

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE CAMPINA GRANDE
CENTRO DE CIÊNCIAS E TECNOLOGIA – CAMPUS I
PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA DE PROCESSOS**

TESE DE DOUTORADO

**DESENVOLVIMENTO DE UM MODELO DE INCRUSTAÇÃO E
APLICAÇÃO DE ALGORITMO GENÉTICO NA PROGRAMAÇÃO DE
LIMPEZAS DE TANQUES DE RESFRIAMENTO**

LUCIANO MEDEIROS DE SOUZA

**CAMPINA GRANDE – PARAÍBA
MAIO 2008**

**DESENVOLVIMENTO DE UM MODELO DE INCRUSTAÇÃO E
APLICAÇÃO DE ALGORITMO GENÉTICO NA PROGRAMAÇÃO DE
LIMPEZAS DE TANQUES DE RESFRIAMENTO**

LUCIANO MEDEIROS DE SOUZA

Tese apresentada à
Universidade Federal de
Campina Grande como parte
dos requisitos exigidos para a
obtenção do título de Doutor
em Engenharia de Processos

Área de concentração: Desenvolvimento de Processos

Orientador: Luis Gonzaga Sales Vasconcelos

Co-Orientador: José Jailson Nicácio Alves

CAMPINA GRANDE – PARAÍBA
2008

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA BIBLIOTECA CENTRAL DA UFCG

S895d

2008 Souza, Luciano Medeiros de.

Desenvolvimento de um modelo de incrustação e aplicação de algoritmo genético na programação de limpezas de tanques de resfriamento / Luciano Medeiros de Souza. — Campina Grande, 2008.

184 f. : il.

Tese (Doutorado em Engenharia de Processos) – Universidade Federal de Campina Grande, Centro de Ciências e Tecnologia.

Referências.

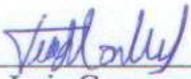
Orientadores: Prof. Dr. Luis Gonzaga Sales, Prof. Dr. José Jaílson Nicácio Alves.

1. Resfriamento. 2. Incrustação. 3. Otimização. 4. Algoritmo Genético. I. Título.

CDU – 66.045(043)

MEMBROS DA BANCA EXAMINADORA DA TESE DE DOUTORADO DE **LUCIANO MEDEIROS DE SOUZA** APRESENTADA AO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA DE PROCESSOS DO CENTRO DE CIÊNCIAS E TECNOLOGIA DA UNIVERSIDADE FEDERAL DE CAMPINA GRANDE

Tese de Doutorado **Aprovada** em 30 de maio de 2008.



Professor Dr. Luis Gonzaga Sales Vasconcelos
Unidade Acadêmica de Engenharia Química/UFCG
Orientador



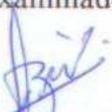
Professor Dr. José Jailson Nicácio Alves
Unidade Acadêmica de Engenharia Química/UFCG
Co-orientador



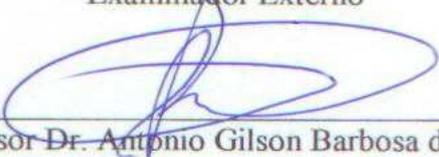
Professor Dr. Fernando Fernandes Vieira
Departamento de Química/UEPB
Examinador Externo



Professor Dr. Vimário Simões e Silva
Unidade Acadêmica de Engenharia Química/UFCG
Examinador Externo



Professor Dr. Romildo Pereira Brito
Unidade Acadêmica de Engenharia Química/UFCG
Examinador Externo



Professor Dr. Antonio Gilson Barbosa de Lima
Unidade Acadêmica de Engenharia Mecânica/UFCG
Examinador Interno

Campina Grande, Maio de 2008
PB, Brasil

Este exemplar corresponde à versão final da Tese de Doutorado em Engenharia de Processos, defendida por LUCIANO MEDEIROS DE SOUZA e aprovada pela banca examinadora em 30 de maio de 2008.

Prof. Dr. Luis Gonzaga Sales Vasconcelos (Orientador)
UFCG/CCT/UAEQ

DEDICATÓRIA

Ao Deus todo Poderoso, Criador de todo o universo

AGRADECIMENTOS

Ao meu Deus que tudo fez por mim e continua fazendo.

À minha noiva Petronila Santos de Oliveira por todo apoio afetivo.

Aos meus pais e toda minha família por todo apoio incentivo que depositaram na minha pessoa.

Aos Professores Luís Gonzaga Sales Vasconcelos e José Jailson Nicácio Alves pela orientação neste trabalho.

Ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Processos pelo apoio a este trabalho.

À BRASKEM Petroquímica pelas informações.

À CAPES pelo suporte financeiro.

À todos os professores do Laboratório de Simulação Numérica de Processos (LENP) da Unidade Acadêmica de Engenharia Química pelo apoio e incentivo dado aos seus alunos.

À todos meus amigos e colegas por todo apoio e ajuda nos momentos mais difíceis.

RESUMO

No processo de produção de soda cáustica, uma das etapas é o resfriamento da solução de hidróxido de sódio. O resfriamento da solução de hidróxido de sódio é feito em uma série de tanques que utilizam água gelada e água de torre de resfriamento para reduzir a temperatura da solução até um valor especificado. Cada tanque é dotado de agitador e serpentina de resfriamento. A água usada para resfriamento escoa no interior das serpentinas em contracorrente. Nos primeiros tanques usa-se água da torre de resfriamento e nos últimos tanques água gelada.

Um dos grandes problemas dos processos industriais é a incrustação formada nos equipamentos. No sistema de resfriamento de soda cáustica, incrustações se formam devido à cristalização de sais em torno da serpentina diminuindo o coeficiente global de transferência de calor. Um modelo assintótico em função do tempo para incrustações nos tanques foi ajustado para determinar o melhor momento da limpeza do tanque.

Otimizar a limpeza dos tanques em relação ao período de tempo e a escolha do tanque é e minimizar o número de limpezas periódicas são os objetivos deste trabalho. A função objetivo é calculada pelo programa baseado num modelo para a simulação deste sistema de resfriamento com modelo de incrustação assintótica desenvolvido anteriormente para este projeto e integrado a outros subprogramas desenvolvidos em MATLAB que utilizam os algoritmos genéticos para escolherem as melhores soluções para o sistema. A partir dos algoritmos genéticos determinaram-se alguns ótimos locais analisando os valores da temperatura da solução no último tanque e o número de limpezas por dia, assim como efeitos na carga térmica e na diferença de temperatura entre a água de resfriamento e a solução. Com o uso dos algoritmos genéticos está sendo possível encontrar padrões ótimos de limpeza para os tanques.

Palavras-chave:

Resfriamento, Incrustação, Otimização, Algoritmo Genético

ABSTRACT

In the process of caustic soda production, one of the stages is the cooling of the sodium hydroxide solution. The cooling of the sodium hydroxide solution is made in a series of tanks that use frozen water and water of cooling tower to reduce the temperature of the solution until the specified value. Each tank is endowed with agitator and coil of cooling. The cooling water flows in the interior of the coils in countercurrent. The water of cooling tower is used in the first tanks, where as the frozen in the last tanks.

One of the great problems of the industrial processes is the fouling formed in the equipment. In the system of caustic soda water cooling of the BRASKEM, fouling if they form due to crystallization of leave around the coil diminishing the global coefficient transference heat. An asymptotic model in function of the time for fouling in the tanks it was adjusted to determine optimum moment where the tank must be clean.

To optimize the cleaning of the tanks in relation to the period of time and the choice of the tank is and to minimize the number of periodic cleanings they are the objectives of this work. The objective function is calculated by the program based on a model for the simulation of this system of cooling with developed previously for this project and integrated model of asymptotic fouling function to other subprograms developed in MATLAB that use the genetic algorithms to choose the best solutions for the system. From the genetic algorithms some excellent places had been determined analyzing the values of the temperature of the solution in the last tank and the number of cleaning per day, as well as effect in the thermal load and the difference of temperature enters the water of cooling and the solution. With the use of the genetic algorithms it is being possible to find optimum cleaning schedule for the tanks.

Keywords:

Cooling, Fouling, Optimization, Genetic algorithm

ÍNDICE

		Páginas
	LISTA DE FIGURAS	v
	LISTA DE TABELAS	ix
	NOMENCLATURA	x
1	INTRODUÇÃO	1
1.1	Descrição do Sistema	2
1.2	Caracterização do Problema	2
1.3	Objetivos	3
1.3.1	Objetivo Geral	3
1.3.2	Objetivos Específicos	3
2	FUNDAMENTOS	4
2.1	Trocadores de Calor	4
2.1.1	Trocadores de Calor Classificados de Acordo com o Processo de Tranferência	4
2.1.2	Tipos de Trocadores de Calor Classificado de Acordo com a Geometria de Construção	5
2.1.2.1	Trocadores Tubulares	6
2.1.2.2	Trocador de Tubo Duplo	6
2.1.2.3	Trocador de Carcaça e Tubo	7
2.1.2.4	Trocador de Calor Tipo Placa	7
2.1.2.5	Tanques com Serpentinhas	8
2.1.3	Tipos de Trocadores de Calor em Relação ao Sentido das Correntes dos Fluidos Frio e Quente	11
2.2	Parâmetros do Processo	12
2.2.1	Coeficientes de Transmissão de Calor	12
2.2.2	Condutividade Térmica	13
2.2.3	Isolamentos Térmicos	15
2.2.4	Incrustações	19
2.2.4.1	Procedimentos para Minimizar as Incrustações e Custos	19
2.2.4.2	Mecanismos de Incrustações	20

2.2.4.3	Resistência Térmica Devido à Camada Formada pelas Incrustações	21
2.2.5	Cristalização	24
2.2.5.1	Supersaturação	24
2.2.5.2	Nucleação	25
2.2.5.3	O Crescimento dos Cristais	25
2.2.6	Influência dos Sólidos em Suspensão no Coeficiente de Transmissão de Calor	26
2.3	Otimização de Processos	27
2.3.1	Otimização em Relação à Limpeza de Trocadores de Calor Devido as Incrustações Formadas Durante o Processo	29
2.3.2	Programação Linear	30
2.3.3	Programação Não Linear	31
2.3.4	Problemas com Variáveis Discretas ou Contínuas	32
2.3.5	Computação Evolucionária e Algoritmos Evolucionários	33
2.3.6	Algoritmos Genéticos	36
2.3.6.1	Codificação dos Indivíduos	38
2.3.6.2	População Inicial de Indivíduos	39
2.3.6.3	Função de Adaptação ou Avaliação (Fitness)	40
2.3.6.4	Métodos de Seleção	41
2.3.6.5	Cruzamento ou Recombinação	42
2.3.6.6	Mutação	44
2.3.6.7	Aplicação dos Algoritmos Genéticos	45
3	MODELAGEM MATEMÁTICA	47
3.1.1	Modelo para o Fluido na Serpentina	48
3.1.2	Modelo para a Solução no Tanque	48
3.1.3	Parâmetros do Modelo	49
3.2	DISCRETIZAÇÃO E RESOLUÇÃO DO MODELO	53
3.2.1	Discretização da Serpentina	53
3.2.2	Discretização do Tanque com Solução Cáustica	55
3.3	Função Objetivo e Fluxograma de Otimização	56
3.4	Procedimentos e Dados de Entrada para Simulação	58

4	RESULTADOS OBTIDOS	61
4.1	Primeira Etapa: Incrustação Constante	61
4.1.1	Tetes Modificando as Taxas de Incrustações com os Tanques	65
4.1.2	Comparação dos Valores Obtidos para Resistência Devido à Incrustação nos Testes com a Literatura	68
4.2	Segunda Etapa: Combinações Utilizando Valores de Incrustação Constante e o Uso da Função Assintótica para as Incrustações	69
4.2.1	Combinações para o Sistema	70
4.2.2	Incrustação Assintótica	77
4.2.3	Comparação de Dados Obtidos na Segunda Etapa com a Literatura	80
4.2.4	Estudo da Espessura da Camada de Incrustação	86
4.3	Terceira Etapa: Modelagem da Limpeza nos Tanques	88
4.4	Quarta Etapa: Otimização da Limpeza nos Tanques via Algoritmos Genéticos	90
5	CONCLUSÃO E SUGESTÕES FUTURAS	105
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	106
	APÊNDICE A DADOS DO SISTEMA ATUAL DA BRASKEM	118
A.1	Dados para a Alimentação no Primeiro Estágio	120
A.1.1	Na Solução	120
A.1.2	No Precipitado	120
A.1.3	Na Alimentação	120
A.2	Dados para a Saída no Último Estágio	121
A.2.1	Na Solução	121
A.2.2	No Precipitado	121
A.2.3	Na saída	121
	APÊNDICE B ESTIMATIVAS PARA O SISTEMA	122
B1	Viscosidade	122
B2	Densidade da Solução	123
B3	Capacidade calorífica	124
B4	Condutividade Térmica	124
	APÊNDICE C FLUXOGRAMA E PROGRAMA DESENVOLVIDO PARA O	

	SISTEMA EM FORTRAN-90	125
	APÊNDICE D PROGRAMA DESENVOLVIDO PARA O SISTEMA EM MATLAB	143
	APÊNDICE E SUBPROGRAMAS PARA O USO DE ALGORITMOS GENÉTICOS	161
E1	Subprograma Principal Que Utiliza Algoritmos Genéticos	161
E2	Rotina de Simulação das Soluções Geradas pelo Subprograma Principal	164
E3	Subprograma de Cálculo das Variáveis de Saída dos Tanques	182
E4	Subprograma Gerador de Gráficos	183

LISTA DE FIGURAS

		Páginas
Figura 1	Sistema de resfriamento dos tanques (BRAGA Jr., 2001)	2
Figura 2	Tanque com serpentina (TROCADOR DE CALOR, 2008)	8
Figura 3	Visualização externa de um Tanque com agitador e serpentina (ABOISSA, 2008)	9
Figura 4	Visualização interna de um tanque com serpentina e agitador (ABOISSA, 2008)	10
Figura 5	Tanque de grandes dimensões utilizado na indústria (SOTANQUES, 2008)	10
Figura 6	Trocador de calor com os fluidos escoando na mesma direção (co-corrente)	11
Figura 7	Trocador de calor com os fluidos escoando em direções contrárias (contracorrente)	12
Figura 8	Esquema de condução de calor em uma parede	13
Figura 9	Condução de calor com isolamento térmico	15
Figura 10	Isolamento térmico da parede de um trocador tubular	16
Figura 11	Isolamento térmico da parede de um trocador de calor por incrustações	16
Figura 12	Representação do raio crítico	18
Figura 13	Tipos de modelos para a taxa de incrustação	23
Figura 14	Representação de indivíduos de uma população e sua respectiva roleta de seleção (ALGORITMOS GENÉTICOS, 2007)	41
Figura 15	Cruzamento ou recombinação entre indivíduos com um único ponto de corte	43
Figura 16	Cruzamento ou recombinação entre indivíduos com dois pontos de corte	43
Figura 17	Mutações pela alteração de um gene	44
Figura 18	Mutações devido a uma troca de genes	44
Figura 19	Desenho esquemático do tanque	47

Figura 20	Representação das malhas para o espaço e o tempo para método das diferenças finitas	53
Figura 21	Malha numérica para o sistema de tanques	55
Figura 22	Fluxograma das etapas de otimização utilizando algoritmos genéticos	58
Figura 23	Temperatura de saída da solução versus o tanque de operação	61
Figura 24	Temperatura da solução para cada tanque	62
Figura 25	Erro relativo da temperatura da solução para cada tanque	63
Figura 26	Carga térmica para cada tanque	63
Figura 27	Temperatura da água que está saindo de cada tanque	64
Figura 28	Temperatura da solução na saída para cada tanque	66
Figura 29	Erro da temperatura da solução na saída para cada tanque	67
Figura 30	Carga térmica para cada tanque	67
Figura 31	Temperatura da água que está saindo de cada tanque	68
Figura 32	Sistema de utilização de água nova nos estágios T7 e T3	71
Figura 33	Sistema de utilização de água nova no estágio T7 e água velha no estágio T3	71
Figura 34	Temperatura da solução na saída em relação aos tanques	72
Figura 35	Temperatura da solução na saída em relação aos tanques com a taxa de incrustação constante do teste 3	73
Figura 36	Temperatura da água na saída em relação aos tanques	74
Figura 37	Temperatura da água na saída em relação aos tanques com a taxa de incrustação constante do teste 3	75
Figura 38	Carga térmica em relação aos tanques	76
Figura 39	Carga térmica na saída em relação aos tanques com a taxa de incrustação constante do teste 3	76
Figura 40	Resistências assintóticas para os tanques T1 e T2 em função do tempo para determinados valores de τ	77
Figura 41	Resistências assintóticas para os tanques T3 a T7 em relação ao tempo para determinados valores de τ	78
Figura 42	Temperatura da solução na saída do tanque T7 para determinados valores de τ	79

Figura 43	Temperatura da solução na saída dos tanques em função do tempo com τ igual a 200000 s	80
Figura 44	Temperatura da água na saída das serpentinas dos tanques em função do tempo com τ igual a 200000 s	81
Figura 45	Variações de temperatura das correntes de fluido quente (T_{ho}) e fluido frio (T_{co}) na saída do trocador de calor E-4105 da Planta Khorasan Petroquímica (SANAYE e NIROOMAND, 2007)	82
Figura 46	Coefficiente global de transferência de calor nos tanques em função do tempo com τ igual a 200000 s	83
Figura 47	Variações no coeficiente global de transferência de calor no trocador E-4105 da Planta Khorasan Petroquímica (SANAYE e NIROOMAND, 2007)	84
Figura 48	Quantidade de calor nos tanques em função do tempo com τ igual a 200000 s	85
Figura 49	Quantidade de calor no trocador E-4105 da Planta Khorasan Petroquímica para resistências (R_f) devido à incrustação (SANAYE e NIROOMAND, 2007)	85
Figura 50	Variação da Espessura de Incrustação com o tempo para $k_d = 0,23 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$	87
Figura 51	Variação da Espessura de Incrustação com o tempo para $k_d = 1,16 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$	87
Figura 52	Temperatura da solução na saída do processo para a operação em vários dias com R_d^∞ pequeno	89
Figura 53	Temperatura da solução na saída do processo para a operação em vários dias com R_d^∞ elevado	90
Figura 54	Funcionalidade dos tanques com o tempo (S1)	92
Figura 55	Temperatura da Solução na saída dos tanques durante a simulação S1	93
Figura 56	Funcionalidade dos tanques no período de operação (S2)	94
Figura 57	Temperatura da solução na saída dos tanques durante a simulação S2	95

Figura 58	Funcionalidade dos tanques no período de operação (S3)	96
Figura 59	Temperatura da solução na saída dos tanques durante a simulação S3	97
Figura 60	Funcionalidade dos tanques no período de operação (S4)	98
Figura 61	Temperatura da solução na saída dos tanques durante a simulação S4	99
Figura 62	Funcionalidade dos tanques no período de operação (S5)	100
Figura 63	Temperatura da solução na saída dos tanques durante a simulação (S5)	101
Figura 64	Valor máximo da função objetivo a cada geração	102
Figura 65	Valor médio da função objetivo a cada geração	103
Figura 66	Valor mínimo da função objetivo a cada geração	104
Figura 1B	Viscosidade versus temperatura da solução	122
Figura 2B	Densidade versus temperatura da solução	123
Figura 1C	Diagrama das partes constitutivas do programa	142

LISTA DE TABELAS

		Páginas
Tabela 1	Condutividade térmica de alguns materiais na temperatura de 27°C	14
Tabela 2	Condutividade térmica de alguns materiais presentes em equipamentos industriais	15
Tabela 3	Dados de dimensionamento dos tanques	60
Tabela 4	Testes para avaliar a incrustação	65
Tabela 5	Valores de resistências devido à incrustações encontrados na literatura	69
Tabela 6	Combinações para o sistema atual	70
Tabela 7	Ciclo de limpezas dos tanques de resfriamento feito pela BRASKEM	88
Tabela 8	Simulações modificando a taxa de cruzamento e a de mutação	91
Tabela 1A	Dados para a solução	120
Tabela 2A	Dados para o precipitado	120
Tabela 3A	Dados para a solução na saída do último tanque	121
Tabela 4A	Dados para o precipitado na saída do último tanque	121
Tabela 1B	Dados obtidos pela regressão da viscosidade versus a temperatura da solução	123
Tabela 2B	Coefficientes obtidos pela regressão da densidade versus a temperatura da solução	124
Tabela 3B	Dados mostrando a exatidão e o desvio pela regressão da densidade versus a temperatura da solução	124

NOMENCLATURA

A	Área transversal de escoamento do fluido [m ²]
c	calor específico [J/(s)(K)]
C	concentração da mistura [kg/kg]
C^*	concentração de equilíbrio da solução [kg/kg]
C_P	capacidade calorífica da água no interior da serpentina [J/(kg)(K)]
C_{Ps}	capacidade calorífica da solução [J/(kg)(K)]
Cu_1	constante da função objetivo para o termo de temperatura especificada para a saída do sistema de resfriamento [K ⁻¹]
Cu_2	constante da função objetivo para o número de limpezas de cada tanque no período de 16 dias.
Cu_3	constante da função objetivo para o número total de limpezas em 16 dias
D_{se}	diâmetro externo da serpentina [m]
D_{si}	diâmetro interno da serpentina [m]
D_H	diâmetro helicoidal [m]
D_t	diâmetro do tanque [m]
E_g	energia de ativação para a taxa de crescimento [J/mol]
F_{obj}	função objetivo
g	ordem de da taxa de crescimento dos cristais
G	vazão mássica [kg/(h)(m ²)]
i	posição do subscrito em z
j	posição do subscrito em t
k	posição do subscrito em relação ao tanque de operação
k_f	condutividade térmica do fluido no interior da serpentina [W/(m)(K)]
K_g	constante de crescimento [kg/(m ²)(s)]
K_G	fator de crescimento dependente da temperatura [kg/(m ²)(s)]
k_s	condutividade térmica da solução [W/(m)(K)]
k_{is}	condutividade térmica da solução [W/(m)(K)]
L_s	espessura da serpentina [m]
m	incremento de espaço [m]
m_s	vazão mássica de solução no tanque [kg/s]

n	incremento de tempo [s]
N	número de rotações [rps]
$PM_{\text{ÁGUA}}$	peso molecular [kmol/kg]
Q	carga térmica no sistema [J/s]
Q_{ag}	carga térmica para a água gelada [J/s]
Q_{at}	carga térmica para a água da torre de resfriamento [J/s]
R^*	constante universal dos gases [J/(mol)(K)]
R_d	resistência térmica por incrustações [(m ²)(K)/W]
R_d^{Inf}	resistência para as incrustações num tempo infinito [(m ²)(K)/W]
R_d	resistência térmica real devido ao precipitado e as incrustações [(m ²)(K)/W]
R_d^∞	resistência para as incrustações num tempo infinito para curvas assintóticas [(m ²)(K)/W]
R_e	resistência térmica do lado da solução [(m ²)(K)/W]
R_i	resistência térmica do lado da água [(m ²)(K)/W]
R_{is}	resistência térmica do lado da água [(m ²)(K)/W]
R_{ss}	resistência dos sólidos em suspensão [(m ²)(K)/W]
r_G	taxa de crescimento dos cristais [kg/(m ²)(s)]
R_p	resistência térmica da parede [(m ²)(K)/W]
S	a área lateral da serpentina por unidade de comprimento (Perímetro da serpentina) (m ² /m)
SS	grau de supersaturação
t	tempo de operação [s]
t'	tempo em que ocorreu a última limpeza no tanque [s]
T	temperatura do fluido no interior da serpentina [K]
T_{ke}	temperatura na entrada do tanque [K]
$T_{conhecida}$	temperatura da serpentina estimada como valor inicial [K]
T_{REF}	temperatura de referência [K]
T_s	temperatura da solução [K]
T_{SE}	temperatura da solução na entrada do tanque [K]
$T_{SAÍDA}$	temperatura da solução na saída do sistema de resfriamento [K]
U	coeficiente global de troca térmica sem incrustações [J/(s)(m ²)(K)]
U_d	coeficiente global de troca térmica com incrustações [J/(s)(m ²)(K)]

U_d'	coeficiente real de transmissão de calor [J/(s)(m ²)(K)]
V_{ag}	vazão de água gelada [m ³ /h]
V_{at}	vazão de água da torre de resfriamento [m ³ /h]
\bar{V}_s	volume da solução [m ³]
w	vazão mássica de fluido frio [kg/s]
x_d	espessura de incrustação [m]
z	posição axial ao longo da serpentina [m]
$z_{máx}$	comprimento máximo da serpentina [m]
Z_a	comprimento das pás do agitador [m]
ΔC	diferença entre as concentrações [g/kg]
μ	viscosidade do fluido na serpentina [J/(kg)(K)]
μ_s	viscosidade da solução [J/(kg)(K)]
μ_{sw}	viscosidade da solução no lado da parede da serpentina [J/(kg)(K)]
μ_w	viscosidade no lado da parede do fluido no interior da serpentina [J/(kg)(K)]
ρ	densidade da água no interior da serpentina [kg/m ³]
ρ_s	densidade da solução no tanque [kg/m ³]
σ	supersaturação relativa
τ	constante de tempo para curvas assintóticas
v	velocidade média do fluido [m/s]
v_{ag}	velocidade média da água gelada [m/s]
v_{at}	velocidade média da água da torre de resfriamento [m/s]

1. INTRODUÇÃO

No processo de produção de cloro-soda, uma das etapas é o resfriamento da soda cáustica. Este resfriamento é feito em uma série de tanques que utilizam água gelada e água da torre de resfriamento para reduzir a temperatura da solução até o valor especificado em projeto.

A solução de soda cáustica produzida pelo processo de células de diafragma é, na verdade, uma mistura contendo água, hidróxido de sódio e sais como o cloreto de sódio e o sulfato de sódio. Os dados sobre solução cáustica são mostrados com maior detalhe no Apêndice A. Durante o resfriamento da solução ocorre a cristalização de sais presentes na solução, especialmente o cloreto de sódio que se encontra em maior quantidade.

A cristalização dos sais afeta diretamente a resistência à transferência de calor entre a solução e o fluido refrigerante; ela é responsável pela incrustação na superfície externa das serpentinas dos tanques, elevando a temperatura de saída da solução do sistema de resfriamento para valores acima do valor especificado para armazenamento e estocagem.

O sistema de resfriamento apesar de possuir sete tanques, está projetado para operar com capacidade total utilizando seis tanques, já que pelo menos um deles ficará fora da operação, para uma lavagem por um determinado intervalo de tempo (NUNES, 2002).

1.1 Descrição do sistema

Neste trabalho, foi tomado como estudo de caso o sistema de resfriamento de soda cáustica da BRASKEM, a unidade CLORO-SODA localizada Maceió-Al.

O sistema de resfriamento é descrito na Figura 1 (BRAGA Jr., 2001):

- Sete tanques em série, onde a soda escoar por gravidade de um tanque para outro;
- Todos os tanques possuem serpentinas e agitadores;
- A água é usada para resfriamento nas serpentinas em contracorrente, ao sentido da solução cáustica;
- Nos primeiros três tanques usam-se águas de resfriamento (T1 a T3) e nos últimos três tanques, água gelada (T4 a T7);
- Apenas um tanque por vez é reservado para a limpeza, nesse caso seis tanques ficam operando.

Espera-se que o sistema de resfriamento de soda cáustica apresente duas especificações:

- Resfriamento da soda desde 91,1 até 25⁰C, preparando-a para centrifugação e estocagem;
- Remoção do sal (cloreto de sódio e outros), reduzindo sua concentração de 2,5% para 1,05 %.

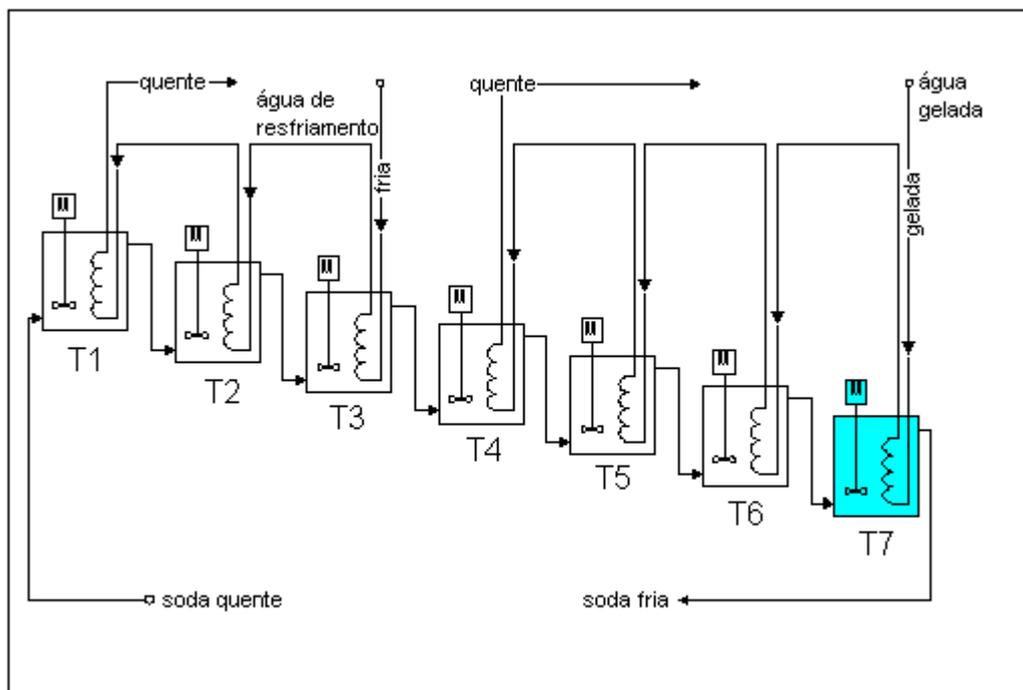


Figura 1 – Sistema de resfriamento da soda cáustica tanques (BRAGA Jr., 2001).

No sistema de resfriamento, cada estágio equivale a um tanque, com um determinado código onde a contagem do estágio é crescente da esquerda para direita (T1 a T7, na Figura 1). O tanque T7 está colorido porque representa o tanque de saída da solução. No caso do tanque T7 está sendo limpo, o tanque T6 torna-se o tanque de saída da soda cáustica do processo.

1.2 Caracterização do Problema

Existem alguns problemas associados com a etapa de resfriamento, entre os quais podem ser citados:

- a) A temperatura da solução na saída do sistema de resfriamento fora (acima) do valor especificado (entre 24 e 26⁰C aproximadamente) para ser estocado e comercializado;
- b) Precipitação de sal na superfície da serpentina, reduzindo a troca térmica nos tanques.

Como a solubilidade dos sais diminui com o resfriamento, ocorre uma deposição de sais em torno da serpentina mesmo com a agitação constante das pás do agitador, tendo como consequência à redução na capacidade de troca térmica e forçando a retirada do tanque de operação para drenagem e lavagem. Isto acarreta em não se poder obter uma temperatura muito próxima de 24⁰C e um aumento nos custos referentes ao gasto de energia com o resfriamento, devido a necessidade de aumentar a vazão de água gelada (BRAGA Jr., 2001).

1.3 Objetivos

1.3.1 Objetivo Geral

Otimizar o desempenho de um sistema de resfriamento de uma solução de soda cáustica (NaOH) representado pela Figura 1, através da determinação do intervalo de tempo no qual cada tanque deve ser limpo, usando-se como ferramenta os algoritmos genéticos.

1.3.2 Objetivos Específicos

Diante dos problemas relacionados na seção anterior, os objetivos específicos deste trabalho processo são:

- a. Desenvolver o modelo matemático para as incrustações no tanque mais próximo da realidade para o sistema;
- b. Determinar os valores ideais para as constantes referentes às resistências devido às incrustações em cada tanque;
- c. Desenvolver um modelo com o qual se possa simular o comportamento do sistema em vários dias, assim como o que ocorre com o mesmo antes e após a limpeza de cada tanque;
- d. Aplicação de algoritmo genético como técnica de otimização.

2. FUNDAMENTOS

Neste capítulo, apresenta-se uma descrição dos equipamentos e operações unitárias envolvidas neste processo, como trocadores de calor e resfriamento de tanques por serpentinas, incrustação, cristalização e conceitos e aplicações importantes sobre otimização e a técnica que é utilizada neste projeto, os algoritmos genéticos.

2.1 Trocadores de Calor

Trocador de calor é o dispositivo usado para realizar o processo da troca térmica entre dois fluidos em diferentes temperaturas. Este processo é comum em muitas aplicações da Engenharia. Pode-se utilizá-los no aquecimento e resfriamento de ambientes, no condicionamento de ar, na produção de energia, na recuperação de calor e no processo químico. Em virtude das muitas aplicações importantes, a pesquisa e o desenvolvimento dos trocadores de calor têm uma longa história, mas ainda hoje busca-se aperfeiçoar o projeto e o desempenho de trocadores, baseada na crescente preocupação pela conservação de energia. (TROCADORES DE CALOR, 2008). Os trocadores de calor são feitos em vários tamanhos, tipos, configurações e disposições de escoamento. Foram desenvolvidos muitos tipos de trocadores de calor para o emprego em diversos níveis de dificuldade tecnológica e de porte, como usinas elétricas à vapor, usinas de processamento químico, aquecimento e condicionamento de ar em edifícios, refrigeradores domésticos, radiadores de automóveis e radiadores de veículos espaciais (ÖZİŞİK, 1990).

Os trocadores de calor usados pelos engenheiros químicos não podem ser caracterizados por um único modelo e na realidade, a variedade deste equipamento é muito grande. Entretanto, a característica comum à maior parte dos trocadores de calor é a transferência de calor de um fluido quente para um fluido frio separadas por uma fronteira sólida (FOUST *et al.*, 1982).

2.1.1 Tipos de Trocadores de Calor Classificado de Acordo com o Processo de Transferência

Os trocadores de calor podem ser classificados como de contato direto e indireto. No tipo de contato direto, a transferência de calor ocorre entre dois fluidos imiscíveis, como um gás e um

líquido, que entram em contato direto. Neste trocador, os dois fluidos se misturam. Aplicações comuns de um trocador de contato direto envolvem transferência de massa além de transferência de calor; aplicações que envolvem só transferência de calor são raras. Comparado a recuperadores de contato indireto e regeneradores, são alcançadas taxas de transferência de calor muito altas. Sua construção é relativamente barata. As aplicações são limitadas aos casos onde um contato direto de dois fluxos fluidos é permissível (TROCADORES DE CALOR, 2008). As torres de resfriamento, condensadores com nebulização para vapor e água e outros vapores, utilizando pulverizadores de água são exemplos típicos de trocadores por contato direto.

No caso do trocador de calor de contato indireto, os fluidos permanecem separados e o calor é transferido continuamente através de uma parede, pela qual se realiza a transferência de calor. Os trocadores de contato indireto classificam-se em: trocadores de transferência direta e de armazenamento.

Nos trocadores de transferência direta há um fluxo contínuo de calor do fluido quente ao frio através de uma parede que os separa. Não há mistura entre eles, pois cada corrente permanece em passagens separadas. Este trocador é designado como um trocador de calor de recuperação, ou simplesmente como um recuperador. Alguns exemplos de trocadores de transferência direta são trocadores de placa, tubular, e de superfície estendida. Recuperadores constituem uma vasta maioria de todos os trocadores de calor (TROCADORES DE CALOR, 2008).

Em um trocador de armazenamento, ambos os fluidos percorrem alternativamente as mesmas passagens de troca de calor. A superfície de transferência de calor geralmente é de uma estrutura chamada matriz. Em caso de aquecimento, o fluido quente atravessa a superfície de transferência de calor e a energia térmica é armazenada na matriz. Posteriormente, quando o fluido frio passa pelas mesmas passagens, a matriz libera energia térmica (no caso de refrigeração, o processo é inverso). Este trocador também é chamado regenerador.

2.1.2 Tipos de Trocadores de Calor Classificados de acordo com a Geometria de Construção

Os trocadores de calor podem também ser classificados de acordo com as características construtivas. Como exemplos, têm-se trocadores tubulares, de placa, de placa aletada, de tubo aletado, regenerativos e tanques com envoltórios ou serpentinas.

2.1.2.1 Trocadores Tubulares

Estes tipo de trocadores são amplamente fabricados e usados em muitos tamanhos, com muitos arranjos de escoamento e em diversos tipos. Eles são geralmente construídos com tubos circulares, existindo uma variação de acordo com o fabricante. São usados para aplicações de transferência de calor líquido/líquido (uma ou duas fases). Eles trabalham de maneira ótima em aplicações de transferência de calor gás/gás, principalmente quando pressões e/ou temperaturas operacionais são muito altas onde nenhum outro tipo de trocador pode operar. Este trocadores podem ser classificados como carcaça e tubo, tubo duplo e de espiral (TROCADORES DE CALOR, 2008).

2.1.2.2 Trocador de Tubo Duplo

O trocador de tubo duplo consiste de dois tubos concêntricos. Um dos fluidos escoam pelo tubo interno e o outro pela parte anular entre tubos, em uma direção de contracorrente. Este é talvez o mais simples de todos os tipos de trocador de calor pela fácil manutenção envolvida. É geralmente usado em aplicações de pequenas capacidades (TROCADORES DE CALOR, 2008).

Segundo Kern (1987), o trocador de tubo duplo industrial também é constituído de dois tês conectores, um cabeçote de retorno e uma curva de retorno. O tubo interno é mantido dentro do tubo externo por meio de buchas de apoio, e o fluido entra no tubo externo por meio de buchas de apoio, e o fluido entra no tubo interno através de uma conexão rosqueada localizada fora da seção própria do trocador. Os tês possuem conexões com roscas ou com bocais que são a eles ligados a fim de permitir a entrada e a saída do fluido da parte anular que cruza um ramo até outro através do cabeçote de retorno. Os dois comprimentos do tubo interno estão conectados por uma curva de retorno que é usualmente exposta e não fornece uma superfície de calor efetiva. Quando a unidade está disposta em dois ramos, ela denomina-se grampo.

O trocador de tubo duplo é extremamente útil porque ele pode ser utilizado em qualquer conjunto com conexões de tubos através de partes padronizadas e fornece uma superfície de transmissão de calor com um custo de projeto mais baixo.

2.1.2.3 Trocador de Carcaça e Tubo

Muitos serviços industriais precisam do uso de um grande número de unidades conectadas por grampos com tubos duplos. Estes ocupam uma considerável área e também garantem um grande número de pontos através dos quais é possível ocorrer escoamento. No caso da necessidade de grandes áreas para transmissão de calor, elas podem ser mais facilmente obtidas com um equipamento multitubular fechado que consiste de diversos tubos que passam no interior de um invólucro ou carcaça (KERN,1987).

O trocador de carcaça e tubo é construído com tubos e uma carcaça. Um dos fluidos passa por dentro dos tubos, e o outro pelo espaço entre a carcaça e os tubos. Existe uma variedade de construções diferentes destes trocadores dependendo da transferência de calor desejada, do desempenho, da queda de pressão e dos métodos usados para reduzir tensões térmicas, prevenir vazamentos, facilidade de limpeza, para conter pressões operacionais e temperaturas altas, controlar corrosão, etc. Trocadores de carcaça e tubo são os mais usados para quaisquer capacidades e condições operacionais, tais como pressões e temperaturas altas, atmosferas altamente corrosivas, fluidos muito viscosos, misturas de multicomponentes, etc. Estes são trocadores muito versáteis, feitos de uma variedade de materiais e tamanhos e são extensivamente usados em processos industriais (TROCADORES DE CALOR, 2008).

2.1.2.4 Trocador de Calor Tipo Placa

Este tipo de equipamento normalmente é construído com placas planas lisas ou com alguma forma de ondulações. Geralmente, este trocador não pode suportar pressões muito altas, comparado ao trocador tubular equivalente.

Este tipo de construção tem menor custo inicial mas, pode ser usado somente para pequenas diferenças de temperatura entre o fluido quente e o frio porque, nenhum provimento é feito para evitar as tensões térmicas devido à expansão diferencial entre os tubos e a carcaça. Outra desvantagem consiste na não remoção do feixe de tubos para a limpeza. Estes inconvenientes podem ser contornados pelo arranjo, uma placa de tubos é fixa, mas a outra é aparafusada a uma tampa flutuante que permite o movimento relativo entre o feixe de tubos e a carcaça (TROCADORES DE CALOR, 2008).

2.1.2.5 Tanques com Serpentinhas

Este tipo de equipamento consiste em uma ou mais serpentinas (de tubos circulares) ordenadas em uma carcaça mostra a Figura 2 (TROCADORES DE CALOR, 2008).

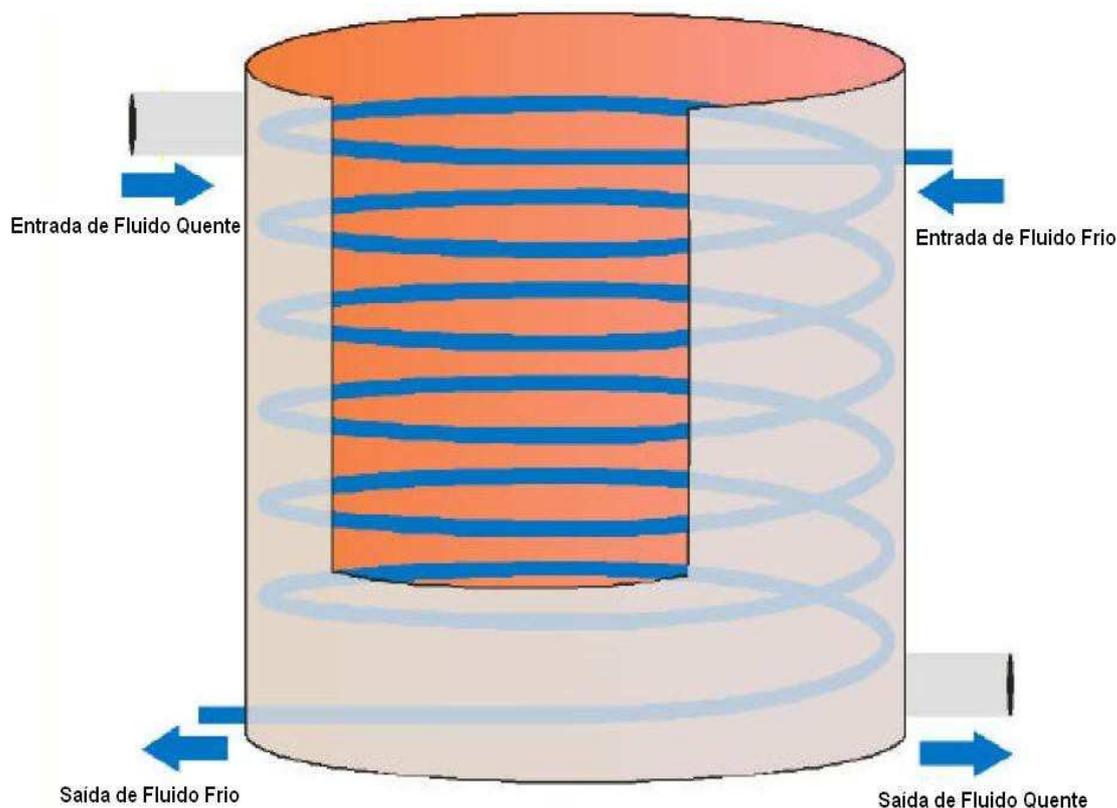


Figura 2 – Tanque com serpentina (TROCADORES DE CALOR, 2008)

Tubos em forma de serpentina constituem o dispositivo mais barato para se obter a área de transmissão de calor. As serpentinas normalmente são feitas enrolando-se tubos de aço, cobre, ou ligas em forma de hélices ou hélices duplas nas quais as entrada e saída são convenientemente localizadas lado a lado. As serpentinas helicoidais são freqüentemente instaladas em recipientes cilíndricos com ou sem agitador, embora exista um espaço livre entre a serpentina e a parede para possibilitar a circulação. Quando estas serpentinas são usadas com um agitador mecânico, o eixo vertical do agitador normalmente corresponde ao eixo vertical do cilindro. Serpentinhas helicoidais duplas podem ser instaladas em carcaças, e as conexões da serpentina passam através da carcaça ou da cobertura da carcaça. Esse aparelho assemelha-se ao trocador tubular, embora seja limitado por áreas menores (KERN, 1987).

A transferência de calor associada a um tubo espiral é mais alta que para um tubo duplo. Além disto, uma grande superfície pode ser acomodada em um determinado espaço utilizando as serpentinas. As expansões térmicas não são nenhum problema, mas a limpeza é muito problemática. Observa-se na Figura 3 e 4, a fotografia de um tanque com serpentina e agitador e na Figura 4, o seu interior. No caso do sistema de resfriamento da BRASKEM, os tanques possuem grandes dimensões como mostrados na Figura 5. Estas fotografias mostradas nas Figuras 3, 4 e 5 são equipamentos anunciados por fabricantes.



Figura 3 – Visualização externa de um tanque com serpentina e agitador (ABOISSA, 2008)



Figura 4 – Visualização interna de um tanque com serpentina e agitador (ABOISSA, 2008)



Figura 5 – Tanque de grandes dimensões utilizado na indústria (SOTANQUES, 2008)

2.1.3 Tipos de Trocadores de Calor em Relação ao Sentido das Correntes dos Fluidos Frio e Quente

A diferença de temperatura gera a força motriz que determina a transmissão de calor, tanto em relação à fonte quente como a fonte fria. Nas Figuras 6 e 7, observa-se o funcionamento das trocas de calor a partir do esquema da seção transversal de um trocador de calor, com configurações concorrente e contra-corrente, respectivamente. O fluido A representa aquele que está entrando no compartimento interior do trocador de calor e o fluido B no compartimento exterior do trocador, o de cor cinza. O fluido A representa o fluido quente do processo, isto é, com temperatura mais elevada e o B, o fluido frio ou refrigerante. Na Figura 5, a configuração do trocador é concorrente, ambos os fluidos escoam na mesma direção, enquanto na Figura 5, a configuração é contra-corrente, os fluidos escoam em direções opostas. O fluido quente A em ambos os casos (concorrente e contra-corrente), ao trocar calor com o fluido frio B, sai com uma temperatura mais baixa.

O sistema de resfriamento por tanques, o qual é similar a trocadores de calor em contra-corrente como os que são estudados nos trabalhos de Estel *et al.* (2000) e de Smaïli *et al.* (2001). No trabalho de Vaselenak *et al.* (1986) em que se a integração energética de um processo em batelada observa-se modelos para perfis de temperatura de trocadores operando tanto em contra como co-corrente. Lee e Reklaitis (1995) estudaram a otimização da integração energética entre trocadores contra e concorrentes.

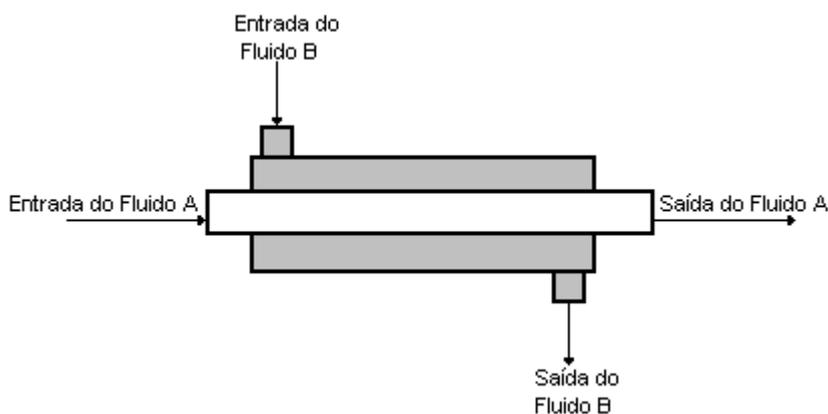


Figura 6 – Trocador de calor com os fluidos escoando na mesma direção (concorrente)

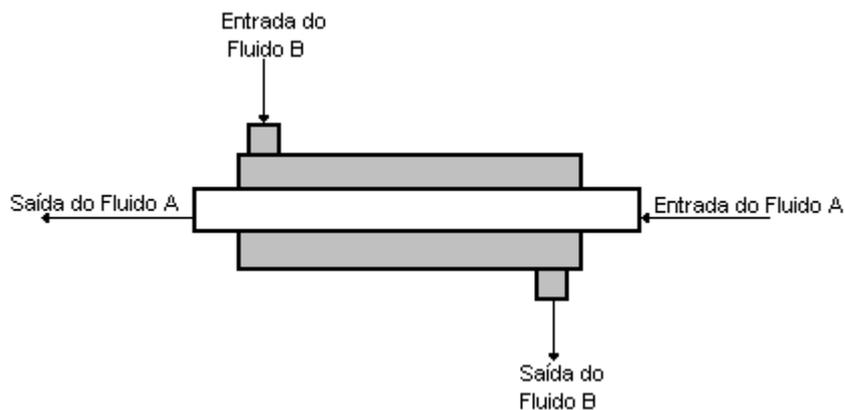


Figura 7 – Trocador de calor com os fluidos escoando em direções contrárias (contracorrente)

Em ambos os casos mostrados nas Figuras 6 e 7, o coeficiente de transmissão de calor que se mede com maior facilidade é o coeficiente global. A diferença total de temperatura e a transferência total de calor são grandezas que se pode usualmente medir num trocador de calor de área conhecida.

