

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
ESCOLA DE ENGENHARIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

**Minimização do Uso de Água e Efluentes com
Considerações Econômicas e Operacionais via
Programação Matemática**

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

Edson Cordeiro do Valle

PORTO ALEGRE

2005

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
ESCOLA DE ENGENHARIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

Minimização do Uso de Água e Efluentes com Considerações Econômicas e Operacionais via Programação Matemática

Edson Cordeiro do Valle

Dissertação de Mestrado apresentada como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Engenharia Química.

Área de concentração: Pesquisa e Desenvolvimento de Processos

Orientadores:

Prof. Dr. Argimiro Resende Secchi

Prof. Dr. Jorge Otávio Trierweiler

PORTO ALEGRE
2005

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
ESCOLA DE ENGENHARIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

A Comissão Examinadora, abaixo assinada, aprova a Dissertação *Minimização do Uso de Água e Efluentes com Considerações Econômicas e Operacionais via Programação Matemática*, elaborada por Edson Cordeiro do Valle, como requisito parcial para obtenção do Grau de Mestre em Engenharia Química.

Comissão Examinadora:

Profa. Dra. Isabel Cristina Tessaro

Profa. Dra. Talita Furlanetto Mendes

Dr. Luís Gustavo Soares Longhi

*Ao meu amor
Silvana*

*"Prefiro ser esta
metamorfose
ambulante do que ter
aquela velha opinião
formada sobre tudo."*

Raul Seixas

*"...uma propriedade só é
legitimamente adquirida
quando, para a possuir,
não se fez mal a
ninguém."**

*"O homem que ocupa uma
posição elevada no
mundo, não se crê
ofendido pelos insultos
daquele que considera
seu inferior."**

*"A riqueza da inteligência deve
te servir como a do ouro;
espalha ao redor de ti os
tesouros da instrução; espalha
sobre os teus irmãos os
tesouros do teu amor, e eles
frutificarão ."**

Agradecimentos

Gostaria de agradecer inicialmente a Deus, por ter me guiado ao longo deste pequeno trecho, acendido as luzes, aberto as portas e colocado as pessoas certas ao meu alcance. Entre estas pessoas "certas", gostaria de agradecer meu pai Antonio e a minha mãe Isamara pela minha educação, criação e apoio, contribuindo para minha formação de engenheiro e principalmente de meu caráter pessoal, sendo um exemplo que sempre procurarei seguir. Gostaria de agradecer meus queridos parentes que acompanharam minha jornada e apoiaram minhas decisões, especialmente a minha sogra "Nilda" pelo apoio prestado. Não poderia deixar de agradecer à pessoa mais especial que apareceu em minha vida, minha noiva Silvana, cuja sabedoria, amor e companheirismo sempre me trouxe inspiração, ajudou a relevar as dificuldades enfrentadas e aceitar novos desafios.

Gostaria de agradecer também aos meus amigos do mestrado que tornaram esta fase bastante frutífera: Em especial, para o pessoal da sala 13 (Hãããã!), André, Flávio e Rafael; Aos demais colegas do mestrado, Ariel, Samuel, Vinícius, Farenzena, Tiago, Paula, Débora, Fisch, Liliane e Arlindo.

Meus sinceros agradecimentos aos meus orientadores Prof. Argimiro Resende Secchi e Prof. Jorge Otávio Trierweiler pelo tempo e dedicação investido neste trabalho além dos ensinamentos que contribuíram para meu amadurecimento. Gostaria de agradecer também, ao meu orientador da época de graduação Dr. Oscar W. Perez Lopes que fez despertar em mim o interesse pela pesquisa; aos demais professores do Departamento de Engenharia Química da UFRGS pela dedicação na formação dos Engenheiros desta Universidade e pelo compromisso com a qualidade de ensino; aos funcionários que, com grande dedicação, tornam este departamento em exemplo de eficiência: Clédia, Irma e Igor.

Finalmente agradeço a Id software (pelas horas de diversão), a CAPES pelo financiamento deste trabalho e a todas as pessoas que contribuíram direta ou indiretamente para que mais este passo fosse dado.

