GrTBe	E	Ee	GrTBe
1ª Optimização	79,0	82,1	89,1	77,8	85,1	90,2
2ª Optimização	77,2	83,4	89,7	75,0	80,8	87,2
3ª Optimização	79,3	85,9	88,9	77,8	85,5	87,7
4ª Optimização	79,4	81,8	88,7	79,0	83,0	88,7
5ª Optimização	77,5	83,6	89,4	77,2	81,1	88,0

Tabela B2.26 Resultados da configuração A, função objectivo VAL2 usando pesquisa Tabu com Penalização

	1ª optimização	2ª optimização	3ª optimização	4ª optimização	5ª optimização
VAL2	-2,85x10 ⁸	-2,05x10 ⁸ *	-3,37x10 ⁸	-3,09x10 ⁸	-2,04x10 ⁸ *
VAL1	-2,06x10 ⁸	-1,53x10 ⁸	-2,36x10 ⁸	-2,14x10 ⁸	-1,52x10 ⁸
IAPG	4,17x10 ⁵	2,47x10 ⁵	5,14x10 ⁵	5,04x10 ⁵	2,13x10 ⁵
IAPG-EPS	2,38x10 ⁷	1,56x10 ⁷	3,03x10 ⁷	2,87x10 ⁷	1,54x10 ⁷
Pureza	0,991	0,948	0,990	0,991	0,941
Suc0,99	1	0	1	2	0

*valores sem o factor de penalização (-1,5x10⁸)

B3. Optimizaç o Multi-objectivo Recozimento Simulado

Nomenclatura

IAPG	impacto ambiental potencial global	
IAPG-EPS	impacto ambiental potencial global (metodologia EPS)	[ELU/ano]
Pureza	pureza da corrente de benzeno	
VAL1	valor actualizado líquido sem inclusão dos custos dos impactos ambientais EPS	[€]
VAL2	valor actualizado líquido com inclusão dos custos dos impactos ambientais EPS	[€]
vc (1)	caudal de hidrogénio	[mol/s]
vc (2)	caudal de metano	[mol/s]
vc (3)	pressão do flash	[Pa]
vc (4)	fracção molar de benzeno na purga	
vc (5)	caudal da purga	[mol/s]
vc (6)	volume do reactor	[m ³]
vc (7)	fracção molar de tolueno da coluna 2	
vc (8)	fracção molar de benzeno da coluna 2	
vc (9)	pressão da coluna 2	[Pa]
vc (10)	fracção molar de benzeno da coluna 1	
vc (11)	razão de refluxo da coluna 1	
vc (12)	pressão da coluna 1	[Pa]
vc (13)	fracção molar de bifenilo da coluna 3	
vc (14)	pressão da coluna 3	[Pa]
vc (15)	número de pratos da coluna 1	
vc (16)	número de pratos da coluna 2	
vc (17)	número de pratos rectificador	
vc (18)	número de pratos da coluna 3	
vc (19)	fracção molar de tolueno da coluna 3	
vc (20)	fracção molar de tolueno no rectificador	
vc (21)	caudal fixo da coluna 2	[mol/s]

Índice de tabelas

Tabela B3.1 Resultados das cinco otimizações multi-objectivo considerando VAL1 como a primeira função objectivo – Configuração E	2
Tabela B3.2 Resultados das cinco otimizações multi-objectivo considerando IAPG como a primeira função objectivo– Configuração E	3
Tabela B3.3 Resultados das cinco otimizações multi-objectivo considerando VAL1 como a primeira função objectivo – Configuração Ee	4
Tabela B3.4 Resultados das cinco otimizações multi-objectivo considerando IAPG como a primeira função objectivo – Configuração Ee	5
Tabela B3.5 Resultados das cinco otimizações multi-objectivo considerando VAL1 como a primeira função objectivo – Configuração GrTBe	6
Tabela B3.6 Resultados das cinco otimizações multi-objectivo considerando IAPG como a primeira função objectivo – Configuração GrTBe	7

Resultados das optimizações

Tabela B3.1 Resultados das cinco otimizações multi-objectivo considerando VAL1 como a primeira função objectivo – Configuração E

Optimização	1		2	3			4			5		
VAL1	-1,74x10 ⁸	-1,60x10 ⁸	-1,61x10 ⁸	-1,62x10 ⁸	-1,68x10 ⁸	-1,56x10 ⁸	-1,67x10 ⁸	-1,59x10 ⁸	-1,65x10 ⁸	-1,59x10 ⁸	-1,66x10 ⁸	-1,58x10 ⁸
IAPG	2,23x10 ⁵	2,34x10 ⁵	2,19x10 ⁵	2,28x10 ⁵	2,03x10 ⁵	2,33x10 ⁵	1,99x10 ⁵	2,24x10 ⁵	2,20x10 ⁵	2,25x10 ⁵	1,97x10 ⁵	2,49x10 ⁵
VAL2	-2,50x10 ⁸	-2,19x10 ⁸	-2,16x10 ⁸	-2,25x10 ⁸	-2,39x10 ⁸	-2,13x10 ⁸	-2,44x10 ⁸	-2,17x10 ⁸	-2,31x10 ⁸	-2,12x10 ⁸	-2,39x10 ⁸	-2,12x10 ⁸
IAPG-EPS	2,30x10 ⁷	1,79x10 ⁷	1,65x10 ⁷	1,89x10 ⁷	2,16x10 ⁷	1,71x10 ⁷	2,32x10 ⁷	1,77x10 ⁷	2,00x10 ⁷	1,59x10 ⁷	2,19x10 ⁷	1,63x10 ⁷
Pureza	0,999	0,999	0,999	0,999	0,999	0,999	0,999	0,999	1,000	0,999	0,999	1,000
Nºsucessos	3		5	4			5			8		
vc (1)	61,7	61,7	57,9	37,7	60,6	57,9	49,4	44,6	50,5	64,9	39,8	53,7
vc (2)	1,9	1,9	1,7	1,1	1,8	1,7	1,5	1,3	1,5	1,9	1,2	1,6
vc (3)	1,25x10 ⁶	1,85x10 ⁶	2,84x10 ⁶	2,90x10 ⁶	2,63x10 ⁶	2,90x10 ⁶	2,63x10 ⁶	2,84x10 ⁶	2,99x10 ⁶	1,73x10 ⁶	3,14x10 ⁶	2,48x10 ⁶
vc (4)	0,0086	0,0076	0,0077	0,0066	0,0054	0,0088	0,0088	0,0051	0,0090	0,0092	0,0057	0,0072
vc (5)	71,3	67,7	62,3	41,9	68,9	62,3	58,7	48,5	56,9	69,5	47,3	56,3
vc (6)	135,3	98,6	129,1	116,8	135,9	87,9	103,0	91,1	139,4	99,6	122,4	109,9
vc (7)	0,00054	0,00060	0,00052	0,00064	0,00076	0,00061	0,00068	0,00100	0,00036	0,00050	0,00068	0,00043
vc (8)	0,00093	0,00060	0,00059	0,00048	0,00048	0,00067	0,00094	0,00036	0,00047	0,00076	0,00037	0,00047
vc (9)	9,50x10 ⁵	6,89x10 ⁵	3,45x10 ⁵	3,64x10 ⁵	2,99x10 ⁵	3,45x10 ⁵	5,32x10 ⁵	4,20x10 ⁵	9,23x10 ⁵	1,03x10 ⁵	2,52x10 ⁵	3,45x10 ⁵
vc (10)	0,092	0,085	0,095	0,094	0,092	0,100	0,062	0,095	0,082	0,089	0,097	0,098
vc (11)	3,10	3,29	3,43	1,06	3,48	3,48	1,25	4,43	4,05	1,82	0,72	1,82
vc (12)	5,97x10 ⁵	6,62x10 ⁵	5,13x10 ⁵	9,87x10 ⁵	9,41x10 ⁵	6,62x10 ⁵	5,50x10 ⁵	6,62x10 ⁵	9,50x10 ⁵	9,23x10 ⁵	9,97x10 ⁵	8,85x10 ⁵
vc (15)	8	7	8	9	9	7	9	6	8	9	6	9
vc (16)	35	37	37	28	24	27	28	33	41	32	27	29
Iteração	264	128	129	113	50	159	76	40	521	390	90	57