2.2 Parâmetros do Processo

2.2.1 Coeficientes de Transmissão de Calor

Pela relação $q = UA\Delta T$, o coeficiente global (U) pode ser calculado conhecendo-se as temperaturas terminais dos fluidos quente e frio e a taxa de calor q . Muitas vezes, os trocadores de calor são caracterizados por meio de coeficientes globais e não pelos coeficientes particulares. A determinação dos coeficientes particulares é muito difícil, pois existem incertezas na medição das temperaturas superficiais (FOUST *et al.*, 1982).

Com a finalidade de se estabelecer a diferença de temperatura, ΔT entre os fluidos quente e frio, é necessário levar em consideração também todas as resistências entre as duas temperaturas. No caso de dois tubos concêntricos, tendo o tubo interno pequena espessura, as resistências encontradas são a resistência pelicular do fluido para o tubo, a resistência da parede do tubo, R_p , e a resistência pelicular do fluido na parte anular (KERN, 1987). Uma vez que q é igual a $\Delta T/\sum R$, sendo que:

$$\sum R = \frac{1}{h_i} + R_p + \frac{1}{h_e} \quad (2.1)$$

onde $\sum R$ é a resistência total. Pode-se verificar por comparação que:

$$U = \frac{1}{\sum R} \quad (2.2)$$

onde U é o coeficiente global de transmissão de calor. Este U , na maioria dos processos não é o verdadeiro, pois não considera as resistências devido a depósitos ou incrustações, o que geralmente ocorre nos processos.

2.2.2 Condutividade Térmica

Condução é o modo de transferência de calor em que a troca de energia ocorre da região de alta temperatura para a de baixa temperatura pelo movimento cinético ou pelo contato direto de moléculas, no caso de fluidos em repouso, e pelo movimento de elétrons, no caso de metais. Num sólido que seja bom condutor elétrico, um grande número de elétrons livres se move através de uma rede; por isso, materiais bons condutores de eletricidade são geralmente bons condutores de calor (ÖZİŞİK, 1990).

A condução de calor através de uma parede pode ser observada na Figura 8.

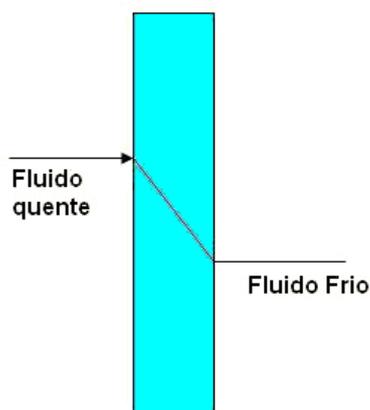


Figura 8 – Esquema de condução de calor em uma parede

O fluxo de calor através de um sólido depende de uma propriedade do material denominada condutividade térmica. Ela pode ser definida como o fluxo térmico de uma substância num dado gradiente de temperatura.

Segundo Incropera e Dewitt (1998), um sólido é considerado composto por elétrons livres e por átomos ligados em um arranjo periódico em forma de rede. Nesse modelo, o transporte de energia térmica ocorre por meio de dois efeitos distintos: a migração de elétrons livres e através de ondas vibracionais na rede. A condutividade térmica é a soma dos efeitos elétricos e da rede cristalina. Dessa forma, materiais cristalinos, como o quartzo, possuem condutividade térmica maior do que materiais amorfos, como por exemplo, o vidro. Para sólidos cristalinos não-metálicos, como o diamante e o óxido de berílio, o valor da condutividade térmica pode ser bastante grande, excedendo valores para a condutividade associados a materiais considerados bons condutores, como o alumínio.

A condutividade térmica também varia com a temperatura. Esta variação, em alguns materiais, dentro de certos intervalos de temperatura, é bastante pequena e pode ser desprezada, mas, em muitos casos, ela é muito significativa. Compostos com baixa condutividade térmica são muitas vezes utilizados como isolantes térmicos e os com valores elevados como material constituinte de equipamentos industriais de transferência de calor. Observa-se na Tabela 1, as condutividades térmicas de alguns materiais (CONDUTIVIDADE TÉRMICA, 2008). Na Tabela 2, são mostradas as condutividades de materiais comuns em processos de transferência de calor (ANTIINCRUSTANTES, 2008).

Tabela 1 – Condutividade térmica de alguns materiais na temperatura de 27⁰C
(CONDUTIVIDADE TÉRMICA, 2008)

Material	k (W.m ⁻¹ .K ⁻¹)
Prata	426
Ferro	80,3
Vidro	0,72-0,86
Água	0,61
Tijolo	0,4-0,8
Fibra de vidro	0,046
Espuma de poliuretano	0,020
Ar atmosférico	0,026

Tabela 2 – Condutividade térmica de alguns materiais presentes em equipamentos industriais
(ANTIINCRUSTANTES, 2008)

Material	k ($\text{W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$)
Aço	46,44
Bronze	104,50
Cobre	371,56
Incrustações formadas por silicatos	0,23-0,46
Incrustações formadas por carbonatos	0,46-0,70
Incrustações formadas por sulfatos	0,70-1,16

2.2.3 Isolamentos Térmicos

Isolamentos térmicos são compostos por materiais de baixa condutividade térmica combinados para se atingir uma condutividade térmica global do sistema ainda menor (observe a Figura 9).

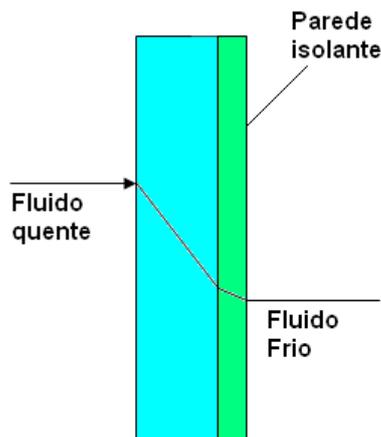


Figura 9 – Condução de calor com isolamento térmico

Nos isolamentos com fibras, com pós, ou com flocos, o material sólido encontra-se finamente disperso num espaço contendo ar. Tais sistemas são caracterizados por uma condutividade térmica efetiva, que depende da condutividade térmica dos materiais radiantes da superfície do material sólido, bem como da natureza e da fração volumétrica do espaço entre as partículas. Um importante parâmetro do sistema é a sua densidade aparente (massa do

sólido/volume total), que depende fortemente da forma na qual o material sólido está interconectado (INCROPERA e DEWITT, 1998).

Alguns isolamentos térmicos são indesejados; o caso das incrustações que ocorrem em equipamentos de transferência de calor na indústria. Qualquer formação de crostas ou depósitos poderá causar o superaquecimento do metal que forma o equipamento, com efeitos às vezes desastrosos, além de atuar como isolante, reduzindo a eficiência projetada de transferência de calor, e aumentando de modo substancial e desnecessário o consumo de combustível (PERDAS DE CALOR EM CALDEIRAS INCRUSTADAS, 2008).

Nas Figuras 10 e 11, têm-se isolamentos em trocadores tubulares. Observe na Figura 11 que, dependendo do tipo de incrustação, a camada formada pode ter algumas saliências.

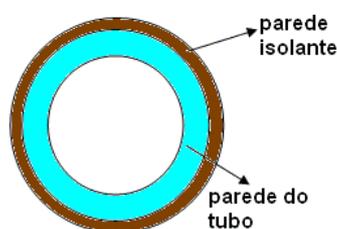


Figura 10 – Isolamento térmico da parede de um trocador tubular

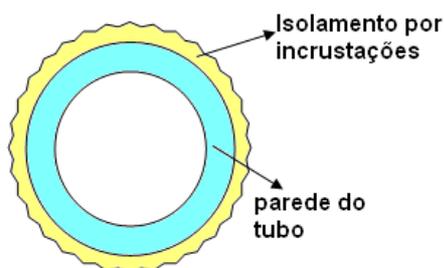


Figura 11 – Isolamento térmico da parede de um trocador de calor por incrustações

Um fator importante que deve ser considerado no estudo de isolamentos térmicos é a formação de pequenos espaços, ou poros devido à fundição ou ligação do material sólido, criando dessa maneira uma matriz rígida. O trabalho de Brahim *et al.* (2008), mostra uma equação para o cálculo da condutividade térmica de incrustação formada em soluções aquosas, a partir da porosidade e condutividade térmica do sólido no qual está ocorrendo deposição e da condutividade térmica da água.

O isolamento possui uma determinada resistência à transferência de calor que pode ser escrita da seguinte forma:

$$R_{is} = \frac{x_{is}}{k_{is}} \quad (2.3)$$

Se a camada isolante for formada por incrustações, a equação (2.3) pode ser reescrita da seguinte forma:

$$R_d = \frac{x_d}{k_d} \quad (2.4)$$

À primeira vista, parece que quanto menor a espessura de isolamento menor deve ser a perda de calor total. Isto é sempre verdade para um isolamento chato, mas não é verdade para um isolamento curvo. Considerando um tubo com sucessivas camadas de isolamento dispostas com simetria cilíndrica. À medida que a espessura aumenta, a área da superfície, da qual o calor pode ser removido pelo ar, aumenta, e a perda total de calor poderá também aumentar se a área crescer muito mais rapidamente do que a resistência (KERN, 1987).

E a resistência do isolamento por comprimento do tubo é dada pela equação (2.5).

$$R_{is} = \frac{l}{2\pi k_{is}} \ln \frac{r}{r_1} \quad (2.5)$$

e a resistência externa do fluido no qual o tubo está imerso é dado por

$$R_e = \frac{l}{h_e 2\pi r} \quad (2.6)$$

A resistência é mínima, e a perda de calor é máxima quando a derivada das somas das resistências R em relação ao raio r é igualada a zero.

$$R_{is} + R_e = \frac{l}{2\pi k_{is}} \ln \frac{r}{r_1} + \frac{l}{h_e 2\pi r} \quad (2.7)$$

$$\frac{d(R_{is} + R_e)}{dr} = \frac{l}{2\pi k_{is}} d \ln \frac{r}{r_1} + \frac{l}{h_e 2\pi r} d \frac{1}{r} \quad (2.8)$$

$$\frac{d(R_{is} + R_e)}{dr} = \frac{l}{2\pi k_{is} r} - \frac{l}{h_e 2\pi r^2} \quad (2.9)$$

$$\frac{d(R_{is} + R_e)}{dr} = 0 \quad (2.10)$$

Igualando as equações (2.9) e (2.10), tem-se:

$$0 = \frac{l}{2\pi k_{is} r} - \frac{l}{h_e 2\pi r^2} \quad (2.11)$$

Rearranjando a equação (2.11), obtém-se o seguinte valor para r :

$$r = \frac{k_{is}}{h_e} \quad (2.12)$$

Com a perda máxima de calor, têm-se que $r = r_c$, dessa forma o raio crítico é igual a

$$r_c = \frac{k_{is}}{h_e} \quad (2.13)$$

A Figura 12 mostra a representação do raio crítico.

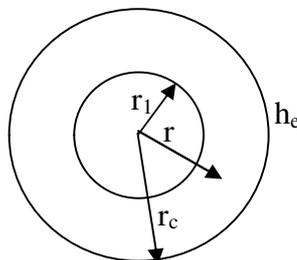


Figura 12 – Representação do raio crítico

A equação (2.13) mostra que a perda máxima de calor num tubo ocorre quando o raio crítico torna-se igual à razão entre a condutividade térmica do isolamento e o coeficiente de transmissão de calor da superfície.

2.2.4 Incrustações

Incrustações são geralmente definidas como materiais não-desejados que se acumulam nas superfícies dos equipamentos de processos (FOULING IN HEAT EXCHANGERS, 2008).

As incrustações são um problema universal no projeto e operação de trocadores de calor e afetam de duas maneiras (FOULING IN HEAT EXCHANGERS, 2008):

- a) A camada de incrustação possui uma baixa condutividade térmica, aumentando a resistência de transferência de calor e diminuindo a efetividade dos trocadores de calor;
- b) A área ao longo do equipamento é reduzida ao ocorrer a deposição, aumentando a pressão;

2.2.4.1 Procedimentos para Minimizar as Incrustações e Custos

Segundo Georgiadis *et al.* (2000), o maior problema não resolvido de interesse significativo do campo de estudo relacionado a trocadores de calor é o da formação de incrustação. Alguns procedimentos para minimizar os efeitos da incrustação são descritos por Smaïli *et al* (2001), Sanaye e Nirromand (2007) e Fouling in Heat Exchangers (2008). São eles:

- a) Reduzir a taxa de incrustação pela adição de um ou mais agentes químicos do tipo que inibe a incrustação;
- b) Aumento a área da superfície de 10 a 50% em relação a que é especificada no projeto;
- c) Utilizar um equipamento de transferência de calor mais eficiente;
- d) Usar combustível extra ou aumentar o fluxo de fluido de aquecimento ou refrigeração para aumentar a carga térmica;
- e) Realizar limpeza regular de unidades incrustadas durante o ciclo de operação para restaurar a performance térmica e hidráulica do sistema.

Enormes custos estão associados às incrustações. O conhecimento da economia relacionada às incrustações é muito importante quando se avalia várias estratégias de minimização dos seus efeitos. E 15% dos custos de manutenção de um processo são atribuídos à trocadores de calor e caldeiras (FOULING IN HEAT EXCHANGERS, 2008).

A formação de incrustação é um fator que influencia demasiadamente nas perdas econômicas em operações industriais (MARKOWSKI, 2000).

2.2.4.2 Mecanismos de Incrustação

Epstein apud Pugh *et al.* (2004) classifica os mecanismos de incrustação em trocadores de calor que utilizam água do mar como fluido de refrigeração. Para trocadores em geral, estes mecanismos podem ser classificados da seguinte forma:

a) incrustação por sedimentação do acúmulo de sólidos finamente divididos de materiais lamosos e arenosos ou outros tipos que estão suspensos nos fluidos do processo, que se depositam na superfície do trocador de calor e agem como uma camada isolante;

b) incrustação devido à cristalização de material orgânico ou inorgânico dissolvido que têm a sua solubilidade diminuída com o aumento, ou na maioria dos casos, com a diminuição da temperatura;

c) incrustação corrosiva pela oxidação dos metais que constituem os trocadores, produzindo camadas isolantes de óxidos na superfície;

d) incrustação por reação química que forma depósitos sobre a superfície de transferência de calor;

e) bioincrustação (aeróbica e anaeróbica) pelo crescimento de organismos biológicos presentes nos fluidos de refrigeração. As espécies que atacam podem ser microorganismos (bactérias e algas) ou macroorganismos (pequenos moluscos). Este tipo de incrustação ocorre principalmente, quando se utiliza água do mar como fluido refrigerante.

Epstein apud Pugh *et al.* (2004) sugere uma sequência geral de eventos que determinam o nível de incrustação:

- a) iniciação;
- b) transporte de material incrustante;
- c) deposição na superfície;
- d) fixação;
- e) crescimento de depósito na superfície.

Dessa forma têm-se os seguintes fatores que influenciam na formação da incrustações:

- a) velocidades de escoamento dos fluidos quente e frio;
- b) temperatura na superfície das paredes do trocador de calor;
- c) diferença de temperatura entre os fluidos;
- d) concentração de oxigênio (para o caso de biocorrosão);
- e) tipo de material que o trocador é constituído;
- f) concentração de sólidos em suspensão ou dissolvidos nos fluidos que atravessam o trocador;
- g) porosidade das paredes do trocador;
- h) formato do trocador de calor (tubo ou placa).

2.2.4.3 Resistência Térmica Devido à Camada Formada pelas Incrustações

O desempenho dos trocadores de calor sob condições de serviço depende do coeficiente global U . Durante a operação com soluções, líquidos e gases, desenvolve-se gradualmente uma película de sujeira na superfície de transferência de calor. Seu efeito, conhecido como incrustação, aumenta a resistência térmica. O fabricante normalmente não pode prever a natureza do depósito de sujeira, nem a velocidade de formação da película. Portanto apenas o desempenho de trocadores limpo pode ser previsto.

A formação de depósitos ou incrustações em sistemas de trocadores de calor que operam continuamente é um problema que afeta muitas plantas industriais, porque além de afetar o coeficiente de transmissão de calor, alteram os valores das temperaturas das correntes quentes e frias em comparação com os valores correspondentes estando o trocador limpo. A incrustação reduz a efetividade do trocador de calor, causando um maior perda de energia, diminuindo a

produção e aumentando os custos de limpeza e manutenção (SANAYE e NIMROOMAND, 2007).

No caso de sistemas de trocadores de calor, além da formação de incrustações na superfície do trocador que está sendo observado, essa mesma ocorrência no trocador antecedente, aquele pelo qual o fluido passou anteriormente, também afeta a sua capacidade de troca térmica (MARKOWSKI e URBANIEC, 2005).

A resistência térmica dos depósitos só pode ser obtida por meio de testes reais, pela experiência ou por simulação. Se os testes de desempenho forem feitos num trocador limpo e repetidos depois, quando a unidade estiver operando por algum tempo, a resistência térmica do depósito poderá ser determinada pela seguinte relação (KREITH, 1977; SMAÏLI *et al.*, 2001; SANAYE e NIMROOMAND, 2007):

$$R_d = \frac{1}{U_d} - \frac{1}{U} \quad (2.14)$$

onde U é o coeficiente de transmissão de calor do trocador limpo; U_d é o coeficiente após ter ocorrido à incrustação; e R_d é a resistência térmica devido à incrustação;

A otimização das limpezas em trocadores individuais de um sistema pode ser determinada pelo conhecimento do comportamento da resistência devido à incrustação em função do tempo (MARKOWSKI e URBANIEC, 2005).

Em trabalhos como o de Smaïli *et al.* (2001) e de Sanaye e Niroomand (2007) há referências à limpeza de depósitos em trocadores de calor em refinarias petroquímicas. Eles utilizam um modelo em que R_d é função do tempo. Nestes casos, a equação (2.14) pode ser rearranjada, e reescrita da seguinte forma:

$$\frac{1}{U_d(t)} = \frac{1}{U} + R_d(t) \quad (2.15)$$

Nos trabalhos de Smaïli *et al.* (2001) e de Sanaye e Niroomand (2007), mostra-se dois tipos de modelo: o primeiro considera a taxa de incrustação variando de forma linear como

mostra a equação (2.16), e o segundo, os autores consideram que a taxa de incrustação é uma função assintótica conforme a equação (2.17), dadas a seguir.

$$R_d(t) = ct \quad (2.16)$$

$$R_d(t) = R_d^\infty (1 - \exp(-t / \tau)) \quad (2.17)$$

Na equação (2.17) R_d^∞ é a resistência devido à incrustação quando esta atinge o estado estacionário; t é o período transcorrido após a última lavagem, e τ é a constante de tempo para a incrustação, esse valor representa o atraso em relação aos efeitos da incrustação.

Baseado no artigo de Pugh *et al.* (2004) na Figura 13, observa-se a dependência da incrustação com o tempo para os tipos mais conhecidos de modelos através. Segundo estes autores, o comportamento assintótico ocorre após um período de tempo, e nesta situação o valor de R_d torna-se constante e começa a crescer linearmente no intervalo entre limpezas ou crescer até um valor máximo, onde a resistência começa a decair. Em algumas circunstâncias, a camada de incrustação é periodicamente removida e pode observar um comportamento conhecido como “dente-de-serra”.

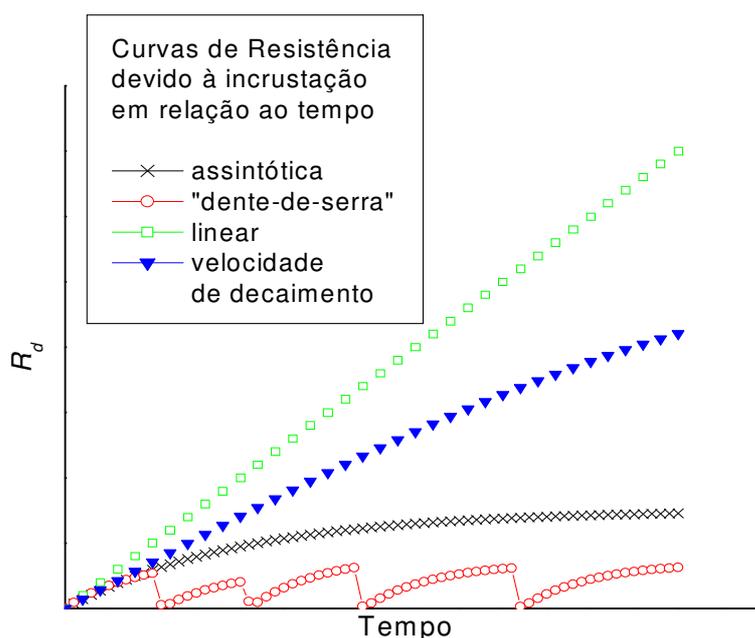


Figura 13 – Tipos de modelos para a taxa de incrustação

2.2.5 Cristalização

Segundo Pamplin (1975), a cristalização é provavelmente a mais antiga das operações unitárias da Engenharia Química. Ela tem muitas aplicações na indústria, mas em muitos casos elas geram problemas como a das incrustações formadas nas superfícies de trocadores de calor, ao formar um isolamento que dificulta a troca térmica entre os fluidos quente e frio.

Os cristais se aglomeram, sendo observadas impurezas nas superfícies de crescimento. A nucleação ocorre não só na solução, mas também sobre as superfícies cristalinas, e os cristais são fragmentados pelas bombas e pela agitação (FOUST *et al*, 1982). A cristalização é fortemente afetada pelo grau de supersaturação, pela intensidade da agitação, pela densidade e pelas dimensões dos cristais já existentes no processo e pela pureza da solução.

2.2.5.1 Supersaturação

O estado de supersaturação é essencial para que ocorra a cristalização e uma das formas mais convenientes de se representá-lo é utilizando a expressão para o grau de supersaturação, dado por:

$$SS = \frac{C}{C^*} \quad (2.18)$$

onde C é a concentração da mistura, isto é a quantidade total de produtos dividido pela quantidade de solvente existente na mistura e C^* é a concentração de equilíbrio da saturação na mesma temperatura, quer dizer, a quantidade máxima de produto para se formar uma solução dividido pela quantidade de água. Para uma solução saturada $SS = 1$, $SS < 1$ mostra baixa saturação, e $SS > 1$ indica supersaturação. Outras expressões comuns são a força motriz, ΔC , e a supersaturação relativa, σ , definidas por:

$$\Delta C = C - C^* \quad (2.19)$$

e

$$\sigma = \frac{\Delta C}{C^*} = S - 1 \quad (2.20)$$

2.2.5.2 Nucleação

A nucleação pode ser definida simplesmente como a formação de um novo cristal (PRICE, 1997). Esse processo, de acordo com Nývlt *et al.* (2001), decide o tamanho dos cristais do produto e, portanto, em uma certa medida, suas propriedades físicas e pureza. Existem dois mecanismos de nucleação e que podem ser classificados da seguinte forma:

- a) Nucleação primária (homogênea e heterogênea);
- b) Nucleação secundária (originada por cristais, por camada intermediária ou por contato).

A nucleação primária é definida como a formação de cristais sem que haja cristais já formados na solução em que ela vai ocorrer. Se a nucleação é absolutamente pura, a nucleação ocorre de forma heterogênea. Se a nucleação acontece em uma suspensão cristalina, o que ocorre frequentemente em equipamentos de cristalização, ela é denominada de nucleação secundária. Parece provável que todas essas nucleações ocorram simultaneamente, mas a nucleação secundária prevalece fortemente em cristalizadores, sendo que a nucleação homogênea torna-se importante somente em elevadas supersaturações, como é o caso da precipitação, em soluções muito puras. Contudo, é necessário descrever as relações básicas que representam a nucleação homogênea, pois elas podem ser (ao menos como uma aproximação) aplicadas para a nucleação heterogênea e para certos mecanismos da nucleação secundária (NÝVLT *et al.*, 2001).

2.2.5.3 O Crescimento dos Cristais

O tamanho e a forma de produtos cristalinos são importantes tendo em vista sua utilização na cristalização industrial. Existe na literatura, um grande número de possibilidades de como definir o tamanho característico do cristal, os correspondentes fatores de forma e, para materiais polidispersos, a distribuição de tamanho também. Essas diferentes possibilidades usualmente correspondem aos métodos individuais de medida de tamanho de partículas ou da distribuição do tamanho das partículas, bem como a utilização final do produto (NÝVLT *et al.*, 2001).

Kim e Kim (2002) utilizam a seguinte taxa de crescimento para cristais:

$$r_G = K_G \Delta C^g = K_g \exp\left(\frac{-E_g}{R^*T}\right) \Delta C^g \quad (2.21)$$

onde r_G é a taxa de crescimento dos cristais, K_G , fator de crescimento dependente da temperatura, K_g a constante de crescimento, E_g a energia de ativação para a taxa de crescimento, e g a ordem do processo referente à supersaturação, ΔC . A equação (2.21) é similar as usadas para cinética química.

2.2.6 Influência dos Sólidos em Suspensão no Coeficiente de Transmissão de Calor

Um fator importante que se deve levar em conta no sistema de resfriamento da BRASKEM e que deve ser considerado nos problemas de incrustação é a concentração de sólidos em suspensão, neste caso, os sais do precipitado que flui junto com a solução.

Deve-se esperar que a presença de cristais acarrete uma diminuição da supersaturação local e que isso diminua o risco de incrustações nas superfícies de resfriamento. Isso é verdadeiro somente nos estágios iniciais de formação das incrustações. Nos estágios seguintes, quando a camada de incrustação já está presente, outro mecanismo pode ser dominante. Pequenos cristais impactando a camada superficial da incrustação podem aderir nessa superfície e contribuir para o crescimento irregular da camada. Outra explicação pode ser dada pelo fato de que a presença de sólidos em suspensão pode levar a uma mudança no coeficiente de transferência de calor da suspensão à superfície de resfriamento (NÝVLT *et al.*, 2001).

Com isso, existem duas resistências que diminuem o coeficiente de transmissão de calor, uma já vista anteriormente na seção (2.2.4.3) quais sejam R_d , resistência devido à depósitos ou incrustações e a outra seria R_{ss} , resistência dos sólidos em suspensão. Sendo assim, a resistência real dos fatores que diminuem o coeficiente de transmissão de calor será:

$$R'_d = R_d + R_{ss} \quad (2.22)$$

Dessa forma a equação (2.15) pode ser reescrita da seguinte forma:

$$\frac{I}{U'_d(t)} = \frac{I}{U} + R'_d(t) \quad (2.23)$$

$$\frac{I}{U'_d(t)} = \frac{I}{U} + R_d(t) + R_{ss}(t) \quad (2.24)$$

onde U'_d é o coeficiente real de transmissão de calor. Em soluções diluídas o valor de R_{ss} é igual a zero.

2.3 Otimização de Processos

A Otimização e a melhoria contínua dos processos operacionais objetivam aumentar a efetividade, qualidade, consistência de informações e rentabilidade, ao mesmo tempo que reduz riscos e custos operacionais (OTIMIZAÇÃO, 2008). O conceito de otimização está bem definido como um mecanismo de análise de decisões complexas, envolvendo a seleção de valores para variáveis, como o simples objetivo de quantificar performance e medir a qualidade das decisões. A intenção é encontrar a melhor solução, respeitando, se necessário, restrições de viabilidade impostas ao processo (SOARES, 1997).

Nos problemas relacionados à otimização de projetos de processos na Engenharia Química existe a necessidade de se representar o melhor critério de performance de uma planta. Geralmente, essa representação é feita através de fatores econômicos como capital, investimentos, custos operacionais e rentabilidade. Com a necessidade de se obter a melhor performance possível de um determinado processo, surge o problema de otimização.

Nos problemas típicos dos projetos de processos da engenharia química ou de plantas operacionais, é muito comum encontrar um número infinito de soluções. Para se obter valores ótimos para um determinado processo, os problemas de otimização são formulados, principalmente, a partir de três componentes (EDGARD e HIMMELBLAU, 1988):

- a) Função objetivo;
- b) Modelo do processo;
- c) As restrições do processo que em geral são relacionadas aos custos do projeto.

Em relação aos problemas de otimização sempre é encontrada pelo menos uma função objetivo para ser otimizada (lucro, custo, rentabilidade, produção) e restrições de igualdade (equações) e desigualdade (inequações). A função objetivo pode ser um modelo de programação linear ou não-linear, com ou sem variáveis contínuas e/ou discretas.

A otimização de processos pode ser aplicada de diversos modos nas operações e processos da indústria química. Alguns dos projetos típicos em que se utiliza técnicas de otimização são os seguintes:

- a) Determinação dos melhores locais de distribuição das unidades que constituem uma planta do processo;
- b) Melhor localização de tanques para o armazenamento de produtos refinados e não-refinados;
- c) Dimensionamento das linhas de transmissão entre as partes que constituem o processo e a sua distribuição e localização;
- d) Projeto do equipamento ou da planta inteira;
- e) Padronização dos períodos de saída de um equipamento para a manutenção e a sua reposição no processo;
- f) Operações de equipamentos como, reatores tubulares, trocadores de calor, colunas de destilação, absorção, etc;
- g) Avaliação de dados da planta para construir um modelo do processo;
- h) Minimização de custos;
- i) Distribuição de recursos ou serviços entre os processos da planta;
- j) Planejamento e padronização da construção de equipamentos.

Na literatura, foram encontrados alguns exemplos de otimização de processos químicos, os quais são listados a seguir:

- a) Modelagem e otimização de uma rede de trocadores de calor baseada num sistema especialista e numa função objetivo exergo-econômica (LI e HUA, 2000);
- b) Problemas de otimização de sistemas complexos sob condições de incerteza (OSTROVSKY *et al.*, 1998);
- c) Síntese estrutural de sistemas de trocadores de calor (GALLI e CERDÁ, 1998);

- d) Síntese e otimização de um sistema de destilação não-ideal (FRAGA e MATIAS, 1996);
- e) Otimização do processo de hidroalquilação do tolueno (GROSS e ROSEN, 1998);
- f) Síntese de trocadores de massa (GARRARD e FRAGA, 1998);
- g) Otimização do projeto de um reator para síntese de amônia (UPRETI e DEB, 1997);
- h) Decomposição térmica de plásticos (SAHA *et al.*, 2008);
- i) Produção de álcool cíclico e minimização da formação de indesejados (VICTORINO *et al.*, 2007);
- j) Simulação de redes de trocadores de calor e planejamento padrão para a otimização de limpezas (SANAYE e NIMROOMAND, 2007);
- k) Mitigação de incrustações de redes de trocadores de calor em refinarias pela ótima gerência de limpeza (SMAÏLI *et al.*, 2001).

Alguns dos exemplos citados utilizam como técnica de otimização, os algoritmos evolucionários, cuja descrição será detalhada na seção (2.3.5).

2.3.1 Otimização em Relação à Limpeza de Trocadores de Calor Devido as Incrustações Formadas Durante o Processo

Incrustações afetam o desempenho do trocador de calor e se este está integrado a operação e o processo de uma planta, afeta também os custos operacionais. Dessa forma torna-se necessário desenvolver um planejamento padrão de limpezas de trocadores de calor. No trabalho de Sanaye e Nimroomand (2007), o planejamento necessita de três elementos:

- a) Simulação do sistema de trocadores de calor;
- b) Modelos apropriados para prever o comportamento da incrustação;
- c) Um método robusto para otimizar e determinar o melhor período para limpeza do trocador, considerando condições e restrições do sistema de trocadores de calor.

Vários métodos de padronização de limpeza de trocadores de calor têm sido propostos na literatura como, por exemplo, o de Smaïli *et al.* (2001), que propõe um modelo de função objetivo desenvolvida a partir dos custos do processo, tendo como variáveis principais estudadas,

a taxa de incrustação assintótica e a diferença de pressão nas paredes internas e externas do trocador de calor. Epstein apud Georgiadis *et al.* (2000) apresenta um método analítico para cálculos de otimização de evaporadores. E Casado apud Georgiadis *et al.* (2000) utiliza um modelo de custo detalhado para calcular o ciclo de limpeza de um trocador de calor incrustado e, com base neste trabalho, Sheikh *et al.* apud Georgiadis *et al.* (2000) apresentou um modelo de incerteza num modelo de incrustação linear com grau de confiabilidade. Neste mesmo contexto, Zubair *et al.* apud Georgiadis *et al.* (2000) considerou diferentes modelos estocásticos de incrustação e Ahmad apud Georgiadis *et al.* (2000) propõe uma condição de monitoramento de um sistema para prever padrões de limpeza de trocadores de calor em indústrias de produção de leite.

Markowski (2000) formulou o seu método a partir de dados importantes como coeficiente de transferência de calor na superfície sem incrustação, calor observado quando o trocador está limpo, calor máximo possível quando há incrustações ou depósitos nas superfícies interna e externa do trocador, resistência assintótica máxima em ambas as superfícies e outros que podem ser obtidos e validados por dados da indústria ou por experimentos.

2.3.2 Programação Linear

Segundo Edgar e Himelblau (1988), a programação linear é bastante utilizada em técnicas de otimização, sendo ela uma das mais eficientes. O termo programação linear foi inventado por George Dantzig, em 1947, para se referir a procedimentos de resolução de problemas de otimização em que tanto a função objetivo como as restrições são lineares. O termo “programação” não se refere especificamente a um código computacional, mas em encontrar a solução de problemas de funções lineares de modo prático utilizando um código computacional.

Nos problemas de programação linear, forma-se um intervalo convexo na forma de um poliedro, que é chamado conjunto de pontos viáveis a partir de restrições lineares. Todo “ótimo local” é automaticamente um “ótimo global”. As restrições são sempre desigualdades em problemas de programação linear. A solução ótima de uma função objetivo pode ser encontrada na intersecção entre ela com uma ou mais restrições. Uma função objetivo utilizando programação linear pode ser escrita da seguinte forma:

$$\text{Minimizar ou maximizar: } f(x) = \sum_{i=1}^r c_i x_i \quad (2.25)$$

sujeito às restrições:

$$x_i \geq 0 \quad i = 1, 2, \dots, r \quad (\text{todos os } r \text{ são variáveis positivas}) \quad (2.26)$$

$$\text{e } x_1 + x_2 \leq 4 \quad (2.27)$$

2.3.3 Programação Não-Linear

Sendo a função objetivo ou uma das restrições não-linear, têm-se um problema de programação não-linear. Um exemplo de programação não-linear pode ser escrita da seguinte forma:

$$\text{Minimizar ou maximizar: } f(x) = \sum_{i=1}^{11} x_i + \sum_{i=1}^{10} (x_i + x_{i+1})^2 \quad (2.28)$$

sujeito às restrições:

$$x_i \geq 0 \quad i = 1, 2, \dots, 11 \quad (2.29)$$

$$0,1x_1 + 0,2x_7 + 0,3x_8 + 0,2x_9 + 0,2x_{11} = 1,0 \quad (2.30)$$

$$0,1x_2 + 0,2x_8 + 0,3x_9 + 0,4x_{10} + 1,2x_{11} = 2,2 \quad (2.31)$$

$$0,1x_3 + 0,2x_8 + 0,3x_9 + 0,2x_{10} + 2,0x_{11} = 3,0 \quad (2.32)$$

Como pode-se observar nas equações (2.28) à (2.32), pode ocorrer em problemas de programação não linear tanto restrições de igualdade como de desigualdade. A função objetivo pode ser côncava quando se tem um único máximo global, ou convexa, no caso de se ter um único mínimo global.

Entre as técnicas de procura de soluções mais conhecidas para programações linear e não-linear estão as seguintes:

a) Algoritmos evolucionários que se baseiam na evolução das espécies e utilizam adaptação, cruzamento e mutação para se obter soluções ótimas;

b) A busca *scatter* que não tem inspiração na natureza e se baseia no balanceamento de movimentos de exploração e intensificação, onde soluções de qualidade podem ser obtidas sem desprezar subespaços de busca pouco promissores.

2.3.4 Problemas com Variáveis Discretas ou Contínuas

Muitos problemas relacionados à otimização de projetos de operações e processos, utilizam tanto variáveis contínuas como discretas ou inteiras. Um intervalo $[a,b]$ é contínuo quando uma variável assume qualquer valor real dentro deste intervalo e discreto quando ela admite apenas valores inteiros.

De acordo com Edgar e Himmelblau (1988), várias decisões tomadas para problemas de otimização são uma dicotomia, por exemplo, para se instalar ou não partes de equipamentos utilizados no processo, as variáveis utilizadas atingem apenas dois valores, 0 e 1 . Outros problemas admitem outros valores discretos como 2, 3 e 4.

Existe uma classificação para os tipos de problema de otimização com variáveis discretas. O caso mais conhecido é o problema de programação com variáveis discretas e contínuas denominada MIP (*mixed-integer programming*) em que a função objetivo depende de intervalos com os dois tipos de variáveis. Se a função objetivo possuir apenas variáveis inteiras, dessa forma, têm-se um problema de programação com apenas variáveis discretas ou inteiras (PI) e, quando essas variáveis assumirem apenas os valores 0 e 1 , tem-se um problema de programação com números binários ou programação binária (PB).

Smaïli *et al.* (2001) utiliza uma função objetiva não-linear com variáveis discretas e contínuas como mostra a equação (2.33).

$$\text{Minimizar } F = \int_0^{t_F} C_E Q(t) dt + \sum_{p=1}^{N_p} \sum_{i=1}^{N_E} C_C (1 - y_{n,p}) \quad (2.33)$$

sujeito à seguinte restrição:

$$0 \leq \theta_{n,p} \leq 1 \quad (2.34)$$

onde

C_E , custo energético devido à incrustação;

C_C , custo de limpeza do trocador de calor;

$n = 1, \dots, N_E$ em que N_E é o número de trocadores de calor disponíveis para a limpeza;

$p = 1, \dots, N_p$ em que N_p é o número de subperíodos de limpezas;

$y_{n,p}$ é uma variável binária, sendo igual a 1, ou igual a 0 se a unidade sai do processo para a manutenção;

$\theta_{n,p}$, variável contínua de restrição.

2.3.5 Computação Evolucionária e Algoritmos Evolucionários

A computação evolucionária (CE) refere-se ao estudo dos fundamentos e das aplicações de determinadas técnicas heurísticas baseadas nos princípios da evolução natural. Inseridos nestas técnicas de computação evolucionária estão os algoritmos evolucionários. As técnicas heurísticas de programação evolucionária possibilitam a exploração versátil de espaços de busca de soluções complexos, baseado na teoria da seleção natural de Charles Darwin (GOLDBERG Apud GREEF e ALDRICH, 1998; TAVARES, 2000).

De acordo com Coelho apud Falcone (2004), as origens da computação evolucionária (CE) podem ser traçadas por trabalhos pioneiros de R.M. Friedberg, H.J. Bremermann, W.Spendley, F.E. Satterthwaite, principalmente, nos anos 50. Após esta fase, este campo de conhecimento permaneceu relativamente despercebido ou inexplorado pela maioria da comunidade científica, por mais de três décadas. Este fato ocorreu devido, principalmente, à falta de plataformas computacionais poderosas naquela época e da formalização e caracterização deficiente de cada metodologia evolucionária nos primeiros estudos nesta área.

Angeline apud Greeff e Aldrich (1998) e Barcellos (2000) afirmam que as três variantes de algoritmos evolucionários mais conhecidas são: algoritmos genéticos, estratégias evolutivas e programação evolucionária.

Os princípios básicos dos algoritmos genéticos foram estabelecidos por Holland (1975). Atualmente, o algoritmo original proposto por Holland é designado por algoritmo genético canônico ou algoritmo genético simples (GOLDBERG Apud TAVARES, 2000). Estes algoritmos serão descritos com mais detalhe na seção (2.3.6).

A programação evolucionária (PE), originalmente introduzida por Fogel apud Tavares (2000), apresenta algumas características comuns com os algoritmos genéticos. A diferença fundamental, em termos da sua funcionalidade, relaciona-se com a forma como os descendentes são gerados. Não existe qualquer preocupação em imitar os operadores naturais, sendo o operador de mutação o único responsável pela geração de descendentes.

A programação evolucionária simula a evolução como um processo baseado nas soluções, que enfatiza o comportamento na ligação entre os progenitores e os descendentes em vez da sua ligação genética, tal como se verifica nos algoritmos genéticos, pelo que a programação evolucionária apresenta menos restrições relativamente à representação das soluções. Como na programação evolucionária não existe um operador de recombinação, ao contrário do que acontece com os algoritmos genéticos, é possível usar qualquer tipo de representação desde que se defina um operador de mutação adequado (TAVARES, 2000).

As estratégias de evolução (EE) foram originalmente introduzidas na Alemanha por Rechenberg apud Tavares (2000), tendo sido alvo de posteriores desenvolvimentos por Schwefel apud Tavares (2000), foram inicialmente usadas para otimização de parâmetros contínuos. A sua primeira versão considera apenas dois indivíduos, um progenitor e um descendente. Estes utilizam uma representação decimal para a sua codificação. As estratégias de evolução consideram, ainda, um operador de mutação e um mecanismo de seleção.

Outros tipos de algoritmos evolucionários também utilizados são a programação genética, a evolução diferencial e os algoritmos da transgenética computacional.

De acordo com Falcone (2004), a programação genética foi abordada pelos pesquisadores J. R. Koza, J. P. Rice, K. E. Kinnear e P. J. Angeline. De acordo com Koza apud Maia Jr. e Bianchi (2008), programação genética pode ser definida como uma forma de computação baseada na simulação da evolução de indivíduos. Nela é aproveitado o fato de que a evolução na natureza é criativa, pois produz muitas vezes resultados inesperados, impensáveis e não-lineares, diferente do modo de programação usual. Em programação genética, o indivíduo que deve ser evoluído é um programa de computador definido como uma árvore de funções e terminais, que constituem suas características e define o comportamento no ambiente para o qual foi desenvolvido. Cada função é um ramo da árvore e cada terminal uma folha do indivíduo. Funções podem ser condições, sensores, operações aritméticas ou lógicas e são usadas para captar informações sobre o ambiente e, convenientemente, para melhorar o desempenho de cada indivíduo (MAIA Jr. e BIANCHI, 2008)

A evolução diferencial foi desenvolvida por R. Storn e K. Price em 1995 (FALCONE, 2004). O algoritmo é iniciado criando uma população inicial escolhida aleatoriamente devendo cobrir todo o espaço de busca. Geralmente, é criada por uma distribuição de probabilidade uniforme, quando não há nenhum conhecimento sobre o problema. A idéia principal da evolução diferencial é gerar novos indivíduos, denotados vetores modificados ou doadores, pela adição da

diferença ponderada entre dois indivíduos aleatórios da população a um terceiro indivíduo. Esta operação é chamada mutação. As componentes do indivíduo doador são misturadas com as componentes de um indivíduo escolhido aleatoriamente (denotado vetor alvo), para resultar no chamado vetor tentativa, ou vetor experimental. O cruzamento refere-se ao processo de misturar os parâmetros. A seleção ocorre se o vetor experimental resultar num valor da função objetivo menor que o vetor alvo, então o vetor experimental substitui o vetor alvo na geração seguinte. O procedimento é finalizado através de algum critério de parada (ARANTES *et al.*, 2008).

Segundo Barboza (2005), a transgenética computacional (TC) é uma nova técnica da computação evolucionária, devido a sua abordagem referente à evolução que emprega população de indivíduos, os quais trocam informações dinamicamente e somente os mais aptos sobrevivem em cada ciclo de troca de informações.

Os algoritmos da transgenética computacional (TC) estão divididos em duas classes principais. A primeira é a classe dos algoritmos transgenéticos extra-intracelulares, ATEIs, que baseiam o seu processo evolucionário nos paradigmas extracelular, intracelular e epigenético. A segunda classe é a dos algoritmos proto-gene, protoG, que desenvolvem seu processo evolucionário baseando-se apenas nos paradigmas intracelular e epigenético. Como consequência disso, o algoritmo protoG não realiza a chamada reprodução sexual como base para o compartilhamento de informações. Esses algoritmos pertencem à classe dos algoritmos evolucionários que baseiam sua metáfora no processo de simbiogênese (GOLDBARG e GOLDBARG, 2002).

Morowitz apud Goldberg *et al.* (2005) define a simbiogênese como uma teoria evolucionária em que indivíduos de naturezas distintas, isto é, de diferentes espécies, unem-se para formar um novo indivíduo. Margulis apud Goldberg *et al.* (2005) diz que a simbiogênese enfatiza mais os efeitos positivos resultantes das inter-relações entre indivíduos do que a sobrevivência e reprodução do mais apto.

Segundo Tavares (2000), os algoritmos evolucionários (AE) são estocásticos e iterativos, não garantindo a convergência para a melhor solução. A conclusão do processo iterativo pode ser obtida atingindo um número máximo de gerações pré-definido ou obtendo uma solução aceitável. Estes operam sobre um conjunto de indivíduos que usualmente são denominados de população. Cada indivíduo representa uma potencial solução para o problema considerado. Esta solução é obtida por meio de um mecanismo de codificação e decodificação. Inicialmente, a população é gerada aleatoriamente e a cada indivíduo na população é atribuído um valor, através

de uma função de aptidão. Este valor, conhecido por valor de aptidão, é uma medida da sua qualidade relativamente ao problema considerado e é usado para orientar a pesquisa.

2.3.6 Algoritmos Genéticos

Os algoritmos genéticos, ao lado das estratégias de evolução, da programação evolucionária e outras técnicas citadas na seção (2.3.5) constituem a chamada computação evolucionária, que se baseia na evolução das espécies, segundo a teoria de Charles Darwin e o trabalho pioneiro de Gregor Mendel sobre os mecanismos da genética (BARCELLOS, 2000; SOUZA, 2007; CASTILHO, 2003).

As bases teóricas para os algoritmos genéticos (AG) desenvolvidas a partir da programação evolucionária foram propostas e desenvolvidas por John Holland, em 1975. Esses métodos operam com conjuntos de candidatos que são constantemente mudados utilizando dois princípios básicos da evolução natural das espécies: seleção e variação. Esses princípios tentam representar a competição onde os indivíduos mais aptos continuam vivos e reproduzem-se passando adiante o seu código genético para as próximas gerações (DEB Apud FORMIGA e CHAUDHRY, 2007; UPRETI e DEB, 1997; GROENWOLD *et al.*, 1999).

A maioria trabalhos citados na seção (2.10.1) referente à otimização de limpeza de trocadores de calor utiliza o método de programação não linear com variáveis contínuas e discretas.

Devido a sua forma de trabalhar com uma gama de soluções a cada geração, os algoritmos genéticos são capazes de encontrar várias soluções não dominadas ao longo do processo de otimização. Essa propriedade aliada a sua adaptabilidade a diferentes tipos de problemas, tornam os algoritmos genéticos, importantes ferramentas de otimização multiobjetivo (FORMIGA e CHAUDHRY, 2007).

Os algoritmos genéticos são diferentes dos métodos tradicionais de busca e otimização, especialmente porque eles trabalham uma codificação com um grupo de parâmetros e não com os parâmetros; eles usam uma população e não apenas um ponto (RAVAGNANI *et al.*, 2005).

Em termos gerais os algoritmos genéticos por se basear na biologia evolucionária e adaptativa, os seus termos têm a seguinte analogia (SOUZA, 2007):

- a) a função objetivo representa uma função de adaptação (“fitness”);

- b) uma solução é a representação de um cromossomo;
- c) cada valor de uma seqüência da qual uma solução é constituída simboliza um gene;
- d) conjunto de soluções são a população de candidatos;
- e) cada iteração representa uma nova geração de indivíduos.