Resumo

A água é uma matéria-prima estratégica na indústria química, petroquímica e de alimentos, sendo utilizada em diversas etapas dos processos. Devido à importância econômica e ao impacto ambiental resultante do consumo da água na indústria, o uso racional da água vem sendo amplamente enfatizado. Nas últimas décadas, diversas metodologias foram propostas para a minimização do consumo de água e emissão de efluentes líquidos na indústria, baseadas em conceitos de integração mássica como reuso, reciclo e regeneração das correntes que conectam os processos. As metodologias propostas na literatura para a integração mássica dividem-se em dois grandes grupos: o primeiro utiliza a abordagem termodinâmica-heurística-evolutiva, enquanto que o segundo faz uso da programação matemática e otimização. Ambas as metodologias apresentam dificuldades para tratar do caso de múltiplos poluentes, sendo que na primeira, é necessário uma série de aproximações para tratar deste tipo de problema e na segunda estão presentes limitações relativas aos métodos de otimização. Além disso, sistemas integrados massivamente podem apresentar dificuldades operacionais devido ao maior número de reciclos e reusos de correntes. O presente trabalho através do uso de ferramentas de programação matemática e, baseado no problema padrão de síntese de redes proposto por Fontana (2002), propõe métodos para a redução da complexidade do problema de síntese e obtenção de redes integradas massivamente, considerando aspectos econômicos e operacionais. Inicialmente foi proposta a eliminação de variáveis inteiras do problema de otimização, transformando o problema de programação não-linear inteira-mista (MINLP) em um problema de programação não-linear (NLP). Em seguida, foi proposta uma metodologia para a redução da complexidade do problema baseada na utilização das restrições de igualdade, reduzindo o número de variáveis de decisão. As formulações propostas apresentaram bons resultados, diminuindo consideravelmente o tempo computacional em relação ao problema MINLP original. Baseada nas metodologias desenvolvidas para redução da complexidade do problema, foi implementado ainda um gerador de estimativas iniciais viáveis utilizando números aleatórios. Também foram propostas três implementações para a síntese de redes com considerações econômicas e operacionais, resolvendo o problema de otimização em dois níveis: um externo para avaliação de critérios econômicos e um interno de onde é obtido o índice operacional. Das três formulações com considerações operacionais propostas, duas apresentaram redes com melhor desempenho operacional quando comparadas com os problemas somente com considerações econômicas. Tais resultados foram avaliados através de simulações dinâmicas com modelos linearizados, sendo observado, nestas duas implementações, aumento da robustez do sistema (redução da ação de controle sobre as variáveis manipuladas) frente a distúrbios positivos nas cargas de poluentes e mudanças nos *set-points* das variáveis controladas.

Palavras chave: Integração de processos, síntese de redes de integração mássica, síntese de redes de trocadores de massa, minimização do consumo de água, minimização de efluentes, reuso, reciclo, otimização, MINLP, NLP, controlabilidade, operabilidade.

Abstract

Water is an important raw material in the chemical, petrochemical, and food industry, being used in several stages of a process. Based on the economic importance of the water and the environmental impact through its employment in the industry, its rational consume has been receiving special attention. In the past decades, several methodologies have been proposed for the minimization of industrial water consume and wastewater emissions based on concepts of mass integration such as reuse, recycle, and regeneration of process streams. The methodologies proposed in the literature for the mass integration can be classified in two main groups: the first uses the thermodynamic-heuristic-evolutive approach while the second uses mathematical programming and optimization. Both methodologies show difficulties to deal with the case of multiple pollutants: on the first one it is necessary to make some assumptions to solve this problem while the second, limitations relative to optimization methods are present. Another problem is the operational limitations due to streams recycle and reuse, that integrated processes can present. The present study, through the use of mathematical programming tools, based on the synthesis problem proposed by Fontana (2002), proposes methods to reduce the problem complexity and also for the synthesis of mass integration networks regarding economical and operational aspects. Initially it was proposed the elimination of the integer variables from the optimization problem, changing the problem from mixed-integer nonlinear programming (MINLP) to nonlinear programming (NLP). In the following, a methodology for the reduction of the problems complexity, based on the equality constraints, was applied to reduce the number of decision variables. The proposed formulations showed good results, reducing the computational time comparing to the MINLP problem. Based on the proposed methodologies for the reduction of the problem complexity described above, it was implemented a feasible initial guess generator based on random numbers. It was also proposed three formulations for the network synthesis with economic and operational considerations, solving the synthesis problem in two levels: an external level for the evaluation of economical criteria and an internal level where the operational index is obtained. Two out of the three implementations presented networks with better operational results comparing with problems only with economical aspects. These results were evaluated by dynamic simulations with linearized models and it was observed an increase in the systems robustness (reduction of the control action over the manipulated variables) when the system was subjected to positive disturbances in the pollutants loads and set-points changes.

Key-word: Process integration, synthesis of mass networks, synthesis of mass exchange networks, water minimization, wastewater minimization, recycle, reuse, optimization, MINLP, NLP, controllability, operability.