Tabela B3.2 Resultados das cinco otimizações multi-objectivo considerando IAPG como a primeira função objectivo– Configuração E

Optimização	1		2	3			4		5		
VAL1	-1,64x10 ⁸	-1,55x10 ⁸	-1,61x10 ⁸	-1,60x10 ⁸	-1,61x10 ⁸	-1,55x10 ⁸	-1,64x10 ⁸	-1,65x10 ⁸	-1,65x10 ⁸	-1,61x10 ⁸	-1,58x10 ⁸
IAPG	1,97x10 ⁵	2,49x10 ⁵	2,27x10 ⁵	2,18x10 ⁵	2,11x10 ⁵	2,49x10 ⁵	2,14x10 ⁵	2,05x10 ⁵	2,04x10 ⁵	2,16x10 ⁵	2,23x10 ⁵
VAL2	-2,33x10 ⁸	-2,06x10 ⁸	-2,28x10 ⁸	-2,24x10 ⁸	-2,26x10 ⁸	-2,06x10 ⁸	-2,31x10 ⁸	-2,38x10 ⁸	-2,27x10 ⁸	-2,26x10 ⁸	-2,21x10 ⁸
IAPG-EPS	2,08x10 ⁷	1,53x10 ⁷	2,01x10 ⁷	1,93x10 ⁷	1,94x10 ⁷	1,53x10 ⁷	2,02x10 ⁷	2,20x10 ⁷	1,87x10 ⁷	1,98x10 ⁷	1,92x10 ⁷
Pureza	0,999	0,999	0,999	0,999	0,999	0,999	0,999	0,999	0,999	0,999	0,999
Nºsucessos	8		10	6			11		5		
vc (1)	43,0	67,5	50,0	57,4	62,2	67,5	43,6	50,5	64,9	50,0	52,6
vc (2)	1,3	2,0	1,5	1,7	1,9	2,0	1,3	1,5	1,9	1,5	1,6
vc (3)	3,14x10 ⁶	3,14x10 ⁶	2,24x10 ⁶	3,32x10 ⁶	3,17x10 ⁶	3,14x10 ⁶	3,32x10 ⁶	2,84x10 ⁶	2,15x10 ⁶	2,24x10 ⁶	3,23x10 ⁶
vc (4)	0,0085	0,0050	0,0084	0,0058	0,0076	0,0050	0,0064	0,0062	0,0088	0,0084	0,0092
vc (5)	50,3	68,9	56,9	63,5	68,9	68,9	49,7	58,7	71,8	56,9	58,7
vc (6)	106,5	110,5	86,1	116,8	116,8	110,5	135,3	98,6	124,0	86,1	93,9
vc (7)	0,00059	0,00093	0,00060	0,00077	0,00057	0,00093	0,00096	0,00076	0,00055	0,00060	0,00093
vc (8)	0,00076	0,00076	0,00072	0,00063	0,00078	0,00076	0,00031	0,00033	0,00040	0,00083	0,00075
vc (9)	1,88x10 ⁵	3,27x10 ⁵	4,39x10 ⁵	4,57x10 ⁵	7,74x10 ⁵	3,27x10 ⁵	7,55x10 ⁵	4,66x10 ⁵	1,41x10 ⁵	4,39x10 ⁵	1,02x10 ⁶
vc (10)	0,088	0,094	0,090	0,099	0,098	0,094	0,093	0,094	0,094	0,090	0,098
vc (11)	2,29	1,58	4,24	1,68	4,10	1,58	4,62	3,15	2,01	4,24	2,29
vc (12)	8,20x10 ⁵	9,13x10 ⁵	1,01x10 ⁶	2,80x10 ⁵	9,04x10 ⁵	9,13x10 ⁵	7,55x10 ⁵	5,32x10 ⁵	1,02x10 ⁶	1,01x10 ⁶	4,39x10 ⁵
vc (15)	7	7	9	6	9	7	9	6	9	9	6
vc (16)	33	30	26	26	41	30	40	28	39	30	35
Iteração	441	609	572	81	40	102	580	524	378	111	410

Tabela B3.3 Resultados das cinco otimizações multi-objectivo considerando VAL1 como a primeira função objectivo – Configuração Ee

Optimização	1	2	3	4	5
VAL1	$-2,30 \times 10^8$	$-4,33 \times 10^8$	$-1,75 \times 10^8$	$-2,30 \times 10^8$	$-2,46 \times 10^8$
IAPG	$5,76 \times 10^5$	$1,57 \times 10^6$	$3,50 \times 10^5$	$3,88 \times 10^5$	$6,33 \times 10^5$
VAL2	$-3,41 \times 10^8$	$-5,87 \times 10^8$	$-2,39 \times 10^8$	$-3,00 \times 10^8$	$-3,62 \times 10^8$
IAPG-EPS	$3,34 \times 10^7$	$4,64 \times 10^7$	$1,94 \times 10^7$	$2,11 \times 10^7$	$3,49 \times 10^7$
Pureza	0,999	1,000	1,000	1,000	0,999
Nºsucessos	6	3	6	7	9
vc (1)	42,0	47,8	70,7	59,5	42,0
vc (2)	1,3	1,4	2,1	1,8	1,3
vc (3)	$1,46 \times 10^6$	$3,08 \times 10^6$	$3,32 \times 10^6$	$1,94 \times 10^6$	$9,76 \times 10^5$
vc (4)	0,0058	0,0067	0,0052	0,0074	0,0053
vc (5)	40,7	37,1	70,7	59,3	40,7
vc (6)	119,0	138,2	85,4	112,1	114,9
vc (7)	0,00078	0,00046	0,00034	0,00047	0,00088
vc (8)	0,00067	0,00040	0,00096	0,00041	0,00032
vc (9)	$1,41 \times 10^5$	$1,97 \times 10^5$	$5,32 \times 10^5$	$4,39 \times 10^5$	$3,08 \times 10^5$
vc (10)	0,087	0,099	0,100	0,088	0,095
vc (11)	3,96	3,62	2,77	1,58	3,58
vc (12)	$4,11 \times 10^5$	$8,01 \times 10^5$	$9,97 \times 10^5$	$7,64 \times 10^5$	$2,52 \times 10^5$
vc (15)	8	6	7	8	6
vc (16)	28	26	35	32	39
Iteração	369	136	461	542	668

Tabela B3.4 Resultados das cinco optimizações multi-objectivo considerando IAPG como a primeira função objectivo – Configuração Ee