Em otimização, os valores da função de adaptação pode ser uma função objetivo para determinados parâmetros ou soluções geradas por funções para programação linear e não-linear. Esse método tem um conjunto de indivíduos ou populações de candidatos como estimativa inicial, dessa forma a função objetivo ou de adaptação é a medida do quanto é bom ou proveitoso a solução particular codificada no cromossomo.

A função de adaptação pode ser modificada para que se inclua informações na diversidade da população corrente ou para reduzir ou aumentar a diferença entre bons e maus indivíduos (GARRARD e FRAGA, 1998).

No processo de seleção de indivíduos, os mais aptos são escolhidos para participar da próxima geração. Estes indivíduos restantes serão utilizados em outras duas operações genéticas chamadas de cruzamento ou recombinação e mutação.

Um algoritmo genético é constituído das seguintes etapas (COSTA e OLIVEIRA, 2001; PAPPA, 2002):

- a) Inicialização: A população inicial consiste em pontos do espaço de busca criados aleatoriamente;
- b) Avaliação: Cada cromossomo na população é avaliado através da função objetivo ou de adaptação;
- c) Operadores Genéticos: A busca é executada a partir de uma nova população gerada pela antecedente;
- d) Critério de parada: As etapas b e c são repetidas até que haja a convergência da população ou o número específico que limite as gerações seja especificado.

Os cromossomos naturais são melhores modelados por cadeias de caracteres binários. Dessa maneira, os cromossomos binários são preferidos em algoritmos genéticos, embora estes cromossomos possam ser decimais. Numa operação genética pode-se ter um cromossomo defeituoso (uma solução impossível). Essas imperfeições devem ser penalizadas de modo que o

índice de adaptação de um cromossomo defeituoso seja mais baixo que o de qualquer cromossomo perfeito. Dessa forma a exclusão de cromossomos defeituosos pelo processo de seleção será fácil e o processo de evolução não se degradará (SOUZA, 2007).

Alguns aspectos que diferenciam e que dão mais vantagens aos algoritmos genéticos em relação aos métodos tradicionais de otimização e busca são abordados por Upreti e Deb (1997), Garrard e Fraga (1998), Pappa (2002), Goldberg apud Falcone (2004) e Barboza (2005) são:

- a) operação num conjunto de soluções e não numa em particular;
- b) operação num espaço de soluções codificadas e não no espaço de busca diretamente;
- c) precisa apenas da informação do valor da função objetivo para cada indivíduo da população, não requerendo que ela seja contínua e/ou diferenciável;
- d) não necessitam de uma formulação extensiva do problema;
- e) não são sensíveis ao ponto de partida do problema;
- f) utiliza transições probabilísticas e não regras determinísticas;
- g) geralmente não são impedidos de continuar a busca por uma solução ótima global devido ao encontro de uma solução ótima local;
- h) a característica de processamento paralelo dos algoritmos genéticos, faz com que o processo de busca se torne mais rápido;
- i) melhor aplicabilidade na resolução de problemas em que ocorre a otimização multiobjetiva, porque buscando a otimização de objetivos conflitantes, em que cada um deles corresponde a uma solução ótima fazendo com que esses problemas apresentem várias soluções ótimas, e sejam preferencialmente resolvidos por métodos capazes de gerar um conjunto de soluções ótimas de uma só vez.

2.3.6.1 Codificação dos Indivíduos

Para se implementar um algoritmo genético é necessário definir a representação das características de uma solução através de um indivíduo (FALCONE, 2004).

Garrard e Fraga (1998) e Falcone (2004) comentam que normalmente, uma solução de um problema está associada a um cromossomo representado por um vetor com m posições, tal que: $p = (x_1, x_2, \dots, x_m)$. Cada componente x_i representa um gene, ou em outras palavras, uma variável da solução.

Os tipos de representação mais conhecidos para um cromossomo são a representação binária (assumem apenas os valores 0 e 1), a de ponto flutuante e a por números inteiros (FALCONE, 2004). O trabalho de Boozarjomehry e Masoori (2007) tenta indentificar qual é o melhor código para a otimização da síntese de Fisher-Topsch, o binário ou o decimal.

Segundo Falcone (2004) e Hinterding apud Pappa (2002), a representação binária é a mais clássica e tem sido utilizada desde o trabalho precursor de Holland com seu AG simples.

Freitas apud Pappa (2002) destaca que essa representação torna-se problemática quando as variáveis a serem representadas assumem valores contínuos. Nos casos em que a representação binária não é muito comum nem a mais apropriada, outros tipos de representação podem ser utilizadas, como assugeridas por Michalewicz apud Pappa (2002).

A representação por números inteiros é mais adequada para problema que envolvam estes números em análise combinatória, arranjo e permutação (SOARES, 1997). O trabalho de Groenwold *et al.* (1999) utiliza a representação do cromossomo por números inteiros.

Segundo Man *et al.* apud Falcone (2004), a representação de ponto flutuante foi introduzida, especialmente, para problemas com parâmetros reais. Michalewicz apud Falcone (2004) comenta que a representação de ponto flutuante apresenta maior precisão e capacidade de representação de domínios de um problema. Experimentos indicam que a sua utilização possibilita maior velocidade de processamento, consistência dos resultados entre rodadas e precisão quando comparada à representação binária.

2.3.6.2 População Inicial de Indivíduos

Geralmente, a população inicial ou conjunto de soluções de um problema de otimização que utiliza algoritmos genéticos é gerada inicialmente de forma aleatória com distribuição uniforme, contudo pode-se utilizar também, formas heurísticas para gerar esta população (FALCONE, 2004; BARBOZA, 2005).

Reeves apud Barboza (2005) relata que direcionar a geração de uma população de forma heurística, com a finalidade de obtenção de soluções ótimas, pode ajudar o algoritmo genético a encontrar melhores soluções mais rapidamente ao se comparar com a geração aleatória dos indivíduos, contudo aumentará as chances de uma convergência prematura, o que não convém para o problema.

Segundo Falcone (2004), o tamanho da população influencia no desempenho do algoritmo. Uma população pequena pode reduzir o espaço de busca, diminuindo as possibilidades de se atingir o ótimo global. No outro extremo, as populações grandes acarretam num maior esforço computacional aumentando o tempo de processamento e convergência.

2.3.6.3 Função de Adaptação ou Avaliação (*Fitness*)

Definida a representação torna-se necessário caracterizar a solução de acordo com suas qualidades, ou seja, quantificar sua importância para o problema. Este processo é feito utilizando-se uma medida de aptidão (FALCONE, 2004).

Segundo Castilho (2003), a função de aptidão também conhecida como função de adaptação ou avaliação (*fitness*) expressa quão boa é a solução codificada por um cromossomo. Os cromossomos que têm melhores valores de aptidão terão maiores chances de passar a sua carga genética à frente via, principalmente cruzamento ou elitismo.

Com a função de adaptação exercendo o papel de selecionador dos cromossomos, ela desempenha o papel de seleção natural na evolução. Dessa forma, seleciona-se os melhores organismos adaptados ao meio para sobreviver e reproduzir, os quais são os cromossomos com melhores valores na função de adaptação (BARCELLOS, 2000).

De acordo com Barboza (2005), se objetivo é maximizar a função de adaptação, a aptidão é diretamente proporcional ao valor da função, caso contrário, se for minimizar, a aptidão é inversamente proporcional ao valor da função de adaptação. Entretanto, o termo minimização não é muito aceito por alguns pesquisadores por não ter inspiração biológica, pois indivíduos mais aptos é que devem ter chance de sobreviver.

A avaliação de uma população gerada ocorre após os operadores de seleção, cruzamento e mutação serem aplicados aos indivíduos formados. Isto consiste na obtenção do grau de adaptação da população atual para a convergência e/ou continuidade do processo. Quando o grau de adaptação for o desejado, o melhor indivíduo desta geração será a solução ótima global. Este grau pode ser determinado pela diferença de aptidão entre o primeiro e o último indivíduo da lista de cromossomos existentes naquela geração (BARBOZA, 2005).

2.3.6.4 Métodos de Seleção

Uma vez que algoritmos genéticos baseiam-se no princípio da seleção natural, eles devem ser capazes de identificar os indivíduos mais aptos, para que permaneçam na população durante o processo de evolução, e os mais fracos, para que sejam excluídos do processo (PAPPA, 2002). Como o processo de seleção se inspira na natureza, os algoritmos genéticos via operador de seleção, escolhem os melhores cromossomos da população para determinar quais indivíduos devem participar da fase de reprodução (cruzamento ou mutação) e contribuir com o seu material genético para a geração seguinte. Os principais métodos de seleção de indivíduos são o método da roleta, seleção por classificação (*ranking*) e a seleção por torneio (CASTILHO, 2003).

Um método de seleção muito utilizado é o método da roleta, onde indivíduos de uma geração são escolhidos para fazer parte da próxima geração, através de um sorteio de roleta. Neste método, cada indivíduo da população é representado na roleta proporcionalmente ao seu índice de aptidão (Figura 14). Dessa maneira, aos indivíduos com alta aptidão é dada uma porção maior da roleta, enquanto que aos com aptidão mais baixa é dada uma porção relativamente menor da roleta. Depois de terminado esses procedimentos, a roleta é girada um determinado número de vezes, dependendo do tamanho da população, e são escolhidos, como indivíduos que participarão da próxima geração, aqueles sorteados na roleta (ALGORITMOS GENÉTICOS, 2007).

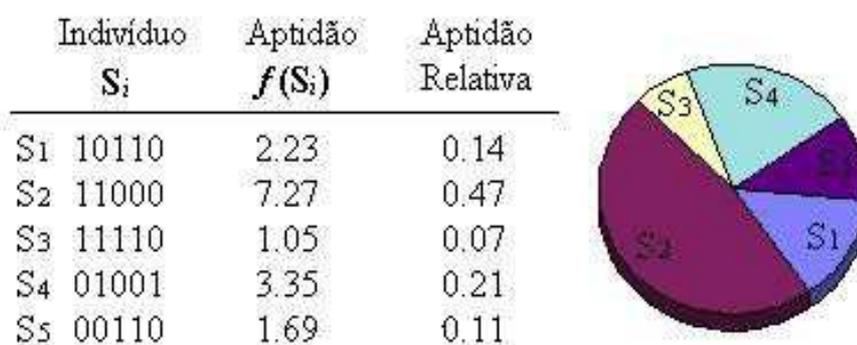


Figura 14 – Representação de indivíduos de uma população e sua respectiva roleta de seleção (ALGORITMOS GENÉTICOS, 2007)

O método da roleta tem problemas quando há grandes diferenças entre os valores de adaptação. Por exemplo, se a melhor adaptação dos cromossomos é 94% da soma de todas as adequações, então haverá cromossomos com chances muito baixas de serem selecionados. A

seleção por classificação (*ranking*) primeiro classifica a população e então atribui a cada cromossomo um valor de adaptação determinado pela sua classificação (SELEÇÃO, 2007). Esse tipo de seleção é também denominado de elitismo. Dependendo do objetivo, são selecionados os N maiores ou menores valores da função de adaptação para participar da próxima geração e contribuir com o seu código genético para os novos indivíduos formados.

No caso do método de seleção por torneio, a competição não ocorre entre todos indivíduos de uma população, mas em um subconjunto desta. A finalidade é escolher k indivíduos da população e extrair deste grupo, o melhor indivíduo para uma população intermediária. Este procedimento é repetido até que a população intermediária atinja o mesmo número de indivíduos da geração anterior (BARBOZA, 2005).

2.3.6.5 Cruzamento ou Recombinação

O cruzamento ou recombinação é o operador responsável pela propagação das características dos indivíduos mais aptos da população (pais) por meio de troca de segmentos de informações entre estes, o que dá origem a novos indivíduos (BARBOZA, 2005). Esse operador combina as informações genéticas de dois ou mais indivíduos (pais) para gerar novos indivíduos (filhos). Ele também é denominado de reprodução, recombinação ou “crossover”. O processo depende de dois parâmetros escolhidos pelo operador/programador, uma é a probabilidade de recombinação e a outra, o ponto de corte (BARCELLOS, 2000).

Existem vários tipos de cruzamento estes diferem entre si pela escolha do locus dos cromossomos que serão trocados entre os pais e pela maneira como esta troca ocorre (BARBOZA, 2005). Em alguns casos, a diferença entre cruzamentos ocorre devido à codificação de indivíduos discutida na seção (2.3.6.1). O cruzamento uniforme consiste no emparelhamento de dois cromossomos pais, cada um com 50% de chance de ser trocado.

No cruzamento de apenas um ponto de corte, dois indivíduos chamados de ***P1*** e ***P2*** trocam genes num ponto do cromossomo de cada um escolhido aleatoriamente e ambos são quebrados neste mesmo ponto. A primeira parte do cromossomo de ***P1*** é concatenada à segunda parte do cromossomo de ***P2***. O mesmo ocorre com as outras duas partes, isto é, a primeira parte de ***P2*** é concatenada a segunda de ***P1***. A Figura 15 ilustra um tipo de cruzamento.

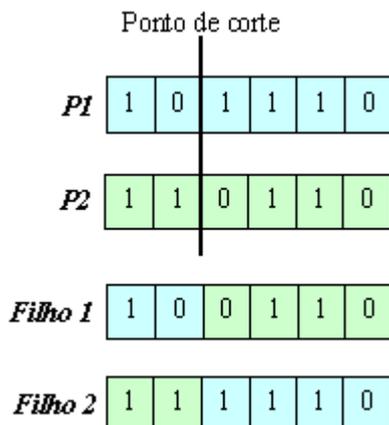


Figura 15 – Cruzamento ou recombinação entre indivíduos com um único ponto de corte

O cromossomo também pode ser quebrado em dois ou mais pontos. Denomina-se de recombinação simples ou tradicional quando o cromossomo é quebrado em dois ou mais pontos. Outro tipo de cruzamento é o multi-ponto, que ocorre com pontos de corte acima de dois e estes segmentos são trocados alternadamente entre os dois cromossomos (BARCELLOS, 2000). Na Figura 16, pode-se observar o ponto de corte em dois pontos.

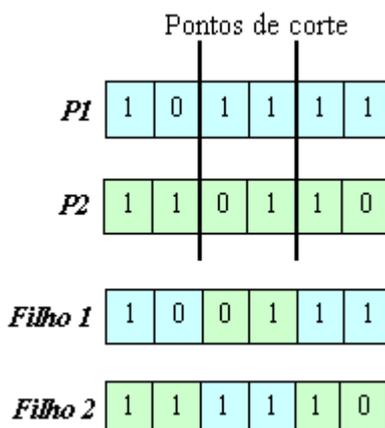


Figura 16 – Cruzamento ou recombinação entre indivíduos com dois pontos de corte

De acordo com Goldberg apud Maruo (2006), nas aplicações que utilizam algoritmos genéticos, as taxas de cruzamento ou recombinação costumam ser geralmente maiores do que as de mutação. Entretanto, uma alta taxa de cruzamento reduz as chances de convergência para obter um ótimo local (CASTILHO, 2003).

2.3.6.6 Mutação

A mutação é um processo de busca aleatória e é necessário porque ocasionalmente a seleção natural e o cruzamento ou recombinação podem eliminar material genético potencialmente promissor da população antes que ele seja avaliado adequadamente (MARUO, 2006).

Soares (1997) caracteriza a mutação como o operador genético que tem a função de introduzir características novas ao indivíduo ou mesmo restaurar características que se perderam em operações, como, por exemplo, cruzamento.

A mutação se processa em um único cromossomo mediante a alteração de um gene aleatório, troca de dois genes aleatórios (mutação simples) ou por inversão de uma seqüência de genes (SOUZA, 2007). Este processo pode ser usado antes ou depois do cruzamento. A mutação tem como objetivo evitar que as soluções na população fiquem apenas num mínimo local. O operador de mutação depende do parâmetro denominado de probabilidade de mutação e ele não pode ser muito alto, pois o uso exagerado da mutação reduz o programa a uma busca totalmente aleatória. As Figuras 17 e 18 mostram como ocorre a mutação pela alteração de um único gene e pela troca de dois, respectivamente.

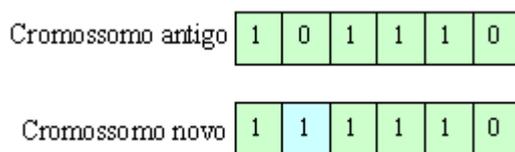


Figura 17 – Mutação pela alteração de um gene



Figura 18 – Mutação devido a uma troca de genes

A mutação tem como objetivos a introdução e a manutenção da diversidade genética da população. Desta forma, a mutação assegura que a probabilidade de verificar qualquer ponto do

espaço de busca nunca será zero, e também contorna os problemas de mínimos locais (CASTILHO, 2003).

2.3.6.7 Aplicação dos Algoritmos Genéticos

Segundo Barboza (2005), com conceitos desenvolvidos e definidos por Holland em 1975, os algoritmos genéticos são utilizados em diversas áreas, tais como:

- a) Problemas de otimização complexos com muitas e espaços de soluções de dimensões elevadas;
- b) Otimização de funções com múltiplos objetivos conflitantes entre si;
- c) Mineração de dados (*Data Mining*);
- d) Tomada de decisões por robôs;
- e) Combinação com redes neurais para treiná-las ou encontrar a sua topologia;
- f) Modelagem de processos biológicos para o entendimento do comportamento de estruturas genéticas;
- g) Aplicações na otimização discreta de estruturas de construções, como no caso do trabalho de Groenwold *et al.* (1999);
- h) Síntese de circuitos analógicos, gerando a topologia, o tipo e o valor dos componentes de um circuito;
- i) Determinação da função de protocolo de *hardware* e *software* para que um determinado desempenho seja alcançado;
- j) Supervisão do tráfego nos *links* e das filas nos *buffers* de roteadores para descobrir rotas ótimas e para reconfigurar as rotas existentes no caso de alguma falha;
- k) Predição de estruturas moleculares como os trabalhos de Fontain (1992), Pullan (1997) e Nair e Goodman (1998);
- l) Descoberta de novos materiais (JUNG *et al.*, 2007);
- m) Comprovação da evolução de sistemas nanoestruturados (SIEPMAN *et al.*, 2007);
- n) Outras áreas: evolução interativa de imagens, composição musical e outras.

Muitos trabalhos relacionados aos processos químicos e da indústria química que utilizam como técnica, os algoritmos genéticos, em áreas como química analítica, físico-química,

processos de separação, reatores químicos e integração energética do processo, entre outras, foram publicados.

Na área de química analítica podem ser citados os seguintes trabalhos:

- a) A determinação de glicose em misturas biológicas (DING *et al.*, 1998);
- b) Identificação de combustíveis utilizados em jatos que são derramados no subsolo junto com técnicas como cromatografia gasosa e extração da fase sólida (LAVINE *et al.*, 2000);
- c) Projeção sequencial para mineração de dados analíticos (GUO *et al.*, 2000);

Alguns trabalhos encontrados na literatura referente à processos químicos utilizam a técnica de redes neurais com conjunto com os algoritmos genéticos, como a otimização do processo de craqueamento catalítico fluidizado (ZHAO *et al.*, 2000); e o estudo da síntese catalítica do metanol (UMEGAKI *et al.*, 2003). Outros estudos são referentes à cinética e cálculo de reatores com otimização via algoritmos, tais como:

- a) Produção de amônia (UPRETTI e DEB, 1997);
- b) Controle PID de um reator em batelada com envoltório utilizado no processo de produção de poliestireno (ALTINTEN *et al.*, 2008);
- c) Produção de álcool cíclico num reator tubular ou PFR (*plug flow reactor*) (VICTORINO *et al.*, 2007).

Também podem ser citados os estudos de processos de separação como o de Leboreiro e Acevedo (2004) sobre síntese e seqüências de destilação, e o de Fraga e Matias (1996) sobre otimização e síntese da destilação de misturas não-ideais.

Com relação a trocadores de calor podem ser citados os trabalhos de Ravagnani *et al.* (2005) e Yu *et al.* (2000). Com base no estudo do projeto de sistemas de trocadores de calor de Ravagnani *et al.* (2003), Ravagnani *et al.* (2005) utiliza algoritmos genéticos como ferramenta de otimização deste tipo de sistema e Yu *et al.* (2000) combina algoritmos genéticos com outra técnica chamada *simulated annealing* para otimizar a integração energética de um sistema.

3. MODELAGEM MATEMÁTICA

O modelo utilizado é descrito pelos balanços de massa e energia para a serpentina e a solução, em regime transiente. Da mesma forma, Kim e Smith (2002) têm estudado o sistema de integração energética entre torres de resfriamento e trocadores de calor nas indústrias. No sistema mostrado, estudou-se apenas o conjunto de formado por tanques, que é similar a um sistema de trocadores de calor. Para este caso do tanque que contém uma solução de soda, a qual está sendo resfriada pela entrada de água numa serpentina que está no interior do tubo foi escolhido o modelo para um trocador de calor com um passe na carcaça e outro no tubo. Observa-se na Figura 19, o desenho esquemático de um tanque.

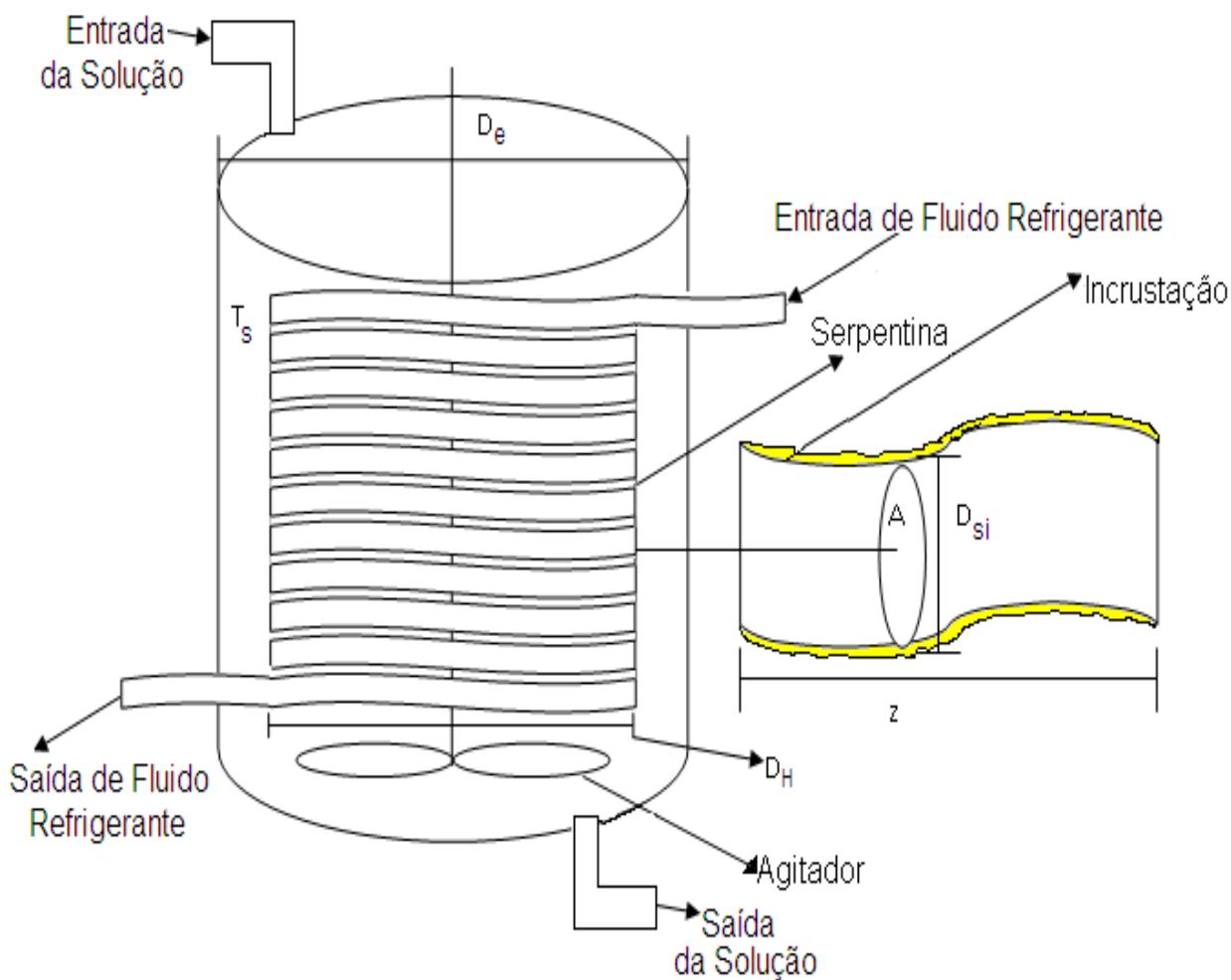


Figura 19 – Desenho esquemático do tanque

Existem dois balanços para o sistema mostrado na Figura 19, um deles é referente ao fluido no interior da serpentina e o outro para a solução no tanque.

Uma descrição matemática do processo é fundamental para o entendimento e otimização do sistema. Neste sentido, um modelo matemático do sistema de resfriamento e sua resolução numérica foram desenvolvidos e são apresentados como ferramenta auxiliar na otimização do processo via simulação computacional.

No trabalho de Souza (2004) foi aplicada a otimização de sistemas de trocadores de calor, como o estudo de Björk e Wasterlund (2002), mas com uma metodologia diferente.

3.1 Modelo para o Fluido na Serpentina

3.1.1 Modelos de Transferência de Calor

Utilizou-se um modelo sem dispersão para o fluido no interior da serpentina, cujo balanço de energia considerando perfil de velocidade tipo *plug flow* é mostrado na equação (3.1).

$$\frac{\partial T}{\partial t} + v \frac{\partial T}{\partial z} + \frac{US}{C_p \rho A} (T - T_s) = 0 \quad (3.1)$$

onde:

$\frac{\partial T}{\partial t}$ refere-se ao acúmulo energético no interior da serpentina;

$\frac{\partial T}{\partial z}$ indica a variação de temperatura ao longo da direção axial da serpentina;

e $\frac{US}{C_p \rho A} (T - T_s)$ representa a geração de energia no interior da serpentina.

3.1.2 Modelo para a Solução no Tanque

Utilizou-se um modelo de tanque de mistura perfeita para a solução no tanque, cujo balanço de energia para a solução no tanque (mistura perfeita) é mostrado na equação (3.2) e (3.3):

$$\text{Energia que Entra} = \text{Energia que sai} + \text{Acúmulo de Energia} + \text{Consumo de Energia} \quad (3.2)$$

$$m_s C_{Ps} (T_{sE} - T_{REF}) = m_s C_{Ps} (T_s - T_{REF}) + \rho \bar{V}_s C_{Ps} \frac{dT_s}{dt} + Q \quad (3.3)$$

onde:

$m_s C_{Ps} (T_{sE} - T_{REF})$ é o termo de representação da quantidade de calor na entrada do tanque;

$m_s C_{Ps} (T_s - T_{REF})$ é o termo de representação da quantidade de calor na saída do tanque;

$\rho \bar{V}_s C_{Ps} \frac{dT_s}{dt}$ indica o acúmulo de energia no interior do tanque;

e Q representa a quantidade de energia consumida no processo de resfriamento e pode ser representada pela equação (3.4).

$$Q = \int_0^L US(T_s - T) dz \quad (3.4)$$

A equação (3.4) mostra que a quantidade de calor Q é obtida através do consumo de energia em torno da serpentina.

Rearranjando a equação (3.2), obtêm-se a seguinte equação abaixo:

$$\rho V_s C_{Ps} \frac{dT_s}{dt} = m_s C_{Ps} (T_{sE} - T_s) - Q \quad (3.5)$$

Considerou-se neste trabalho, que os tanques estão isolados termicamente nos seus lados externos.

A equação (3.5) foi definida para a entrada da solução no tanque T1, reescrevendo a mesma no escoamento da solução de um tanque para o outro, têm-se a equação abaixo:

$$\rho V_s C_{Ps} \frac{dT_{sK}}{dt} = m_s C_{Ps} (T_{sK\text{anterior}} - T_{sK}) - Q \quad (3.6)$$

3.1.3 Parâmetros para o Modelo

Substituindo a equação (2.2) na (2.1), têm-se:

$$U = \frac{1}{(R_p + R_i + R_e)} \quad (3.6)$$

onde:

$$R_i = \frac{1}{h_i} \quad (3.7)$$

$$R_e = \frac{1}{h_e} \quad (3.8)$$

$$R_p = \frac{D_{si} \ln(D_{si} / D_{se})}{2\pi k} \quad (3.9)$$

Se a espessura da parede de um tubo interno for muito pequena, a equação (3.9) pode ser reescrita da seguinte forma:

$$R_p = \frac{L_s}{2k} \quad (3.10)$$

Ao se considerar, as resistências devido às incrustações, R_d , o coeficiente global de transferência de calor será U_d como mostra a equação (2.3). No caso de $R_d = 0$, tem-se que:

$$U_d = U \quad (3.11)$$

No caso de $R_d \neq 0$, a equação (3.6) pode ser reescrita da seguinte maneira:

$$U = \frac{I}{(R_p + R_i + R_e + R_d)} \quad (3.12)$$

onde pode-se obter R_d tanto pela equação (2.16) como pela (2.17).

Neste trabalho, torna-se importante o estudo da configuração desse sistema bem como dos fatores que influenciam nas trocas térmicas, como a temperatura da água que está entrando na serpentina bem como a cristalização dos sais que formam a incrustação e a agitação. E R_d vai depender do tempo, da supersaturação da solução, da temperatura, do tanque de operação.

Rearranjando a equação (2.4), obtém-se a espessura da camada de incrustação do seguinte modo:

$$x_d = R_d k_d \quad (3.13)$$

Sanaye e Niroomand (2007) descreve a espessura da camada de incrustação pela equação (3.14).

$$x_d = 0,5 D_{se} \left[1 - \exp\left(-\frac{2\pi R_d k_d}{D_{se}}\right) \right] \quad (3.14)$$

O coeficiente de transferência de calor por convecção no interior da serpentina foi estimado a partir das correlações sugeridas por MacAdams apud Kern (1987) utilizadas para trocadores de calor de tubo duplo:

- Escoamento laminar ($Re < 2100$):

$$\frac{h_i D_{si}}{k_f} = 1,86 \left[\left(\frac{D_{si} G}{\mu} \right) \left(\frac{c\mu}{k_f} \right) \left(\frac{D_{si}}{z_{máx}} \right) \right]^{1/3} \left(\frac{\mu}{\mu_w} \right)^{0,14} = 1,86 \left(\frac{4}{\pi} \frac{wc}{k_f z} \right)^{1/3} \left(\frac{\mu}{\mu_w} \right)^{0,14} \quad (3.15)$$

- Escoamento turbulento ($Re > 2100$):

$$\frac{h_i D_{si}}{k_f} = 0,027 \left(\frac{D_{si} G}{\mu} \right)^{0,8} \left(\frac{c\mu}{k_f} \right)^{1/3} \left(\frac{\mu}{\mu_w} \right)^{0,14} \quad (3.16)$$

Devido ao aumento da turbulência é de esperar que os coeficientes do interior do tubo de uma serpentina sejam maiores do que os coeficientes referentes a um tubo reto. As equações acima foram desenvolvidas para o escoamento em um tubo linear. Dessa maneira MacAdams apud Kern (1987) sugere que os efeitos de curvatura podem ser adicionados multiplicando-se o valor de h_i assim obtido por $1+3,5(D_i/D_H)$, onde D_H é o diâmetro da helicoidal formada pela serpentina e D_i , o diâmetro do tanque.

O coeficiente de transferência de calor por convecção externo sobre a serpentina, foi estimado a partir da seguinte correlação apresentada por Chilton, Drew e Jebens apud Kern (1987):

$$\frac{h_{se} D_{se}}{k_s} = 0,87 \left(\frac{Z_a^2 N \rho_s}{\mu_s} \right)^{2/3} \left(\frac{c\mu_s}{k_s} \right)^{1/3} \left(\frac{\mu_s}{\mu_{sw}} \right)^{0,14} \quad (3.17)$$

Esta correlação foi obtida para uma serpentina mergulhada em um meio com um agitador de uma única pá de comprimento Z_a , com velocidade de rotação N . As características dos agitadores do sistema de resfriamento da BRASKEM são diferentes das características do agitador para o qual a correlação acima foi desenvolvida. Por hipótese, assumiu-se que a agitação é a mesma, com os diferentes tipos de agitadores.

3.2 Discretização e Resolução do Modelo

O método das diferenças finitas, com malha regular, no tempo e no espaço foi utilizado na discretização do modelo matemático do processo, a partir de HIMELBLAU *et al.* (1968).

3.2.1 Discretização da Serpentina

Para cada serpentina de cada tanque, a discretização foi conduzida para as coordenadas espacial e temporal com

$$z_i = z_0 + im \quad (3.18)$$

$$t_j = t_0 + jn \quad (3.19)$$

A coordenada z indica a distância axial ao longo da serpentina e t é o tempo. Os incrementos no espaço e no tempo valem m e n , respectivamente (Figura 20).

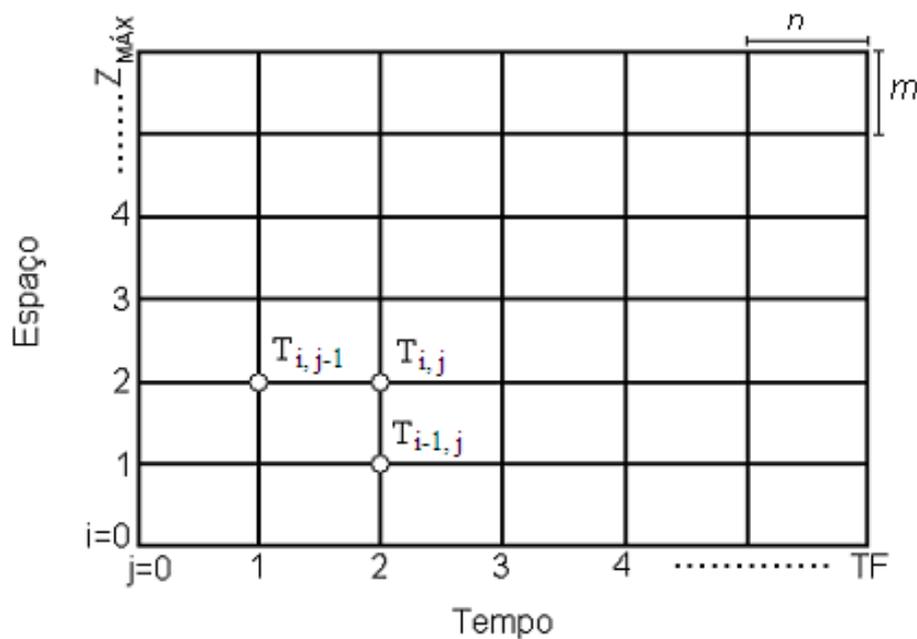


Figura 20 – Representação das malhas para o espaço e o tempo usando o método das diferenças finitas

A temperatura nos pontos das malhas são representadas da seguinte forma:

$$T(z_i, t_j) = T_{i,j} \quad (3.20)$$

As derivadas parciais no modelo matemático são aproximados na seguinte forma:

$$\frac{\partial T}{\partial z}(i, j) = \frac{T_{i,j} - T_{i-1,j}}{m} \quad (\text{Diferença anterior}) \quad (3.21)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t}(i, j) = \frac{T_{i,j} - T_{i,j-1}}{n} \quad (3.22)$$

Substituindo as aproximações por diferenças finitas nas equações diferenciais que representam o modelo [equação (3.1)], obtém-se a seguinte equação para o fluido no interior da serpentina:

$$v \left(\frac{T_{i,j} - T_{i-1,j}}{m} \right) + \left(\frac{T_{i,j} - T_{i,j-1}}{n} \right) + \frac{US}{C_p \rho A} (T_{i,j} - T_s) = 0 \quad (3.23)$$

Rearranjando a equação acima obtemos:

$$T_{i,j} = \frac{T_{i,j-1} + \frac{vn}{m} T_{i-1,j} + \frac{USn}{C_p \rho A} T_s}{\left(1 + \frac{vn}{m} + \frac{USn}{C_p \rho A} \right)} \quad (3.24)$$

$$\text{condição inicial: } T(z, 0) = T_{conhecida} \quad (3.25)$$

O valor de $T_{conhecida}$ representa a estimativa inicial para a temperatura no interior da serpentina, isto é, a temperatura quando o tempo t igual a 0. Geralmente, nos cálculos deste

trabalho admite-se que esse valor é igual a temperatura de entrada da solução no sistema de resfriamento.

Para se verificar a estabilidade no método utilizado, utilizou-se a condição de Courant-Freidrich-Lewy descrito em Estel *et al.* (2000) como segue:

$$n \leq \frac{m}{v} \quad (3.26)$$

3.2.2 Discretização do Tanque com Solução Cástica

Como um modelo global (tanque de mistura perfeita) foi utilizado para a solução, a temperatura em cada tanque k muda com o tempo apenas. Na Figura 21, temos a representação para os tanques k no instante de tempo j .

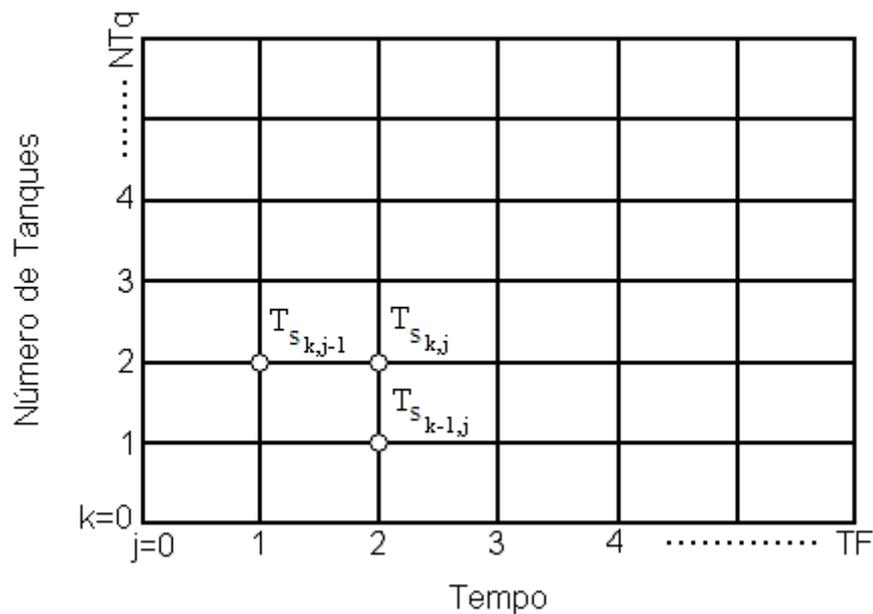


Figura 21 - Malha numérica para o sistema de tanques

Discretizando a equação (3.6), têm-se:

$$\frac{T_{s_{k,j}} - T_{s_{k,j-1}}}{n} = \frac{m_s C_{ps}}{\rho V_s C_{ps}} (T_{s_{k-1,j}} - T_{s_{k,j}}) - \frac{Q}{\rho V_s C_{ps}} \quad (3.27)$$

Rearranja-se a equação (3.6) para isolar $T_{s_{k,j}}$ como mostra as equações (3.28) e (3.29):

$$T_{s_{k,j}} = T_{s_{k,j-1}} + \frac{m_s C_{ps} n}{\rho_s \bar{V}_s C_{ps}} (T_{s_{k-1,j}} - T_{s_{k,j}}) - \frac{Qn}{\rho \bar{V}_s C_{ps}} \quad (3.28)$$

$$T_{s_{k,j}} = \frac{\left(T_{s_{k,j-1}} + \frac{m_s C_{ps} n T_{s_{k-1,j}}}{\rho_s \bar{V}_s C_{ps}} - \frac{Qn}{\rho \bar{V}_s C_{ps}} \right)}{\left(1 + \frac{m_s C_{ps} n}{\rho_s \bar{V}_s C_{ps}} \right)} \quad (3.29)$$

Observa-se na equação (3.29) que a temperatura da solução em um determinado intervalo de tempo depende da temperatura no instante anterior.

3.3 Função Objetivo e Fluxograma de Otimização

A função objetivo deste trabalho depende do valor da temperatura na saída do último tanque do processo em relação ao valor especificado do projeto (25°C ou 298K) e da quantidade de limpezas durante um dia e durante um período de 16 dias. A função objetivo é representada pela equação (3.30).

$$F_{obj} = \sum_{p=1}^{16} Cu_1 |T_{SAÍDA} - 298,15| + \sum_{p=1}^{16} \sum_{j=1}^7 Cu_2 N_L^2 + Cu_3 |(N_{TL} - 16)|^2 \quad (3.30)$$

onde Cu_1 , Cu_2 , Cu_3 são coeficientes da função objetivo e N_L e N_{TL} representam o número de limpezas durante o dia e o número total de limpezas em 16 dias, respectivamente.

As restrições são determinadas pelo modelo de processo para o sistema de resfriamento durante o funcionamento de todos os tanques e quando um deles sai de operação para limpeza. Observa-se na função objetivo fatores não-lineares como N_L^2 e $|(N_{TL} - 16)|^2$. A equação (3.30) foi formulada a partir das variáveis consideradas neste estudo mais importantes e a partir do trabalho de Sanaye e Nirromand (2007).

A função objetivo que avalia os resultados das simulações, possui os seguintes valores de constantes:

$$-Cu_1 = 3024 \text{ K}^{-1}$$

$$-Cu_2 = 3024$$

$$-Cu_3 = 8000$$

Neste trabalho serão aplicados os algoritmos genéticos como metodologia de otimização de limpeza dos tanques, da mesma que Chen *et al.* (2007) para otimizar um projeto de sistema de trocadores de calor em termos de cálculos térmicos para superestrutura do trocador.

A codificação utilizada foi a binária, onde o cromossomo representa a ordem de limpeza de cada tanque em cada dia de operação.

A população inicial foi gerada de forma aleatória e inseridas no modelo do processo onde são obtidos valores para a temperatura da solução na saída do último tanque e os resultados são avaliados a partir da função objetivo e os melhores resultados obtidos determinará os indivíduos que participarão da próxima geração.

Os indivíduos selecionados farão da parte das etapas de cruzamento e mutação para completar aqueles que estarão na próxima geração. A nova geração formada é composta pelos melhores indivíduos da geração anterior e os gerados por cruzamento e mutação. A quantidade de indivíduos é a mesma da geração anterior e o procedimento se repete até que se atinja o critério de parada estabelecido, ou seja, o número máximo de gerações que se estabelece para este problema.

Para os parâmetros referentes aos algoritmos genéticos, considerou-se o seguinte:

- a) População inicial igual a 100 indivíduos;
- b) Seleção por classificação dos 50 melhores para participarem da próxima geração e dos operadores genéticos (cruzamento e mutação);
- c) Número total de gerações igual a 16.

A Figura 22 representa o fluxograma de otimização em relação a operação e o ciclo de limpezas utilizando algoritmos genéticos.

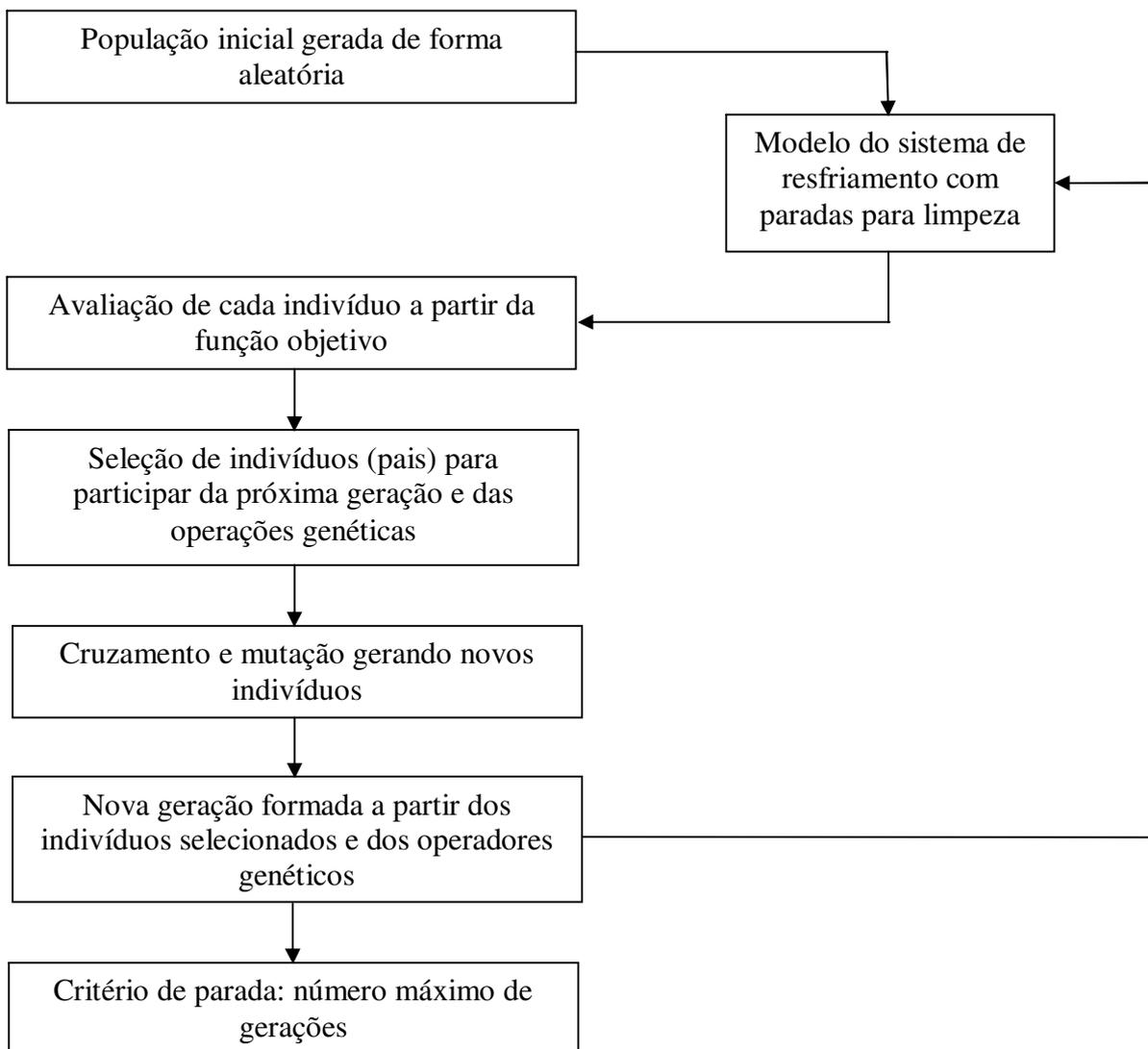


Figura 22 – Fluxograma das etapas de otimização utilizando algoritmos genéticos

3.4 Procedimentos e Dados de Entrada para Simulação

Este trabalho foi constituído de quatro etapas de obtenção e análise de resultados:

- Na primeira etapa investigou-se a influência de incrustações nos tanques, fazendo testes comparativos;
- Na segunda etapa, analisou-se como as incrustações constantes influenciam outras combinações para o sistema e foi feito um estudo das incrustações como função assintótica em função do tempo;

- Na terceira etapa, foi observado como o sistema opera em semanas, levando-se em conta a retirada de um tanque por dia;
- E na quarta etapa utilizou-se algoritmos genéticos ao modelo para otimizar a limpeza dos tanques.

O uso de modelos matemáticos implementados em programas desenvolvidos em linguagem de programação FORTRAN-90, torna-se uma ferramenta eficiente para se obter valores otimizados a partir da simulação. Nas primeiras etapas deste trabalho, utilizou-se o programa desenvolvido por Souza (2004). Devido à necessidade da modelagem em vários dias, saída de um dos tanques para limpeza, de se implementar um modelo de otimização que utiliza algoritmos genéticos como ferramenta, este programa foi recodificado para MATLAB. Os resultados foram obtidos via simulação computacional pelos programas dos Apêndices C, D e E para avaliar a influência da incrustação no sistema.

Os tanques do sistema de resfriamento possuem formato cilíndrico (3658 mm de diâmetro e 4267 mm de altura) e são posicionados de forma que seus eixos coincidam com a direção vertical. Os tanques T1 a T3 de resfriamento são equipados com três serpentinas de 3327 mm, 2870 mm e 2423 mm de diâmetro (medida de centro a centro). Essas serpentinas têm diâmetro externo de 114 mm, proporcionando uma superfície de troca térmica de 110 m².

Em relação aos tanques do quarto ao sétimo estágios de resfriamento são equipados com duas serpentinas de 3327 mm e 2870 mm de diâmetro (medida de centro a centro). Estas serpentinas têm 114 mm de diâmetro externo, e uma espessura de parede de no mínimo 2,41 mm, proporcionando uma superfície de troca térmica de 81 m² (área de troca).

Os agitadores serão de fluxo axial, com duas turbinas montadas em um único eixo. É previsto um sistema de redução para 68 rpm (NUNES, 2002).

A temperatura da solução na entrada do sistema de resfriamento é igual a 91,1 °C (364,25 K). A temperatura da água da torre de resfriamento é igual a 29,4 °C e o valor para a temperatura da água gelada é igual a 5 °C.

Para as simulações foram utilizados os dados referentes ao dimensionamento do tanque descritos abaixo e na Tabela 3.

Tabela 3 – Dados de dimensionamento dos tanques

Comprimento da Serpentina ($z_{máx}$)	200 m
Espessura da serpentina	0,00241 m
Diâmetro da serpentina	0,114
Vazão Total de Água Gelada (V_{ag})	44 m ³ /h
Vazão Total de Água da Torre de Resfriamento (V_{at})	240 m ³ /h
Velocidade da Água Gelada (v_{ag})	1,188 m/s
Velocidade da Água da Torre de Resfriamento (v_{at})	6,54 m/s

4. RESULTADOS OBTIDOS E DISCUSSÕES

4.1 Primeira Etapa: Incrustação Constante

Nesta etapa, considerou-se a incrustação como constante. No trabalho de Souza (2004), as simulações foram feitas, considerando a resistência devido à incrustação como sendo igual a 0, $R_d = 0$.

Na Figura 23, observa-se a diferença dos resultados obtidos para esta condição em comparação com os dados verificados ou medidos pela BRASKEM.

A diferença observada na Figura 23 entre os valores medidos e os simulados ocorre porque no processo real, o precipitado que escoar junto com a solução de soda cáustica forma incrustações devido a sua cristalização em torno da serpentina. Existe uma grande dificuldade em estimar os efeitos causados pelo conjunto destas substâncias que participam deste processo, por causa da dificuldade de se obter na literatura dados essenciais das mesmas.

Para se obter uma cinética de cristalização seria necessário saber como os cristais se formariam durante o processo, o que no momento é difícil, por não se ter dados medidos sobre isso. O que no momento se sabe é a temperatura de saída de solução de cada tanque.

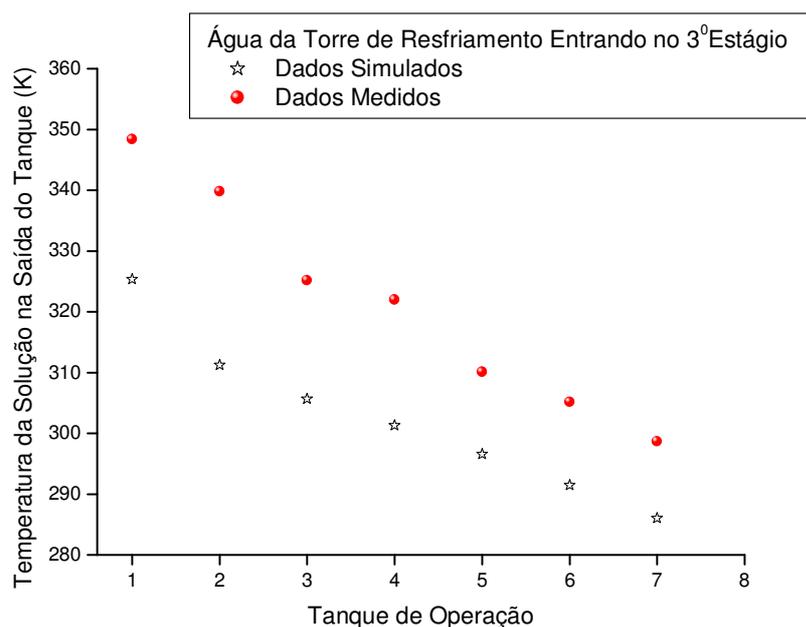


Figura 23 – Temperatura de saída da solução versus o tanque de operação

Como inicialmente, nas simulações foram descartadas as incrustações, desta vez por tentativas foram simulados valores constantes para R_d e comparados com os valores obtidos para temperatura na saída da solução em cada tanque com os valores medidos pela BRASKEM. E foi calculado o erro relativo para cada valor obtido por simulação e tentou-se prever a carga térmica e a temperatura de saída da água em cada tanque.

Na Figura 24, foram testadas várias resistências para poder comparar os resultados com os valores verificados pela BRASKEM. As resistências foram consideradas constantes para todos os tanques para poder também comparar com o caso em que não ocorre incrustação.

Observa-se na Figura 24 que foram atingidos valores aproximados para a temperatura da solução nos primeiros tanques (T1 e T2), quando o valor de R_d foi igual a $3,0 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2 \cdot \text{K} \cdot \text{W}^{-1}$, provavelmente deve ocorrer uma maior incrustação nestes tanques pois a concentração de precipitado nestes tanques é maior; uma parte dos sais que se precipitam vão se acumulando ao longo dos tanques.

Na Figura 25 é mostrado o erro relativo da temperatura da solução para cada tanque. Para os três últimos (T5, T6, T7), foi necessária uma resistência menor, R_d igual a $2,0 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2 \cdot \text{K} \cdot \text{W}^{-1}$, devido à mesma explicação referente à concentração descrito anteriormente. Em alguns tanques a temperatura tem maior influência do que a concentração. Os tanques 3 e 4 não obedeceram a comportamento semelhantes aos demais tanques.

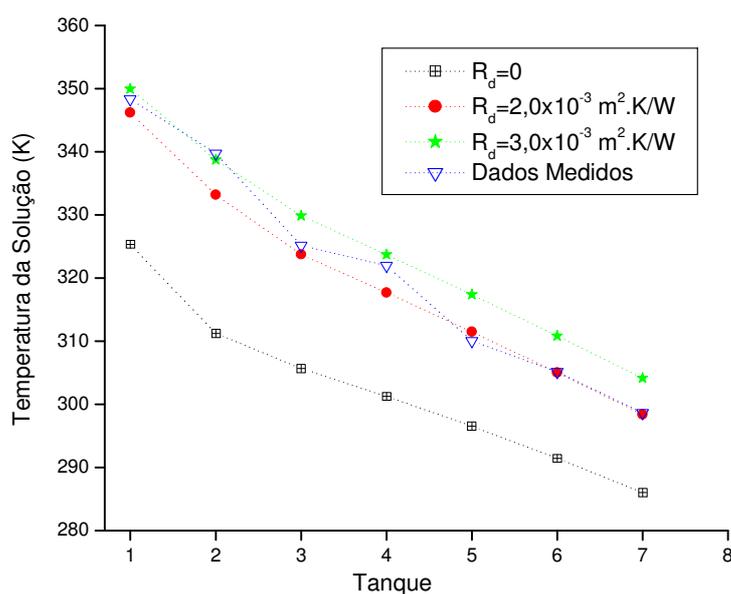


Figura 24 – Temperatura da solução para cada tanque

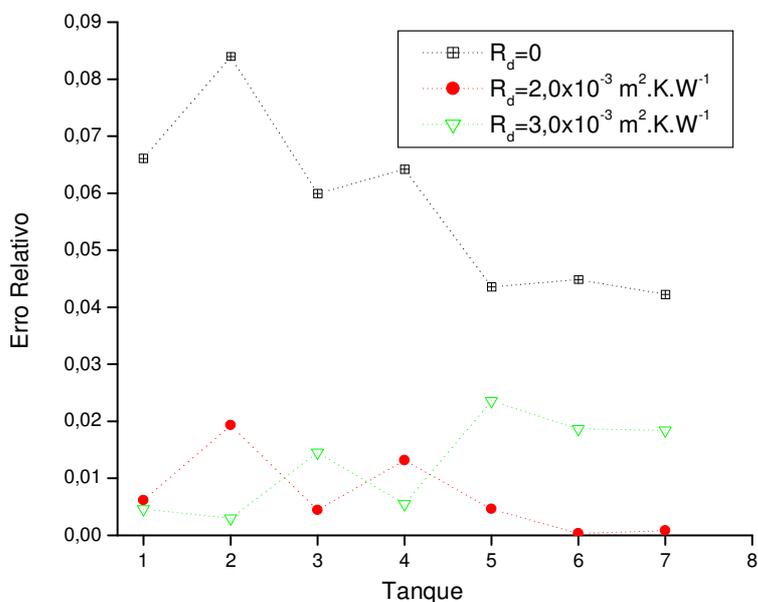


Figura 25 – Erro relativo da temperatura da solução para cada tanque

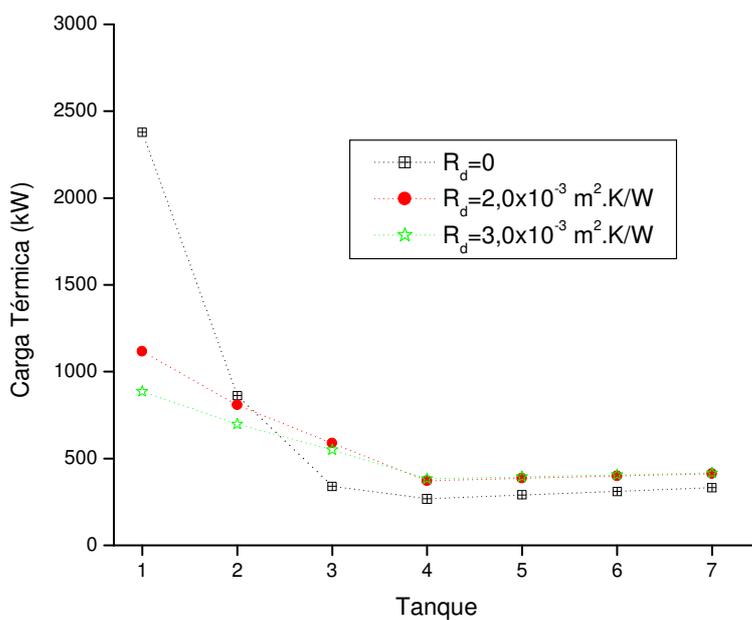


Figura 26 – Carga térmica para cada tanque

O tanque T1 é o que sofre maior influência devido à incrustação, o que pode ser visto na Figura 26. Ele é o que possui maior carga térmica (quantidade de calor trocado entre os fluidos)

devido ser o tanque de entrada da solução no processo, isto é, a soda cáustica possui a temperatura mais elevada neste tanque. Isto influencia também no restante do processo, e esta magnitude dependerá muito da temperatura com a qual a solução vai sair deste tanque.

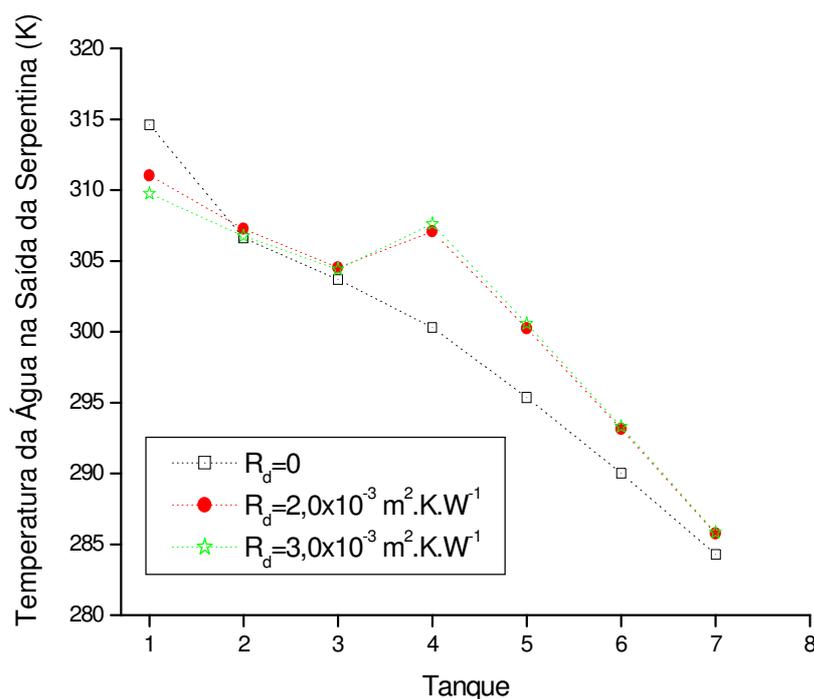


Figura 27 – Temperatura da água que está saindo de cada tanque

A Figura 27 mostra que a água gelada sai do tanque T4 com temperatura mais elevada em comparação a água da torre de resfriamento que sai do tanque T1 em relação aos casos em que R_d é diferente de zero, isto ocorre porque a temperatura da solução chega mais aquecida ao tanque T4.

Observa-se na Figura 27, que exceto no tanque T1, a temperatura da água que está saindo das serpentinas dos tanques aumenta em função do crescimento de R_d , exceto no tanque T1. A temperatura da solução aumenta com a incrustação e o sistema está em contra-corrente. Como a solução chega no tanque com uma temperatura mais elevada devido à incrustação, o ΔT exerce maior influência do que o U_d . O que não acontece no tanque T1, devido à enorme temperatura com que chega a solução para ser resfriada no sistema.

4.1.1 Testes Modificando as Taxas de Incrustações com os Tanques

Depois de se observar e se analisar a influência das incrustações nos tanques, de acordo com os resultados obtidos e analisados na seção 4.1, foram feitos testes modificando as resistências devido às incrustações tomando como base valores que favoreceram uma maior proximidade com os valores medidos pela BRASKEM. Os testes foram feitos com os valores descritos na Tabela 4.

O teste 1 considera constante a resistência térmica devido à incrustação para os tanques onde é utilizado a água da torre de resfriamento e outro valor diferente para os tanques que utilizam a água gelada, enquanto os testes 2 e 3, consideraram constantes as resistências nos tanques T1 e T2, e os outros valor constante, diferenciando-se entre si num determinado valor.

Tabela 4 – Testes para avaliar a incrustação

Tanque	Teste 1 (R_d em $m^2.K.W^{-1}$)	Teste 2 (R_d em $m^2.K.W^{-1}$)	Teste 3 (R_d em $m^2.K.W^{-1}$)
1	0,0030	0,0030	0,0030
2	0,0030	0,0030	0,0030
3	0,0030	0,0020	0,0015
4	0,0020	0,0020	0,0015
5	0,0020	0,0020	0,0015
6	0,0020	0,0020	0,0015
7	0,0020	0,0020	0,0015

Nas Figuras 28 e 29, observa-se a aproximação dos resultados obtidos pelas resistências de acordo com os testes com os dados verificados.

A Figura 28 mostra que nos tanques T1 e T2, os testes apresentaram valores aproximados daqueles verificados pela BRASKEM, uma vez que apresentaram a mesma resistência devido à incrustação. As pequenas diferenças ocorrem devido ao fluido refrigerante (água da torre de resfriamento que chega com uma temperatura diferente nos três testes).

Para as temperaturas dos tanques T5, T6 e T7, os valores que mais se aproximam são os obtidos pelo teste 3, o que indica que esses tanques provavelmente possuem uma resistência devido à incrustação relativamente pequena em comparação com os demais tanques.

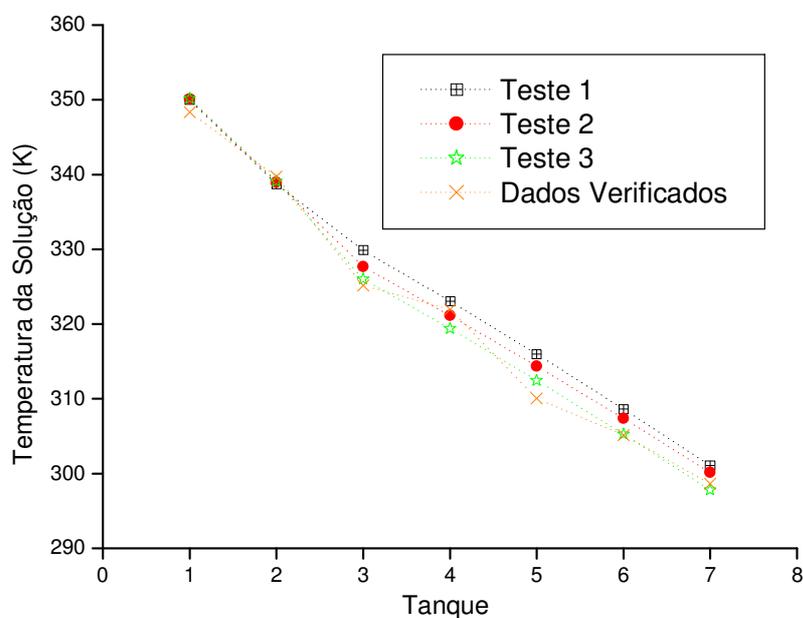


Figura 28 – Temperatura da solução na saída para cada tanque

Observa-se na Figura 29, que na maioria dos tanques os valores obtidos para o teste 3 são os que mais se aproximam dos dados verificados pela BRASKEM, apresentando um erro relativo mais baixo, com exceção do tanque T4 que é o tanque de saída da água gelada do processo. Com mais estudos será possível determinar com mais detalhes esse comportamento.

O gráfico da Figura 30 mostra que no tanque T3 a diferença entre as cargas térmicas obtidas nos três testes da Tabela 4 foram maiores em comparação com os outros tanques, isto ocorre porque a carga térmica se torna menor devido a maior incrustação por causa da diminuição do coeficiente global de transmissão de calor, mas a temperatura chega nos demais tanques com uma temperatura mais elevada, sendo a diferença de temperatura um fator mais preponderante no caso do teste 1, já os valores obtido para os testes 2 e 3, a menor incrustação favorece a uma maior carga térmica.

Observando os valores para as resistências na Tabela 4, os valores são iguais para nos tanques T1 e T2 para todos os testes, mas no tanque T3 ocorre diferenças entre esses valores fazendo a carga térmica diminuir em função do aumento da resistência (Figura 30). Utilizando os valores das resistências do teste 1, a carga térmica nos tanques T4 a T7 é maior em relação aos outros testes como mostra a Figura 30, porque a solução sai mais aquecida do tanque T3. E

comparando os testes 2 e 3, possui maior carga térmica quem apresenta menor resistência como pode-se observar na Figura 30.

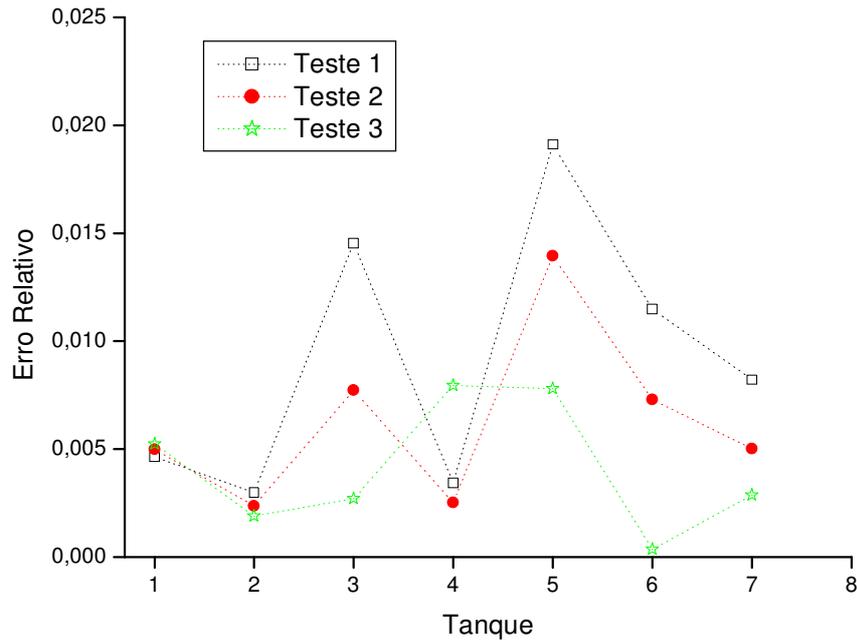


Figura 29 – Erro da temperatura da solução na saída para cada tanque

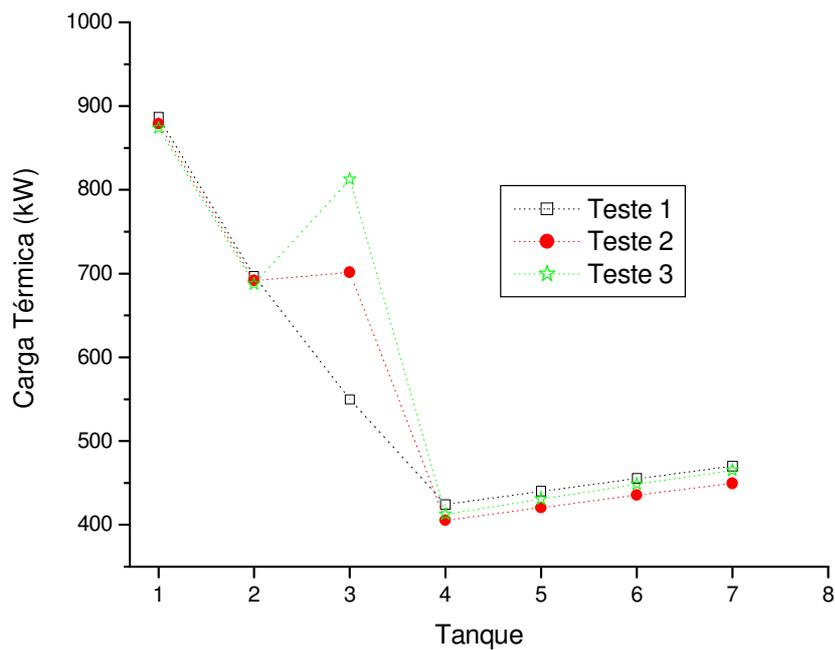


Figura 30 – Carga térmica para cada tanque

Nos tanques que utilizam água da torre de resfriamento (T1 a T3), a água sai mais aquecida quanto menor for a resistência no tanque T3 como mostra a Figura 31. Há uma diferença de incrustações no tanque T3 para os testes da Tabela 4, dessa forma a água sai mais aquecida em função da menor da resistência como se observa na Figura 31, devido ao aumento da carga térmica (Figura 30). Ao se observar a Figura 31, nota-se que não houve muita influência dos testes para a temperatura da água, apesar de que nos tanques que utilizam água da torre de resfriamento, a água sai com um valor mais alto destes tanques devido à maior incrustação no tanque de entrada da água da torre de resfriamento, os para os tanques com água gelada (T4 a T7), a diferença de temperatura influencia mais no resultado do que a incrustação.

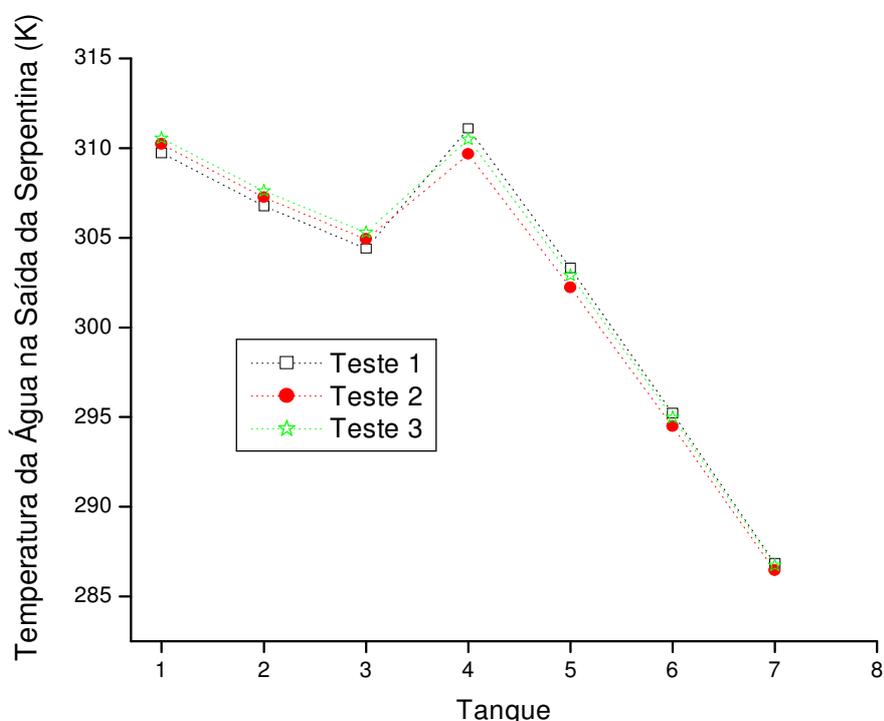


Figura 31 – Temperatura da água que está saindo de cada tanque

4.1.2 Comparação dos Valores Obtidos para Resistência Devido à Incrustação nos Testes com a Literatura

Não foi encontrado um problema na literatura que envolva sistema de resfriamento com tanques, mas alguns valores para incrustações que ocorre em equipamentos industriais de

transferência de calor podem ser encontrados a partir de Kern (1987), Smaïli *et al.* (2001) e de Sanaye e Niroomand (2007). Estes valores são listados na Tabela 5.

Observa-se que os valores das resistências da Tabela 5 são menores em relação aos obtidos na seção 4.1.1 para os tanques de resfriamento da BRASKEM. Isto pode ser justificado pelo fato de que a cada dia, um tanque da BRASKEM sai do processo para ser limpo, ou seja, a cada semana, um determinado tanque é limpo, enquanto a limpeza dos equipamentos descritos na Tabela 5, geralmente ocorre em intervalos de três a quatro meses ou a cada ano, contudo mais estudos devem ser feitos.

Tabela 5 – Valores de resistências devido à incrustações encontrados na literatura

Equipamento Estudado	Valores das Resistências ($m^2.K.W^{-1}$)
Trocadores de calor na refinaria estudada por Smaïli <i>et al.</i> (2001) em 1 dia	0,000001-0,0000125
Trocadores de calor na unidade Urea da planta petroquímica Khorasan em 1 dia (SANAYE e NIROOMAND, 2007)	0,00006-0,0002
Trocadores de calor e refervedores em processos de separação de frações do petróleo (KERN, 1987)	0,000282
Separador de vapores em processos de separação de frações do petróleo (KERN, 1987)	0,000352-0,00176
Caldeiras (KERN, 1987)	0,000352

4.2 Segunda Etapa: Combinações Utilizando Valores de Incrustação Constante e o Uso da Função Assintótica para as Incrustações

Em Souza (2004), foram feitas simulações modificando o sistema e comparando com o sistema atual da BRASKEM com o objetivo de obter uma configuração com os melhores parâmetros, observando variáveis como temperatura da solução na saída do último tanque e também a carga térmica, mas considerando o R_d igual a zero. Neste trabalho de tese, foram simuladas situações em que o R_d é diferente de zero, cujos valores se encontram no teste 3 da Tabela 4 para diferentes combinações do sistema, entrada de água da torre ou gelada e

configuração (série ou paralelo). Esse teste foi escolhido por apresentar menor erro relativo em comparação com os dados reais.

4.2.1 Combinações para o Sistema

Anteriormente, foram feitos estudos de combinações observadas na Tabela 6. Os estágios de entrada de água resfriada são o terceiro (tanque T3) e o último estágio (tanque T7). Utilizou-se uma vazão de 44 m³/h de água gelada e 240 m³/h de água da torre de resfriamento, independente do estágio de entrada. Esses valores são dados fornecidos pela BRASKEM

Todos os tanques estão em série para o resfriamento da soda. As combinações apresentadas na Tabela 5 são todas as possíveis utilizando as entradas para água de resfriamento no sistema atual da BRASKEM (entradas nos tanques T3 e T7, terceiro e último estágio, respectivamente).

A água nova é aquela que vem diretamente da torre de resfriamento ou de sistema de refrigeração da água gelada, como mostra a Figura 32, enquanto a água velha é aquela já processada no sistema (vem do tanque anterior no sentido da corrente de água), como mostra a Figura 33.

Tabela 6 – Combinações para o sistema atual

Combinações	Entrada no último tanque	Entrada no terceiro tanque
C1	Água gelada nova	Água gelada velha
C2	Água da torre nova	Água da torre velha
C3	Água gelada nova	Água da torre nova
C4	Água gelada nova	Água gelada nova
C5	Água da torre nova	Água da torre nova
C6	Água da torre nova	Água gelada nova

Utilizando a combinação C1 como mostra a Figura 34, nos três primeiros tanques (T1, T2 e T3) a temperatura da solução é mais elevada do que nos quatro últimos. Isto ocorre devido à água gelada velha que chega ao tanque T3, está bastante aquecida devido à troca térmica com a soda cáustica dos outros tanques pela qual passou, e além disso, a vazão também é baixa em comparação com a vazão da água da torre de resfriamento.

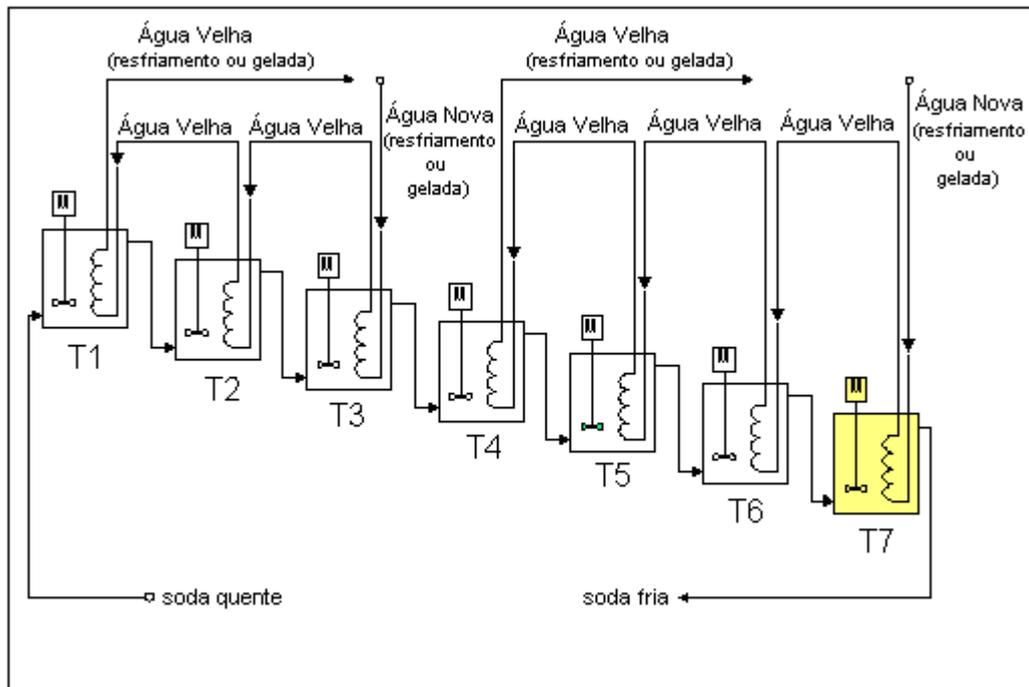


Figura 32 – Sistema de utilização de água nova nos estágios T7 e T3

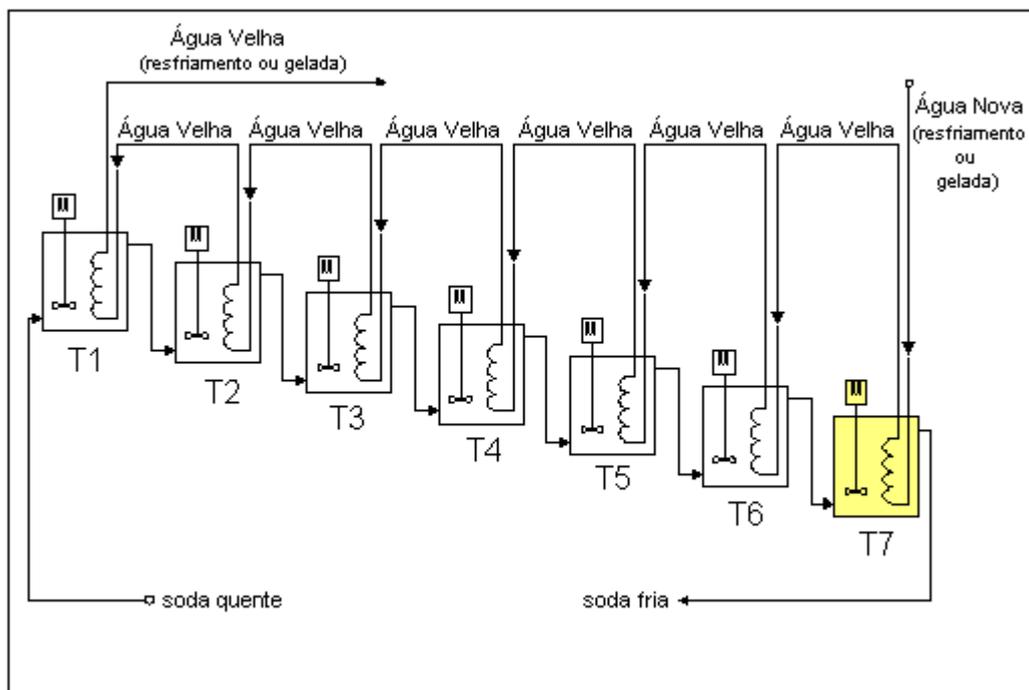


Figura 33 – Sistema de utilização de água nova no estágio T7 e água velha no estágio T3

Os resultados para as combinações C2 e C3 mostra que nos dois primeiros tanques, assim como os resultados da combinação C1, a temperatura da solução também é elevada, apesar de ser menor, por causa da água gelada entrar com uma temperatura mais baixa. A Figura 34 mostra que é mais eficiente utilizar água da torre de resfriamento nos três primeiros tanques por causa da sua maior vazão. Entretanto no tanque T3, a água gelada resfriada também tem uma boa eficiência devido a sua baixa temperatura na entrada da serpentina.

Em relação aos últimos tanques (T4, T5, T6 e T7), a utilização de água gelada foi mais eficiente como mostra a Figura 34, evidenciando que o efeito da temperatura mais baixa para água gelada é mais preponderante do que a maior vazão de água da torre de resfriamento.

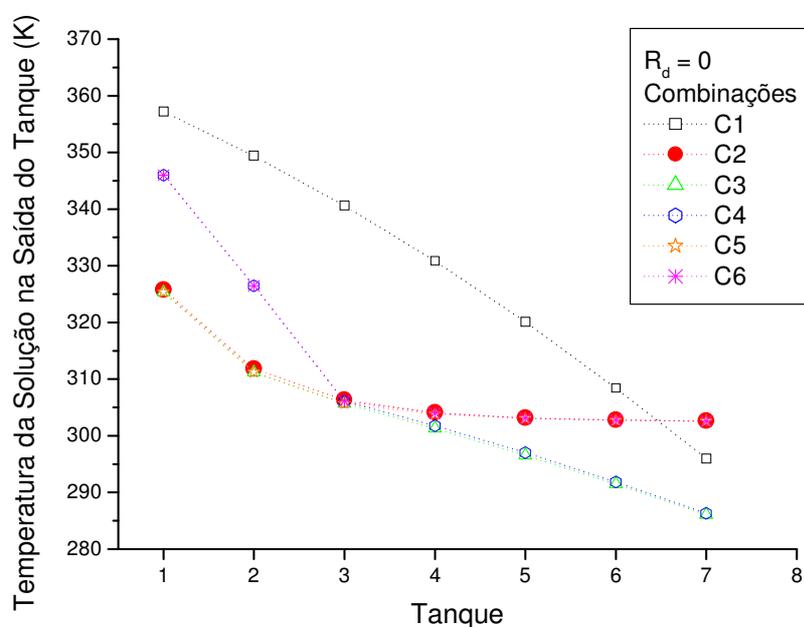


Figura 34 – Temperatura da solução na saída dos tanques

A Figura 35 mostra os efeitos das combinações com incrustações constantes para cada tanque cujos valores utilizados foram do teste 3 da Tabela 4.

Observa-se na Figura 35 que incorporando os efeitos da resistência devido à incrustação no coeficiente de transmissão de calor, as temperaturas da solução na saída do tanque ficam mais elevadas como já era de se esperar. Verifica-se então que o efeito da vazão nos primeiros tanques não contribui com tanta intensidade para o melhor resfriamento da solução. Já o efeito do líquido refrigerante de menor temperatura é mais sentido nos tanques T6 e T7.

Os efeitos da utilização de água gelada podem ser melhor observados na Figura 35, onde a água está em contra-corrente em relação à solução e com exceção das combinações C1 e C2, ocorre a entrada de dois tipos de água (água gelada e água da torre de resfriamento).

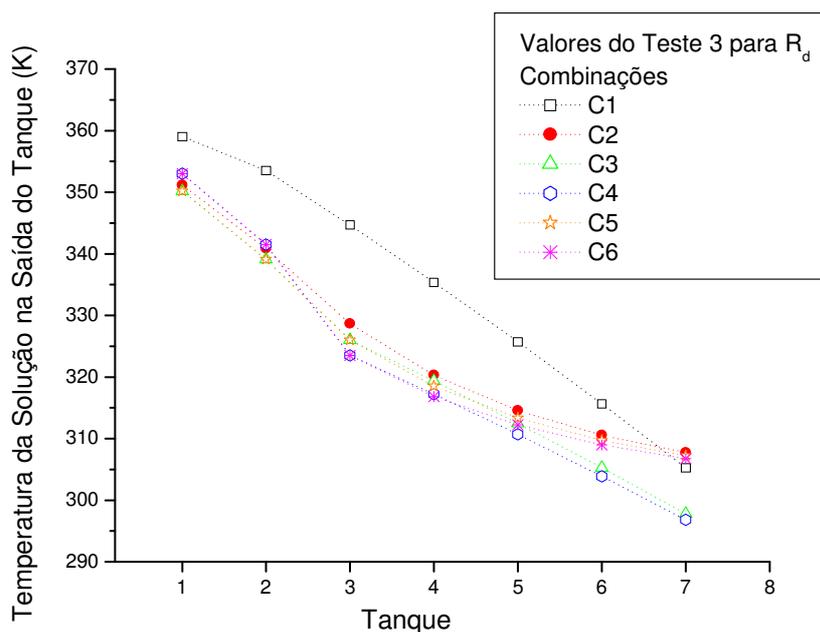


Figura 35 – Temperatura da solução na saída em relação aos tanques com a incrustação constante do teste 3

A Figura 34 mostra que solução sai menos aquecida na combinação C3, enquanto na Figura 35, isso ocorre na combinação C4. Portanto, C4 é mais eficiente.

A Figura 36 mostra que a água que sai dos tanques com uma temperatura mais baixa nos últimos tanques (T6 e T7) quando se utiliza água gelada, principalmente nas combinações C3 e C4.

Observando a Figura 36, a combinação C1, apesar de utilizar água gelada nos últimos tanques, como não ocorre uma nova entrada de água e a vazão de água gelada é menor que a da água da torre de resfriamento, fazendo com que a solução dos primeiros tanques seja menos resfriada e ao chegar nestes últimos tanques, e a sua temperatura é mais elevada em comparação com as combinações C1 e C2.

Em relação aos primeiros tanques (T1 e T2), as temperaturas mais baixas para a água que sai destes tanques são para combinações que utilizam nestes tanques água da torre de resfriamento (C2, C3 e C5). E no tanque T3, observa-se na Figura 36 que o efeito térmico é

praticamente o mesmo, a temperatura da água que sai destes tanques é praticamente a mesma com um valor um pouco mais baixo para as combinações que utilizam água gelada mais resfriada nestes tanques.

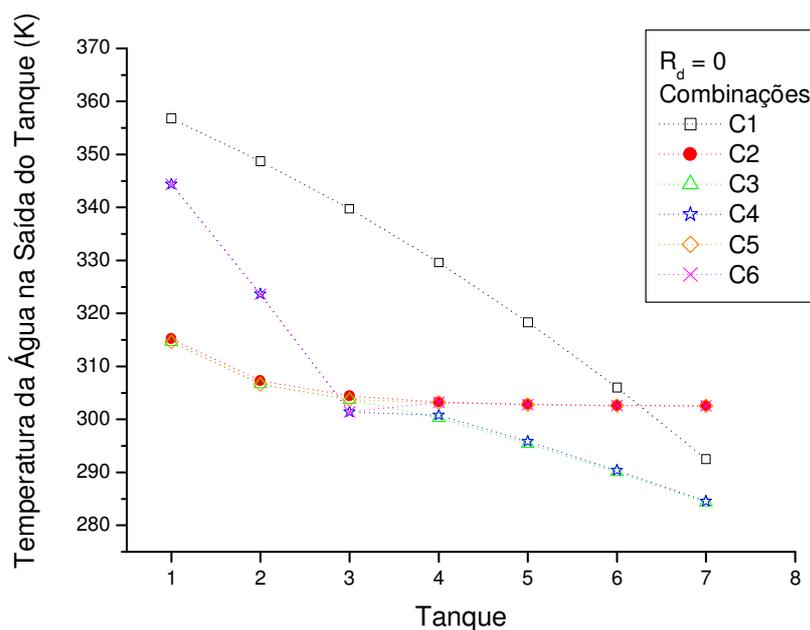


Figura 36 – Temperatura da água na saída em relação aos tanques sem incrustação

Na Figura 37 observa-se a temperatura da água para as combinações da Tabela 6, utilizando os valores de incrustação constantes do teste 3 da Tabela 4.

Observa-se que o gráfico da Figura 37 possui um comportamento semelhante ao gráfico da Figura 36, mas com a adição da taxa de incrustação aos tanques, o efeito da maior vazão de água da torre de resfriamento exerce menor influência que a menor temperatura de água gelada. Tanto que no último tanque (T7), a diferença de temperatura da água entre as combinações que utilizam água gelada nos últimos tanques (C1, C3 e C4) e os que utilizam água da torre de resfriamento (C2, C5 e C6) é maior quando existe incrustação no tanque.

E para os primeiros tanques, a diferença de temperatura é menor entre as combinações que utilizam água da torre de resfriamento (C2, C3 e C6) e os que utilizam água gelada nestes tanques (C1, C4 e C5) quando ocorre incrustação no tanque. As incrustações influenciam diretamente no coeficiente de transmissão de calor, assim como a vazão de água, dessa forma quanto maior for à incrustação, a vazão de água irá contribuir menos para a carga térmica porque o coeficiente de transmissão de calor está mais reduzido.

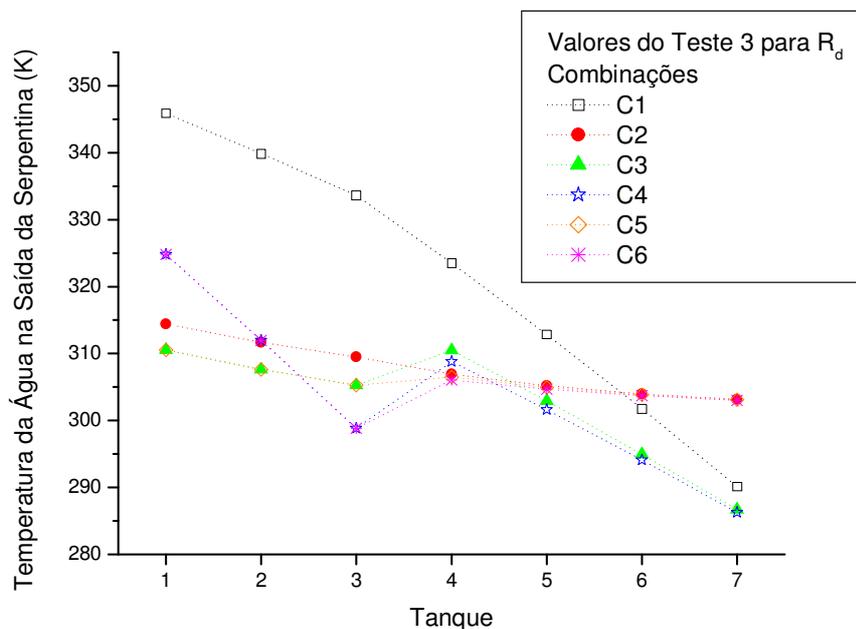


Figura 37 – Temperatura da água na saída em relação aos tanques com a taxa de incrustação constante do teste 3

A carga térmica em relação a cada tanque sem a ocorrência de incrustações pode ser observada na Figura 38. A maior carga térmica atingida ocorre no primeiro tanque (T1) para as combinações C2, C3 e C5, onde ocorre a entrada de água da torre no terceiro tanque (T3). Nestas combinações água sai com uma temperatura mais baixa do tanque T2 em comparação com as combinações que utilizam água gelada (C1, C4, C6) e além disso a vazão da água da torre é maior do que a da água gelada.

No tanque de entrada de água (T3), a Figura 38 mostra que as combinações que utilizam água gelada neste tanque possui uma maior carga térmica pelo fato da água gelada nova ser bastante resfriada. Isso também ocorre nos últimos tanques (T5, T6 e T7), a água gelada provoca uma carga térmica maior que água da torre de resfriamento.

Comparando as Figuras 38 e 39, observa-se que as incrustações possibilitam um maior efeito da água mais resfriada, tanto que a carga térmica na combinação C4 foi maior que a combinação C3 para os últimos tanques (T5, T6 e T7).

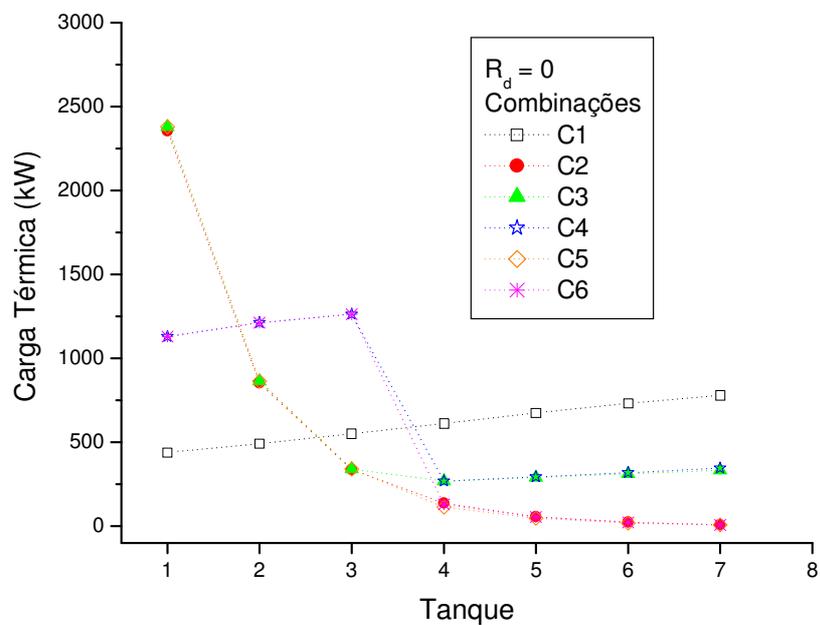


Figura 38 – Carga térmica em relação aos tanques sem incrustações

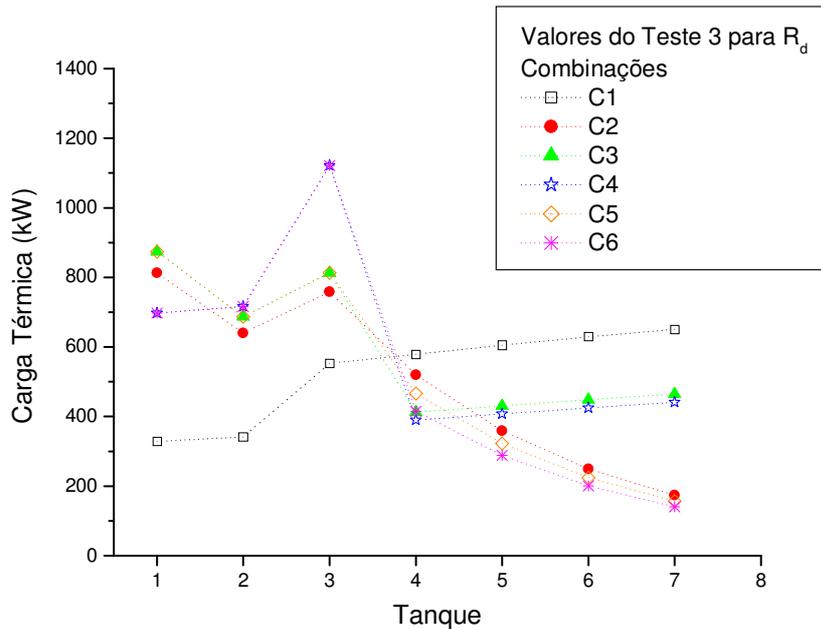


Figura 39 – Carga térmica em relação aos tanques com as resistências do teste 3

Estas duas combinações C3 e C4 foram as que atingiram os melhores valores de temperatura da solução na saída do tanque T7, tanto sem incrustação quanto com os valores do teste 3, basta observar as Figuras 34 e 35. Sendo que sem incrustações C3 foi um pouco melhor que C4, mas com incrustações, a melhor foi C4. E os efeitos da carga térmica observados nas Figuras 38 e 39 confirmam isso.