Optimização	1	2	3	4		5
VAL1	$-3,97 \times 10^8$	$-1,91 \times 10^8$	$-3,97 \times 10^8$	$-4,08 \times 10^8$	$-4,00 \times 10^8$	$-2,21 \times 10^8$
IAPG	$1,19 \times 10^6$	$2,99 \times 10^5$	$1,33 \times 10^6$	$1,13 \times 10^6$	$1,53 \times 10^6$	$5,83 \times 10^5$
VAL2	$-5,70 \times 10^8$	$-2,45 \times 10^8$	$-5,39 \times 10^8$	$-5,63 \times 10^8$	$-5,44 \times 10^8$	$-3,32 \times 10^8$
IAPG-EPS	$5,21 \times 10^7$	$1,64 \times 10^7$	$4,30 \times 10^7$	$4,70 \times 10^7$	$4,32 \times 10^7$	$3,35 \times 10^7$
Pureza	0,999	0,999	1,000	0,996	0,999	0,999
Nºsucessos	8	8	7	3		5
vc (1)	74,5	68,1	38,8	47,8	75,0	50,5
vc (2)	2,2	2,0	1,2	1,4	2,3	1,5
vc (3)	$1,31 \times 10^6$	$3,20 \times 10^6$	$3,29 \times 10^6$	$1,37 \times 10^6$	$3,32 \times 10^6$	$1,94 \times 10^6$
vc (4)	0,0062	0,0100	0,0050	0,0090	0,0053	0,0062
vc (5)	72,5	69,5	28,2	44,9	64,7	49,7
vc (6)	133,1	120,0	126,9	121,2	108,7	109,3
vc (7)	0,00084	0,00092	0,00045	0,00036	0,00099	0,00087
vc (8)	0,00041	0,00066	0,00087	0,00035	0,00057	0,00074
vc (9)	$2,90 \times 10^5$	$1,13 \times 10^5$	$1,22 \times 10^5$	$2,43 \times 10^5$	$2,05 \times 10^5$	$1,78 \times 10^5$
vc (10)	0,086	0,088	0,064	0,066	0,060	0,084
vc (11)	4,90	2,44	3,34	4,10	2,53	2,62
vc (12)	$4,94 \times 10^5$	$6,34 \times 10^5$	$5,03 \times 10^5$	$5,13 \times 10^5$	$7,27 \times 10^5$	$4,20 \times 10^5$
vc (15)	8	9	7	3	8	8
vc (16)	23	40	37	27	30	24
Iteração	230	428	540	473	68	612

Tabela B3.5 Resultados das cinco otimizações multi-objectivo considerando VAL1 como a primeira função objectivo – Configuração GrTBe

Optimização	1		2				3			4	5	
VAL1	-1,55x10 ⁸	-1,60x10 ⁸	-1,58x10 ⁸	-1,68x10 ⁸	-1,53x10 ⁸	-1,57x10 ⁸	-1,54x10 ⁸	-1,54x10 ⁸	-1,79x10 ⁸	-1,55x10 ⁸	-1,68x10 ⁸	-1,54x10 ⁸
IAPG	3,71x10 ⁵	2,99x10 ⁵	3,00x10 ⁵	2,98x10 ⁵	4,17x10 ⁵	3,20x10 ⁵	3,83x10 ⁵	2,92x10 ⁵	2,90x10 ⁵	3,07x10 ⁵	2,94x10 ⁵	4,25x10 ⁵
VAL2	-2,14x10 ⁸	-2,26x10 ⁸	-2,21x10 ⁸	-2,42x10 ⁸	-2,03x10 ⁸	-2,14x10 ⁸	-2,05x10 ⁸	-2,14x10 ⁸	-2,75x10 ⁸	-2,14x10 ⁸	-2,49x10 ⁸	-2,07x10 ⁸
IAPG-EPS	1,77x10 ⁷	2,01x10 ⁷	1,90x10 ⁷	2,25x10 ⁷	1,53x10 ⁷	1,73x10 ⁷	1,53x10 ⁷	1,81x10 ⁷	2,92x10 ⁷	1,81x10 ⁷	2,46x10 ⁷	1,58x10 ⁷
Pureza	1,000	0,999	1,000	0,999	0,997	0,999	0,999	1,000	0,999	0,999	1,000	0,997
Nºsucessos	2		3				2			4	4	
vc (1)	67,5	50,5	53,7	51,6	51,6	63,8	44,6	57,9	48,4	59,5	43,6	51,6
vc (2)	2,0	1,5	1,6	1,5	1,5	1,9	1,3	1,7	1,4	1,8	1,3	1,5
vc (3)	2,63x10 ⁶	2,51x10 ⁶	3,11x10 ⁶	2,75x10 ⁶	1,94x10 ⁶	2,48x10 ⁶	2,69x10 ⁶	2,63x10 ⁶	3,14x10 ⁶	3,14x10 ⁶	2,69x10 ⁶	1,94x10 ⁶
vc (4)	0,0092	0,0076	0,0083	0,0074	0,0070	0,0082	0,0094	0,0060	0,0084	0,0062	0,0052	0,0070
vc (5)	70,7	56,3	58,7	56,3	52,7	67,1	46,1	62,9	56,9	63,5	52,1	52,7
vc (6)	88,9	113,9	123,4	111,1	85,4	111,1	130,9	93,9	115,5	104,8	104,8	85,4
vc (7)	0,99441	0,99144	0,99108	0,99135	0,99702	0,99216	0,99837	0,99540	0,99882	0,99783	0,99036	0,99549
vc (8)	0,99891	0,99171	0,99360	0,99090	0,99144	0,99135	0,99396	0,99270	0,99162	0,99432	0,99882	0,99144
vc (9)	4,57x10 ⁵	6,72x10 ⁵	3,83x10 ⁵	3,18x10 ⁵	5,41x10 ⁵	1,03x10 ⁵	4,20x10 ⁵	3,45x10 ⁵	1,50x10 ⁵	7,92x10 ⁵	8,20x10 ⁵	8,67x10 ⁵
vc (10)	0,995	0,993	0,997	0,996	0,994	0,990	0,997	0,997	0,994	0,992	0,996	0,994
vc (11)	3,48	1,72	4,67	2,20	0,72	3,96	4,53	1,87	3,48	2,01	2,15	0,72
vc (12)	4,39x10 ⁵	3,27x10 ⁵	3,64x10 ⁵	5,32x10 ⁵	9,50x10 ⁵	5,97x10 ⁵	3,45x10 ⁵	9,87x10 ⁵	1,01x10 ⁶	4,20x10 ⁵	2,62x10 ⁵	9,50x10 ⁵
vc (13)	0,99162	0,99297	0,99432	0,99459	0,99180	0,99333	0,99153	0,99549	0,99711	0,99486	0,99387	0,99180
vc (14)	5,13x10 ⁵	3,92x10 ⁵	1,01x10 ⁶	4,11x10 ⁵	6,43x10 ⁵	4,76x10 ⁵	7,83x10 ⁵	3,83x10 ⁵	8,48x10 ⁵	1,88x10 ⁵	2,90x10 ⁵	6,43x10 ⁵
vc (15)	3	3	3	3	4	3	3	4	3	3	3	4
vc (16)	25	25	31	35	27	24	34	24	30	36	29	27
vc (18)	8	9	9	11	8	6	10	8	9	6	11	8
vc (19)	0,99846	0,99027	0,99216	0,99153	0,99351	0,99324	0,99567	0,99675	0,99324	0,99324	0,99279	0,99351
Iteração	548	183	441	92	200	716	696	462	563	205	607	159

Tabela B3.6 Resultados das cinco otimizações multi-objectivo considerando IAPG como a primeira função objectivo – Configuração GrTBe