4.2.2 Incrustação Assintótica

No estudo atual, foram obtidos resultados referentes aos problemas causados pela cristalização dos sais e com um modelo de incrustação em função do tempo obtido a partir dos trabalhos de Smaïli *et al.* (2001) e Sanaye e Niroomand (2007). Devido ao uso mais comum nos trabalhos citados do modelo assintótico, este trabalho daqui por diante fará uso do mesmo.

Utilizou-se a equação (2.17) junto com os dados do teste 3 da Tabela 4 para modelos assintóticos. Com a finalidade de se determinar os parâmetros como R_d^∞ e τ , foram feitas algumas simulações. A resistência máxima (R_d^∞) é igual aos valores do teste 3 e τ foi modificado como pode-se observar nas Figuras 40, 41 e 42.

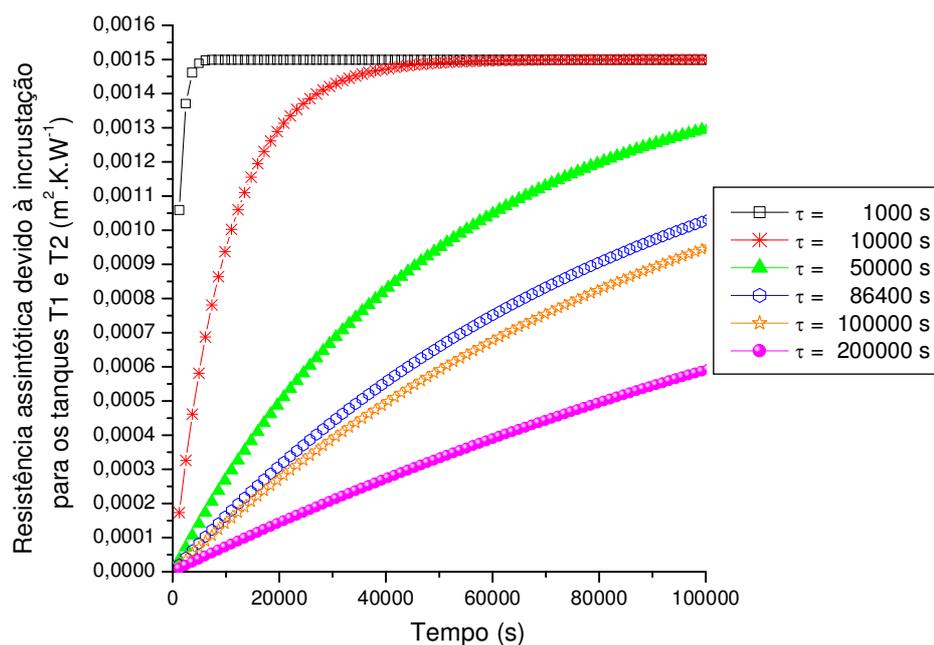


Figura 40 – Resistências assintóticas para os tanques T1 e T2 em função do tempo para determinados valores de τ

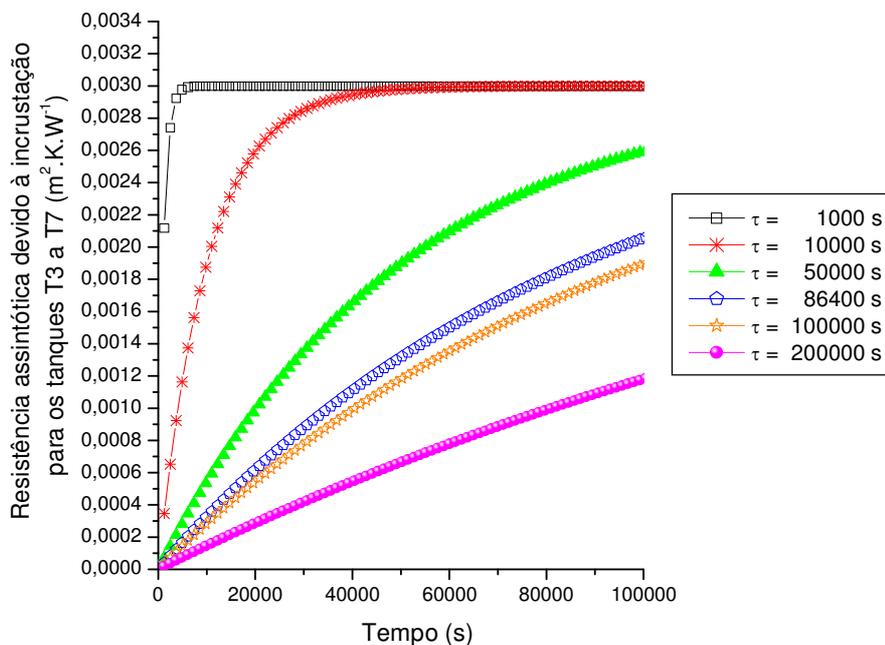


Figura 41 – Resistências assintóticas para os tanques T3 a T7 em relação ao tempo para determinados valores de τ

Analisando a equação (2.17), sabe-se que aumentando o valor de τ e considerando constante os demais parâmetros, o valor de R_d cresce com menor intensidade em relação ao tempo. Pode-se observar nas Figuras 39 e 40 que os valores das resistências se tornam iguais aos de R_d^∞ para os valores de τ igual a 1000 e 10000 s.

A primeira limpeza de um tanque da atual configuração da BRASKEM ocorre um dia após o funcionamento do sistema de resfriamento, dessa forma ao comparar-se com os sistemas estudados na literatura, o valor de τ , geralmente, deve ser maior do que o período em ocorre a primeira limpeza.

Nos trocadores de calor estudados por Sanaye e Niroomand (2007), a primeira limpeza ocorre em 4 meses (120 dias), enquanto o valor de τ no modelo de incrustação é igual a 180 ou 300 dias. Nas unidades de refinarias de petróleo estudadas por Smaïli *et al.* (2001), os trocadores de calor levam de 300 a 330 dias para que tenham a primeira limpeza naquele período de operação com um valor de τ igual a 400 dias. Num trocador de calor estudado, o valor de τ é igual a 350 dias, mas a primeira limpeza ocorre em 510 dias, devido o seu R_d^∞ ser menor do que os outros trocadores descritos por Smaïli *et al.* (2001).

Com os valores observados nas Figuras 40 e 41 e os dados da literatura, uma hipótese para o atual sistema de resfriamento da BRASKEM é de que o τ seja igual a 100000 s ou 200000 s com os valores de R_d^∞ utilizados nestas simulações. Contudo, é necessário analisar o impacto dos valores de τ e R_d^∞ na temperatura da solução, principalmente, no tanque T7 como mostra a Figura 42.

Observa-se na Figura 42 que a temperatura da solução atinge o valor ideal, isto é, aquele que mais se aproxima de 278,15 K em menos de um dia (86400 s) para os valores de τ igual a 1000 e 10000 s, mas como já foi comentado, a primeira limpeza ocorre após o primeiro dia de operação e todos os tanques não podem ser limpo num único dia, uma vez que comprometeria o funcionamento do sistema, dessa forma o valor da temperatura da solução na saída do último tanque (T7) após 1 dia de operação deve ser menor do que o valor ideal.

O tanque T7 é o último a ser limpo no período de 1 semana, portanto de acordo com os dados da literatura de Sanaye e Niroomand (2007) e Smaïli *et al.* (2001), entre os valores de τ que foram substituídos neste problema até o momento, o valor mais adequado é 200000 s, pois ele é maior do que o tempo de limpeza dos dois primeiros tanques T1 e T2 e menor em relação aos tanques T3, T4, T5, T6 e T7, os quais possuem maior R_d^∞ .

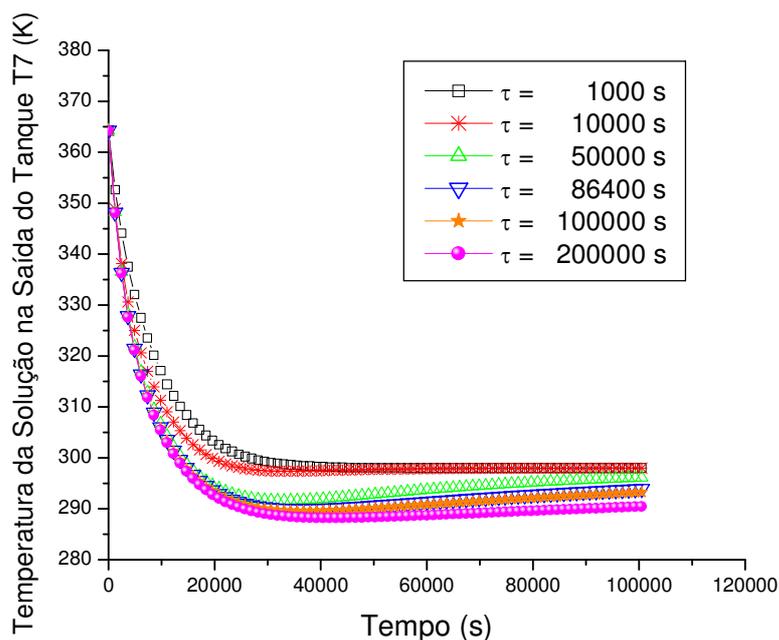


Figura 42 – Temperatura da solução na saída do tanque T7 em função do tempo para determinados valores de τ

4.2.3 Comparação de Dados Obtidos na Segunda Etapa com a Literatura

Foram obtidos valores via simulação para temperatura da solução e da água, calor e coeficiente global de transferência de calor e os perfis são comparados com dados reportados por Sanaye e Niroomand (2007).

Pode-se observar na Figura 43 que a temperatura da solução nos tanques diminui até atingir o tempo de operação, aproximadamente, igual a 37000 s, após esse intervalo, ela começa a aumentar devido ao crescimento assintótico da resistência devido à incrustação. Esse tipo de comportamento ocorre em todos os tanques.

Com o aumento da resistência, o coeficiente global de transferência de calor diminui, conseqüentemente, a eficiência de troca térmica diminui.

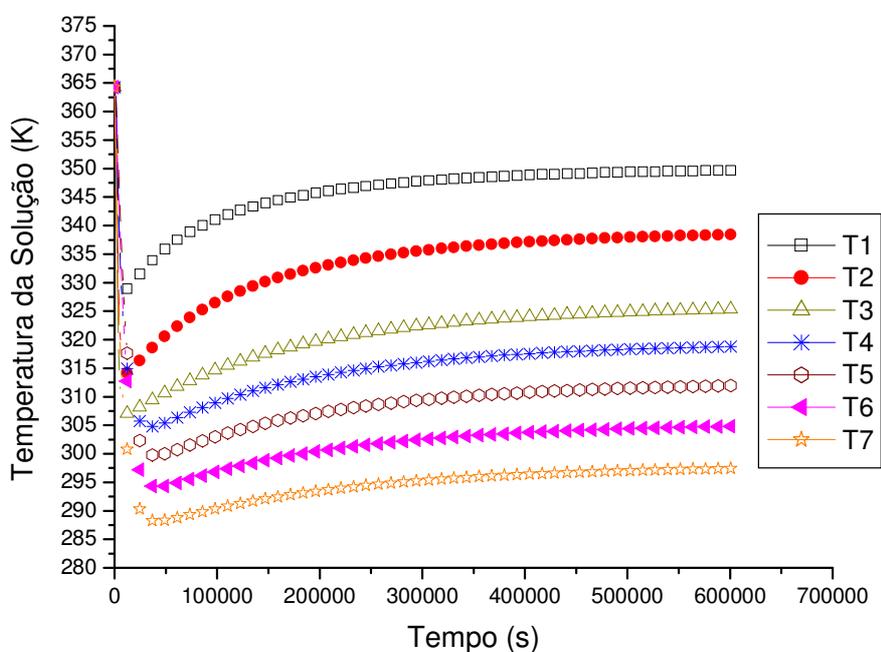


Figura 43 – Temperatura da solução na saída dos tanques em função do tempo com τ igual a 200000 s

A Figura 44 mostra que a temperatura da água na serpentina do tanque T1, diminui com o tempo, devido ao fluxo contínuo de água da torre de resfriamento que entra no tanque T3 e sai do processo neste tanque, e pelo aumento da resistência devido à incrustação, que diminui o efeito

de troca térmica entre a solução e a água de resfriamento. Como a temperatura da solução sai mais alta do tanque T1 com o tempo devido ao aumento da incrustação, a água que sai das serpentinas dos tanques T2 e T3 tem um aumento de temperatura, apesar do aumento da resistência de troca térmica.

Observa-se também na Figura 44, que a temperatura da água no tanque T4 aumenta com mais intensidade ao longo do tempo. Como já foi explicado, a temperatura da solução que sai dos tanques antecedentes (T1, T2 e T3) aumenta com o tempo por causa da incrustação, e a água gelada que chega neste tanque está mais aquecida, porque ela entra no sistema a partir do tanque T7, onde sua temperatura aumenta quando flui pelas serpentinas em contracorrente à solução de cada tanque (T7, T6 e T5). Quando a água gelada está muito aquecida em relação a entrada no processo, o seu efeito de resfriamento é menor do que o da água da torre de resfriamento, porque sua vazão é menor.

Em relação aos tanques T5, T6 e T7, a temperatura da água na saída da serpentina aumenta em função do tempo e diminui na direção crescente dos tanques, devido a diminuição da temperatura da solução a cada tanque em que a soda cáustica esco.

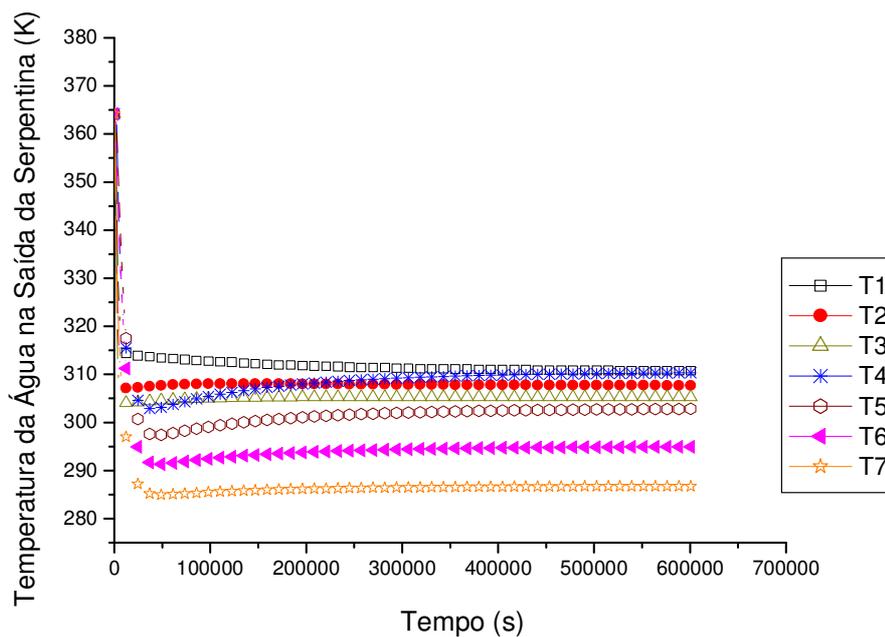


Figura 44 – Temperatura da água na saída das serpentinas dos tanques em função do tempo com τ igual a 200000 s

Os dados mostrados na Figura 45 foram extraídos do trabalho de Sanaye e Nirromand (2007), e mostra os perfis de temperatura dos fluidos quente e frio na saída do trocador de calor E-4105 da unidade Urea da Planta Khorasan Petroquímica. Comparando com os tanques de resfriamento da BRASKEM, o fluido quente é a soda cáustica e o frio, a água de resfriamento.

Há uma diferença entre os tanques de resfriamento estudados neste trabalho e o trocador E-4105. Neste trabalho, a solução de soda cáustica e as águas de resfriamento (torre e gelada) escoam em contra-corrente, enquanto no E-4105, o escoamento é co-corrente. Contudo, da mesma maneira que a temperatura da solução, depois de um certo intervalo de tempo, ela aumenta nos tanques devido ao acréscimo de camada isolante causada pela incrustação (Figura 43 e 45).

No caso da temperatura do fluido frio do E-4105, o perfil mais semelhante é do tanque T1, comparando as Figuras 43 e 45. Pelo que mostra Sanaye e Nirromand (2007), o E-4105 é trocador inicial da unidade Urea, dessa forma o fluido que entra neste equipamento possui uma temperatura fixada num determinado valor, da mesma maneira que o tanque T1 do sistema de resfriamento de soda cáustica da BRASKEM, ao contrário dos demais tanques, cuja a temperatura da solução que entra nos seus tanques, depende do nível de resfriamento do antecedente.

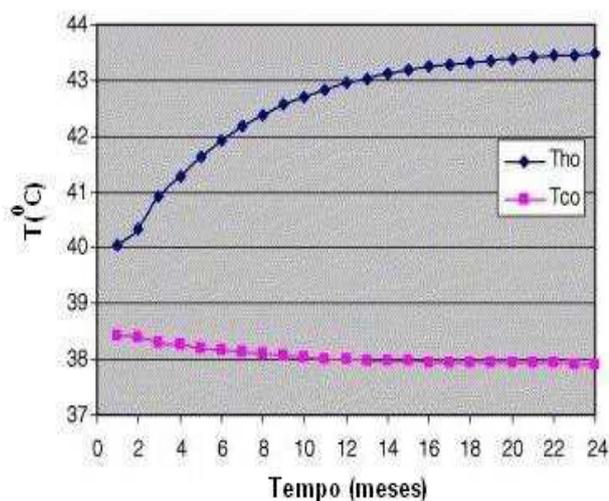


Figura 45 – Variações de temperatura das correntes de fluido quente (Tho) e fluido frio (Tco) na saída do trocador de calor E-4105 da Planta Khorasan Petroquímica (SANAYE e NIROOMAND, 2007).

A variação do coeficiente global com o tempo para os tanques de resfriamento estudados neste trabalho são mostrados na Figura 46. Os valores utilizados para R_d^∞ foram iguais aos valores da resistência devido à incrustação do teste 3 da Tabela 4. Os tanques T1 e T2 possuem $R_d^\infty = 0,003 \text{ m}^2 \cdot \text{K} \cdot \text{W}^{-1}$ e os demais, $R_d^\infty = 0,002 \text{ m}^2 \cdot \text{K} \cdot \text{W}^{-1}$.

Os tanques que possuem maior valor de R_d^∞ (T1 e T2), possuem um valor mais baixo de coeficiente global de transmissão de calor como mostra a Figura 46. O tanque T3 possui maior coeficiente global de transferência de calor em relação aos demais tanques, porque possui maior vazão em relação aos tanques que utilizam água gelada e menor R_d^∞ em relação aos que usam em suas serpentinas água da torre de resfriamento.

Observando a Figura 46, o coeficiente global de transmissão de calor diminui com o tempo, a causa disso é o aumento da incrustação com o tempo.

Em relação ao trocador de calor E-4105 da unidade Urea, o coeficiente global de transmissão de calor também diminui como mostra a Figura 47.

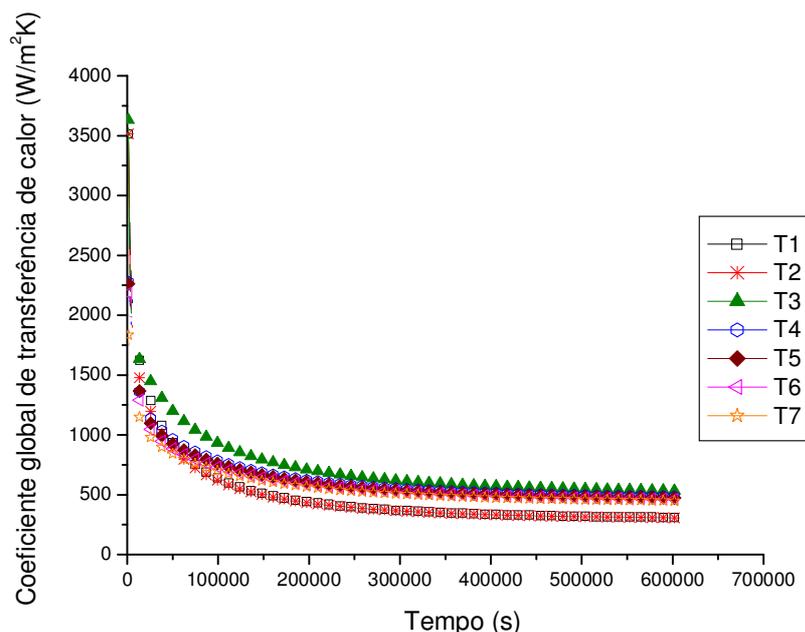


Figura 46 – Coeficiente global de transferência de calor nos tanques em função do tempo com τ igual a 200000 s

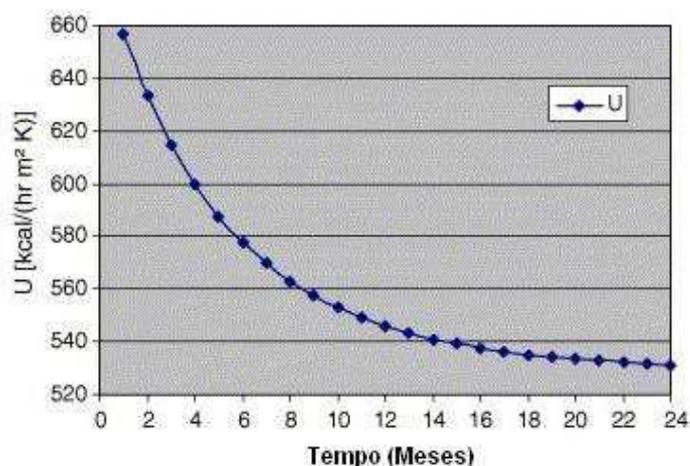


Figura 47 – Variações no coeficiente global de transferência de calor no trocador E-4105 da Planta Khorasan Petroquímica (SANAYE e NIROOMAND, 2007)

Os perfis de quantidade de calor ou carga térmica nos tanques de resfriamento podem ser verificados na Figura 48. A carga térmica depende da diferença de temperatura entre a solução de soda cáustica e do coeficiente global de transferência de calor.

Como as temperaturas da solução e da água diminuem com o tempo, a carga térmica no tanque T1 também diminui como mostra a Figura 48. Como já foi comentado, a solução de soda cáustica têm o tanque T1, possui um valor fixo de temperatura, o que não acontece com os outros tanques, pois dependem do que ocorre com o antecedente. Inicialmente, a carga térmica no tanque T2, têm um pequeno crescimento devido ao aumento, nesse período, da temperatura da água. Após um certo tempo, aproximadamente, 50000 s, a quantidade de calor começa a diminuir, porque o coeficiente global se torna um fator mais predominante do que a diferença de temperatura. Já no tanque T3, a carga térmica aumenta ao longo do tempo como mostra a Figura 47. A temperatura de entrada da água da torre de resfriamento no tanque T3 é um valor fixo igual a 29,4 °C, então, como a temperatura da solução aumenta com o tempo na entrada deste tanque, a diferença de temperatura entre a solução de soda cáustica e a água na serpentina cresce com o tempo. Neste tanque, o fator predominante é a diferença de temperatura.

Ainda observando a Figura 48, verifica-se que a diferença de temperatura é mais preponderante em relação ao coeficiente global de transferência de calor nos tanques T4 e T5, pois a carga térmica aumenta em função do tempo.

No período inicial de funcionamento dos tanques T6 e T7, a carga térmica diminui em função do tempo, devido a pequena resistência formada nesse intervalo de tempo, fazendo com

que a solução se resfrie bastante, diminuindo a diferença de temperatura entre a soda cáustica e a água gelada. Após esse período, em torno de 50000 s, a variação da carga térmica em função do tempo, torna-se semelhante a dos tanques T4 e T5, devido a mesma causa.

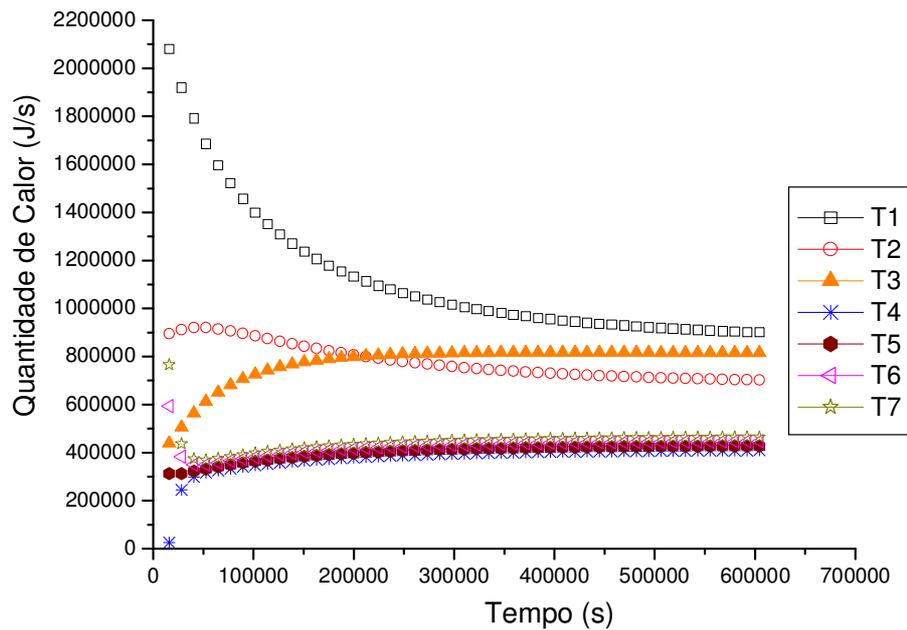


Figura 48 – Quantidade de calor nos tanques em função do tempo com τ igual a 200000 s

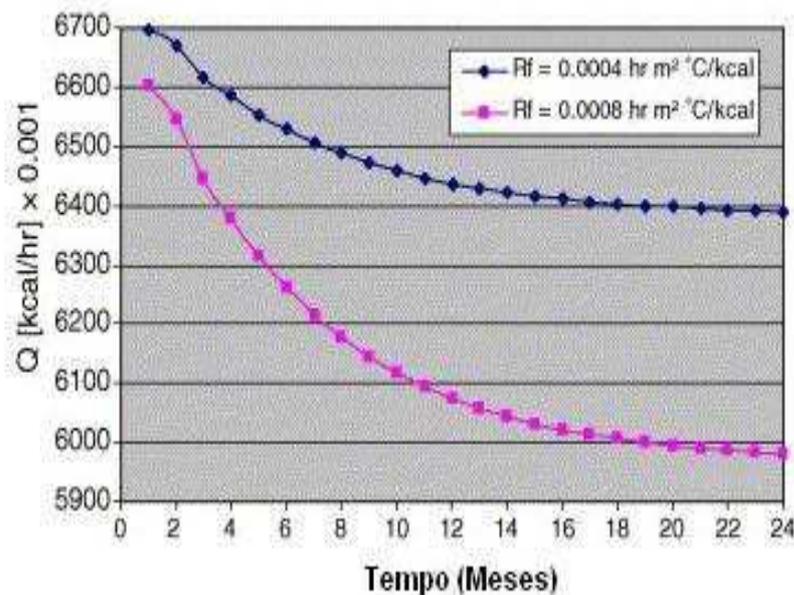


Figura 49 – Quantidade de calor no trocador E-4105 da Planta Khorasan Petroquímica para resistências (R_f) devido à incrustação (SANAYE e NIROOMAND, 2007)

A Figura 49 mostra como a carga térmica varia no trocador de calor E-4105 da unidade Urea na planta Khorasan Petroquímica, para diferentes R_f , o equivalente ao R_d^∞ deste trabalho. Pode-se verificar que o comportamento da carga térmica do E-4105 em função do tempo é semelhante ao do tanque T1 (Figura 48), devido a mesma causa que foi comentada para a temperatura da água. Assim, como o tanque T1 é o equipamento de troca térmica inicial no sistema de resfriamento de soda cáustica da BRASKEM, da mesma maneira o E-4105 tem essa posição inicial na unidade Urea.

4.2.4 Estudo da Espessura da Camada de Incrustação

Baseado na descrição sobre condutividade térmica e isolamento térmico, nas seções 2.2.2 e 2.2.3, respectivamente e no modelo de incrustação assintótica com os valores de R_d^∞ e τ definidos até o momento, será introduzido nesta seção um estudo de previsão da espessura da camada de incrustação formada nas serpentinas dos tanques. A espessura da camada de incrustação é calculada pela equação (3.14).

Outro valor calculado e comparado com a espessura da camada de incrustação é o do isolamento crítico, onde ocorre a perda máxima de calor, a partir da equação (2.13).

Foram utilizados os valores de condutividade térmica de substâncias incrustantes da Tabela 2. Escolheu-se o maior e o menor valor de condutividade da Tabela 2. O menor valor é $0,23 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$, enquanto, o maior é $1,16 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$. A partir destas condutividades foram obtidos os valores mostrados nas Figuras 50 e 51.

Os valores da Tabela 2 não têm informações suficientes para descrever a condutividade térmica das substâncias existentes no processos de resfriamento da BRASKEM, descritas no Apêndice A. Devido a essa situação, este estudo tem por finalidade adquirir dados para prever o possível comportamento de formação da camada de incrustação nos tanques.

Observa-se nas Figuras 50 e 51, o crescimento assintótico da espessura da camada de incrustação com o tempo. A maior espessura ocorre devido ao maior R^{Inf} , o mesmo que R_d^∞ . Verifica-se que os valores atingidos pela espessura de incrustação em relação ao da espessura crítica é bastante rápida como é mostrado nas Figuras 50 e 51. A aproximação da espessura de incrustação do seu valor máximo, faz com que a diferença em relação a crítica seja bastante elevada.

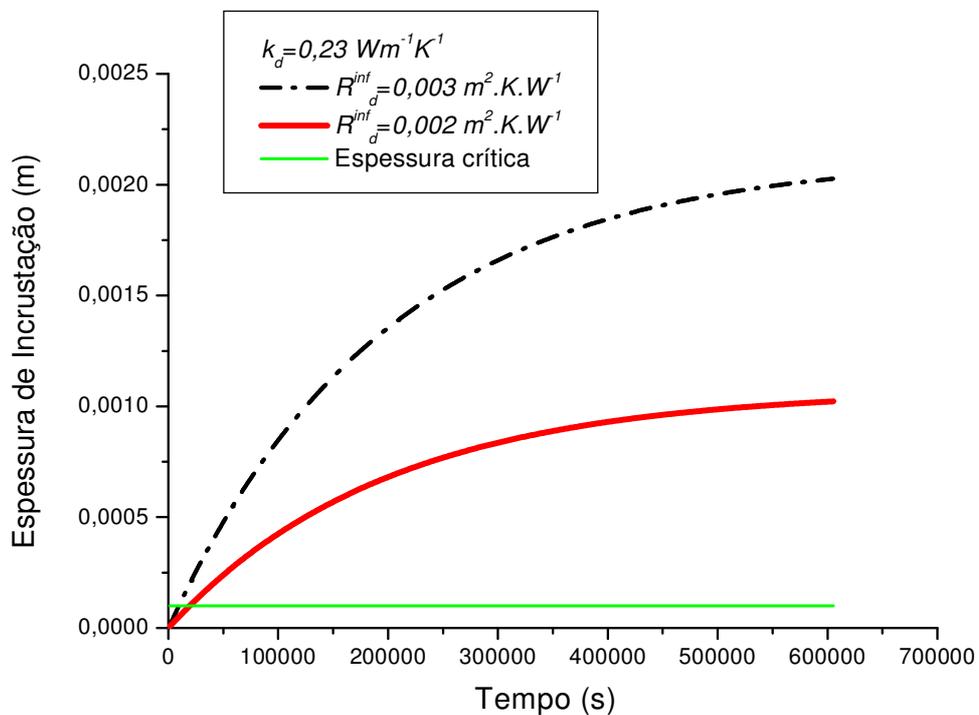


Figura 50 – Variação da espessura de incrustação com o tempo para $k_d = 0,23 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$

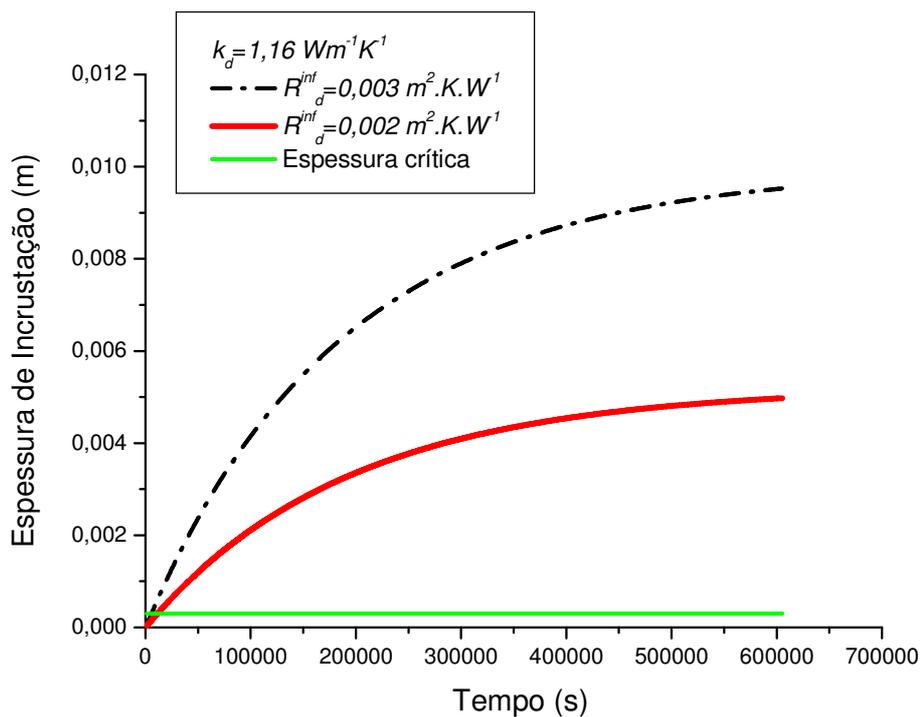


Figura 51 – Variação da espessura de incrustação com o tempo para $k_d = 1,16 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$

4.3 Terceira Etapa: Modelagem da Limpeza nos Tanques

Na primeira simulação, utilizou-se o período e a seqüência de limpezas feitas atualmente pela BRASKEM. O ciclo de limpeza começa após o primeiro dia de operação. É lavado um tanque por dia conforme a seqüência que pode ser vista na Tabela 7.

Tabela 7 – Ciclo de limpezas dos tanques de resfriamento feito pela BRASKEM

dias \ tanque	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16
1																
2																
3																
4																
5																
6																
7																
limpeza	0	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1

Segundo Braga Jr. (2001), o ciclo de cada tanque é de 7 dias, sendo que 6,25 dias operando e 0,25 dias ou 6 horas em lavagem. Atualmente a temperatura de saída chega até 36 °C quando apenas 6 tanques estão operando. Devido a estas informações, o tempo de limpeza em cada tanque será o atual que a BRASKEM faz a limpeza dos tanques.

Os dados obtidos nas etapas anteriores foram obtidos pelo programa em Fortran-90 (Apêndice C) em várias etapas de simulação. Para que a simulação de vários dias fosse feita numa única etapa levando em conta os intervalos de limpeza, o programa foi recodificado para MATLAB (Apêndice D).

Os resultados da Figura 52, foram obtidos com os valores de R_d^∞ do teste 3 e τ igual a 200000 s, utilizando os dados sobre a limpeza, conforme reportado por Braga Jr. (2001), e com o ciclo de limpezas estabelecido na Tabela 7.

A Figura 52 mostra uma periodicidade da temperatura da solução na saída do último tanque do processo, esse tanque pode ser o T7, ou na maioria das vezes, o T6. Quando um destes dois tanques sai do processo para a limpeza, atinge-se os valores mais elevados de temperatura da solução na saída do processo de resfriamento. Os tanques T6 e T7 são os tanques utilizados como entrada de água gelada no processo, que causa um grande efeito de resfriamento.

Observando a Figura 52, a temperatura da solução na saída do sistema de resfriamento, atinge um valor mais elevado quando o tanque T6 está em limpeza, porque o T7 ainda não foi limpo naquele ciclo.

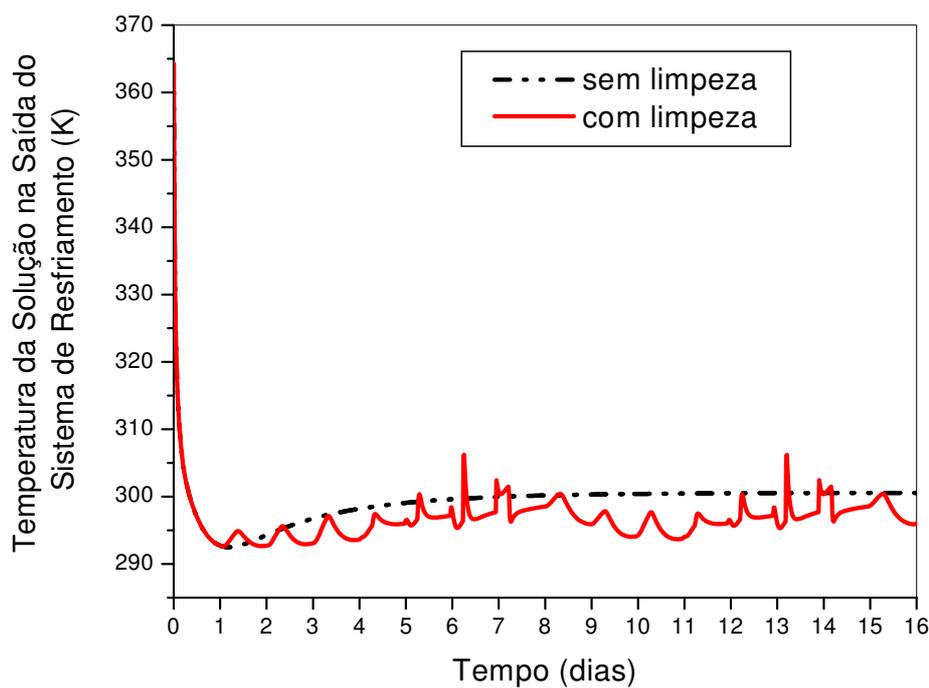


Figura 52 – Temperatura da solução na saída do processo para a operação em vários dias com

R_d^∞ pequeno

Quando não ocorre limpeza, a temperatura da solução atingida na saída do processo é igual ao valor ideal, o que não deve acontecer, porque espera-se que a resistência atinja valores tão elevados, caso não haja limpeza, aumentando bastante a temperatura da solução. Dessa maneira, o modelo de incrustação precisa ser reformulado.

Nesse novo modelo, os valores de R_d durante o ciclo de limpeza são praticamente iguais ao do anterior, mas os valores de R_d^∞ são aumentados, assim como o de τ . Para os tanques T1 e T2, R_d^∞ é igual a $7 \text{ m}^2 \cdot \text{K} \cdot \text{W}^{-1}$ e para os demais tanques, $4 \text{ m}^2 \cdot \text{K} \cdot \text{W}^{-1}$. O valor de τ é igual a $8,64 \cdot 10^{-9}$. A partir desse modelo foram obtidos os resultados mostrados na Figura 53.

Comparando as Figuras 52 e 53, a periodicidade e as variações de temperatura da solução na saída do sistema de resfriamento são semelhantes. No caso em que não ocorre limpezas, a

temperatura da solução cresce em valores muito elevados em relação ao que ocorre no ciclo de limpezas.

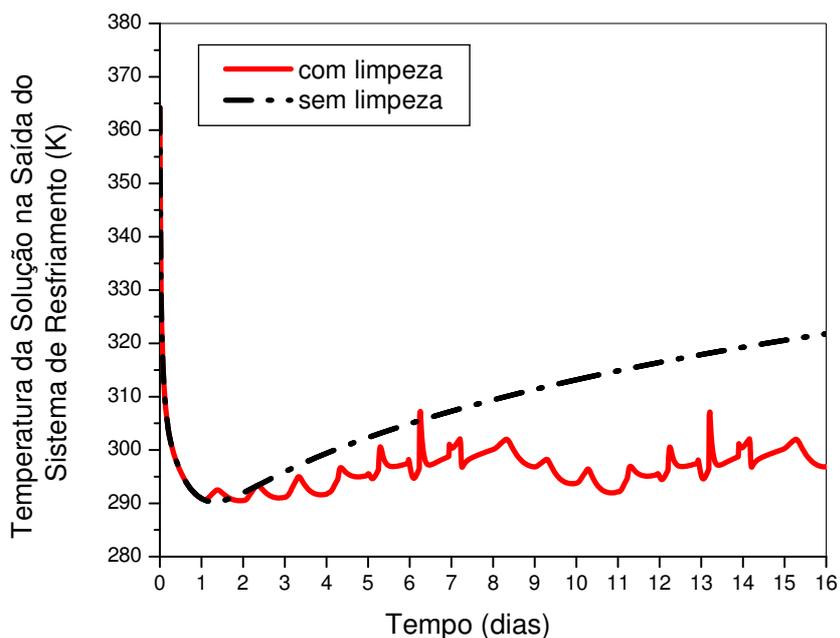


Figura 53 – Temperatura da solução na saída do processo para a operação em vários dias com R_d^∞ elevado

4.4 Quarta Etapa: Otimização da Limpeza nos Tanques via Algoritmos Genéticos

Com o desenvolvimento do modelo assintótico de incrustação e o estabelecimento de período de paradas de tanques para serem limpos, surgiu o interesse de verificar novas formas de limpeza, tanto referente à ordem de limpeza quanto em relação ao período em que isso deve ocorrer. Devido à grande quantidade de soluções existentes, uma técnica de busca e procura é necessária. E a técnica utilizada é o algoritmo genético, definido na seção 2.3.6. A função de avaliação é a função objetivo descrita na seção 3.3. As constantes da função objetivo, assim como os parâmetros referentes à algoritmos genéticos foram também mostrados na seção 3.3.

O modelo de resfriamento foi simplificado para diminuir o esforço computacional, uma vez que a finalidade principal desta etapa é a otimização das limpezas dos tanques. Ele foi simplificado, considerando as propriedades de fluido constante. Para realizar as simulações são utilizados os subprogramas do Apêndice E.

As taxas de cruzamento e mutação são modificadas de acordo com as simulações da Tabela 8.

Tabela 8 – Simulações modificando a taxa de cruzamento e a de mutação

Simulação	Taxa de cruzamento	Taxa de Mutação
S1	50%	50%
S2	30%	70%
S3	70%	30%
S4	6%	94%
S5	94%	6%

As Figuras 54, 56, 58, 60 e 62 mostram a funcionalidade dos tanques durante 16 dias, referentes aos resultados obtidos pela simulações da Tabela 8. O valor 0 indica que o tanque está fora de operação, enquanto 1, ele está operando. Os perfis de temperatura na saída dos tanques variando com o tempo obtidos a partir das simulações da Tabela 8 podem ser observados nas Figuras 56, 58, 60, 62 e 64.

Verificando a Figura 54, o quadro de limpezas obtido pela simulação S1 tem um total de 26 limpezas em 16 dias. Isso em termos reais não é muito bom, pois está muito acima do número de limpezas que devem ocorrer na seqüência normal da BRASKEM.

Comparando as Figuras 54, 56, 58 e 62, é possível obter os seguinte valores para o número total de limpezas durante 16 dias:

- S1: 26 limpezas;
- S2: 18 limpezas;
- S3: 18 limpezas;
- S4: 22 limpezas;
- S5: 18 limpezas.

Observa-se que S1 e S4 apresentaram um número maior de limpezas em comparação com as outras simulações.

A Figura 54 mostra que o tanque T6 foi limpo seis vezes, o T7 não foi limpo nenhuma vez durante os 16 dias no quadro obtido pela simulação S1, enquanto quatro tanques foram limpos no mesmo dia.

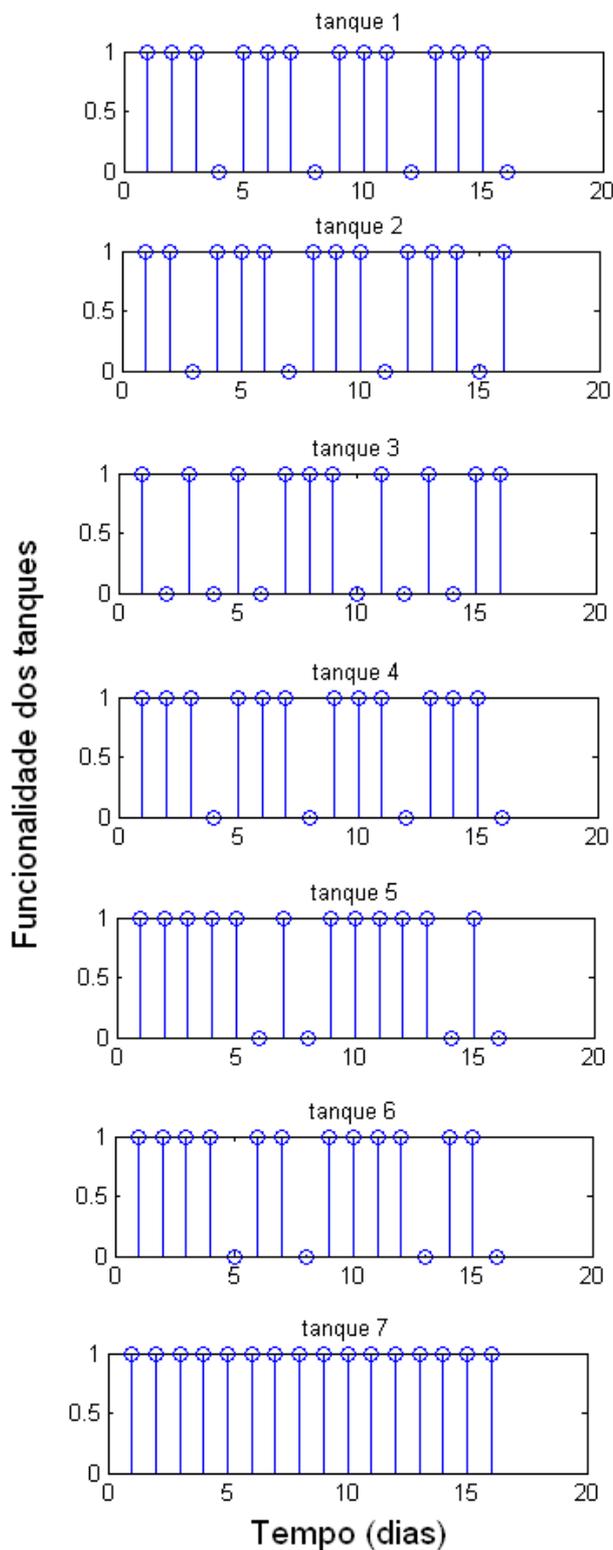


Figura 54 – Funcionalidade dos tanques com o tempo (S1)

Observa-se na Figura 55, as variações de temperatura na saída dos tanques na operação obtida através da simulação S1. Os picos são atingido durante o momento em que um tanque sai da operação para ser limpo (Figuras 57, 59, 61 e 63). Quando um tanque sai da operação, os subprogramas do Apêndice E fazem os cálculos de forma que a solução entra do tanque que está sendo limpo sem trocar calor.

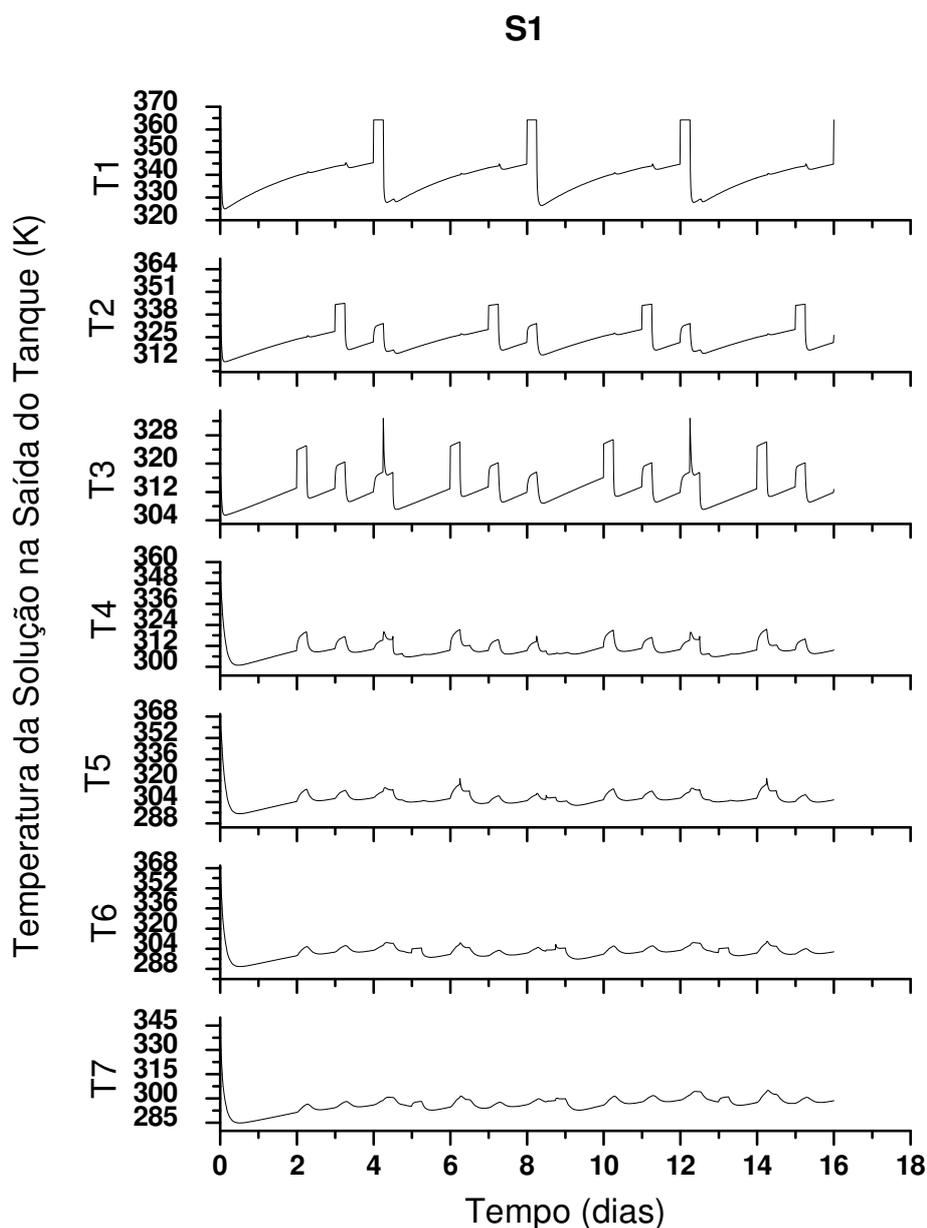


Figura 55 – Temperatura da solução na saída dos tanques durante a simulação S1

A Figura 56 mostra a funcionalidade dos tanques com o tempo obtido a partir da simulação S2. Ocorreram 18 limpezas em 16 dias, e todos os tanques foram limpo durante esse período. Os tanques que mais saíram para limpeza foram os tanques T1 e T2.

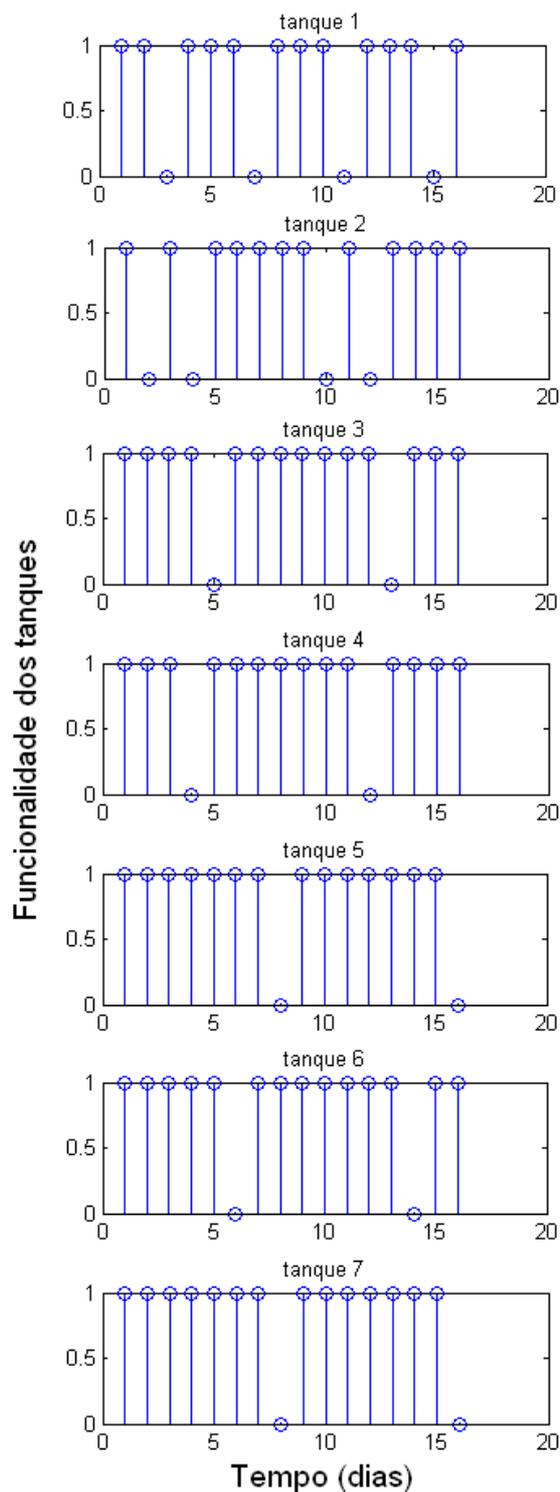


Figura 56 – Funcionalidade dos tanques no período de operação (S2)

Os tanques que são limpos no mesmo dia, não saem do processo ao mesmo tempo, mas em intervalos diferentes, portanto o número máximo de tanques que pode ser limpo durante 24 horas é 4. Como mostra a Figura 56, apenas no oitavo e no décimo sexto dia ocorre limpeza de mais de um tanque, neste caso, dois tanques (T5 e T7).

O perfil de temperatura da solução na saída dos tanques pode ser observado na Figura 57. A temperatura assume valores constantes neste gráfico quando os tanques estão sendo limpo, isso ocorre principalmente nos tanques T1, T2 e T3 em que as soluções estão mais aquecidas.

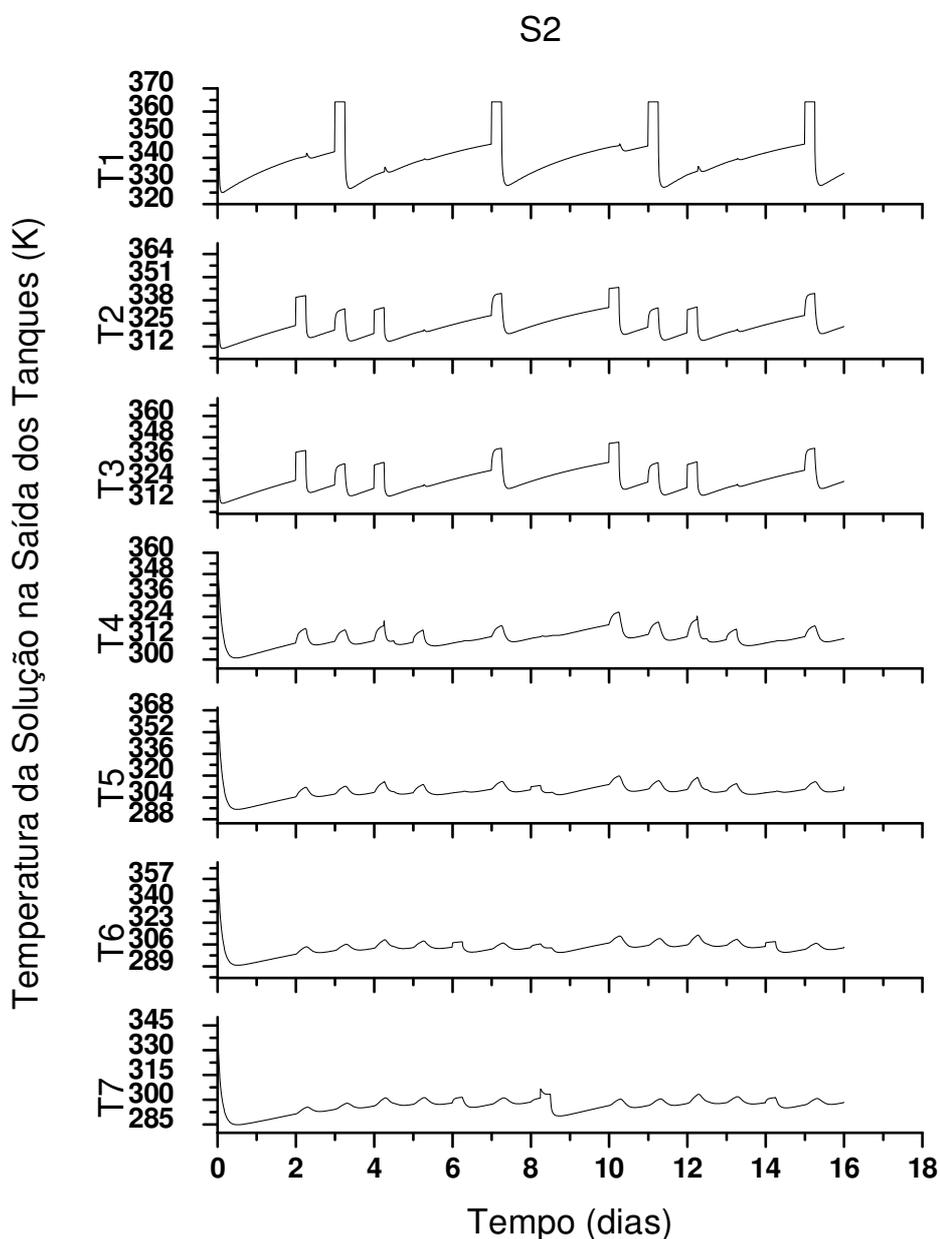


Figura 57 – Temperatura da solução na saída dos tanques durante a simulação S2

A simulação S3 mostra um quadro de limpezas, cujo total é igual 18. O tanque que mais foi submetido a limpeza é o primeiro, quatro vezes. Isso pode ser verificado na Figura 58.

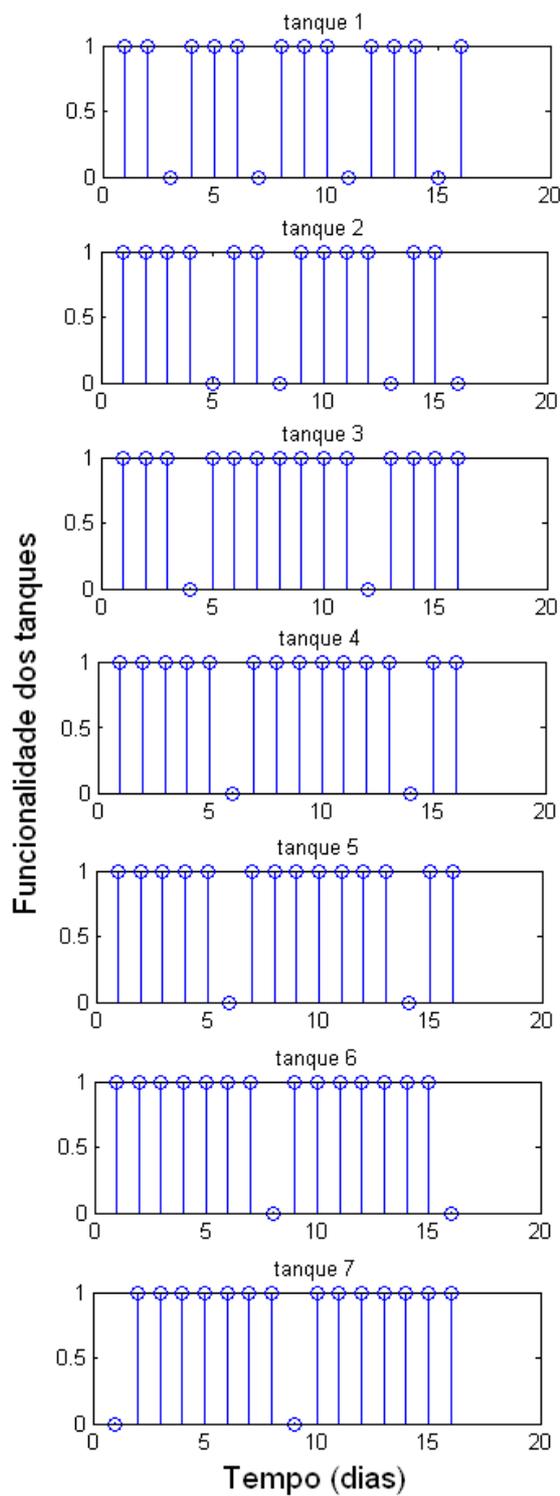


Figura 58 – Funcionalidade dos tanques no período de operação (S3)

A variação de temperatura nos tanques para a simulação S3 pode ser verificada na Figura 59. Apenas no tanque T1 é que a quantidade de picos igualou-se ao número de limpezas deste equipamento. Os perfis dos demais tanques mostram que os picos além de dependerem do seu número de limpezas, também podem ser formados pela limpeza de tanques anteriores. O número de picos aumenta ou permanece constante de um tanque para outro. Isso pode ser observado em todos os perfis obtidos a partir das simulações da Tabela 8.

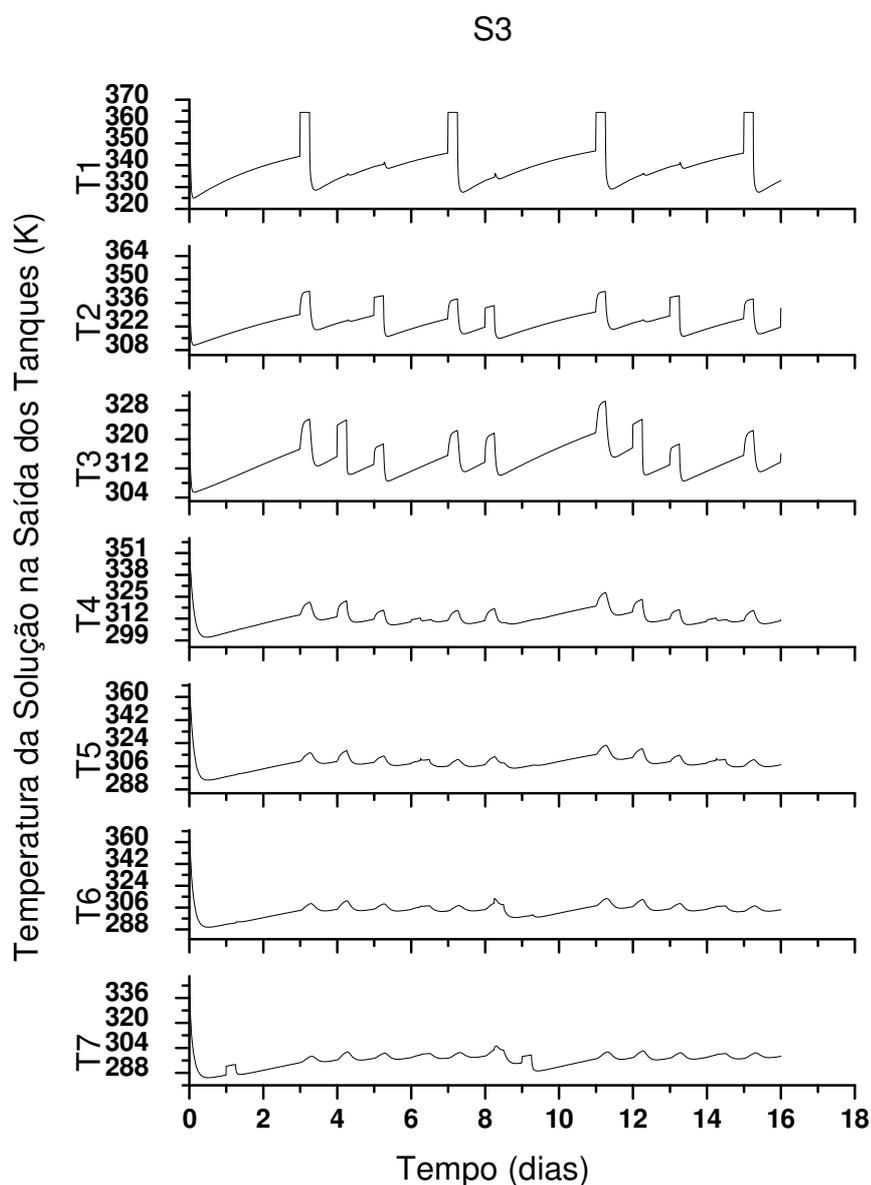


Figura 59 – Temperatura da solução na saída dos tanques durante a simulação S3

Observando a Figura 60, o tanque T4 apresenta o maior número de limpezas com valor igual a 6, num total de 22, assim como o quadro obtido na simulação S1.

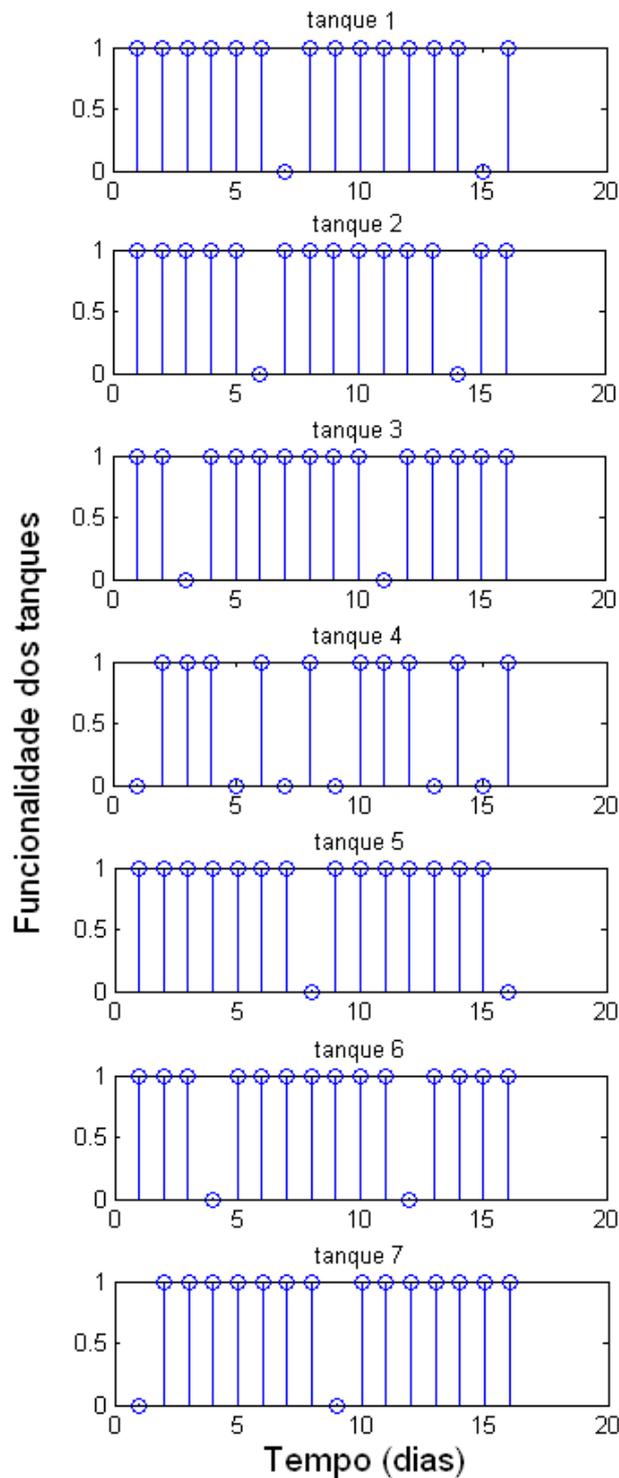


Figura 60 – Funcionalidade dos tanques em relação ao tempo de operação (S4)

Como o tanque T1 foi limpo apenas duas vezes, o número de picos no perfil apresentado para temperatura da solução neste tanque, também foi igual a dois (verifique a Figura 61).

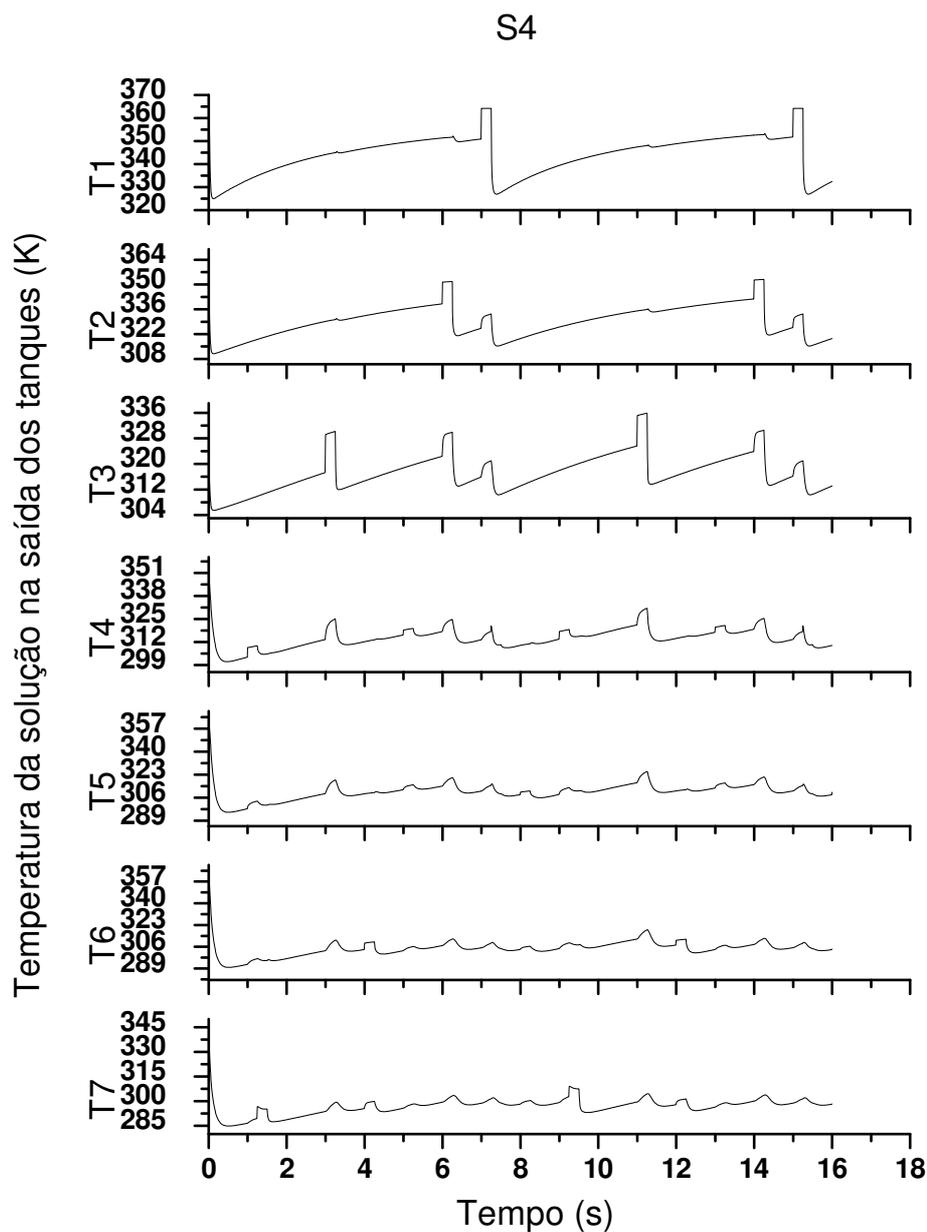


Figura 61 – Temperatura da Solução na Saída dos Tanques durante a simulação S4

O número total de limpezas nos tanques de resfriamento em relação ao resultado da simulação S5 é 18 (observe a Figura 62). Os tanques que mais vezes deixaram o processo são o T1, T3 e o T6. Eles foram limpo quatro vezes. Nesta simulação, o tanque T5 não foi limpo.

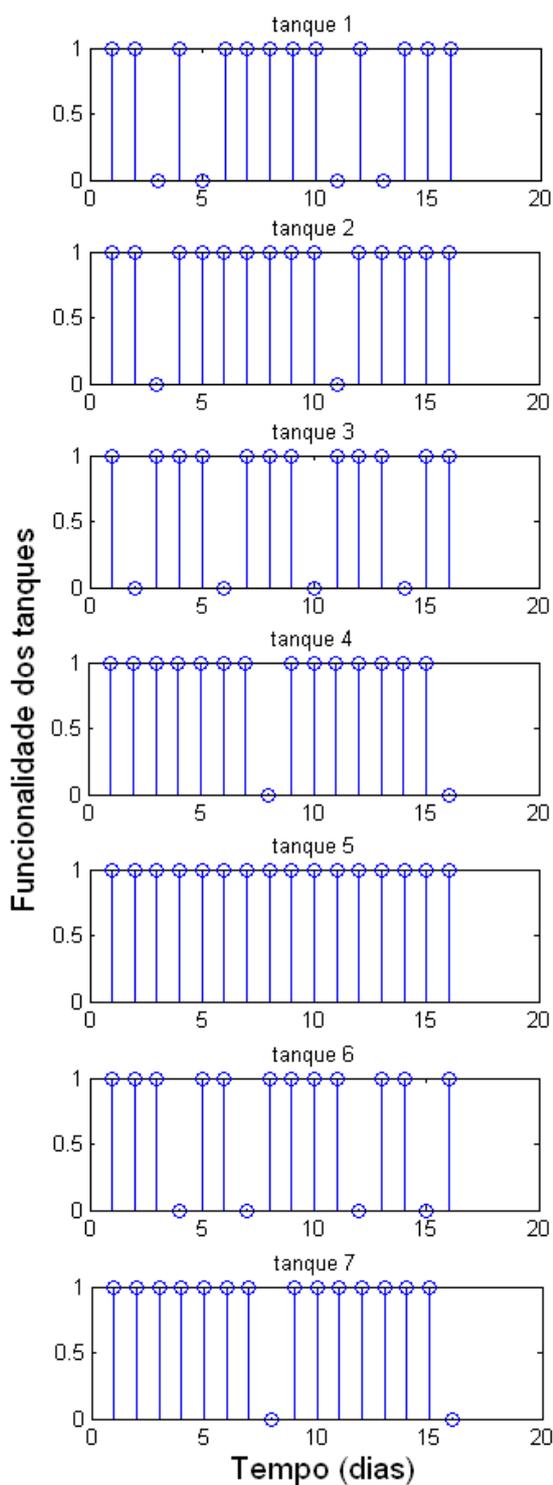


Figura 62 – Funcionalidade dos tanques no período de operação (S5)

As variações de temperatura da solução nos tanques para o resultado obtido na simulação S5 são mostradas na Figura 63.

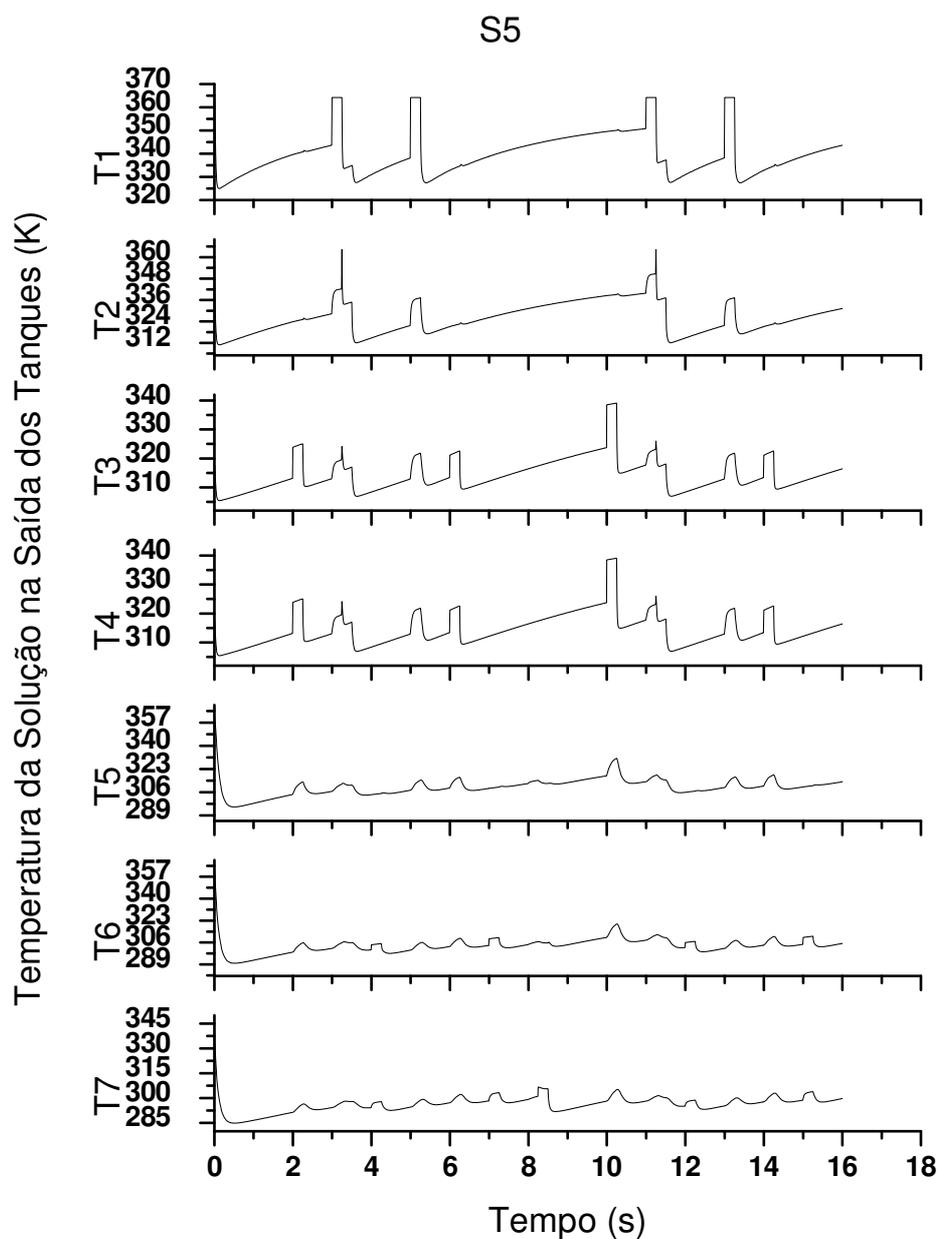


Figura 63 – Temperatura da Solução na Saída dos Tanques durante a simulação S5

Foi comentado nos gráficos de funcionalidade dos tanques, o número total de limpezas durante a operação, a quantidade de vezes que um mesmo tanque foi limpo e foram mostrados os perfis de temperatura para cada funcionalidade destes tanques. A função avalia o desempenho dos resultados obtidos pelas simulações da Tabela 8. Observou-se nos resultados referentes a funcionalidade dos tanques, que quando um deles não é limpo durante os 16 dias, outra acaba

deixando a operação para limpeza várias vezes. A distribuição regular de limpezas entre os tanques é um fator tão importante quanto o número total de limpezas.

A função objetivo além de ser usada para escolher os melhores indivíduos numa determinada simulação, ela pode ser utilizada para comparar os resultados entre elas através de seus valores máximo, médio e mínimo para cada geração de indivíduos formados e são representados pelas Figuras 64, 65 e 66, respectivamente.

O programa elimina os indivíduos com valores mais altos obtidos a partir da função objetivo de uma geração para outra, pois eles podem ser formados, principalmente por mutação. Apesar disso, de uma geração para outra, pode aparecer um indivíduo com um valor mais alto para a função objetivo, como mostra a Figura 64.

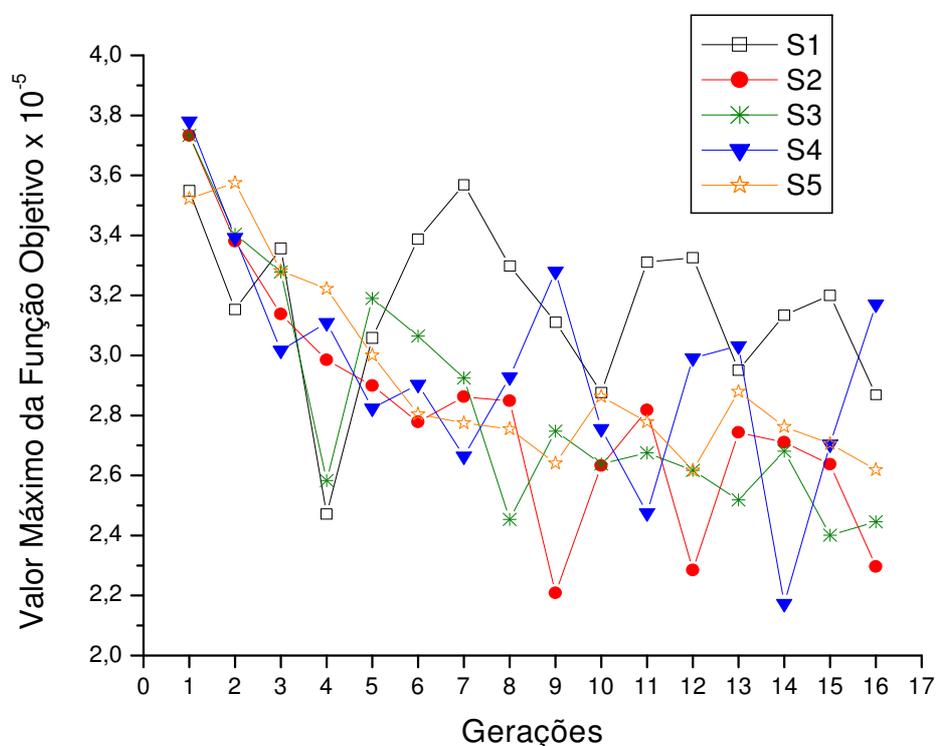


Figura 64 – Valor máximo da função objetivo a cada geração

A mutação é responsável pela maior variabilidade genética de uma geração para outra, dessa maneira pode-se observar na Figura 64, uma grande variação de valores nas simulações que possuem uma grande taxa de mutação.

Os valores médio mostrados na Figura 65 são obtidos pelas médias das funções objetivo de cada indivíduo da população criada naquela determinada geração.

Observa-se na Figura 65 que os menores valores médios foram apresentados na simulação S1. Comparando as Figuras 64 e 66, verifica-se que na décima sexta (geração máxima de indivíduos), a simulação S2 apresenta tanto o menor valor mínimo quanto o máximo em relação a S1. Provavelmente, S1 deve ter uma maior quantidade de indivíduos mais próximos do valor mínimo em comparação a S2.

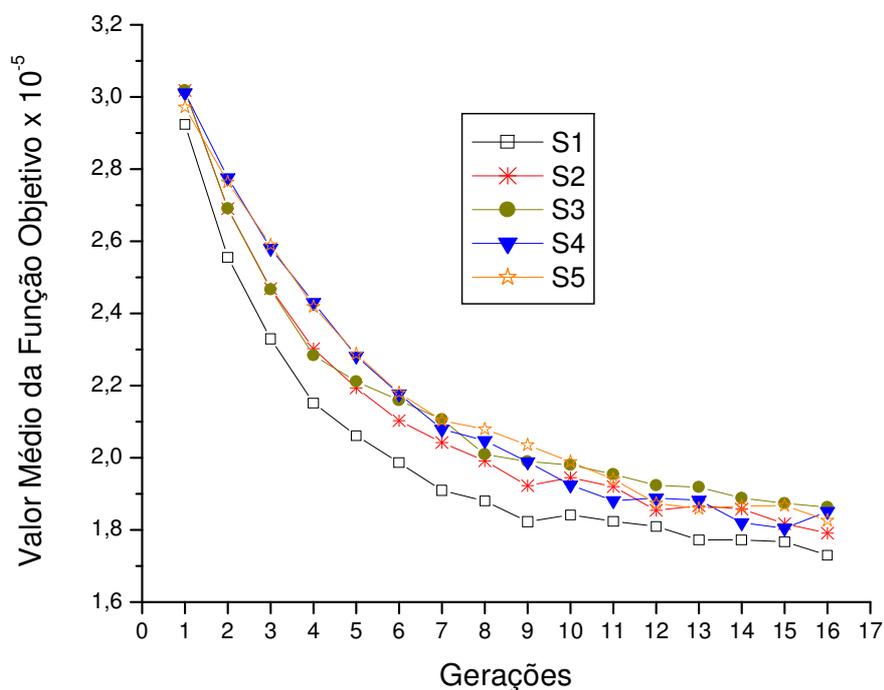


Figura 65 – Valor médio da função objetivo a cada geração

Atingir o valor mínimo da função objetivo é a finalidade da otimização deste trabalho. Essa finalidade pode ser analisada na Figura 66. Pode-se observar que o valor mínimo de uma geração para outra, obtido pelas simulações apresentadas diminui ou permanece constante. Isso acontece porque os 50 indivíduos com valores mais altos são eliminados de uma geração para outra.

Os resultados obtidos nas simulações S4 e S5 mostram uma constância no valor mínimo entre a décima e a última gerações criadas. S4 têm uma alta taxa de mutação e por causa disso, mostra uma grande variabilidade no valor máximo, contudo isso não contribui na geração de novos mínimos (Figura 66).

A simulação S5 têm uma alta taxa de cruzamento, o que pode provocar uma convergência para um valor mínimo local, o que pode ter acontecido neste problema.

O melhor valor foi apresentado pela simulação S2 (Figura 66). Observando as Figuras 56 e 57 que mostram a funcionalidade e os perfis de temperatura nos tanques obtidos através de S2, respectivamente, verifica-se que este quadro de limpeza obtido foi melhor em comparação com os outros. O número total de limpezas foi 18 (valor mínimo) entre as simulações apresentada e teve uma distribuição regular de limpezas entre os tanques, justificando uma função objetivo com valor mais baixo na décima sexta geração em comparação com as outras simulações.

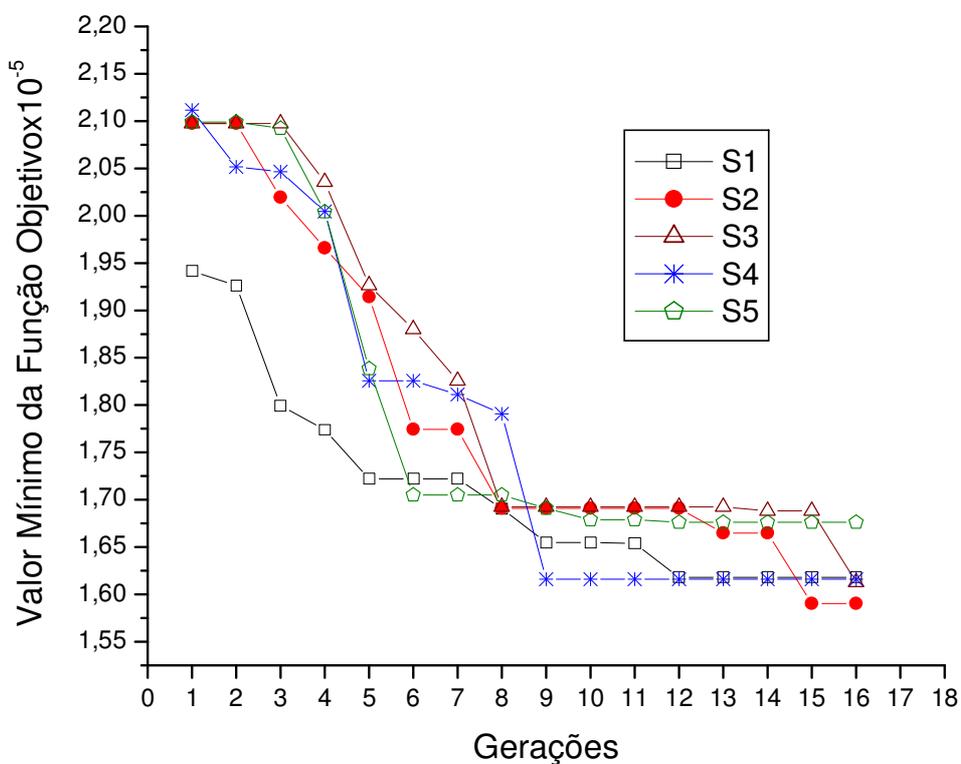


Figura 66 – Valor mínimo da função objetivo a cada geração

5. CONCLUSÕES E SUGESTÕES FUTURAS

A partir dos dados obtidos, foi possível estudar melhores configurações para o sistema de resfriamento com o fator de incrustação. Utilizando o fator de incrustação, observou-se que a combinação C4, que utiliza água gelada nova entrando no tanque T3 e no T7, é a mais eficiente entre as utilizadas neste estudo.

E através do desenvolvimento do modelo para taxa de incrustação dependente do tempo (curvas assintóticas) é possível encontrar a espessura de incrustação formada em torno da serpentina e fazer simulações de vários dias com limpeza dos tanques, obtendo perfis de temperatura da solução, principalmente na saída do último tanque do processo.

Com o modelo desenvolvido tornou-se possível aplicar o algoritmo genético como técnica de otimização do quadro de limpeza dos tanques. Entre as simulações que utilizaram algoritmos genéticos, na simulação S2 que utiliza uma taxa de cruzamento de 30% e a de mutação igual a 70% foi obtido um melhor quadro de limpezas uma vez que seu desempenho foi avaliado pela função objetivo. Contudo não foi possível neste trabalho obter dados reais em relação ao funcionamento de todos os dias dos sistema de resfriamento da BRASKEM.

Este trabalho obteve resultados e possui informações com finalidade de consultas que podem ser usadas em trabalhos futuros, podendo ser utilizados na continuação do estudo do sistema de resfriamento da BRASKEM, se os dados reais da planta estiverem disponíveis ou outros projetos da mesma natureza.

Em relação ao sistema de resfriamento estudado, os dados e a informações obtidas podem auxiliar nos seguintes desenvolvimentos:

- Obtenção do modelo cinético de cristalização que provoca a incrustação em torno das serpentinas;
- Determinação da espessura real de camada incrustante com o tempo;
- Aplicação de algoritmos genéticos em outros objetivos de otimização (dimensionamento, configurações do sistema, combinações);
- Aplicação de controle de processos utilizando algoritmos genéticos.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ABOISSA. Disponível em: <<http://equipamentos.aboissa.com.br/detail.php?siteid=617>> acessado em 11 de abril de 2008.

AHMAD, D. K. *Condition Monitoring of a Heat Exchanger under Milk Fouling. Master's Thesis*. Imperial College of Science Technology and Medicine, 1997, *apud* GEORGIADIS, M.C.; PAPAGEORGIU, L.G.; MACHIETTO, S. *Optimal Cleaning Policies in Heat Exchanger Networks Under Rapid Fouling*, Industrial and Engineering Chemistry Research, Vol. 39, 441-454, 2000.

ALGORITMOS GENÉTICOS, disponível em: <<http://www.icmc.usp.br/%7Eandre/research/genetic/>>, acessado em 14/09/2007.

ALTINTEN, A.; KETEVANLIOĞLU, F.; ERDOĞAN, S.; HAPOĞLU, H.; ALPBAZ, M. *Self-tuning PID Control of Jacketed Batch Polystyrene Reactor Using Genetic Algorithm*, Chemical Engineering Journal, Vol. 138, 490-497, 2008.

ANTIINCRUSTANTES. Disponível em: <<http://www.biocane.com.br/produtos/detalhes.php?segmento=1&classe=antiincrustantes>> acessado em 17 de abril de 2008.

ANGELINE, P. J. *Evolution Revolution: An Introduction to the Special Track on Genetic and Evolutionary Programming*, IEE Expert, Vol. 10 (3), 6-10, 1995 *apud* GREFF, D.J.; ALDRICH, C. *Empirical Modeling of Chemical Process Systems with Evolutionary Programming*, Computers and Chemical Engineering, Vol. 22 (7-8), 995-1005, 1998.

ARANTES, M. B.; OLIVEIRA, G. T. S.; SARAMAGO, S. F. P. *Evolução Diferencial Aplicada à Solução de Alguns Problemas de Engenharia de Produção*, disponível em: <http://www.famat.ufu.br/revista/revistamai2006/artigos/Artigo_Matheus_Giovana_Sezimaria.pdf>, acessado em 28/05/2008.

BARBOZA, A.O. *Simulação e Técnicas da Computação Evolucionária Aplicadas a Problemas de Programação Linear Inteira Mista*, Tese de Doutorado, Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Curitiba, 2005.

BARCELLOS, J.C.H. *Algoritmos Genéticos Adaptativos: Um Estudo Comparativo*, Dissertação de Mestrado, USP, São Paulo, 2000.

BOOZARJOMEHRY, R.B., MASOORI, M. *Which Method is Better for the Kinetic Modeling: Decimal Encoded or Binary Genetic Algorithm?* Chemical Engineering Journal, Vol. 130, 29-37, 2007.

BJÖRK, K.M., WASTERLUND, T. *Global Optimization of Heat Exchanger Network Synthesis Problems with and without the Isothermal Mixing Assumption*. Computers and Chemical Engineering, Vol. 26, 1581-1593, 2002.

BRAGA JR., L. *Modelagem e Otimização de um Sistema de Soda Cáustica (Comunicação Pessoal)*, 2001.

BRAHIM, F.; AUGUSTIN, W.; BOHNET, M. *Numerical Simulation of the Fouling on Structured Heat Transfer Surfaces (Fouling)*, disponível em: <<http://services.bepress.com/eci/heatexchanger>>, acessado em 27/03/2008.

CASADO, E. *Model Optimizes Exchanger Cleaning*. Hydrocarbon Process. 1990 apud GEORGIADIS, M.C.; PAPAGEORGIU, L.G.; MACHIETTO, S. *Optimal Cleaning Policies in Heat Exchanger Networks Under Rapid Fouling*, Industrial and Engineering Chemistry Research, Vol. 39, 441-454, 2000.

CASTILHO, V.C. *Otimização de Componentes de Concreto Pré-Moldado Protendidos Mediante Algoritmos Genéticos*. Tese de Doutorado, USP, São Carlos, 2003.

CHEN, D.; YANG, S.; LUO, X.; WEN, Q.; MA, H. *An Explicit Solution for Thermal Calculation and Synthesis of Superstructure Heat Exchanger Networks*, Chinese Chemical Journal, Vol. 15, Issue 2, 659-661, March 2007.

CHILTON, T. H.; DREW, T. B.; JEBENS, R.H. *Industrial and Engineering Chemistry*, 36, Vol. 50, 510-516, 1944 *apud* KERN, D.Q. *Processos de Transmissão de Calor*, Traduzido por Adir M. Luiz, Guanabara Koogan, Rio de Janeiro, 1987.

COELHO, L. S. *Identificação e Controle de Processos Multivariáveis via Metodologias Avançadas e Inteligência Computacional*. Tese de Doutorado, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, 2000 *apud* FALCONE, M.A.G. *Estudo Comparativo entre Algoritmos Genéticos e Evolução Diferencial para Otimização de um Modelo de Cadeia de Suprimento Simplificada*, Dissertação de Mestrado, Pontifícia Universidade Católica do Paraná, Curitiba, 2004.

CONDUTIVIDADE TÉRMICA. Disponível em: < [http:// pt. wikipedia. org/ wiki/ Condutividade_t%C3%A9rmica](http://pt.wikipedia.org/wiki/Condutividade_t%C3%A9rmica) > acessado em 17 de abril de 2008.

COSTA, L.; OLIVEIRA, P. *Evolutionary Algorithms Approach to the Solution of Mixed Integer Non-Linear Programming Problems*, Computers and Chemical Engineering, Vol. 25, 257-266, 2001.

EDGARD, T.F.; HIMMELBLAU, D.M. *Optimization of Chemical Processes*, MacGraw-Hill International, United States of America, 1988.