Optimização	1			2				3		
VAL1	-1,59x10 ⁸	-1,54x10 ⁸	-1,80x10 ⁸	-1,84x10 ⁸	-1,55x10 ⁸	-1,68x10 ⁸	-1,74x10 ⁸	-1,66x10 ⁸	-1,94x10 ⁸	-1,67x10 ⁸
IAPG	3,09x10 ⁵	4,11x10 ⁵	2,87x10 ⁵	2,63x10 ⁵	3,16x10 ⁵	3,07x10 ⁵	2,73x10 ⁵	3,31x10 ⁵	2,91x10 ⁵	2,98x10 ⁵
VAL2	-2,24x10 ⁸	-2,11x10 ⁸	-2,79x10 ⁸	-2,92x10 ⁸	-2,11x10 ⁸	-2,46x10 ⁸	-2,67x10 ⁸	-2,43x10 ⁸	-3,15x10 ⁸	-2,42x10 ⁸
IAPG-EPS	1,96x10 ⁷	1,72x10 ⁷	2,99x10 ⁷	3,27x10 ⁷	1,68x10 ⁷	2,35x10 ⁷	2,79x10 ⁷	2,32x10 ⁷	3,65x10 ⁷	2,25x10 ⁷
Pureza	1,000	0,998	1,000	0,999	1,000	0,999	1,000	1,000	0,998	0,999
Nºsucessos	2			7				5		
vc (1)	54,7	53,1	59,0	36,1	52,6	45,2	50,5	55,8	44,1	51,6
vc (2)	1,6	1,6	1,8	1,1	1,6	1,4	1,5	1,7	1,3	1,5
vc (3)	2,87x10 ⁶	3,05x10 ⁶	2,45x10 ⁶	3,35x10 ⁶	2,39x10 ⁶	2,66x10 ⁶	2,69x10 ⁶	2,51x10 ⁶	1,94x10 ⁶	2,75x10 ⁶
vc (4)	0,0098	0,0090	0,0092	0,0090	0,0057	0,0100	0,0066	0,0052	0,0063	0,0074
vc (5)	59,9	54,5	67,7	47,9	56,3	50,3	61,1	61,1	58,7	56,3
vc (6)	112,7	93,5	99,2	91,7	125,2	117,8	103,6	104,8	104,2	111,1
vc (7)	0,99891	0,99720	0,99180	0,99792	0,99666	0,99027	0,99036	0,99162	0,99855	0,99135
vc (8)	0,99342	0,99549	0,99477	0,99828	0,99333	0,99144	0,99414	0,99882	0,99459	0,99090
vc (9)	6,15x10 ⁵	4,76x10 ⁵	4,01x10 ⁵	5,23x10 ⁵	7,36x10 ⁵	5,41x10 ⁵	4,39x10 ⁵	9,04x10 ⁵	3,83x10 ⁵	3,18x10 ⁵
vc (10)	0,996	0,992	0,997	0,993	0,997	0,994	0,998	0,999	0,992	0,996
vc (11)	1,96	0,82	1,15	0,72	0,68	3,24	2,15	3,34	0,72	2,20
vc (12)	2,71x10 ⁵	4,01x10 ⁵	4,76x10 ⁵	6,89x10 ⁵	6,34x10 ⁵	7,46x10 ⁵	2,99x10 ⁵	2,62x10 ⁵	5,03x10 ⁵	5,32x10 ⁵
vc (13)	0,99396	0,99477	0,99090	0,99378	0,99018	0,99468	0,99090	0,99090	0,99432	0,99549
vc (14)	2,15x10 ⁵	9,04x10 ⁵	7,09x10 ⁵	1,59x10 ⁵	6,81x10 ⁵	7,83x10 ⁵	4,20x10 ⁵	2,90x10 ⁵	8,01x10 ⁵	4,11x10 ⁵
vc (15)	3	3	3	3	4	3	3	3	3	3
vc (16)	26	33	38	41	34	35	29	29	34	30
vc (18)	7	6	9	9	10	12	11	11	7	11
vc (19)	0,99432	0,99738	0,99504	0,99045	0,99567	0,99522	0,99279	0,99396	0,99153	0,99684
Iteração	623	112	484	830	695	660	788	692	403	108

Tabela B3.6 Resultados das cinco otimizações multi-objectivo considerando IAPG como a primeira função objectivo – Configuração GrTBe (cont.)

Optimização	4				5	
VAL1	-1,66x10 ⁸	-1,92x10 ⁸	-1,79x10 ⁸	-1,97x10 ⁸	-1,64x10 ⁸	-1,70x10 ⁸
IAPG	3,04x10 ⁵	2,70x10 ⁵	2,84x10 ⁵	2,59x10 ⁵	3,12x10 ⁵	2,74x10 ⁵
VAL2	-2,37x10 ⁸	-3,02x10 ⁸	-2,73x10 ⁸	-3,21x10 ⁸	-2,42x10 ⁸	-2,52x10 ⁸
IAPG-EPS	2,15x10 ⁷	3,33x10 ⁷	2,82x10 ⁷	3,77x10 ⁷	2,36x10 ⁷	2,48x10 ⁷
Pureza	0,999	1,000	1,000	0,993	0,999	0,999
Nºsucessos	8				4	
vc (1)	39,3	54,2	47,8	48,9	56,3	38,2
vc (2)	1,2	1,6	1,4	1,5	1,7	1,1
vc (3)	1,94x10 ⁶	1,34x10 ⁶	2,60x10 ⁶	3,17x10 ⁶	3,23x10 ⁶	2,72x10 ⁶
vc (4)	0,0080	0,0052	0,0066	0,0076	0,0096	0,0072
vc (5)	44,9	69,5	58,1	65,3	64,1	47,3
vc (6)	105,4	130,9	133,1	132,5	97,4	113,3
vc (7)	0,99108	0,99207	0,99117	0,99396	0,99225	0,99333
vc (8)	0,99486	0,99009	0,99513	0,99702	0,99144	0,99729
vc (9)	2,05x10 ⁵	8,20x10 ⁵	1,02x10 ⁶	1,02x10 ⁶	1,02x10 ⁶	2,05x10 ⁵
vc (10)	0,995	0,996	0,996	0,992	0,991	0,993
vc (11)	0,72	2,58	1,34	0,39	3,15	0,25
vc (12)	2,99x10 ⁵	8,58x10 ⁵	3,36x10 ⁵	8,58x10 ⁵	5,03x10 ⁵	9,87x10 ⁵
vc (13)	0,99495	0,99351	0,99621	0,99171	0,99009	0,99666
vc (14)	8,48x10 ⁵	8,11x10 ⁵	2,62x10 ⁵	4,76x10 ⁵	6,81x10 ⁵	1,02x10 ⁶
vc (15)	3	4	3	3	3	4
vc (16)	40	39	30	40	25	39
vc (18)	10	10	9	10	6	9
vc (19)	0,99153	0,99855	0,99351	0,99036	0,99711	0,99423
Iteração	877	279	124	718	198	654

C1. Análise da Robustez

Nomenclatura

IAPG	impacto ambiental potencial global	
IAPG-EPS	impacto ambiental potencial global (metodologia EPS)	[ELU/ano]
Q_{Benzeno}	caudal da corrente de benzeno	[mol/s]
VAL1	valor actualizado líquido sem inclusão dos custos dos impactos ambientais EPS	[€]

Índice de tabelas

Tabela C1.1 Resultados para análise da robustez da solução E – VAL1 (SA)	1
Tabela C1.2 Resultados para análise da robustez da solução E – VAL2 (SA)	1
Tabela C1.3 Resultados para análise da robustez da solução E – IAPG (SA)	2
Tabela C1.4 Resultados para análise da robustez da solução E – IAPG-EPS (SA)	2
Tabela C1.5 Resultados para análise da robustez da solução E – VAL1 (TS)	2
Tabela C1.6 Resultados para análise da robustez da solução E – VAL2 (TS)	3
Tabela C1.7 Resultados para análise da robustez da solução E – IAPG (TS)	3
Tabela C1.8 Resultados para análise da robustez da solução E – IAPG-EPS (TS)	3
Tabela C1.9 Resultados para análise da robustez da solução Ee – VAL1 (SA)	4
Tabela C1.10 Resultados para análise da robustez da solução Ee – VAL2 (SA)	4
Tabela C1.11 Resultados para análise da robustez da solução Ee – IAPG (SA)	4
Tabela C1.12 Resultados para análise da robustez da solução Ee – IAPG-EPS (SA)	4
Tabela C1.13 Resultados para análise da robustez da solução Ee – VAL1 (TS)	5
Tabela C1.14 Resultados para análise da robustez da solução Ee – VAL2 (TS)	5
Tabela C1.15 Resultados para análise da robustez da solução Ee – IAPG (TS)	5
Tabela C1.16 Resultados para análise da robustez da solução Ee – IAPG-EPS (TS)	5
Tabela C1.17 Resultados para análise da robustez da solução GrTBe – VAL1 (SA)	6
Tabela C1.18 Resultados para análise da robustez da solução GrTBe – VAL2 (SA)	6
Tabela C1.19 Resultados para análise da robustez da solução GrTBe – IAPG (SA)	6
Tabela C1.20 Resultados para análise da robustez da solução GrTBe – IAPG-EPS (SA)	6
Tabela C1.21 Resultados para análise da robustez da solução GrTBe – VAL1 (TS)	7
Tabela C1.22 Resultados para análise da robustez da solução GrTBe – VAL2 (TS)	7
Tabela C1.23 Resultados para análise da robustez da solução GrTBe – IAPG (TS)	8
Tabela C1.24 Resultados para análise da robustez da solução GrTBe – IAPG-EPS (TS)	8
Tabela C1.25 Desvios das grandezas relativamente às soluções da configuração E	9
Tabela C1.26 Desvios das grandezas relativamente às soluções da configuração GrTBe	10

Resultados

Solução E da optimização SA – função objectivo VAL1

Tabela C1.1 Resultados para análise da robustez da solução E – VAL1 (SA)

Direcção	Flexibilidade	Pureza	VAL1	IAPG	IAPG-EPS	Q _{Benzeno} (mol/s)
	0	0,999	-1,57x10 ⁸	2,49x10 ⁵	1,65x10 ⁷	27,9
++	0,25	0,999	-1,60x10 ⁸	2,81x10 ⁵	1,69x10 ⁷	28,2
+-	0,25	0,999	-1,60x10 ⁸	2,81x10 ⁵	1,69x10 ⁷	28,2
-+	0,25	0,999	-1,58x10 ⁸	2,27x10 ⁵	1,73x10 ⁷	26,4
--	0,25	0,999	-1,58x10 ⁸	2,27x10 ⁵	1,72x10 ⁷	26,4
++	0,5	0,999	-1,75x10 ⁸	3,52x10 ⁵	2,16x10 ⁷	23,3
+-	0,5	0,999	-1,75x10 ⁸	3,52x10 ⁵	2,16x10 ⁷	23,4
-+	0,5	0,999	-1,60x10 ⁸	2,14x10 ⁵	1,87x10 ⁷	24,3
--	0,5	0,999	-1,60x10 ⁸	2,14x10 ⁵	1,87x10 ⁷	24,3
++	0,75	0,999	-1,76x10 ⁸	3,54x10 ⁵	2,18x10 ⁷	23,1
+-	0,75	0,999	-1,76x10 ⁸	3,55x10 ⁵	2,18x10 ⁷	23,1
-+	0,75	Não convergiu				
--	0,75	Não convergiu				

Solução E da optimização SA - função objectivo VAL2

Tabela C1.2 Resultados para análise da robustez da solução E – VAL2 (SA)

Direcção	Flexibilidade	Pureza	VAL1	IAPG	IAPG-EPS	Q _{Benzeno} (mol/s)
	0	1,000	-1,56x10 ⁸	2,46x10 ⁵	1,59x10 ⁷	27,6
++	0,25	1,000	-1,66x10 ⁸	2,87x10 ⁵	1,94x10 ⁷	23,4
+-	0,25	1,000	-1,66x10 ⁸	2,87x10 ⁵	1,94x10 ⁷	23,4
-+	0,25	1,000	-1,53x10 ⁸	2,21x10 ⁵	1,53x10 ⁷	28,1
--	0,25	1,000	-1,53x10 ⁸	2,21x10 ⁵	1,53x10 ⁷	28,1
++	0,5	1,000	-1,73x10 ⁸	3,08x10 ⁵	2,15x10 ⁷	21,0
+-	0,5	1,000	-1,73x10 ⁸	3,08x10 ⁵	2,15x10 ⁷	20,9
-+	0,5	1,000	-1,54x10 ⁸	2,08x10 ⁵	1,62x10 ⁷	26,8
--	0,5	1,000	-1,54x10 ⁸	2,08x10 ⁵	1,62x10 ⁷	26,8
++	0,75	1,000	-1,86x10 ⁸	3,49x10 ⁵	2,54x10 ⁷	16,3
+-	0,75	1,000	-1,86x10 ⁸	3,49x10 ⁵	2,54x10 ⁷	16,3
-+	0,75	Não convergiu				
--	0,75	Não convergiu				

Solução E da optimização SA - função objectivo IAPG

Tabela C1.3 Resultados para análise da robustez da solução E – IAPG (SA)

Direcção	Flexibilidade	Pureza	VAL1	IAPG	IAPG-EPS	Q _{Benzeno} (mol/s)
	0	1,000	-1,71x10 ⁸	1,89x10 ⁵	2,59x10 ⁷	14,6
++	0,25	1,000	-1,69x10 ⁸	1,97x10 ⁵	2,43x10 ⁷	16,9
+-	0,25	1,000	-1,69x10 ⁸	1,97x10 ⁵	2,43x10 ⁷	16,9
-+	0,25	Não convergiu				
--	0,25	Não convergiu				

Solução E da optimização SA - função objectivo IAPG-EPS

Tabela C1.4 Resultados para análise da robustez da solução E – IAPG-EPS (SA)

Direcção	Flexibilidade	Pureza	VAL1	IAPG	IAPG-EPS	Q _{Benzeno} (mol/s)
	0	0,999	-1,53x10 ⁸	2,28x10 ⁵	1,53x10 ⁷	28,6
++	0,25	0,999	-1,56x10 ⁸	2,57x10 ⁵	1,59x10 ⁷	28,2
+-	0,25	0,999	-1,56x10 ⁸	2,57x10 ⁵	1,59x10 ⁷	28,2
-+	0,25	0,999	-1,54x10 ⁸	2,14x10 ⁵	1,65x10 ⁷	26,9
--	0,25	0,999	-1,54x10 ⁸	2,14x10 ⁵	1,65x10 ⁷	26,9
++	0,5	0,999	-1,67x10 ⁸	3,01x10 ⁵	1,95x10 ⁷	24,1
+-	0,5	0,999	-1,67x10 ⁸	3,01x10 ⁵	1,95x10 ⁷	24,1
-+	0,5	0,999	-1,58x10 ⁸	2,03x10 ⁵	1,88x10 ⁷	23,8
--	0,5	0,999	-1,58x10 ⁸	2,03x10 ⁵	1,87x10 ⁷	23,8
++	0,75	0,999	-1,74x10 ⁸	3,24x10 ⁵	2,18x10 ⁷	21,4
+-	0,75	0,999	-1,74x10 ⁸	3,24x10 ⁵	2,17x10 ⁷	21,4
-+	0,75	0,999	-1,62x10 ⁸	1,96x10 ⁵	2,11x10 ⁷	20,7
--	0,75	0,999	-1,62x10 ⁸	1,96x10 ⁵	2,10x10 ⁷	20,7
++	1	0,999	-1,88x10 ⁸	3,69x10 ⁵	2,61x10 ⁷	16,4
+-	1	0,999	-1,88x10 ⁸	3,69x10 ⁵	2,60x10 ⁷	16,4
-+	1	Não convergiu				
--	1	Não convergiu				