EPSTEIN, N. *Optimum Evaporator Cycle with Scale Formation*, Canadian Journal of Chemical Engineering, vol. 57, 659-661, 1979 *apud* GEORGIADIS, M.C.; PAPAGEORGIOU, L.G.; MACHIETTO, S. *Optimal Cleaning Policies in Heat Exchanger Networks Under Rapid Fouling*, Industrial and Engineering Chemistry Research, Vol. 39, 441-454, 2000.

EPSTEIN, N. *Thinking About Heat Transfer Fouling: A 5*5 Matrix*, Heat Transfer Engineering, Vol. 4, pp. 43-56, 1983 *apud* PUGH, S.; HEWWITT, G. F.; MULLER-STEINHAGEN, H. O.

Fouling During the Use of Seawater as Coolant- The Development of a 'User Guide', 2003 ECI Conference on Heat Exchanger Fouling and Cleaning: Fundamentals and Applications, Paper 3, 3-19, 2004.

ESTEL, L.; BAGUI, F.; ABDELGHANI-IDRISSI, M.A. *Distributed State Estimation of a Counter Current Heat Exchanger Under Varying Flow Heat*, Computers and Chemical Engineering, Vol. 24, 53-60, 2000.

DEB, K. *Multi-Objective Optimization Using Evolutionary Algorithms*, John Willey & Sons, Chichester, England, 2001 *apud* FORMIGA, K. T. M.; CHAUDHRY, F. H. *Utilização de Algoritmos Evolucionários Multiobjetivos no Dimensionamento de Redes de Abastecimento de Água*, disponível em: < http://www.lenhs.ct.ufpb.br/html/downloads/serea/trabalhos/A35_16.pdf >, acessado em 15/09/2007.

DING, Q.; SMALL, G.W.; ARNOLD, M.A. *Genetic Algorithm-Based Wavelength Selection for the Near-Infrared Determination of Glucose in Biological Matrixes: Initialization Strategies and Effects of Spectral Resolution*, Analytical Chemistry, Vol. 70 (21), 4472-4479, November 1, 1998.

FOGEL, L. J.; OWENS, A. J.; E WALSH, M. J.; *Artificial intelligence through simulated evolution*. John Wiley and Sons, New York, USA, 1966 *apud* TAVARES, J.A.R. *Geração de Configurações de Sistemas Industriais com o Recurso à Tecnologia das Restrições e Computação Evolucionária*, Tese de Doutorado, Universidade do Minho, Porto, 2000.

FALCONE, M.A.G. *Estudo Comparativo entre Algoritmos Genéticos e Evolução Diferencial para Otimização de um Modelo de Cadeia de Suprimento Simplificada*, Dissertação de Mestrado, Pontifícia Universidade Católica do Paraná, Curitiba, 2004.

FONTAIN, E.; *Application of Genetic Algorithms in the Field of Constitutional Similarity*, Journal of Chemical Information and Computer Sciences, vol. 37 (6), 748-752, 1992.

FORMIGA, K. T. M.; CHAUDHRY, F. H. *Utilização de Algoritmos Evolucionários Multiobjetivos no Dimensionamento de Redes de Abastecimento de Água*, disponível em: <http://www.lenhs.ct.ufpb.br/html/downloads/serea/trabalhos/A35_16.pdf>, acessado em 15/09/2007.

FOULING IN HEAT EXCHANGERS, disponível em: <<http://www.dynamic-descaler.com/fouling.htm>>, acessado em 08/04/2008.

FOUST, A.S., WENZEL, L.A.; CLUMP, C.W.; MAUS, L.; Andersen, L.B. *Princípios das Operações Unitárias*, Segunda edição, Traduzido por Horácio Macedo, Livros Técnicos e Científicos, Rio de Janeiro, 1982.

FRAGA, E.S.; MATIAS, T.R.S. *Synthesis and Optimization of a Nonideal System Using a Parallel Genetic Algorithm*, Computers and Chemical Engineering, Vol. 20, S79-S84, 1996.

FREITAS, A. A., *Data Mining and Knowledge Discovery with Evolutionary Algorithms*, Berlin: Springer-Verlag, 2002 *apud* PAPPA, G.L. *Seleção de Atributos Utilizando Algoritmos Genéticos Multiobjetivos*, Dissertação de Mestrado, Pontifícia Universidade Católica do Paraná, Curitiba, 2002.

GALLI, M.R.; CERDÁ, J. *Synthesis of Structural-Constrained Heat Exchanger Networks- II Split Networks*, Computers and Chemical Engineering, Vol. 22 (7-8), 1017-1035, 1998.

GARRARD, A.; FRAGA, E.S. *Mass Exchanger Network Synthesis Using Genetic Algorithms*, Computers and Chemical Engineering, Vol. 22 (12), 1837-1850, 1998.

GEORGIADIS, M.C.; PAPAGEORGIOU, L.G.; MACHIETTO, S. *Optimal Cleaning Policies in Heat Exchanger Networks Under Rapid Fouling*, Industrial and Engineering Chemistry Research, vol. 39, 441-454, 2000.

GOLDBERG, D.E. *Genetic Algorithms in Search, Optimization and Machine Learning*, Reading, MA, 1989 *apud* GREFF, D.J.; ALDRICH, C. *Empirical Modeling of Chemical Process*

Systems with Evolutionary Programming, Computers and Chemical Engineering, Vol. 22 (7-8), 995-1005, 1998.

GOLDBERG, D.E. *Genetic Algorithms in Search, Optimization and Machine Learning*, Reading, MA, 1989 *apud* MARUO, M.H. *Projeto Automático Utilizando Algoritmos Genéticos Auto-adaptativos*, Dissertação de Mestrado, Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Curitiba, 2006.

GOLDBERG, D.E. *Genetic Algorithms in Search, Optimization and Machine Learning*, Reading, MA, 1989 *apud* TAVARES, J.A.R. *Geração de Configurações de Sistemas Industriais com o Recurso à Tecnologia das Restrições e Computação Evolucionária*, Tese de Doutorado, Universidade do Minho, Porto, 2000.

GOLDBARG, M.C.; GOLDBARG, E.F.G. *Transgenética Computacional: Uma Aplicação ao Problema Quadrático de Alocação*, Pesquisa Operacional, Vol. 22 (3), 359-386, julho a dezembro de 2002.

GOLDBARG, M.C.; GOLDBARG, E.F.G.; NETO, F.D.M. *Algoritmos Evolucionários na Determinação da Configuração de Custo Mínimo de Sistemas de Co-geração de Energia com Base no Gás Natural*, Pesquisa Operacional, Vol. 25 (2), 231-259, maio a agosto de 2005.

GROENWOLD, A.A.; STANDER, N.; SNYMAN, J.A. *A Regional Genetic Algorithm for Discrete Optimal Design of Truss Structures*, International Journal For Numerical Methods in Engineering, Vol. 44, 749-766, 1999.

GREFF, D.J.; ALDRICH, C. *Empirical Modeling of Chemical Process Systems with Evolutionary Programming*, Computers and Chemical Engineering, Vol. 22 (7-8), 995-1005, 1998.

GROSS, B.; ROOSEN, P. *Total Process Optimization in Chemical Engineering with Evolutionary Algorithms*, Computers and Chemical Engineering, Vol. 22, S229-S236, 1998.

GUO, Q.; WU, W.; QUESTIER, F.; MASSART, D.F.; BOUCON, C.; DE JONG, S. *Sequential Projection Pursuit Using Genetic Algorithms for Data Mining of Analytical Data*, Analytical Chemistry, Vol. 72 (13), 2846-2855, July 1, 2000.

HIMMELBLAU, D.M., BISCHOFF, K.B. *Process Analysis and Simulation: Deterministic Systems*, John Wiley & Sons, Inc, United States of America, 1968.

HINTERDING, R., *Representation, Mutation and Crossover Issues in Evolutionary Computation*, In: Proc. Conference on Evolutionary Computation, pp 916-923, 2000, *apud* PAPPA, G.L. *Seleção de Atributos Utilizando Algoritmos Genéticos Multiobjetivos*, Dissertação de Mestrado, Pontifícia Universidade Católica do Paraná, Curitiba, 2002.

INCROPERA, F.P., DEWWIT, D.P. *Fundamentos de Transferência de Calor e Massa*, Quarta edição, Traduzido por Sérgio Stamile Soares, Livros Técnicos e Científicos, Rio de Janeiro, 1998.

JUNG, Y.S.; KULSHRESHTHA, C.; KIM, J.S.; SHIN, N.; SOHN, K.S. *Sequential Projection Pursuit Using Genetic Algorithms for Data Mining of Analytical Data*, Chemistry of Materials, Vol. 19 (22), 5309-5318, 2007.

KERN, D.Q. *Processos de Transmissão de Calor*, Traduzido por Adir M. Luiz, Guanabara Koogan, Rio de Janeiro, 1987.

KIM, K.J.; KIM, K.M. *Growth Kinetics in Seeded Cooling Crystallization of 3-nitro-1,2,4-triazol-5-one in water-N-methylpyrrolidone*. Powder Technology, Vol. 122, 46-53, 2002.

KOZA, J. *Genetic Programming: on the Programming of Computers by Means of Natural Selection*. Cambridge, MA, MIT Press, 1992 *apud* MAIA JR., L.C.; BIANCHI, R.A.C.; *Usando Programação Genética Para Evoluir Agentes Jogadores de Futebol de Robôs*, disponível em: < <http://www.fei.edu.br/~rbianchi/publications/RevistaFEI2001.pdf> >, acessado em 28/04/2008.

KREITH, F. *Princípios da Transmissão de Calor*, 3^a edição, Traduzido por Eitaro Yamane, Otávio de Mattos Silveiras e Virgílio Rodrigues Lopes de Oliveira, Edgard Blücher, São Paulo, 1977.

LAVINE, B.K.; RITTER, J.; MOORES, A.J.; WILSON, M.; FARUQUE, A.; MAYFIELD, H.T. *Source Identification of Underground Fuel Spills by Solid-Phase Microextraction/High-Resolution Gas Chromatography/Genetic Algorithms*. Analytical Chemistry, Vol. 72 (2), 423-431, January 15, 2000.

LEBOREIRO, J.; ACEVEDO, J. *Processes Synthesis and Design of Distillation Sequences Using Modular Simulators: a Genetic Algorithm Framework*, Computers Chemical Engineering, Vol. 28, 1223-1236, 2004.

LEE, B.; REKLAITIS, G.V. *Optimal Scheduling of Cyclic Batch Processes for Heat Integration*. Computers Chemical Engineering, Vol. 19 (8), 907-931, 1995.

LI, Z.H.; HUA, B. *Modeling and Optimizing for Heat Exchanger Networks Synthesis Based on Expert system and Exergo-economic Objective Function*. Computers Chemical Engineering, Vol. 24, 1223-1228, 2000.

MACADAMS, W.H. *Heat Transmission*, 2^a edition,. McGraw Hill Book Company, New York, 1942 *apud* KERN, D.Q. *Processos de Transmissão de Calor*, Traduzido por Adir M. Luiz, Guanabara Koogan, Rio de Janeiro, 1987.

MAIA JR., L.C.; BIANCHI, R.A.C.; *Usando Programação Genética Para Evoluir Agentes Jogadores de Futebol de Robôs*, disponível em: < <http://www.fei.edu.br/~rbianchi/publications/RevistaFEI2001.pdf> >, acessado em 28/04/2008.

MAN, K. F.; TANG, K. S.; KWONG, S. *Genetic Algorithms: Concepts and Applications*, IEEE Transactions on Industrial Electronics, Vol. 43 (50), 519-534, 1996 *apud* FALCONE, M.A.G. *Estudo Comparativo entre Algoritmos Genéticos e Evolução Diferencial para Otimização de um*

Modelo de Cadeia de Suprimento Simplificada, Dissertação de Mestrado, Pontifícia Universidade Católica do Paraná, Curitiba, 2004.

MARGULIS, L. *Symbiotic Planet*, Basic Books, Nova York, 1998 *apud* GOLDBARG, M.C.; GOLDBARG, E.F.G.; NETO, F.D.M. *Algoritmos Evolucionários na Determinação da Configuração de Custo Mínimo de Sistemas de Co-geração de Energia com Base no Gás Natural*, Pesquisa Operacional, Vol. 25 (2), 231-259, maio a agosto de 2005.

MARKOWSKI, M.; URBANIEC, K. *Optimal Cleaning Schedule for Heat Exchangers in Heat Exchange Network*. Applied Thermal Engineering, Vol. 25, 1019-1032, 2005.

MARKOWSKI, M. *Reconstruction of a Heat Exchanger Network under Industrial Constraints-The Case of a Crude Distillation*. Applied Thermal Engineering, Vol. 20, 1535-1544, 2000.

MARUO, M.H. *Projeto Automático Utilizando Algoritmos Genéticos Auto-adaptativos*, Dissertação de Mestrado, Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Curitiba, 2006.

MICHALEWICZ, Z., *Genetic Algorithms + Data Structures: Evolution Programs*, Springer, 3rd ed., Nova Iorque, 1996 *apud* PAPPA, G.L. *Seleção de Atributos Utilizando Algoritmos Genéticos Multiobjetivos*, Dissertação de Mestrado, Pontifícia Universidade Católica do Paraná, Curitiba, 2002.

MOROWITZ, H.J. *Beginning of Cellular Life*, Yale University Press, New Haven, Conn, 1992 *apud* GOLDBARG, M.C.; GOLDBARG, E.F.G.; NETO, F.D.M. *Algoritmos Evolucionários na Determinação da Configuração de Custo Mínimo de Sistemas de Co-geração de Energia com Base no Gás Natural*, Pesquisa Operacional, Vol. 25 (2), 231-259, maio a agosto de 2005.

NAIR, N.; GOODMAN, J.M. *Structure Genetic Algorithms in Conformational Analysis*, J. Journal of Chemical Information and Computer Sciences, Vol. 38 (2), 317-320, 1998.

NUNES, C.A.M. *Descritivo da BRAKEM (Comunicação Pessoal)*, 2002.

NÝVLT, J.; HOSTOMSKÝ, J.; GIULIETTI, M. *Cristalização*, UFSCar, São Carlos, 2001.

ÖZIŞIK, M. N. *Transferência de Calor – Um Texto Básico*, Traduzido por Luis de Oliveira, Guanabara Koogan, Rio de Janeiro, 1990.

OSTROVSKY, G.M.; VOLIN, Y.M.; GOLOVASHKIN, D.V. *Optimization Problem of Complex System Under Uncertainty*. Computers Chemical Engineering, Vol. 22 (7-8), 1007-1015, 1998.

OTIMIZAÇÃO, disponível em: < http://www.wcamentoring.com.br/processos_e_metricas.asp-excelencia-em-qualidade>, acessado em 16/04/2008.

PAMPLIN, B.R.; *Crystal Growth*, volume 6, 1^a edition, Pergamon Press, New York, 1975

PAPPA, G.L. *Seleção de Atributos Utilizando Algoritmos Genéticos Multiobjetivos*, Dissertação de Mestrado, Pontifícia Universidade Católica do Paraná, Curitiba, 2002.

PERDAS DE CALOR EM CALDEIRAS INCRUSTADAS, disponível em: <http://www.aquaplan.com.br/artigos/caldeira_encrustada.htm>, acessado em 08/04/2008.

PERRY, R.H.; GREEN, D.W. *Perry Chemical Engineer's Handbook*, 6^a edition, McGraw Hill Book Company, New York, 1984.

PRICE, C.J. *Take Some Solid Steps to Improve Crystallization*, Chemical Engineering Progress, 34-43, September 1997.

PUGH, S.; HEWWITT, G. F.; MULLER-STEINHAGEN, H. O. *Fouling During the Use of Seawater as Coolant- The Development of a 'User Guide'*, 2003 ECI Conference on Heat Exchanger Fouling and Cleaning: Fundamentals and Applications, Paper 3, 3-19, 2004.

PULLAN, W. J.; *Structure Prediction of Benzene Clusters Using a Genetic Algorithm*, Journal of Chemical Information and Computer Sciences, Vol. 37 (6), 1189-1193, 1997.

RAVAGNANI, M.A.S.S.; DA SILVA, A.P.; ARROYO, P.A.; CONSTANTINO, A.A. *Heat Exchanger Network Synthesis and Optimisation Using Genetic Algorithm*, Applied Thermal Engineering, Vol. 25, Issue 7, 1003-1017, May 2005.

RAVAGNANI, M.A.S.S.; DA SILVA, A.P.; ANDRADE, P.A.; *Detailed Equipment Design in Heat Exchanger Networks Synthesis and Optimisation*, Applied Thermal Engineering, Vol. 23, 141-151, 2003.

RECHENBERG, I.,. *Evolutionsstrategie: Optimierung Technischer Systeme nach Prinzipien der Biologischen Evolution*, Frommann-Holzboog Verlag, Stuttgart, 1973 *apud* TAVARES, J.A.R. *Geração de Configurações de Sistemas Industriais com o Recurso à Tecnologia das Restrições e Computação Evolucionária*, Tese de Doutorado, Universidade do Minho, Porto, 2000.

REID, R.C.; PRAUSNITZ, J.M.; POLING, B.E. *The Properties of Gases & Liquids*, 4^a edition., McGraw Hill Book Company, New York, 1987.

REEVES, C. R.; *Modern Heuristic Techniques for Combinatorial Problems*, 4^a edition., McGraw Hill Book Company, London, 1995 *apud* BARBOZA, A.O. *Simulação e Técnicas da Computação Evolucionária Aplicadas a Problemas de Programação Linear Inteira Mista*, Tese de Doutorado, Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Curitiba, 2005.

SAHA, B.; REDDY, P.K.; GHOSHAL, A.K. *Hybrid genetic algorithm to find the best model and the globally optimized overall kinetics parameters for thermal decomposition of plastics*, Chemical Engineering Journal, Vol. 138, 20-29, 2008.

SANAYE, S.; NIROOMAND, B. *Simulation of Heat Exchanger Network (HEN) and Planning the Optimum Cleaning Schedule*, Energy Conversion and Management, Vol. 48, 1450-1461, 2007.

SCHWEFEL, H.P.; *Numerical Optimization of Computer Models*, John Wiley and Sons, Chichester, New York, 1981 *apud* TAVARES, J.A.R. *Geração de Configurações de Sistemas*

Industriais com o Recurso à Tecnologia das Restrições e Computação Evolucionária, Tese de Doutorado, Universidade do Minho, Porto, 2000.

SELEÇÃO, disponível em: < <http://professor.webizu.org/gal/> >, acessado em 14/09/2007.

SHEIKH, A. K.; ZUBAIR, S. M.; HAQ, M. U.; BUDAIR, M. O. *Reliability-Based Maintenance Strategies for Heat Exchangers Subject to Fouling*, *Trans. ASME*, Vol. 118, 306-312, 1996 *apud* GEORGIADIS, M.C.; PAPAGEORGIOU, L.G.; MACHIETTO, S. *Optimal Cleaning Policies in Heat Exchanger Networks Under Rapid Fouling*, *Industrial and Engineering Chemistry Research*, Vol. 39, 441-454, 2000.

SIEPMANN, P.; MARTIN, C.P.; VANCEA, I.; MORIARTY, P.J.; KRASNOGOR, N. *A Genetic Algorithm Approach to Probing the Evolution of Self-Organized Nanostructured Systems*, *Nano Letters*, Vol. 7 (7), 1985-1990, 2007.

SMAÏLI, F.; VASSILIADIS, V.S.; WILSON, D.I. *Mitigation of Fouling in Refinery Heat Exchanger Networks by Optimal Management*, *Energy and Fuels*, Vol. 15, 1038-1056, 2001.

SMITH, J.M.; VAN NESS, H.C.; ABBOTT, M.M. *Introduction to Chemical Engineering Thermodynamics*, 5^o ed., MacGraw-Hill International, Singapore, 1996.

SOARES, G. L. *Algoritmos Genéticos: Estudo, Novas Técnicas e Aplicações*, Monografia (Especialização em Engenharia Elétrica), Escola de Engenharia, UFMG, Belo Horizonte, 1997.

SOTANQUES. Disponível em: <<http://www.sotanques.com.br>> acessado em 11 de abril de 2008.

SOUZA, B.A. *Algoritmos Genéticos Aplicados ao Problema do Caixeiro Viajante*, Notas de Aula de Análise de Sistemas Elétricos, Campina Grande, 2007.

SOUZA, L.M. *Modelagem, Simulação e Otimização de um Sistema de Resfriamento de Soda Cáustica*, Dissertação de Mestrado, UFCG, Campina Grande, 2004.

TAVARES, J.A.R. *Geração de Configurações de Sistemas Industriais com o Recurso à Tecnologia das Restrições e Computação Evolucionária*, Tese de Doutorado, Universidade do Minho, Porto, 2000.

TROCADORES DE CALOR. Disponível em: < <http://www.ucs.br/ccet/demc/craltafi/TrocadoresdeCalor.pdf>> acessado em 11 de março de 2008.

UPRETI, S.R.; DEB, K. *Optimal Design of an Ammonia Synthesis Reactor Using Genetic Algorithms*, Computers and Chemical Engineering, Vol. 21 (1), 87-92, 1997.

UMEGAKI, T.; WATANABE, Y.; NUKUI, N.; OMATA, K.; YAMADA, M. *Optimization of Catalyst for Methanol Synthesis by a Combinatorial Approach Using a Parallel Activity Test and Genetic Algorithm Assisted by a Neural Network*, Energy and Fuels, vol. 17, N^o 4, 850-856, 2003.

VASELENAK, J.A.; GROSSMANN I.E.; WESTBERG, A.W. *Heat Integration in Batch Processing*, Industrial and Engineering Chemistry Research, Vol. 25, 357-366, 1986.

VICTORINO, I.R.S.; MAIA J.P.; MORAIS, E.R.; MACIEL, M.R.W.; MACIEL FILHO, R. *Optimization for Large Scale Process Based on Evolutionary Algorithms: Genetic Algorithms*, Chemical Engineering Journal, Vol. 132, 1-8, 2007.

YU, H.; FANG, H.; YAO, P.; YUAN, Y. *A Combined Genetic Algorithm: Simulated Annealing Algorithm for Large Scale System Energy Integration*, Computers and Chemical Engineering, Vol. 24, 2023-2035, 2000.

ZHAO, W.; CHEN, D.; HU, S. *Optimization Operating Conditions Based on ANN and Modified GAs*, Computers and Chemical Engineering, Vol. 24, 61-65, 2000.

ZUBAIR, S. M.; SHEIKH, A. K.; SHAIK, M. N. *A Probabilistic Approach to the Maintenance of Heat-Transfer Equipment Subject to Fouling*, Energy, Vol.17, 769-776, 1992 *apud*

GEORGIADIS, M.C.; PAPAGEORGIU, L.G.; MACHIETTO, S. *Optimal Cleaning Policies in Heat Exchanger Networks Under Rapid Fouling*, Industrial and Engineering Chemistry Research, Vol. 39, 441-454, 2000.

APÊNDICE A - DADOS DO SISTEMA ATUAL DA BRASKEM

A1 – Dados para a Alimentação no Primeiro Estágio

A1.1 - Na Solução

Tabela 1A – Dados para a solução (NUNES, 2002)

	Vazão (kg/h)	Porcentagem (%)
Hidróxido de Sódio(NaOH)	34.327	49,2
Cloreto de Sódio(NaCl)	1.884	2,7
Sulfato de Sódio(Na ₂ SO ₄)	70	0,1
Água(H ₂ O)	33489	48,0
Total em solução	69770	100

A1.2 - No Precipitado

Tabela 2A – Dados para o precipitado (NUNES, 2002)

	Vazão (kg/h)
Hidróxido de Sódio(NaOH)	133
Cloreto de Sódio(NaCl)	3.886
Sulfato de Sódio(Na ₂ SO ₄)	472
Total de precipitado	4.491

A1.3 - Na Alimentação

- Vazão total de alimentação (solução + precipitado)- 74.261 Kg/h
- Densidade média – 1,54
- Temperatura – 91,1⁰C

A2 – Dados para a Saída no Último Estágio

A2.1 - Na Solução

Tabela 3A – Dados para a solução na saída do último tanque (NUNES,2002)

	Vazão (kg/h)	Porcentagem (%)
Hidróxido de Sódio(NaOH)	34.327	50,0
Cloreto de Sódio(NaCl)	686	1,0
Sulfato de Sódio(Na ₂ SO ₄)	34	0,05
Água(H ₂ O)	33489	48,95
Total em solução	68.526	100

A2.2 - No Precipitado

Tabela 4A – Dados para o precipitado na saída do último tanque (NUNES,2002)

	Vazão (kg/h)
Hidróxido de Sódio(NaOH)	142
Cloreto de Sódio(NaCl)	5.084
Sulfato de Sódio(Na ₂ SO ₄)	507
Total de precipitado	5.733

A2.3 - Na saída

- Vazão total de alimentação (solução + precipitado)- 74.259 kg/h
- Densidade Média – 1,58
- Temperatura – 26,7⁰C

APÊNDICE B – ESTIMATIVAS PARA O SISTEMA

Foram obtidas a partir dos dados de PERRY (1984), a densidade da solução, capacidade calorífica, e viscosidade para serem colocadas no programa. Estes dados foram interpolados utilizando o programa Microcal Origin 6.0.

B1 - Viscosidade

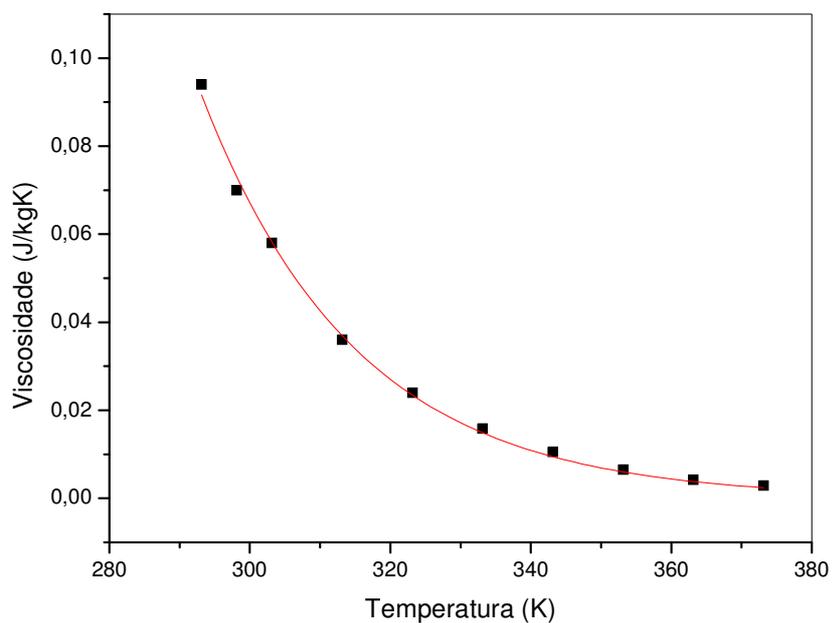


Figura 1B – Viscosidade versus temperatura da solução

- Regressão:

Foi estabelecida uma regressão exponencial para viscosidade versus a temperatura da solução da seguinte forma:

$$y = y_0 + A1e^{(-x/t1)}$$

Tabela 1B – Dados obtidos pela regressão da viscosidade versus a temperatura da solução

	Valor	Erro
Coefficiente de Correlação	0,99796	$2,306 \times 10^{-6}$
y0	0	0
A1	56312,56056	20463,4002
t1	21,99387	0,58686

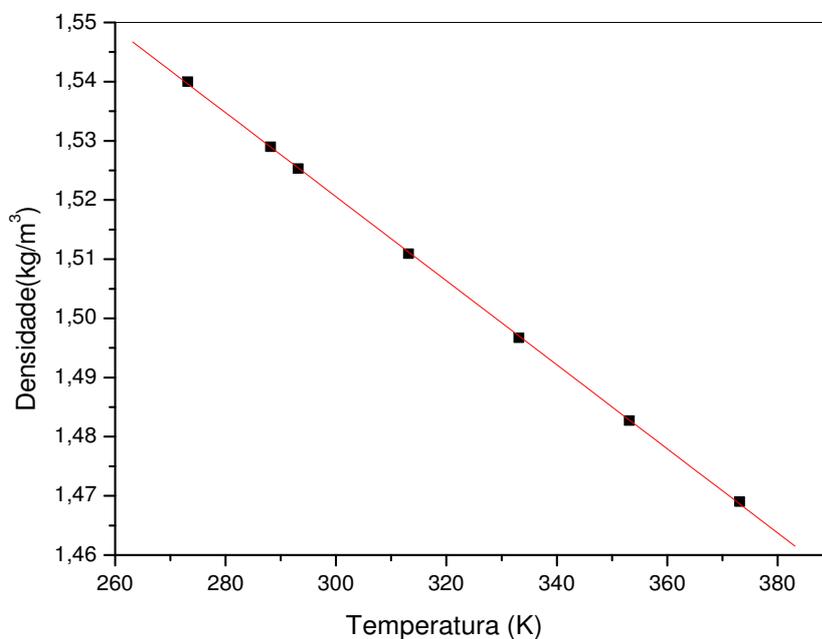
B2 - Densidade da Solução

Figura 2B - Densidade versus temperatura da solução

Regressão:

Foi estabelecida uma regressão linear para densidade da seguinte forma:

$$Y = A + BX$$

Tabela 2B – Coeficientes obtidos pela regressão da densidade versus a temperatura da solução

	Valor	Erro
A	1,7336	0,00115
B	$-7,10186 \times 10^{-4}$	$3,60077 \times 10^{-6}$

Tabela 3B – Dados mostrando a exatidão e o desvio pela regressão da densidade versus a temperatura da solução

Coeficiente de Correlação	-0,99994
Desvio Padrão	$3,23068 \times 10^{-4}$

B3 - Capacidade calorífica

Foi Usada a seguinte correlação do Smith *et al.* (1996):

$$C_p = (8,712 + 1,25 \times 10^{-3} T - 0,18 \times 10^{-6} T^2) \frac{1000R^*}{PM_{\text{ÁGUA}}} \quad (\text{B.1})$$

Esta equação (B.1) foi obtida para água pura, mas neste problema foi aproximada para a solução de NaOH a 50%.

B4 – Condutividade Térmica

Foi Usada a seguinte correlação do Reid *et al.* (1987):

$$k = -3,838 \times 10^{-1} + 5,254 T - 6,369 T^{-2} \quad (\text{B.2})$$

Esta equação (B.2) foi obtida para água pura, mas neste problema foi aproximada para a solução de NaOH a 50%.

APÊNDICE C – FLUXOGRAMA E PROGRAMA DESENVOLVIDO PARA O SISTEMA EM FORTRAN-90

```

program luciano
implicit REAL (a-z)
DIMENSION
                                                    TJ(0:10,0:1000000),
TJ1(0:10,0:1000000),Z(0:10,0:1000000),TS(0:10),Q(0:10),TSA(0:10),AUX2(0:10),AUX1(0:10)
,CU2(0:10),CU1(0:10),V(0:10),RD(0:10),RD3(0:10),SR(0:10),U(0:10),Ri(0:10)
DIMENSION XD(0:10)
!REAL RD,RT,RG
INTEGER N,I,J,K,JJ,II,ICONF1,ICONF2,comb
!REAL TS,A,S,W,CP,DENS,ZMAX,V,U,FC,TIME,C1,C2,C3
!REAL ka,k1,hi,hi2,he,L1,La,visc,viscw,Dt,Dc,SR,Nue, Nui,qi

parameter(pi=3.1416)

OPEN(UNIT=1, FILE='RDI1.TXT',STATUS='OLD')
OPEN(UNIT=11, FILE='SERP.TXT', STATUS='UNKNOWN')
OPEN(UNIT=2, FILE='TANK.TXT', STATUS='UNKNOWN')
OPEN(UNIT=3, FILE='CORR.TXT', STATUS='UNKNOWN')
OPEN(UNIT=7, FILE='TEMPOSOL.TXT',STATUS='UNKNOWN')
OPEN(UNIT=8, FILE='CUSTO.TXT',STATUS='UNKNOWN')
OPEN(UNIT=9, FILE='TEMPOAGU.TXT',STATUS='UNKNOWN')
OPEN(UNIT=4, FILE='INCRUSTA.TXT',STATUS='UNKNOWN')
OPEN(UNIT=15, FILE='UD.TXT',STATUS='UNKNOWN')
OPEN(UNIT=16, FILE='CALOR.TXT',STATUS='UNKNOWN')
OPEN(UNIT=17, FILE='FOULING.TXT',STATUS='UNKNOWN')
OPEN(UNIT=18, FILE='RAIOF.TXT',STATUS='UNKNOWN')

! DADOS DE ENTRADA

!número de tanques

```

```

NTANK=7
! TANQUE ENTRADA DA AGUA DA TORRE
write(*,*) "DIGITE O LOCAL DE ENTRADA DA ÁGUA DA TORRE"
read(*,*) LOCAL

!LOCAL=8
do J=ntank,1,-1
read(1,*)RD(J)
end do

! temperatura de saída da solução no 1o estagio
!TS=364.5

!número de tanques em paralelo
num=(NTANK-LOCAL+1)
num2=NTANK-num

! diametro da serpentina
Dc=0.114d+0

! temperatura de entrada da solução no primeiro estagio
TSE=364.25

! area da secção transversal
A=PI*(DC**2.0d+0)/4.0

! area de troca térmica POR METRO DE COMPRIMENTO DE TUBO
S=0.358

! capacidade calorifica da agua a TMED=40 oC (FONTE: VAN NESS 5 EDICAO, PG. 639)
RGAS=8.314
PMAGUA=18
TMED=40.0
CP=(8.712+1.25E-3*TMED-0.18E-6*TMED**2.0)*RGAS/PMAGUA*1000.0

! densidade da agua
DENS=1000.0

! comprimento de cada serpentina
ZMAX=200.0

```

!Custo da água da torre(\$/J)

CTR=0.16E-9

!Custo da água gelada(\$/J)

CAG=20.0E-9

! velocidade da agua

V(6)=2.18*3

!V1=(0.863*3.*(44./95.))

Vmax=V(6)

!F=0.5

!AMP=.1

!F1=1.

! incremento de espaço (m)=tamanho da malha espacial

N=500

M=ZMAX/(N-1.0)

! incremento de tempo para courant=0.5

L=20000*M/Vmax

!

TIME=0.0

VISC=0.000631

VISCW=0.000631

N1=1.1333

Dt=3.658

K1=-3.838E-1+(5.254E-3)*(30+273.15) - (6.369E-6*((30+273.15)**2))

KA=44.9

KD=1.16

!KD=0.23

L1=Dt/3.0

LA=2.41E-3

DSE=LA+Dc

NSERP1=3.0

NSERP2=2.21

NSERP1=1.0

NSERP2=1.0

! temperatura de entrada da agua

write(*,*) "DIGITE A TEMPERATURA NA ENTRADA DO TANQUE 7"

read(*,*) TC2

!TTORRE=29.4+273.15

write(*,*) "DIGITE A TEMPERATURA NA ENTRADA DO TANQUE LOCAL"

read(*,*) TC1

!TK2=5.0+273.15

write(*,*) "DIGITE A ESTIMATIVA PARA OS TANQUES DE ÁGUA DA TORRE "

read(*,*) TM1

!TTORRE=29.4+273.15

write(*,*) "DIGITE A TEMPERATURA PARA OS TANQUES DE ÁGUA GELADA"

read(*,*) TM2

TK1=TC1+273.15

TK2=TC2+273.15

TKM1=TM1+273.15

TKM2=TM2+273.15

```

!Q=VAGUA*CP*(T2-T1)
! vazao de soluçao
VSOL=74261.0/3600.0
!
! volume da soluçao no tanque
HTANK=4.267
VOLUME=PI*DT**2.0D+0/4.0D+0*HTANK

write(*,*) "DIGITE A VAZÃO DE ÁGUA NO TANQUE LOCAL"
read(*,*) Vtorre

write(*,*) "DIGITE A VAZÃO DE ÁGUA NO TANQUE 7"
read(*,*) Vgela

!write(*,*) "DIGITE A RESISTENCIA DEVIDO A INCRUSTAÇÃO"
!read(*,*) RDT
!read(*,*) RDG

write(*,*) "INFORME O TIPO DE CONFIGURAÇÃO"
read(*,*) ICONF1 !Água da torre : 1-série; diferente de 1-paralelo
read(*,*) ICONF2 !Água gelada : 1-série; diferente de 1-paralelo

write(*,*) "INFORME O TEMPO REAL DE SIMULAÇÃO"
read(*,*) TEMPO

      tempoexe=timef()

! CÁLCULO DAS CORRELAÇÕES
!
teste=(TSE+TK1)/2.0
!ESTIMA INICIAL DA TEMPERATURA (condicao inicial)!

```

```
DO J=0,LOCAL-1
```

```
DO I=0,N+1
```

```
TJ1(J,I)=TKM2
```

```
TJ(J,I)=TJ1(J,I)
```

```
END DO
```

```
TS(J)=TSE
```

```
TSA(J)=TS(J)
```

```
if (ICONF2.eq.1) then
```

```
!V(J)=(0.863*3.*(44./95.))
```

```
V(J)=(0.863*3.*(Vgela/95.))
```

```
VG=V(J)
```

```
else
```

```
!V(J)=(0.863*3.*(44./95.))/num2
```

```
V(J)=(0.863*3.*(Vgela/95.))/num2
```

```
VG=V(J)
```

```
end if
```

```
END DO
```

```
DO J=LOCAL,ntank+1
```

```
DO I=0,N+1
```

```
TJ1(J,I)=TKM1
```

```
TJ(J,I)=TJ1(J,I)
```

```
END DO
```

```
TS(J)=TSE
```

```
TSA(J)=TS(J)
```

```
if (ICONF1.eq.1) then
```

```
V(J)=(2.18*3)*(Vtorre/240.)
```

```
VT=V(J)
```

```

else
V(J)=((2.18*3)*(Vtorre/240.))/num
VT=V(J)
end if
END DO

!ESTIMATIVA INICIAL PARA TEMP TANK 1

WRITE(7,55) TIME, (TS(k), k=ntank,1,-1)
WRITE(9,55) TIME, (TJ1(k,N), k=ntank,1,-1)
!
! CÁLCULO DA TEMPERATURA NAS MALHAS no tanque J
!
! retorno para incrementar tempo
10 CONTINUE
!
! CONDICÕES FIXAS

TJ1(0,N)=TK2
if(LOCAL.eq.1) then
TJ1(0,N)=TK1
TJ(0,N)=TJ1(0,N)
end if
TJ1(1,1)=TJ1(0,N)
TJ(0,N)=TJ1(0,N)
TS(NTANK+1)=TSE
TSA(NTANK+1)=TSE

TIME=TIME+L
!
! retorno para verificar a convergencia em dado tempo
11 CONTINUE

```

```
!do 77 j=1,NTANK
```

```
j=1
```

```
12 continue
```

```
! CALCULO DA VAZÃO DE AGUA por serpentina (incremento Jailson)
```

```
VAGUA=DENS*V(J)*PI*(DC**2.)/4.0
```

```
!write(*,*) ts(j)
```

```
!TJ1(J,1)=TJ1(J-1,N)
```

```
!TS(J)=TS(J+1)-Q(j)/(VSOL*CPS)
```

```
!TJ1(J,1)=TTORRE
```

```
Z(J,1)=0.0d+0
```

```
!
```

```
ITER=0
```

```
30 continue
```

```
! capacidade calorifica da agua a TMED=40 oC (FONTE: VAN NESS 5 EDICAO, PG. 639)
```

```
RGAS=8.81
```

```
PMAGUA=18
```

```
TMED=(TJ1(J,1)+TJ1(J,N))/2.0
```

```
CP=(8.712+1.25E-3*TMED-0.18E-6*TMED**2.0)*RGAS/PMAGUA*1000.0
```

```
! capacidade calorifica da agua a TEMP DA SOLUÇÃO C (FONTE: VAN NESS 5 EDICAO,  
PG. 639)
```

```
CPS=(8.712+1.25E-3*TS(J)-0.18E-6*TS(J)**2.0)*RGAS/PMAGUA*1000.0
```

```
! densidade da solução
```

```
DENSOL=1733.6 -(0.710186*TS(J))
```

```
!DENSOL=1000
```

```
! CORREÇÃO DEVIDO A PRESENÇA DA SODA CAUSTICA
```

```
CPS=CPS*DENS/DENSOL
```

```
!VISCOSIDADE DA SOLUÇÃO A TEMPERATURA TS
```

```
VISCS=58460.08716*Exp(-TS(J)/21.9365)
```

!CORREÇÃO COM A CONCENTRAÇÃO

VISCS=VISCS

!VISCS=0.000631

!VISCOSIDADE DA SOLUÇÃO A TEMPERATURA Tw

VISCSW=58460.08716*Exp(-TMED/21.9365)

!VISCSW=VISCS

!CONDUTIVIDADE TÉRMICA DA AGUA

K1=-3.838E-1+(5.254E-3)*TMED - (6.369E-6*(TMED**2))

!CONDUTIVIDADE TÉRMICA DA SOLUÇÃO

KS=-3.838E-1+(5.254E-3)*TS(J) - (6.369E-6*(TS(J)**2))

! EFEITO DA PRESEÇA DA SOLUÇÃO DE NaOH

ks=ks

!TEMPO=100.0

!

Nue=0.87*(L1**2.*N1*densol/viscs)**(2./3.)*(CPS*viscs/ks)**(1./3.)*(viscs/viscsw)**0.14

Nue=2*Nue

IF (J.GE.LOCAL) THEN

V(J)=VT

Ri(J)=(Dc*v(J)*dens)/viscw

Ri2=Ri(J)

ELSE

V(J)=VG

Ri(J)=(Dc*v(J)*dens)/viscw

Ri2=Ri(J)

END IF

IF (Ri2.LT.2100.0) THEN

Nui=1.86*(((Dc*v(J)*dens)/visc)**(0.8))*((CP*viscw/k1)**(1./3.))

ELSE

Nui=0.023*(((Dc*v(J)*dens)/visc)**(0.8))*((CP*viscw/k1)**(1./3.))

END IF

44 FORMAT(3X,6F13.4)

!COEFICIENTE DE CALOR POR CONVECÇÃO EXTERNO E INTERNO

he=(ks*Nue)/Dt

hi=(k1*Nui)/Dc

!CÁLCULO DA ESPESSURA CRÍTICA

XC=KD/he

! FATOR DE CORREÇÃO

FC= 1.+3.5*(Dc/Dt)

!COEFICIENTE DE CALOR POR CONVECÇÃO INTERNO MODIFICADO

hi2= hi*FC

!if (J .gt. LOCAL) then

!RD(J)=RDT

!write(*,*) "DIGITE A RESISTENCIA DEVIDO A INCRUSTAÇÃO"

RD3(J)=RD(J)*(1-exp(-(TIME)/(200000)))

!RD3(J)=RD(J)*(TIME/((1E4)*86400))

SR(J)=(1.0/hi2)+(La/ka)+(1.0/he)+RD3(J)

U(J)=1.0/SR(J)

!CÁLCULO DA ESPESSURA DE INCRUSTAÇÃO

XD(J)=0.5*DSE*(1-EXP(-(2*PI*RD3(J)*KD)/DSE))

!enddo

!else

!RD(J)=RDG

!SR(J)=(1.0/hi2)+(La/ka)+(1.0/he)+RD(J)

!U(J)=1.0/SR(J)

!endif

!CÁLCULO DE CONSTANTES

C1=(U(J)*S*L)/(CP*DENS*A)

C2=V(J)*L/M

C3=1.0-C2-C1

!

!TS=(T1*EXP(U*S*ZMAX/(VAGUA*CP))-T2)/(EXP(U*S*ZMAX/(VAGUA*CP))-1.0)

!