Solução E da optimização TS - função objectivo VAL1

Tabela C1.5 Resultados para análise da robustez da solução E – VAL1 (TS)

Direcção	Flexibilidade	Pureza	VAL1	IAPG	IAPG-EPS	Q _{Benzeno} (mol/s)
	0	1,000	-1,56x10 ⁸	2,35x10 ⁵	1,59x10 ⁷	27,9
++	0,25	Não convergiu				
+-	0,25	Não convergiu				
-+	0,25	Não convergiu				
--	0,25	Não convergiu				

Solução E da optimização TS - função objectivo VAL2

Tabela C1.6 Resultados para análise da robustez da solução E – VAL2 (TS)

Direcção	Flexibilidade	Pureza	VAL1	IAPG	IAPG-EPS	Q _{Benzeno} (mol/s)
	0	1,000	-1,55x10 ⁸	2,22x10 ⁵	1,55x10 ⁷	28,1
++	0,25	1,000	-1,57x10 ⁸	2,44x10 ⁵	1,55x10 ⁷	28,4
+-	0,25	1,000	-1,57x10 ⁸	2,44x10 ⁵	1,55x10 ⁷	28,4
-+	0,25	1,000	-1,59x10 ⁸	2,09x10 ⁵	1,69x10 ⁷	26,2
--	0,25	1,000	-1,59x10 ⁸	2,09x10 ⁵	1,68x10 ⁷	26,2
++	0,5	1,000	-1,70x10 ⁸	3,02x10 ⁵	1,98x10 ⁷	23,4
+-	0,5	1,000	-1,70x10 ⁸	3,02x10 ⁵	1,98x10 ⁷	23,5
-+	0,5	1,000	-1,61x10 ⁸	1,99x10 ⁵	1,93x10 ⁷	23,0
--	0,5	1,000	-1,61x10 ⁸	1,99x10 ⁵	1,93x10 ⁷	23,0
++	0,75	1,000	-1,73x10 ⁸	3,09x10 ⁵	2,05x10 ⁷	22,7
+-	0,75	1,000	-1,73x10 ⁸	3,09x10 ⁵	2,04x10 ⁷	22,7
-+	0,75	1,000	-1,65x10 ⁸	1,93x10 ⁵	2,16x10 ⁷	19,9
--	0,75	Não convergiu				

Solução E da optimização TS - função objectivo IAPG

Tabela C1.7 Resultados para análise da robustez da solução E – IAPG (TS)

Direcção	Flexibilidade	Pureza	VAL1	IAPG	IAPG-EPS	Q _{Benzeno} (mol/s)
	0	0,999	-1,73x10 ⁸	1,98x10 ⁵	2,44x10 ⁷	16,8
++	0,25	Não convergiu				
+-	0,25	Não convergiu				
-+	0,25	Não convergiu				
--	0,25	Não convergiu				

Solução E da optimização TS - função objectivo IAPG-EPS

Tabela C1.8 Resultados para análise da robustez da solução E – IAPG-EPS (TS)

Direcção	Flexibilidade	Pureza	VAL1	IAPG	IAPG-EPS	Q _{Benzeno} (mol/s)
	0	1,000	-1,61x10 ⁸	2,44x10 ⁵	1,53x10 ⁷	28,7
++	0,25	Infringiu restrição				
+-	0,25	Infringiu restrição				
-+	0,25	Não convergiu				
--	0,25	Não convergiu				

Solução Ee da optimização SA - função objectivo VAL1

Tabela C1.9 Resultados para análise da robustez da solução Ee – VAL1 (SA)

Direcção	Flexibilidade	Pureza	VAL1	IAPG	IAPG-EPS	Q _{Benzeno} (mol/s)
	0	0,999	$-3,90 \times 10^8$	$1,38 \times 10^6$	$4,26 \times 10^7$	6,2
++	0,25	Não convergiu				
+-	0,25	Infringiu restrição				
-+	0,25	Infringiu restrição				
--	0,25	Infringiu restrição				

Solução Ee da optimização SA - função objectivo VAL2

Tabela C1.10 Resultados para análise da robustez da solução Ee – VAL2 (SA)

Direcção	Flexibilidade	Pureza	VAL1	IAPG	IAPG-EPS	Q _{Benzeno} (mol/s)
	0	0,999	$-1,70 \times 10^8$	$3,23 \times 10^5$	$1,66 \times 10^7$	28,3
++	0,25	0,999	$-1,76 \times 10^8$	$3,89 \times 10^5$	$2,11 \times 10^7$	23,4
+-	0,25	0,999	$-1,76 \times 10^8$	$3,89 \times 10^5$	$2,10 \times 10^7$	23,4
-+	0,25	Não convergiu				
--	0,25	Não convergiu				

Solução Ee da optimização SA - função objectivo IAPG

Tabela C1.11 Resultados para análise da robustez da solução Ee – IAPG (SA)

Direcção	Flexibilidade	Pureza	VAL1	IAPG	IAPG-EPS	Q _{Benzeno} (mol/s)
	0	0,999	$-1,84 \times 10^8$	$3,51 \times 10^5$	$1,91 \times 10^7$	25,2
++	0,25	infringiu restrição				
+-	0,25	infringiu restrição				
-+	0,25	0,999	$-1,72 \times 10^8$	$2,95 \times 10^5$	$1,61 \times 10^7$	28,3
--	0,25	0,999	$-1,72 \times 10^8$	$2,94 \times 10^5$	$1,61 \times 10^7$	28,3

Solução Ee da optimização SA - função objectivo IAPG-EPS

Tabela C1.12 Resultados para análise da robustez da solução Ee – IAPG-EPS (SA)

Direcção	Flexibilidade	Pureza	VAL1	IAPG	IAPG-EPS	Q _{Benzeno} (mol/s)
	0	0,999	$-2,56 \times 10^8$	$6,68 \times 10^5$	$3,60 \times 10^7$	11,5
++	0,25	0,999	$-5,61 \times 10^8$	$9,90 \times 10^5$	$4,52 \times 10^7$	8,5
+-	0,25	0,999	$-5,65 \times 10^8$	$9,90 \times 10^5$	$4,51 \times 10^7$	8,5
-+	0,25	Não convergiu				
--	0,25	Não convergiu				

Solução Ee da optimização TS - função objectivo VAL1

Tabela C1.13 Resultados para análise da robustez da solução Ee – VAL1 (TS)

Direcção	Flexibilidade	Pureza	VAL1	IAPG	IAPG-EPS	Q _{Benzeno} (mol/s)
	0	0,999	-1,75x10 ⁸	3,60x10 ⁵	1,95x10 ⁷	24,3
++	0,25	infringiu restrição				
+-	0,25	infringiu restrição				
-+	0,25	0,999	-1,63x10 ⁸	2,87x10 ⁵	1,53x10 ⁷	29,0
--	0,25	0,999	-1,63x10 ⁸	2,87x10 ⁵	1,53x10 ⁷	29,0

Solução Ee da optimização TS - função objectivo VAL2

Tabela C1.14 Resultados para análise da robustez da solução Ee – VAL2 (TS)

Direcção	Flexibilidade	Pureza	VAL1	IAPG	IAPG-EPS	Q _{Benzeno} (mol/s)
	0	0,999	-1,63x10 ⁸	2,97x10 ⁵	1,54x10 ⁷	29,4
++	0,25	0,999	-1,91x10 ⁸	3,44x10 ⁵	1,82x10 ⁷	26,7
+-	0,25	Não convergiu				
-+	0,25	Infringiu restrição				
--	0,25	Infringiu restrição				

Solução Ee da optimização TS - função objectivo IAPG

Tabela C1.15 Resultados para análise da robustez da solução Ee – IAPG (TS)

Direcção	Flexibilidade	Pureza	VAL1	IAPG	IAPG-EPS	Q _{Benzeno} (mol/s)
	0	1,000	-1,90x10 ⁸	3,19x10 ⁵	1,72x10 ⁷	27,3
++	0,25	Não convergiu				
+-	0,25	Infringiu restrição				
-+	0,25	Não convergiu				
--	0,25	Não convergiu				

Solução Ee da optimização TS - função objectivo IAPG-EPS

Tabela C1.16 Resultados para análise da robustez da solução Ee – IAPG-EPS (TS)

Direcção	Flexibilidade	Pureza	VAL1	IAPG	IAPG-EPS	Q _{Benzeno} (mol/s)
	0	1,000	-1,70x10 ⁸	3,30x10 ⁵	1,69x10 ⁷	28,4
++	0,25	Não convergiu				
+-	0,25	Não convergiu				
-+	0,25	Não convergiu				
--	0,25	Não convergiu				

Solução GrTBe da optimização segundo SA - função objectivo VAL1

Tabela C1.17 Resultados para análise da robustez da solução GrTBe – VAL1 (SA)

Direcção	Flexibilidade	Pureza	VAL1	IAPG	IAPG-EPS	Q _{Benzeno} (mol/s)
	0	0,997	-1,54x10 ⁸	4,70x10 ⁵	1,51x10 ⁷	32,5
++	0,25	0,994	-1,56x10 ⁸	5,64x10 ⁵	1,45x10 ⁷	33,3
+-	0,25	não convergiu				
-+	0,25	0,998	-1,57x10 ⁸	4,63x10 ⁵	1,74x10 ⁷	31,3
--	0,25	Não convergiu				

Solução GrTBe da optimização SA - função objectivo VAL2

Tabela C1.18 Resultados para análise da robustez da solução GrTBe – VAL2 (SA)

Direcção	Flexibilidade	Pureza	VAL1	IAPG	IAPG-EPS	Q _{Benzeno} (mol/s)
	0	0,999	-1,49x10 ⁸	3,41x10 ⁵	1,53x10 ⁷	29,8
++	0,25	0,998	-1,50x10 ⁸	3,86x10 ⁵	1,42x10 ⁷	31,8
+-	0,25	0,998	-1,50x10 ⁸	3,86x10 ⁵	1,41x10 ⁷	31,8
-+	0,25	Infringiu restrição				
--	0,25	Infringiu restrição				

Solução GrTBe da optimização segundo SA - função objectivo IAPG

Tabela C1.19 Resultados para análise da robustez da solução GrTBe – IAPG (SA)

Direcção	Flexibilidade	Pureza	VAL1	IAPG	IAPG-EPS	Q _{Benzeno} (mol/s)
	0	0,998	-1,89x10 ⁸	2,50x10 ⁵	3,47x10 ⁷	4,3
++	0,25	infringiu restrição				
+-	0,25	0,998	-1,91x10 ⁸	2,52x10 ⁵	3,39x10 ⁷	5,2
-+	0,25	Infringiu restrição				
--	0,25	Infringiu restrição				

Solução GrTBe da optimização segundo SA - função objectivo IAPG-EPS

Tabela C1.20 Resultados para análise da robustez da solução GrTBe – IAPG-EPS (SA)

Direcção	Flexibilidade	Pureza	VAL1	IAPG	IAPG-EPS	Q _{Benzeno} (mol/s)
	0	0,997	-1,68x10 ⁸	5,64x10 ⁵	1,48x10 ⁷	33,4
++	0,25	0,996	-1,75x10 ⁸	6,82x10 ⁵	1,55x10 ⁷	33,8
+-	0,25	0,996	-1,75x10 ⁸	6,82x10 ⁵	1,55x10 ⁷	33,8
-+	0,25	Infringiu restrição				
--	0,25	Infringiu restrição				

Solução GrTBe da optimização TS - função objectivo VAL1

Tabela C1.21 Resultados para análise da robustez da solução GrTBe – VAL1 (TS)

Direcção	Flexibilidade	Pureza	VAL1	IAPG	IAPG-EPS	Q _{Benzeno} (mol/s)
	0	0,998	-1,48x10 ⁸	3,40x10 ⁵	1,46x10 ⁷	30,0
++	0,25	0,998	-1,47x10 ⁸	3,79x10 ⁵	1,36x10 ⁷	31,5
+-	0,25	0,998	-1,47x10 ⁸	3,70x10 ⁵	1,37x10 ⁷	31,2
-+	0,25	0,999	-1,50x10 ⁸	3,13x10 ⁵	1,59x10 ⁷	28,1
--	0,25	0,999	-1,50x10 ⁸	3,13x10 ⁵	1,59x10 ⁷	28,1
++	0,50	0,997	-1,48x10 ⁸	4,38x10 ⁵	1,31x10 ⁷	32,6
+-	0,50	0,997	-1,48x10 ⁸	4,39x10 ⁵	1,30x10 ⁷	32,6
-+	0,50	0,999	-1,55x10 ⁸	2,92x10 ⁵	1,77x10 ⁷	25,6
--	0,50	0,999	-1,56x10 ⁸	2,89x10 ⁵	1,79x10 ⁷	25,2
++	0,75	0,996	-1,49x10 ⁸	4,91x10 ⁵	1,29x10 ⁷	33,0
+-	0,75	0,996	-1,50x10 ⁸	4,88x10 ⁵	1,29x10 ⁷	33,0
-+	0,75	0,999	-1,57x10 ⁸	2,81x10 ⁵	1,93x10 ⁷	23,5
--	0,75	0,999	-1,57x10 ⁸	2,79x10 ⁵	1,95x10 ⁷	23,1
++	1,00	0,994	-1,54x10 ⁸	6,16x10 ⁵	1,34x10 ⁷	33,5
+-	1,00	0,995	-1,53x10 ⁸	5,78x10 ⁵	1,31x10 ⁷	33,3
-+	1,00	0,999	-1,60x10 ⁸	2,72x10 ⁵	2,12x10 ⁷	21,1
--	1,00	0,999	-1,59x10 ⁸	2,74x10 ⁵	2,06x10 ⁷	21,8
++	1,25	0,992	-1,59x10 ⁸	7,49x10 ⁵	1,44x10 ⁷	33,4
+-	1,25	não convergiu				
-+	1,25	0,999	-1,63x10 ⁸	2,66x10 ⁵	2,28x10 ⁷	19,0
--	1,25	0,999	-1,63x10 ⁸	2,67x10 ⁵	2,26x10 ⁷	19,1

Solução GrTBe da optimização TS - função objectivo VAL2

Tabela C1.22 Resultados para análise da robustez da solução GrTBe – VAL2 (TS)

Direcção	Flexibilidade	Pureza	VAL1	IAPG	IAPG-EPS	Q _{Benzeno} (mol/s)
	0	0,991	-1,55x10 ⁸	6,09x10 ⁵	1,30x10 ⁷	34,1
++	0,25	0,987	-1,62x10 ⁸	7,59x10 ⁵	1,43x10 ⁷	33,9
+-	0,25	0,987	-1,62x10 ⁸	7,59x10 ⁵	1,43x10 ⁷	33,9
-+	0,25	0,993	-1,50x10 ⁸	5,28x10 ⁵	1,26x10 ⁷	34,2
--	0,25	0,993	-1,50x10 ⁸	5,28x10 ⁵	1,26x10 ⁷	34,2
++	0,5	0,983	-1,70x10 ⁸	9,13x10 ⁵	1,58x10 ⁷	33,4
+-	0,5	0,983	-1,70x10 ⁸	9,12x10 ⁵	1,57x10 ⁷	33,4
-+	0,5	Infringiu restrição				
--	0,5	Infringiu restrição				