DO I=2,N

```

Z(J,I)=Z(J,I-1)+M
TJ1(J,I)=(TJ(J,I)+C2*TJ1(J,I-1)+C1*TS(J))/(1.0+C1+C2)
END DO
!
Q(j)=0.0d+0
do II=2,n
Q(j)=Q(j)+U(J)*S*M*(TS(J)-(TJ1(J,II-1)+TJ1(J,II))/2.0)
end do
!
!Multiplicação da carga de uma serpentina pelo numero de serpentinas
if (J .GT. 3) then
Q(j)=Q(j)*NSERP1
else
Q(j)=Q(j)*NSERP2
end if
! Q=NSERP*VAGUA*CP*(T2-T1)
! calculo do calor trocado
AUX1(J)=Q(j)

if (J .GE. LOCAL) then
CU1(j)=AUX1(j)*CTR
else
CU1(j)=AUX1(j)*CAG
end if
CU2(j)=CU1(j)

!if(TIME.eq.TEMPO) then
!End if
!PAUSE
!!!!!!!!!!!!!!TS(J)=TS(J+1)-Q(j)/(VSOL*CPS)
aux13=vsol*cps
aux14=densol*volume*cps

```

```

aux15=aux13*L/aux14
aux16=L/aux14
TS(J)=(TSA(J)+aux15*TS(J+1)-Q(J)*aux16)/(1.0d+0+aux15)
AUX2(J)=VSOL*CPS*(TS(J+1)-TS(J))

!INCREMENTO verificando convergencia no implicito
T1=TJ1(J,1)
T2=TJ1(J,N)
!
if (abs((T2-T2ANT)) .ge. 1E-3 .and. iter .lt. 10000) then
!if (abs((aux2(J)-q(j))) .ge. 1E-0 .and. iter .lt. 50000) then
T2ANT=T2
iter=iter+1
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!TS(J+1)=TS(J)+Q(j)/(VSOL*CPS)
go to 30
end if
!!!aux5=nserp*vagua*cpagua*(tj1(j,n)-tj1(j,1))
77 continue
!
! numero de tankes

!if (j .lt. LOCAL) then
!tj1(j,1)=tj1(j-1,n)
!TJ1(j,1)=TK2
!end if
!if (j .gt. LOCAL) then
!end if
if (j .lt. ntank) then
j=j+1

!if (j .ge. local.and.comb.eq.1) then
if (j .gt. local) then

```

```

!if (comb .eq. 1) then
tj1(LOCAL,1)=TK1
!else
!tj1(LOCAL,1)=tj1(LOCAL-1,n)
!endif
if (ICONF1.eq.1) then
!Configuração em série para água da torre
tj1(j,1)=tj1(j-1,n)
else
tj1(j,1)=TK1
endif

endif
!endif

if (j .lt. LOCAL) then
!Configuração em série para água gelada
if (ICONF2 .eq. 1) then
tj(1,1)=TK2
tj1(j,1)=tj1(j-1,n)
else
!Configuração em paralelo para água gelada
tj(1,1)=TK2
tj1(j,1)=TK2
endif
endif
!TS(J)=TS(J-1)+Q(j-1)/(VSOL*CPS)
!ts(ntank+1)=tse
!TS(J)=TSA(J)+aux15*(TS(J+1)-TS(J))-Q(J)*aux16
!TS(J)=TS(J+1)-Q(j)/(VSOL*CPS)
!DO I2=1,N

```

```

!TJ1(J,I2)=tj1(j-1,n)
!END DO
go to 12
end if
!
! criterio de convergencia global
!TS1ANT=TS(1)
!do it=1,1000
qtot=0.0
do k=ntank,1,-1
qtot=qtot+Q(k)
TS(k)=TSA(k)+aux15*(TS(k+1)-TS(k))-Q(k)*aux16
end do
!erro=abs(tse-ts(ntank+1))/TSE
erro=abs((TS(1)-TS1ANT))
if ((erro .gt. 1.0D-5) .and. (iter2 .gt. 10000) ) then
write(*,*) ts(j)
iter2=iter2+1
TS1ANT=TS(1)
TS(1)=TSE-qtot/(vsol*cps)
TS(NTANK+1)=TSE
go to 11
end if
!CÁLCULO DA TEMPERATURA NO TEMPO
!
99 continue
DO JJ=0,NTANK+1
TSA(JJ)=TS(JJ)
DO I=0,N+1

TJ(JJ,I)=TJ1(JJ,I)

```

```

END DO
END DO
! calculo da temperatura de saida da soluçao
!TS=TSE-Q/(VSOL*CPS)
!WRITE(6,3) (Z(I)*RT,(MUG(I,J),J=1,M,1), I=1,N)
WRITE(7,55) TIME, (TS(k), k=ntank,1,-1)
WRITE(9,55) TIME, (TJ1(k,N), k=ntank,1,-1)
WRITE(15,55) TIME, (U(k), k=ntank,1,-1)
WRITE(16,55) TIME, (AUX1(k), k=ntank,1,-1)
WRITE(17,75) TIME, (RD3(k), k=ntank,1,-1)
WRITE(18,75) TIME, (XD(k), k=ntank,1,-1)

55 format(1x,f16.2,<ntank>f16.2)
75 format(1x,f16.7,<ntank>f16.7)
!
IF (TIME .LE. TEMPO) GO TO 10

CTOTAL=0.0
Do j=0,NTANK
CTOTAL= CTOTAL + CU2(j)
End do
!
45 FORMAT(2X,F13.4,<ntank>F13.4)
!
!do j=1,ntank
WRITE(11,45) (Z(1,I), (TJ1(J,I), j=ntank,1,-1), I=1,N)

write(*,*) "L=",L
do j=ntank,1,-1
WRITE(2,37) j,AUX1(J),AUX2(J),CU2(j), TS(J), j,v(j)
if (j.eq.NTANK) then
WRITE(8,49) Vtorre, Vgela, CTOTAL

```

```
end if
WRITE(4,51)U(J),RD(j),SR(J),J
WRITE(3,44) NUI,NUE,Ri(J),he,hi,XC

!WRITE(1,*) "HINTERNO=",HI2, "HEXTERNO=",HE, "COEF. GLOBAL=",U
enddo
37  FORMAT(I2,"tanq","  Q1=",F13.2,"  Q2=",F13.2,"  C=",E13.7,"  TS=",F8.4,'
V',I2,'=',F6.2)
49  FORMAT(" Vtorre=",F6.2,"  Vgela=",F6.2,"  CTOTAL=",E13.7)
51  FORMAT("U=",F11.4,"  RD=",F8.5,"  SR=",E13.7,"  J=",I2)
!52  FORMAT(F7.5)

      tempoexe=timef()
      write(*,*) 'tempo simulaça0=',      tempoexe
      STOP
      END
```

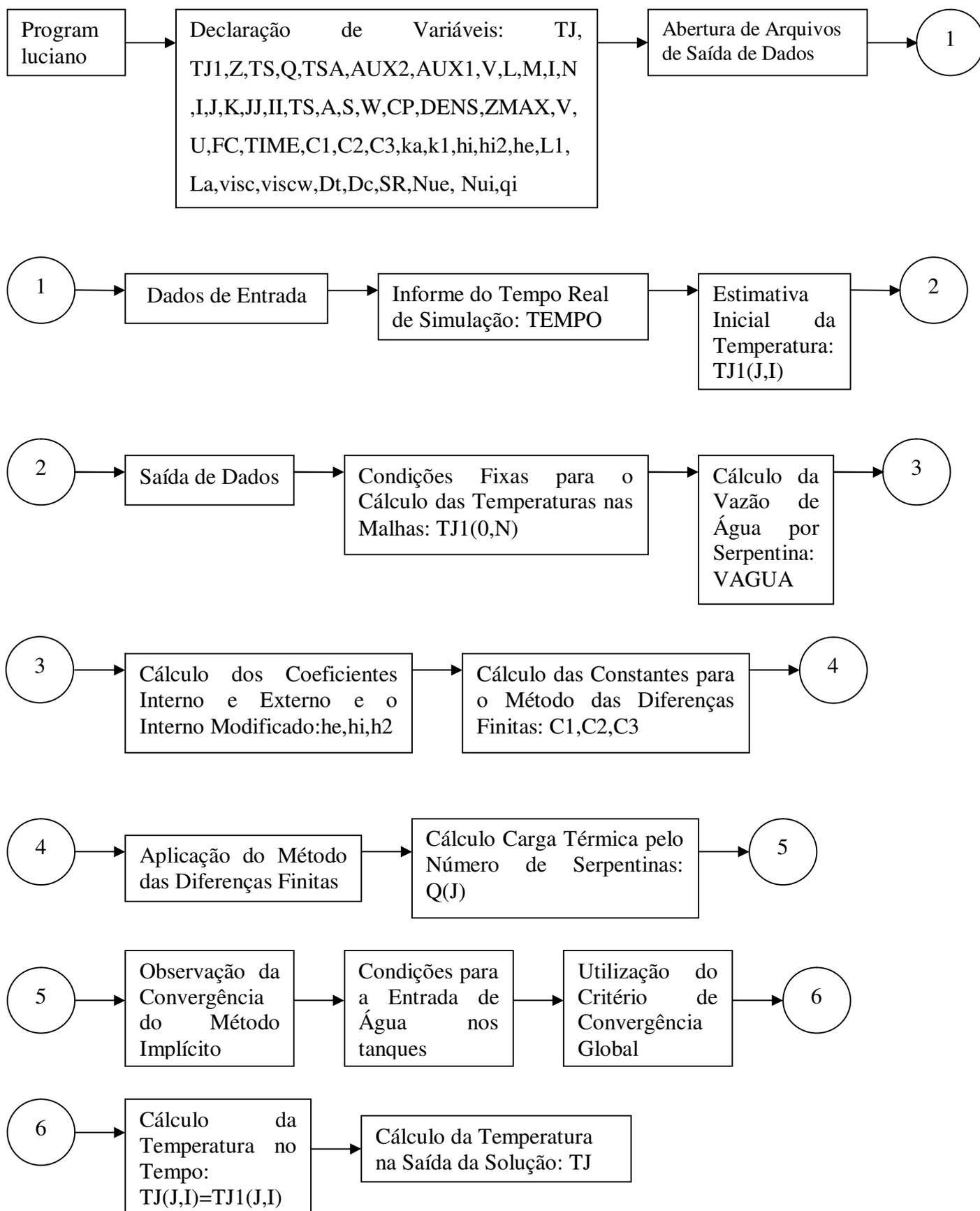


Figura 1C – Diagrama das partes constitutivas do programa em FORTRAN-90

APÊNDICE D –PROGRAMA DESENVOLVIDO PARA O SISTEMA EM MATLAB

```
%Otimização dos tanques de resfriamento da BRASKEM

%Número de tanques
Ntank= input('número de tanques = ');

%Local de Entrada da Água da Torre de Resfriamento
Local = input('Tanque Local = ');

%temperatura de entrada da agua no tanque T7
TC2 = input('Temperatura na Entrada do tanque T7 = ');

%temperatura de entrada da agua no tanque local
TC1 = input('Temperatura de Entrada da água da torre = ');
TIME3=input('Indique o intervalo de lavagem = ');

%vazão de água da torre de resfriamento na entrada do tanque local
Vtorre = input('Digite a vazão de água da torre no tanque local = ');

%vazão de água gelada no tanque T7
Vgela = input('Digite a vazão de água gelada no tanque T7 = ');

%Informe o tipo de configuração !Água da torre : 1-série;
% diferente de 1-paralelo
ICONF1 = input('Série ou paralelo para água da torre = ');
ICONF2 = input('Série ou paralelo para água gelada = ');

%Tempo de simulação
TEMPO = input('Tempo real de simulação = ');

%Resistências devido às incrustações no tanque
```

```

for i = 1:1:Ntank
    RD(:,i) = input('Incrustações = ');
    RD1(:,i)=RD(:,i);
    %TSE(:,i) = input('Temperatura das solucoes = ');
end

%sequencia de limpezas
SL=[7 6 5 4 3 2 1 7 6 5 4 3 2 1 7 6 5 4 3 2 1 7 6 5 4 3 2 1 7 6 5 4 3 2 1 7 6 5 4 3 2
1 7 6 5 4 3 2 1]

TSE = [296.8531 301.8481 306.7268 311.4841 316.1159 338.2842 349.7178];
%temperatura de entrada da agua nos tanques
TKM1 = [280.9193 286.3995 291.7599 296.9944 303.3380 305.3138 308.0214];
%TSE = [364.25 364.25 364.25 364.25 364.25 364.25 364.25];
%TKM1 = [364.25 364.25 364.25 364.25 364.25 364.25 364.25];
%TKM1 = TSE;
%TSE = [286.7190 291.9590 296.8322 301.2769 305.2584 312.1367 327.7266];
%TSE = [286.7190 291.9590 296.8322 301.2769 305.2584 312.1367 286.7190];
%constante de tempo
%TAU = [604800 518400 432000 345600 259200 172800 86400];
TAU = [100000 100000 100000 100000 100000 100000 100000];
TIME2 = [0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0];
for i = 1:1:Ntank
    TIME22(:,i)=TIME2(:,i);
end

%Número de tanques que utilizam água da torre de resfriamento
Num = Ntank-Local+1;

%Número de tanques que utilizam água gelada
Num2 = Ntank-Num;

```

%Diâmetro da serpentina

Dserp = 0.114;

%temperatura de entrada da solução no primeiro estágio

TSE2 = 364.25;

%TSE = 303.2668;

%área da secção transversal

PI = 3.14159;

AREA = PI*(Dserp^2)/4.0;

% area de troca térmica POR METRO DE COMPRIMENTO DE TUBO

S=0.358;

%constante universal dos gases ideais

RGAS=8.314;

%Peso molecular da água

PMAGUA=18;

%temperatura média da água

TMED=40.0;

%capacidade calorífica da água a TMED=40 oC

%(FONTE:VAN NESS 5 EDICAO,PG.639)

CP=(8.712+1.25E-3*TMED-0.18E-6*TMED^2.0)*RGAS/PMAGUA*1000.0;

% densidade da água

DENS=1000.0;

%comprimento de cada serpentina

ZMAX=200.0;

%Custo da água da torre(\$/J)

CTR=0.16E-9;

%Custo da água gelada(\$/J)

CAG=20.0E-9;

%velocidade da agua

V=2.18*3;

%V1=(0.863*3.*(44./95.))

Vmax=V;

%incremento de espaço (m)=tamanho da malha espacial

N = input('numero de pontos da malha = ');

M=ZMAX/(N-1.0);

% incremento de tempo para courant=0.5

L=20000*M/Vmax;

ITE3=int16(TIME3/L);

ITEL3=ITE3;

ITE4=ITE3+1;

ITE5=ITE4+int16(21600/L);

ITE6=ITE5+1;

ITEL4=ITE3;

ITEL5=ITE4;

ITEL6=ITE5;

TIME=0.0;

L3=TIME3;

TIME4=TIME3+1200.0;

L4=L3;

L5=TIME4;

TIME5=TIME4+21600;

L6=TIME5;

TIME6=TIME5+1200.0;

```

VISC=0.000631;
VISCW=0.000631;
N1=1.1333;
Dt=3.658;
K1=-3.838E-1+(5.254E-3)*(30+273.15) - (6.369E-6*((30+273.15)^2));

```

```

KA=44.9;
L1=Dt/3.0;
LA=2.41E-3;
NSERP1=3.0;
NSERP2=2.21;
NSERP1=1.0;
NSERP2=1.0;

```

```

TK1=TC1+273.15;
TK2=TC2+273.15;

```

% vazao de solução

```
VSOL=74261.0/3600.0;
```

%volume da solução no tanque

```
HTANK=4.267;
```

```
VOLUME=PI*(Dt^2.0)*HTANK/4.0;
```

% capacidade calorífica da água a $T_{MED}=40$ °C (FONTE: VAN NESS 5 EDICAO, PG. 639)

```
RGAS=8.81;
```

```
PMAGUA=18;
```

%ESTIMA INICIAL DA TEMPERATURA (condicao inicial)!

```
for J=1:1:Ntank
```

```
U1(J)=0.0;
```

```
RD2(:,J)=0.0;
```

```

RD3(:,J)=0.0;
for I=1:1:N
    TSA(J)=TSE(:,J);
    TS(J)=TSA(J);
    Q(J)=0.0;
    D(I,:)=I;
    if (J < Local)
        TJ1(I,J)=TKM1(:,J);
        TJ(I,J)=TJ1(I,J);
        if (ICONF2 == 1)
            V(I,J)=(0.863*3.*(Vgela/95.));
            VG=V(I,J);
        else
            V(I,J)=(0.863*3.*(Vgela/95.))/Num2;
            VG=V(I,J);
            VAGUA=DENS*VG*PI*(Dserp^2.)/4.0;
        end
        Ri2(J)=(Dserp*VG*DENS)/VISCW;
    else
        TJ1(I,J)=TKM1(:,J);
        TJ(I,J)=TJ1(I,J);
        if (ICONF1 == 1)
            V(I,J)=(2.18*3)*(Vtorre/240.);
            VT=V(I,J);
        else
            V(I,J)=((2.18*3)*(Vtorre/240.))/Num;
            VT=V(I,J);
            VAGUA=DENS*VT*PI*(Dserp^2.)/4.0;
        end
        Ri2(J)=(Dserp*VT*DENS)/VISCW;
    end
end
end

```

end

ITER=0;

NL=1;

NLIMP=0;

NL2=1;

NLIMP2=0;

A=[TIME TS(1) TS(2) TS(3) TS(4) TS(5) TS(6) TS(7)];

B=[TIME TJ1(N,1) TJ1(N,2) TJ1(N,3) TJ1(N,4) TJ1(N,5) TJ1(N,6) TJ1(N,7)];

C=[TIME Q(1) Q(2) Q(3) Q(4) Q(5) Q(6) Q(7)];

D=[TIME U1(1) U1(2) U1(3) U1(4) U1(5) U1(6) U1(7)];

E=[TIME RD2(:,1) RD2(:,2) RD2(:,3) RD2(:,4) RD2(:,5) RD2(:,6) RD2(:,7)];

F=[TIME RD3(:,1) RD3(:,2) RD3(:,3) RD3(:,4) RD3(:,5) RD3(:,6) RD3(:,7)];

FOBJ=0.0;

x=0;

x2=0;

while (TIME<TEMPO)

 x=x+1;

 x3=0.0;

 A2=A

 B2=B;

 C2=C;

 D2=D;

 E2=E;

 F2=F;

TIME=TIME+L

ITER=ITER+1;

if (ITER==ITE3)&(ITER<ITE4)

 if(NLIMP>0)

 L6=TIME5;

```

TIME6=L7;
TIME6=TIME6+L3;
ITEL6=ITE5;
ITE6=ITEL7;
ITE6=ITE6+ITEL3;
end
JL=SL(:,NL)
for J=1:1:Ntank-1
if (JL==7)
    TSA(J)=TS(J);
    RD(:,J)=RD(:,J);
    TIME2(:,J)=TIME2(:,J);
elseif (JL==1)
    TSA(J)=TS(J+1)
    RD(:,J)=RD(:,J+1);
    TIME2(:,J)=TIME2(:,J+1);
elseif (J>=JL)
    TSA(J)=TS(JL+1)
    RD(:,J)=RD(:,JL+1);
    TIME2(:,J)=TIME2(:,J+1);
else
    TSA(J)=TS(J)
    RD(:,J)=RD(:,J);
    TIME2(:,J)=TIME2(:,J);

end
end

Ntank=6
TSA(J)=TSA(J)
end

```

```
if (ITER>=ITE4)
    TIME3=L4;
    TIME3=TIME3+L3;
    ITE3=ITEL4;
    ITE3=ITE3+ITEL3;

    Ntank=6;
    TSA(J)=TS(J)
end

if(ITER==ITE5)&(ITER<ITE6)
    L4=TIME3;
    TIME4=L5;
    TIME4=TIME4+L3;
    ITEL4=ITE3;
    ITE4=ITEL5;
    ITE4=ITE4+ITEL3;
    Ntank=7;

for J=2:1:Ntank
    if (JL==7)
        TS(Ntank)=364.25;
        TSA(1)=TS(1);
        TS(J)=TS(J)
        TSA(J)=TS(J);
    elseif (JL==1)
        TSA(1)=TS(1);
        TSA(J)=TS(J-1);
    elseif (J>JL)
        TSA(1)=TS(1);
        TSA(J)=TS(J-1);
        TSA(JL)=TS(J);
    end
end
```

```

%TSA(1)=TS(JL+1)
%RD(:,J)=RD(:,J-1);
%TIME2(:,J)=TIME2(:,J-1);
%RD(:,J)=RD(:,J-1);
%TIME2(:,JL)=TIME2(:,JL);
%RD(:,1)=RD(:,1);
TIME2(:,1)=TIME2(:,1);
%TIME2(:,JL)=TIME5;

```

```

else

```

```

TSA(1)=TS(1);
TS(J)=TS(J)
TSA(J)=TS(J);
%RD(:,J)=RD(:,J);
TIME2(:,J)=TIME2(:,J);
%RD(:,1)=RD(:,1);
TIME2(:,1)=TIME2(:,1);
%TSA(JL)=TS(JL+1);

```

```

end

```

```

end

```

```

%Ntank=7;

```

```

for J=1:1:Ntank

```

```

RD(:,J)=RD1(:,J);

```

```

TIME2(:,J)=TIME22(:,J);

```

```

end

```

```

TIME2(:,JL)=TIME;

```

```

NL=NL2;

```

```

NLIMP=NLIMP2;

```

```

NL=NL+1;

```

```

NLIMP=NLIMP+1;

```

```

%ite3=0;

```

```
for J=1:1:Ntank
RD(:,J)=RD1(:,J);
TIME22(:,J)=TIME2(:,J);
end
```

```
%TIME5=TIME5+L3;
%TIME=TIME6;
```

```
end
```

```
if(ITER>=ITE6)
NL2=NL;
NLIMP2=NLIMP;
L5=TIME4;
TSA(J)=TS(J);
TIME5=L6;
TIME5=TIME5+L3;
L7=TIME6;
ITEL5=ITE4;
ITE5=ITEL6;
ITE5=ITE5+ITEL3;
ITEL7=ITE6;
end
```

```
for I=1:1:N
for J=1:1:Ntank
Q(J)=0.0;
```

```

Q3(J)=0.0;
    end
end
% Condições fixas

TJ1(1,1)=TK2;
TJ(1,1)=TK2;
TJ1(1,Local)=TK1;
TJ(1,Local)=TK1;
%TJ1(2,1)=TJ1(1,1);
%TJ(I,J)=TJ1(I,J);
%if(Local == 1)
%TJ1(1,1)=TK1;
%TJ(1,1)=TJ1(1,1);
%end

Z(1,1:1:Ntank)=0.0;

for I=1:1:N
    for J=1:1:Ntank

if (J <= Ntank)

TJ2=TJ1(1,J);
TJ2=TJ1(N,J);

TMED2(J)=(TJ1(1,J)+TJ1(N,J))/2.0;
CP(J)=(8.712+1.25E-3*TMED2(J)-0.18E-6*TMED2(J)^2.0)*RGAS/PMAGUA*1000.0;

%capacidade calorífica da água a TEMP DA SOLUÇÃO C (FONTE: VAN NESS 5 EDICAO,
PG. 639)

```

$$\text{CPS}(J) = (8.712 + 1.25E-3 * \text{TS}(J) - 0.18E-6 * \text{TS}(J)^2.0) * \text{RGAS} / \text{PMAGUA} * 1000.0;$$

% densidade da soluçãO

$$\text{DENSOL}(J) = 1733.6 - (0.710186 * \text{TS}(J));$$

% CORREÇÃO DEVIDO A PRESENÇA DA SODA CAUSTICA

$$\text{CPS}(J) = \text{CPS}(J) * \text{DENS} / \text{DENSOL}(J);$$

%VISCOSIDADE DA SOLUÇÃO A TEMPERATURA TS

$$\text{viscs}(J) = 58460.08716 * \exp(-\text{TS}(J) / 21.9365);$$

%VISCOSIDADE DA SOLUÇÃO A TEMPERATURA Tw

$$\text{viscsW}(J) = 58460.08716 * \exp(-\text{TS}(J) / 21.9365);$$

%CONDUTIVIDADE TÉRMICA DA AGUA

$$\text{K1}(J) = -3.838E-1 + (5.254E-3) * \text{TMED2}(J) - (6.369E-6 * (\text{TMED2}(J)^2));$$

%CONDUTIVIDADE TÉRMICA DA SOLUÇÃO

$$\text{KS}(J) = -3.838E-1 + (5.254E-3) * \text{TS}(J) - (6.369E-6 * (\text{TS}(J)^2));$$

%constantes da solucao

$$\text{aux13}(J) = \text{VSOL} * \text{CPS}(J);$$

$$\text{aux14}(J) = \text{DENSOL}(J) * \text{VOLUME} * \text{CPS}(J);$$

$$\text{aux15}(J) = \text{aux13}(J) * L / \text{aux14}(J);$$

$$\text{aux16}(J) = L / \text{aux14}(J);$$

%Constantes de movimento do fluido

$$\text{Nue}(J) = 0.87 * (L1^2 * N1 * \text{DENSOL}(J) / \text{viscs}(J))^{(2./3.)} * (\text{CPS}(J) * \text{viscs}(J) / \text{KS}(J))^{(1./3.)} * (\text{viscs}(J) / \text{viscsW}(J))^{0.14};$$

$$\text{Nue}(J) = 2 * \text{Nue}(J);$$

```

if (Ri2(J) < 2100.0)
Nui(J)=1.86*(((Dserp*V(I,J)*DENS)/VISC)^(0.8))*((CP(J)*VISCW/K1(J))^(1./3.));
else
Nui(J)=0.023*(((Dserp*V(I,J)*DENS)/VISC)^(0.8))*((CP(J)*VISCW/K1(J))^(1./3.));
end

```

```

%COEFICIENTE DE CALOR POR CONVECÇÃO EXTERNO E INTERNO

```

```

he(J)=(KS(J)*Nue(J))/Dt;

```

```

hi(J)=(K1(J)*Nui(J))/Dserp;

```

```

% FATOR DE CORREÇÃO

```

```

FC= 1.+3.5*(Dserp/Dt);

```

```

%COEFICIENTE DE CALOR POR CONVECÇÃO INTERNO MODIFICADO

```

```

hi2(J)= hi(J)*FC;

```

```

%Resistencia exponencial

```

```

RD2(:,J)=RD(:,J)*(1-exp(-(TIME-TIME2(:,J))/TAU(:,J)));

```

```

RD3(:,J)= RD(:,J)*(1-exp(-(TIME-TIME2(:,J))/86400E4));

```

```

%RD2(:,J)=RD(:,J);

```

```

%RD4(:,J)=RD3

```

```

% Soma das resistencias

```

```

SR(:,J)=(1.0/hi2(J))+(LA/KA)+(1.0/he(J)) + RD3(:,J);

```

```

%coeficiente global de transferencia de calor

```

```

U(:,J)=1.0/SR(:,J);

```

```

%CÁLCULO DE CONSTANTES
C1(:,J)=(U(:,J)*S*L)/(CP(J)*DENS*AREA);
C2(:,J)=V(1,J)*L/M;
%C3(:,J)=1.0-C2(:,J)-C1(:,J);
%end

%C3(I,J)=C3(:,J);

C11(J)=C1(1,J);
U1(J)=U(1,J);
C22(J)=C2(1,J);

end

end

end

for I=2:1:N

    for J=1:1:Ntank

Z(I,J)=Z(I-1,J)+M;

if (J >= Local)

    if (ICONF1==1)
%Configuração em série para água da torre
    TJ1(1,Local)=TK1;
    TJ(1,Local)=TJ1(1,Local);
    TJ1(1,J)=TJ1(N,J-1);

```

```

        %TJ(1,J)=TJ(N,J-1);
    else
        TJ1(1,J)=TK1;
    end

else

%Configuração em série para água gelada
    if (ICONF2 == 1)
        TJ1(1,1)=TK2;
        TJ(1,1)=TJ1(1,1);
        if (J > 1)
            TJ1(1,J)=TJ1(N,J-1);
            %TJ(1,J)=TJ(N,J-1);
        end
    else
%Configuração em paralelo para água gelada
        TJ(1,1)=TK2;
        TJ1(1,J)=TK2;
    end
end

TJ1(I,J)=(TJ(I,J)+C22(J)*TJ1(I-1,J)+C11(J)*TS(J))/(1.0+C11(J)+C22(J));

%Q(J)=Q(J)+U1(J)*S*M*(TS(J)-(TJ1(I-1,J)+TJ1(I,J))/2.0);
%Q3(J)=Q3(J)+U1(J)*S*M*(TS(J)-(TJ1(N-1,J)+TJ1(N,J))/2.0);

    end
end

for I=2:1:N
    for J=1:1:Ntank

```

```

        Q(J)=Q(J)+U1(J)*S*M*(TS(J)-(TJ1(I-1,J)+TJ1(I,J))/2.0);
    end
end

for I=1:1:N
    for J=1:1:Ntank
        TJ(I,J)=TJ1(I,J);
    end
end

for J=1:1:Ntank

    if (J == Ntank)

        TS(J)=(TSA(J)+aux15(J)*TSE2-Q(J)*aux16(J))/(1.0+aux15(J));
        AUX2(J)=VSOL*CPS(J)*(TSE2-TS(J));
        TS2(J)=(TSA(J)+aux15(J)*TSE2-AUX2(J)*aux16(J))/(1.0+aux15(J));

    else

        TS(J)=(TSA(J)+aux15(J)*TS(J+1)-Q(J)*aux16(J))/(1.0+aux15(J));
        AUX2(J)=VSOL*CPS(J)*(TS(J+1)-TS(J));
        TS2(J)=(TSA(J)+aux15(J)*TS(J+1)-AUX2(J)*aux16(J))/(1.0+aux15(J));

    end

    %TSA(J)=TS(J);
end

```

```

for J=1:1:Ntank
    TSA(J)=TS(J);
    TS(J)=TS(J);
    TS2(J)=TS2(J);
end
%FOBJ=FOBJ+TS(1)+x3*TS(1);
%FOBJ2=FOBJ/(x+x2);
FOBJ=FOBJ+TS(1);
FOBJ2=FOBJ/(x);
%A1=[TIME TS(1)];
A1=[TIME TS(1) TS(2) TS(3) TS(4) TS(5) TS(6) TS(7)];
B1=[TIME TJ1(N,1) TJ1(N,2) TJ1(N,3) TJ1(N,4) TJ1(N,5) TJ1(N,6) TJ1(N,7)];
C1=[TIME Q(1) Q(2) Q(3) Q(4) Q(5) Q(6) Q(7)];
D1=[TIME U1(1) U1(2) U1(3) U1(4) U1(5) U1(6) U1(7)];
E1=[TIME RD2(:,1) RD2(:,2) RD2(:,3) RD2(:,4) RD2(:,5) RD2(:,6) RD2(:,7)];
F1=[TIME RD3(:,1) RD3(:,2) RD3(:,3) RD3(:,4) RD3(:,5) RD3(:,6) RD3(:,7)];
A=[A2;A1]
B=[B2;B1];
C=[C2;C1];
D=[D2;D1];
E=[E2;E1];
F=[F2;F1];

plot(A(:,1),A(:,2))
%plot(A(:,1),A(:,3))
end

```

APÊNDICE E –SUBPROGRAMAS PARA O USO DE ALGORITMOS GENÉTICOS**E1 - Subprograma Principal Que Utiliza os Operadores Genéticos**

```
x=[];
y=[];
e=[];
min=[];
max=[];
med=[];
j=0;
m=0;
for i=64:255
    flag=0
    j=j+1;

    str = dec2bin(i,8);
    for k=1:8
        aux(k)= str2num(str(k));
        if k > 2
            if aux(k) == 0 & aux(k) == aux(k-1)
                flag=flag+1;
            else
                end
        else
            end
        end
    end
end
if flag == 0
    m=m+1;
    for k=1:8
        aux(k)= str2num(str(k));
        e(m,k)= aux(k);
```

```
end
e

end
xs(j) = str2num(str);
ys(j) = i;
t=xs(j)/1000;
end
[ys' xs']

a=[]
for k=1:100
    for i=1:7
        r= round(rand(1)*54+1)
        a(i,1:16,k)= [e(r,:) e(r,:)]
    end
end

for s=1:16
    [tmp,out,des]= simula(a,1,100);
    x=sort(des)';
    for i=1:100
        [tf, index(i)] = ismember(x(i), des);
    end
    for ic=1:100
        c(:,:,ic)= a(:,:,index(ic));
    end
    s
    min(s)=x(1)
    max(s)=x(100)
    med(s)=mean(x)
    %pause
```

```

sc=[];
for kd=1:100
    for id=1:7
        strp=[];
        for jd=1:8

            strp= [strp num2str(c(id,jd,kd))];
        end
        sc(id,kd)=bin2dec(strp);
    end
end
%a=c;

a(:, :, 1:50)= c(:, :, 1:50);
for i=51:75
    eq=1;
    while eq == 1
        j= round(rand(1)*9+1);
        k= round(rand(1)*9+1);
        u= round(rand(1)*6+1);
        v= round(rand(1)*6+1);
        a(:, :, i)= c(:, :, i-50);
        a(u, :, i)= c(v, :, i-49);
    end
    for w=1:i-1
        if a(:, :, i) == a(:, :, w)
            eq= 1;
        else
            eq =0;
        end
    end
end
end
end
end

```

```

for k=76:100
    eq=1;
    while eq == 1
        a(:,k)= c(:,k-75);
        r= round(rand(1)*54+1);
        u= round(rand(1)*6+1);
        a(u,:,k)= [e(r,:) e(r,:)];
    for w=1:k-1
        if a(:,k) == a(:,w)
            eq= 1;
        else
            eq =0;
        end
    end
end
end
end
end
[tmp,out,des]= simula(a,1,1);
graf(tmp,a(:,16),out)
subplot(6,3,14)
min(s)=x(1)
plot(min)
subplot(6,3,15)
bar(x);
subplot(6,3,17)
plot(max)
subplot(6,3,18)
plot(med)

```

E2 - Rotina de Simulação das Soluções Geradas pelo Subprograma Principal

```
function [tmp,out,des1,des2,des3] = simula(a,ini,fin)
```

```
des1=[];
des2=[];
des3=[];
for p=ini:fin
out=[];
x=[];
tmp=[];
T0=364.25;
TAG=5.0+273.15;
TAT=29.4+273.15;

%velocidade da agua
%V(6)=2.18*3
V=2.18*3;
%V1=(0.863*3.*(44./95.))
Vmax=V;

% area de troca térmica POR METRO DE COMPRIMENTO DE TUBO
S1=0.358;
S2=0.358;
S3=0.358;
S4=0.358;
S5=0.358;
S6=0.358;
S7=0.358;

%resistências constantes
rd1=3.25;
rd2=3.25;
rd3=2.5;
rd4=2.5;
```

rd5=2.5;

rd6=2.5;

rd7=2.5;

%comprimento máximo de cada serpentina

ZMAX=200.0;

%comprimento inicial de cada serpentina

Z1=0.0;

Z2=0.0;

Z3=0.0;

Z4=0.0;

Z5=0.0;

Z6=0.0;

Z7=0.0;

%número de pontos da malha

N = 707;

N1=N;

N2=N;

N3=N;

N4=N;

N5=N;

N6=N;

N7=N;

%incremento de espaço (m)=tamanho da malha espacial

M=ZMAX/(N-1.0);

M1=M;

M2=M;

M3=M;

M4=M;

M5=M;

M6=M;

M7=M;

% incremento de tempo para courant=0.5

L=20000*M/Vmax;

%L=L;

L1=L;

L2=L;

L3=L;

L4=L;

L5=L;

L6=L;

L7=L;

% calor inicial

Q1=0.0;

Q2=0.0;

Q3=0.0;

Q4=0.0;

Q5=0.0;

Q6=0.0;

Q7=0.0;

% constantes de tempo

tau1=1.1;

tau2=1.1;

tau3=1.1;

tau4=1.1;

tau5=1.1;

tau6=1.1;

tau7=1.1;

% tempo de funcionalidade

t1=0;

t2=0;

t3=0;

t4=0;

t5=0;

t6=0;

t7=0;

% coeficiente global de transferência de calor para o trocador limpo

%[1.2357 1.2990 1.3326 1.3936 1.9172 2.1574 2.2953]*10e3

U1=2315.4729;

U2=2026.8953;

U3=1920.3512;

U4=1370.8464;

U5=1300.8486;

U6=1227.0736;

U7=1150.1262;

%U1=2320.6368;

%U2=1903.6348;

%U3=1752.601;

%U4=1295.5444;

%U5=1248.1809;

%U6=1197.3933;

%U7=1143.7997;

% constantes da temperatura da solução

%aux13=auxu

auxu1=60945.3325;

$\text{auxu2}=60375.8256;$
 $\text{auxu3}=60149.9341;$
 $\text{auxu4}=60041.6263;$
 $\text{auxu5}=59922.4926;$
 $\text{auxu6}=59792.9352;$
 $\text{auxu7}=59653.8872;$

$\% \text{aux14}=\text{auxx}$

$\text{auxx1}=199586194.1927;$
 $\text{auxx2}=199192138.2377;$
 $\text{auxx3}=199033774.5525;$
 $\text{auxx4}=198957422.9219;$
 $\text{auxx5}=198873122.0755;$
 $\text{auxx6}=198781065.7324;$
 $\text{auxx7}=198681823.4607;$
 $\%[0.368,0.3687,0.3693,0.3699,0.3704,0.3715,0.3743;]$

$\% \text{aux15}=\text{auxy}$

$\text{auxy1}=\text{auxu1} * \text{L1} / \text{auxx1};$
 $\text{auxy2}=\text{auxu2} * \text{L2} / \text{auxx2};$
 $\text{auxy3}=\text{auxu3} * \text{L3} / \text{auxx3};$
 $\text{auxy4}=\text{auxu4} * \text{L4} / \text{auxx4};$
 $\text{auxy5}=\text{auxu5} * \text{L5} / \text{auxx5};$
 $\text{auxy6}=\text{auxu6} * \text{L6} / \text{auxx6};$
 $\text{auxy7}=\text{auxu7} * \text{L7} / \text{auxx7};$

$\% \text{aux15(J)}=\text{aux13(J)} * \text{L} / \text{aux14(J)};$

$\% \text{aux16}=\text{auxz}$

$\text{auxz1}=\text{L1} / \text{auxx1};$
 $\text{auxz2}=\text{L2} / \text{auxx2};$
 $\text{auxz3}=\text{L3} / \text{auxx3};$

auxz4=L4/auxx4;

auxz5=L5/auxx5;

auxz6=L6/auxx6;

auxz7=L7/auxx7;

%aux16(J)=L/aux14(J);

% constantes da temperatura da água

%CC=C11

%[11.1031,11.6171,12.1038,12.5572,16.973,18.4402,22.4621;]

%6.4527 6.7187 6.9749 7.2209 9.2143 9.8691 11.3214

%8.2575 8.9413 9.5010 9.9165 13.7207 14.6245 17.0041

CC1=11.3214;

CC2=9.8691;

CC3=9.2143;

CC4=7.2209;

CC5=6.9749;

CC6=6.7187;

CC7=6.4527;

CC1=13.28;

CC2=11.72;

CC3=10.88;

CC4=8.231;

CC5=7.927;

CC6=7.587;

CC7=7.215;

```
%DD=C22
%[3667.0208,3667.0208,3667.0208,3667.0208,20000,20000,20000;]
DD1=20000;
DD2=20000;
DD3=20000;
DD4=3667.0208;
DD5=3667.0208;
DD6=3667.0208;
DD7=3667.0208;

%sequencia de limpezas
  %SL=[7 6 5 4 3 2 1 7 6 5 4 3 2 1 7 6 5 4 3 2 1 7 6 5 4 3 2 1 7 6 5 4 3 2 1 7 6 5 4 3
2 1 7 6 5 4 3 2 1];

%y=[T1 T2 T3 T4 T5 T6 T7];
%tmp=[t]
flag1=1;
ind1(1:7)=[1 1 1 1 1 1 1];
ind2(1:7)=[0 0 0 0 0 0 0];
ind3=0;
tp=1;
Tfinal=16;
t=0.0;
A=[0 364.25];
%while(t<=Tfinal)
  A2=A;
for t=0:0.01:16
```

```
if t == tp
```

```
    for i=7:-1:1
```

```
        a1=a(i,tp,p);
```

```
        if a(i,tp,p) == 0
```

```
            ind3 = i;
```

```
            ind1(i)= 0;
```

```
        %if i==1
```

```
        % t1=tp+0.25
```

```
        %elseif i==2
```

```
        % t2=tp+0.25
```

```
        %elseif i==3
```

```
        % t3=tp+0.25
```

```
        %elseif i==4
```

```
        % t4=tp+0.25
```

```
        %elseif i==5
```

```
        % t5=tp+0.25
```

```
        %elseif i==6
```

```
        % t6=tp+0.25
```

```
        %else
```

```
        % t7=tp+0.25
```

```
        %end
```

```
    end
```

```
end
```

```
% pause
```

```
tp=tp+1;
```

```
end
```

```
if t==0
```

```
    %3756,78
```

```
    3756,35
```

```
    3755,64
```

```
    2329,17
```

```
    2318,5 2254,96
```

```
    1903,23
```

U1=3756.78;
U2=3756.35;
U3=3755.64;
U4=2329.17;
U5=2318.5;
U6=2254.96;
U7=1903.23;

else

U1=2318.0;
U2=2030;
U3=1923.0;
U4=1377;
U5=1308.65592;
U6=1234.34746;
U7=1154.48035;
%U1=3756.78;
%U2=3756.35;
%U3=3755.64;
%U4=2329.17;
%U5=2318.5;
%U6=2254.96;
%U7=1903.23;
U1=2431.26;
U2=2150;
U3=2023.46;
U4=1631;
U5=1630.44;
U6=1533.82;
U7=1334;
% U=296.8694

%U=293.9001

```
%U=291.3028
%U=276.4148
%U=273.6132
%U=369.3069
%U=360.4942
end

if t==0
    %T1=364.25;
    %T2=364.25;
    %T3=364.25;
    %T4=364.25;
    %T5=364.25;
    %T6=364.25;
    %T7=364.25;
    %TSE = [296.8531 301.8481 306.7268 311.4841 316.1159 338.2842 349.7178];
    TSA1=364.25;
    TSA2=364.25;
    TSA3=364.25;
    TSA4=364.25;
    TSA5=364.25;
    TSA6=364.25;
    TSA7=364.25;

% coeficiente global de transferência de calor para o trocador limpo
%[1.2357 1.2990 1.3326 1.3936 1.9172 2.1574 2.2953]*10e3

%329.4591 327.4126 310.3396 308.9290 304.3865 299.4945 294.7859

TA1=364.15;
TA2=364.15;
```

TA3=364.15;

TA4=364.15;

TA5=364.15;

TA6=364.15;

TA7=364.15;

%TKM1 = [280.9193 286.3995 291.7599 296.9944 303.3380 305.3138 308.0214];

%TA1=308.0214;

%TA2=305.3138;

%TA3=303.3380;

%TA4=296.9944;

%TA5=291.7599;

%TA6=286.3995;

%TA7=280.9193;

for I=2:1:N

 %TJA1(I)=308.0214;

 %TJA2(I)=305.3138;

 %TJA3(I)=303.3380;

 %TJA4(I)=296.9944;

 %TJA5(I)=291.7599;

 %TJA6(I)=286.3995;

 %TJA7(I)=280.9193;

 TJA1(I)=364.15;

 TJA2(I)=364.15;

 TJA3(I)=364.15;

 TJA4(I)=364.15;

 TJA5(I)=364.15;

 TJA6(I)=364.15;

 TJA7(I)=364.15;

end

```

end
% Chamada do tanque 1
if ind1(1) == 0 & (ind3 == 0 | ind3 == 1)
    if ind2(1) < 0.25
        ind2(1)=ind2(1)+0.01;
        T1=T0;
        %t1=t+0.01;
        ind3=1;
    else
        ind1(1)=1;
        ind2(1)=0;
        t1=t;
        ind3=0;
    end
else
    [T1,TJ1,TA1,t1]=
AG4(T0,tau1,t,t1,rd1,Z1,M1,L1,TA2,Q1,U1,CC1,DD1,auxu1,auxx1,auxy1,auxz1,S1,TSA1,TJA
1,N1,ind1(1));
end
% Chamada do tanque 2
if ind1(2) == 0 & (ind3 == 0 | ind3 == 2)
    if ind2(2) < 0.25
        ind2(2)=ind2(2)+0.01;
        %t2=t+0.01;
        T2=T1;
        TA2=TA3;
        ind3=2;
    else
        ind1(2)=1;
        ind2(2)=0;
        t2=t;

```

```

        ind3=0;
    end
else
    [T2,TJ2,TA2,t2]=
AG4(T1,tau2,t,t2,rd2,Z2,M2,L2,TA3,Q2,U2,CC2,DD2,auxu2,auxx2,auxy2,auxz2,S2,TSA2,TJA
2,N1,ind1(2));
end

```

% Chamada do tanque 3

```

if ind1(3) == 0 & (ind3 == 0 | ind3 == 3)
    if ind2(3) < 0.25
        ind2(3)=ind2(3)+0.01;
        T3=T2;
        TA3=TAT;
        % t3=t+0.01;
        ind3=3;
    else
        ind1(3)=1;
        ind2(3)=0;
        t3=t;
        ind3=0;
    end
else
    [T3,TJ3,TA3,t3]=
AG4(T2,tau3,t,t3,rd3,Z3,M3,L3,TAT,Q3,U3,CC3,DD3,auxu3,auxx3,auxy3,auxz3,S3,TSA3,TJA
3,N1,ind1(3));
end

```

% Chamada do tanque 4

```

if ind1(4) == 0 & (ind3 == 0 | ind3 == 4)
    if ind2(4) < 0.25
        ind2(4)=ind2(4)+0.01;

```

```

    T4=T3;
    TA4=TA5;
    % t4=t+0.01;
    ind3=4;
else
    ind1(4)=1;
    ind2(4)=0;
    t4=t;
    ind3=0;
end
else
    [T4,TJ4,TA4,t4]=
AG4(T3,tau4,t,t4,rd4,Z4,M4,L4,TA5,Q4,U4,CC4,DD4,auxu4,auxx4,auxy4,auxz4,S4,TSA4,TJA
4,N1,ind1(4));
end

% Chamada do tanque 5
if ind1(5) == 0 & (ind3 == 0 | ind3 == 5)
    if ind2(5) < 0.25
        ind2(5)=ind2(5)+0.01;
        T5=T4;
        TA5=TA6;
        %t5=t+0.01;
        ind3=5;
    else
        ind1(5)=1;
        ind2(5)=0;
        t5=t;
        ind3=0;
    end
end
else

```

```

    [T5,TJ5,TA5,t5]=
    AG4(T4,tau5,t,t5,rd5,Z5,M5,L5,TA6,Q5,U5,CC5,DD5,auxu5,auxx5,auxy5,auxz5,S5,TSA5,TJA
    5,N1,ind1(5));
    end

```

```

% Chamada do tanque 6

```

```

    if ind1(6) == 0 & (ind3 == 0 | ind3 == 6)

```

```

        if ind2(6) < 0.25

```

```

            ind2(6)=ind2(6)+0.01;

```

```

            T6=T5;

```

```

            TA6=TA7;

```

```

            %t6=t+0.01;

```

```

            ind3=6;

```

```

        else

```

```

            ind1(6)=1;

```

```

            ind2(6)=0;

```

```

            t6=t;

```

```

            ind3=0;

```

```

        end

```

```

    else

```

```

        [T6,TJ6,TA6,t6]=

```

```

        AG4(T5,tau6,t,t6,rd6,Z6,M6,L6,TA7,Q6,U6,CC6,DD6,auxu6,auxx6,auxy6,auxz6,S6,TSA6,TJA
        6,N1,ind1(6));

```

```

    end

```

```

% Chamada do tanque 7

```

```

    if ind1(7) == 0 & (ind3 == 0 | ind3 == 7)

```

```

        if ind2(7) < 0.25

```

```

            ind2(7)=ind2(7)+0.01;

```

```

            T7=T6;

```

```

            ind3=7;

```

```

            %t7=t+0.01;

```

```
else
```

```
    ind1(7)=1;
```

```
    ind2(7)=0;
```

```
    t7=t;
```

```
    ind3=0;
```

```
end
```

```
else
```

```
    [T7,TJ7,TA7,t7]=
```

```
AG4(T6,tau7,t,t7,rd7,Z7,M7,L7,TAG,Q7,U7,CC7,DD7,auxu7,auxx7,auxy7,auxz7,S7,TSA7,TJ  
A7,N1,ind1(7));
```

```
end
```

```
TSA1=T1;
```

```
TSA2=T2;
```

```
TSA3=T3;
```

```
TSA4=T4;
```

```
TSA5=T5;
```

```
TSA6=T6;
```

```
TSA7=T7;
```

```
for I=2:1:N
```

```
    TJA1(I)=TJ1(I);
```

```
    TJA2(I)=TJ2(I);
```

```
    TJA3(I)=TJ3(I);
```

```
    TJA4(I)=TJ4(I);
```

```
    TJA5(I)=TJ5(I);
```

```
    TJA6(I)=TJ6(I);
```

```
    TJA7(I)=TJ7(I);
```

```
end
```

```
TA1=TJA1(N);
```

```
TA2=TJA2(N);
```

```

TA3=TJA3(N);
TA4=TJA4(N);
TA5=TJA5(N);
TA6=TJA6(N);
TA7=TJA7(N);

x=[T1 T2 T3 T4 T5 T6 T7];
out =[out ; x];
tmp=[tmp ;t];
end
a(1:7,1:16,p);
[m1,n1]=size(out);
des1(p)=0;
%des2(p)=0;
for j=1:m1
    if out(j,7) > 298.15
        des1(p)= des1(p)+ 3024*abs(out(j,7)-298.15);
    else
        des1(p)= des1(p)+ 3024*abs(out(j,7)-298.15);
    end
end
end
des2(p)=0;
for jj=1:16
aa=find(a(:,jj,p) == 0);
des2(p)= des2(p)+3024*((length(aa))^2);
end
des3(p)=0;
bb=find(a(:,:,p) == 0);
des3(p)=8000*abs((length(bb)-16)^2);
%des2(p)= des2(p)+bb(p)*50;
%graf(tmp,a,out)
des(p)=des1(p)+des2(p)+des3(p);

```

```

des1(p)=des1(p)/100;
des2(p);
end

```

E3 - Subprograma de Cálculo das Variáveis de Saída dos Tanques

```

function [Tout,TJ,TAout,ti]=
AG4(Tin,tau,t,ti,rd,Z,M,L,TAin,Q,U,CC,DD,auxu,auxx,auxy,auxz,S,TSAout,TJA,N,flag)
Q=0.0;
tt=ti;
%Resistencia exponencial
rd2=rd*(1-exp(-(t-ti)/tau));
rd3=rd*(1-exp(-(t-ti)/1E4));
%rd2=rd
rd2=0.0;
sr=rd2+rd3;
%sr=0;
U1=U/(1+sr*U);

for I=2:1:N
    Z=Z+M;
    TJ(1)=TAin;
    TJ(I)=(TJA(I)+DD*TJ(I-1)+CC*TSAout)/(1.0+CC+DD);
    Q=Q+U1*S*M*(TSAout-(TJ(I-1)+TJ(I))/2.0);
    % Q(J)=Q(J)+U1(J)*S*M*(TS(J)-(TJ1(I-1,J)+TJ1(I,J))/2.0);
    %TJ(I)=TJ1(I);
end

%for I=2:1:N
%  TJA(I)=TJ(I);
%end

```

```

Q;
Z;
TAout=TJ(N);
%TS(J)=(TSA(J)+aux15(J)*TSE2-Q(J)*aux16(J))/(1.0+aux15(J));
TSAout;
Tout=(TSAout+auxy*Tin-Q*auxz)/(1.0+auxy);

%ti=ti+0.01

```

E4 - Subprograma Gerador de Gráficos

```

function graf(tmp,a,y)
subplot(6,3,1)
stem(1:16,a(1,1:16,1))
title('tanque 1')
subplot(6,3,2)
stem(1:16,a(2,1:16,1))
title('tanque 2')
subplot(6,3,3)
stem(1:16,a(3,1:16,1))
title('tanque 3')
subplot(6,3,4)
plot(tmp,y(:,1))
subplot(6,3,5)
plot(tmp,y(:,2))
subplot(6,3,6)
plot(tmp,y(:,3))

subplot(6,3,7)
stem(1:16,a(4,1:16,1))
title('tanque 4')
subplot(6,3,8)

```

```
stem(1:16,a(5,1:16,1))
title('tanque 5')
subplot(6,3,9)
stem(1:16,a(6,1:16,1))
title('tanque 6')
subplot(6,3,10)
plot(tmp,y(:,4))
subplot(6,3,11)
plot(tmp,y(:,5))
subplot(6,3,12)
plot(tmp,y(:,6))

subplot(6,3,13)
stem(1:16,a(7,1:16,1))
title('tanque 7')
subplot(6,3,16)
plot(tmp,y(:,7))
```