Solução GrTBe da optimização TS - função objectivo IAPG

Tabela C1.23 Resultados para análise da robustez da solução GrTBe – IAPG (TS)

Direcção	Flexibilidade	Pureza	VAL1	IAPG	IAPG-EPS	Q _{Benzeno} (mol/s)
	0	1,000	-1,81x10 ⁸	2,59x10 ⁵	3,01x10 ⁷	10,2
++	0,25	1,000	-1,84x10 ⁸	2,62x10 ⁵	2,91x10 ⁷	11,3
+-	0,25	1,000	-1,84x10 ⁸	2,62x10 ⁵	2,91x10 ⁷	11,3
-+	0,25	Infringiu restrição				
--	0,25	Infringiu restrição				

Solução GrTBe da optimização TS - função objectivo IAPG-EPS

Tabela C1.24 Resultados para análise da robustez da solução GrTBe – IAPG-EPS (TS)

Direcção	Flexibilidade	Pureza	VAL1	IAPG	IAPG-EPS	Q _{Benzeno} (mol/s)
	0	0,996	-1,50x10 ⁸	4,56x10 ⁵	1,44x10 ⁷	31,2
++	0,25	0,995	-1,51x10 ⁸	5,19x10 ⁵	1,42x10 ⁷	32,0
+-	0,25	0,995	-1,51x10 ⁸	5,05x10 ⁵	1,41x10 ⁷	31,9
-+	0,25	0,997	-1,50x10 ⁸	4,21x10 ⁵	1,49x10 ⁷	30,3
--	0,25	0,997	-1,50x10 ⁸	4,20x10 ⁵	1,49x10 ⁷	30,3
++	0,5	0,994	-1,53x10 ⁸	5,63x10 ⁵	1,42x10 ⁷	32,3
+-	0,5	0,994	-1,53x10 ⁸	5,83x10 ⁵	1,43x10 ⁷	32,4
-+	0,5	Infringiu restrição				
--	0,5	Infringiu restrição				

Tabela C1.25 Desvios das grandezas relativamente às soluções da configuração E

Flexibilidade	Desvio pureza %	Desvio VAL1 %	Desvio IAPG %	Desvio IAPG-EPS %	Desvio Q _{Benzeno} %
E/VAL1/SA					
0,25	0,0	1,6	12,9	2,5	0,9
0,25	0,0	1,6	12,9	2,4	0,9
0,25	0,0	0,6	-8,6	4,9	-5,5
0,25	0,0	0,6	-8,6	4,7	-5,5
0,50	0,0	11,1	41,6	31,5	-16,5
0,50	0,0	11,1	41,5	31,2	-16,3
0,50	0,0	1,5	-13,9	13,6	-13,2
0,50	0,0	1,5	-14,0	13,4	-13,2
0,75	0,0	11,6	42,5	32,5	-17,3
0,75	0,0	11,8	42,6	32,4	-17,4
E/VAL2/SA					
0,25	0,0	6,6	16,6	22,1	-15,0
0,25	0,0	6,6	16,6	22,0	-15,0
0,25	0,0	-1,8	-10,3	-3,6	1,8
0,25	0,0	-1,8	-10,3	-3,8	1,9
0,50	0,0	10,7	24,8	35,1	-24,0
0,50	0,0	10,8	25,0	35,2	-24,2
0,50	0,0	-1,2	-15,7	1,9	-2,7
0,50	0,0	-1,2	-15,7	1,6	-2,6
0,75	0,0	19,1	41,5	60,1	-41,0
0,75	0,0	19,1	41,4	59,7	-40,9
E/IAPG-EPS/SA					
0,25	0,0	1,6	12,6	4,1	-1,4
0,25	0,0	1,7	12,8	4,1	-1,4
0,25	0,0	0,6	-6,4	8,0	-6,1
0,25	0,0	0,6	-6,4	7,8	-6,0
0,5	0,0	8,7	31,8	27,8	-15,8
0,5	0,0	8,7	31,7	27,5	-15,8
0,5	0,0	3,2	-10,9	23,1	-16,8
0,5	0,0	3,2	-10,9	22,7	-16,7
0,75	0,0	13,3	42,0	43,0	-25,3
0,75	0,0	13,3	41,8	42,3	-25,1
0,75	0,0	5,8	-14,2	38,2	-27,5
0,75	0,0	5,8	-14,3	37,9	-27,5
1	0,0	22,8	61,8	71,2	-42,8
1	0,0	22,8	61,6	70,6	-42,6
E/VAL2/TS					
0,25	0,0	1,0	10,0	0,0	1,1
0,25	0,0	1,0	10,0	-0,2	1,1
0,25	0,0	2,2	-5,9	8,9	-6,8
0,25	0,0	2,2	-5,9	8,7	-6,8
0,5	0,0	9,8	36,2	28,1	-16,6
0,5	0,0	9,8	36,1	27,7	-16,4
0,5	0,0	3,9	-10,2	24,4	-18,1
0,5	0,0	4,0	-10,3	24,4	-18,3
0,75	0,0	11,2	39,3	32,0	-19,3
0,75	0,0	11,3	39,4	31,8	-19,3
0,75	0,0	6,5	-13,1	39,5	-29,0

Tabela C1.26 Desvios das grandezas relativamente às soluções da configuração GrTBe

Flexibilidade	Desvio pureza %	Desvio VAL1 %	Desvio IAPG %	Desvio IAPG-EPS %	Desvio Q _{Benzeno} %
GrTBe/VAL1/TS					
0,25	0,0	-0,7	11,5	-6,8	5,0
0,25	0,0	-0,7	8,8	-6,2	4,0
0,25	0,1	1,4	-7,9	8,9	-6,3
0,25	0,1	1,4	-7,9	8,9	-6,3
0,5	-0,1	0,0	28,8	-10,3	8,7
0,5	-0,1	0,0	29,1	-11,0	8,7
0,5	0,1	4,7	-14,1	21,2	-14,7
0,5	0,1	5,4	-15,0	22,6	-16,0
0,75	-0,2	0,7	44,4	-11,6	10,0
0,75	-0,2	1,4	43,5	-11,6	10,0
0,75	0,1	6,1	-17,4	32,2	-21,7
0,75	0,1	6,1	-17,9	33,6	-23,0
1	-0,4	4,1	81,2	-8,2	11,7
1	-0,3	3,4	70,0	-10,3	11,0
1	0,1	8,1	-20,0	45,2	-29,7
1	0,1	7,4	-19,4	41,1	-27,3
1,25	-0,6	7,4	120,3	-1,4	11,3
1,25					
1,25	0,1	10,1	-21,8	56,2	-36,7
1,25	0,1	10,1	-21,5	54,8	-36,3
GrTBe/VAL2/TS					
0,25	-0,4	4,5	24,6	10,0	-0,6
0,25	-0,4	4,5	24,6	10,0	-0,6
0,25	0,2	-3,2	-13,3	-3,1	0,3
0,25	0,2	-3,2	-13,3	-3,1	0,3
0,5	-0,8	9,7	49,9	21,5	-2,1
0,5	-0,8	9,7	49,8	20,8	-2,1
GrTBe/IAPG-EPS/TS					
0,25	-0,1	0,7	13,8	-1,4	2,6
0,25	-0,1	0,7	10,7	-2,1	2,2
0,25	0,1	0,0	-7,7	3,5	-2,9
0,25	0,1	0,0	-7,9	3,5	-2,9
0,5	-0,2	2,0	23,5	-1,4	3,5
0,5	-0,2	2,0	27,9	-0,7	3,8