Sumário

Capítulo 1: Introdução	23
1.1. Estatísticas sobre a água no mundo	24
1.2. A água na indústria de processos	25
1.3. Integração de Processos	28
1.3.1. Histórico	28
1.3.2. Definições	29
1.3.3. Potenciais de ganho com a aplicação da integração mássica	31
1.4. Integração e controlabilidade	33
1.1. Objetivos do trabalho	35
1.5. Estrutura da Dissertação	35
Capítulo 2: Revisão Bibliográfica	37
2.1. Abordagens para a Realização da Integração Mássica	38
2.2. Métodos de Síntese de Redes de Integração Mássica	40
2.2.1. Técnicas Heurístico-Teóricas	40
2.2.2. Técnicas de Programação Matemática	42
2.3. Operabilidade de Redes Integradas	44
2.4. Ferramentas Computacionais para a Integração de Processos	47
2.4.1. Ferramentas Baseadas no Método do Ponto de Estrangulamento	47
2.4.2. Ferramentas Baseadas em Programação Matemática	47
2.4.3. Ferramentas Genéricas de Otimização	48
Capítulo 3: Descrição e Equacionamento do Problema	50
3.1. Descrição do Problema de Síntese de Redes de Integração Mássica	51
3.2. Equacionamento do Problema	55
3.2.1. Equacionamento do problema MINLP completo	55
Capítulo 4: Métodos de Resolução para o Problema	66
4.1. Descrição do problema MINLP reduzido	67
4.1.1. Função Objetivo	71
4.1.2. Restrições de Igualdade	71
4.1.3. Restrições de Desigualdade	72
4.1.4. Análise de Graus de Liberdade do Sistema	72
4.2. Problema NLP completo	73
4.2.1. Função Objetivo	73
4.2.2. Restrições de Igualdade	74
4.2.3. Restrições de Desigualdade	75
4.2.4. Análise de Graus de Liberdade do Sistema	75
4.3. Problema NLP reduzido	75
4.3.1. Função Objetivo	75
4.3.2. Restrições de Igualdade	76
4.3.3. Restrições de Desigualdade	76
4.3.4. Análise de Graus de Liberdade do Sistema	76
4.4. Gerando estimativas iniciais	77

4.4.1.	Função objetivo.....	77
4.4.2.	Restrições de Igualdade	77
4.4.3.	Restrições de Desigualdade	77
4.4.4.	Análise de Graus de Liberdade do Sistema	78
4.5.	Equacionamento do Problema com Considerações Operacionais	78
4.5.1.	Formulação Operacional 1	79
4.5.2.	Formulação Operacional 2	85
4.5.3.	Formulação Operacional 3	87
Capítulo 5: Resultados e Discussão		95
5.1.	Obtenção dos Resultados.....	96
5.2.	Resultados dos Problemas com Considerações Econômicas	96
5.2.1.	Problema de Geração de Estimativas Iniciais	96
5.2.2.	Problema MINLP Original.....	99
5.2.3.	Problema MINLP reduzido	101
5.2.4.	Problema NLP completo	101
5.2.5.	Problema NLP reduzido.....	102
5.3.	Avaliação da Operabilidade e Economicidade das Estruturas Desenvolvidas.....	104
5.3.1.	Modelagem dos processos	104
5.3.2.	Modelagem dos regeneradores.....	105
5.3.3.	Correntes do processo	107
5.3.4.	Especificações, Distúrbios, Variáveis Controladas e Manipuladas	108
5.3.5.	Linearização dos Modelos Dinâmicos	109
5.3.6.	Resultados dos Problemas em Malha Aberta.....	111
5.3.7.	Resultados dos Problemas em Malha Fechada	125
5.4.	Considerações Finais.....	142
Capítulo 6: Conclusões e Sugestões para Trabalhos Futuros		144
6.1.	Conclusões.....	145
6.1.1.	Principais contribuições	145
6.1.2.	Resumo dos Resultados	146
6.2.	Sugestões para Trabalhos Futuros.....	149
Apêndice A: Análise de Graus de Liberdade do Sistema		157
A.1.	Problema MINLP Completo	157
A.2.	Problema MINLP reduzido	158
A.3.	Problema NLP completo	159
A.4.	Problema NLP reduzido	161
A.5.	Problema NLP reduzido para geração de estimativas iniciais	162
Apêndice B: Linearização do Modelo Dinâmico		163
B.1.	Modelagem dos processos.....	163
B.1.1.	Resposta dos Processos Linearizados.....	166
B.2.	Modelagem dos regeneradores.....	169
B.2.1.	Resposta dos Regeneradores Linearizados.....	173
B.3.	Correntes de Processo.	175
B.4.	Linearização das Correntes	177
B.5.	Subsistema Divisor de Correntes	178
B.6.	Subsistema Água Fresca.....	178
B.7.	Subsistema Efluente Líquido.....	179

Apêndice C: Resultados dinâmicos	180
C.1. Resultados	180
Apêndice D: Resultados dos Problemas de Otimização	188
D.1. Resultados	188

Lista de Figuras

Figura 1.1: Distribuição da água no mundo	24
Figura 1.2: Exemplo de sistema com tratamento de final de tubulação	28
Figura 1.3: Exemplos de sistemas com reuso, regeneração-reuso e regeneração-reciclo.....	30
Figura 1.4: Exemplo de sistema com segregação, reuso e regeneração-reuso.	30
Figura 1.5: Operações envolvidas na captação e tratamento de água na indústria.	32
Figura 1.6: Exemplo de um processo típico da indústria química Papadourakis; Doherty e Douglas (1987).....	34
Figura 1.7: Exemplo de um processo integrado massivamente.	35
Figura 2.1: Exemplo da construção de uma rede de trocadores de massa.	38
Figura 2.2: Exemplo de síntese de processos que utilizam água: a) sem integração; b) com integração	39
Figura 2.3: Exemplo de sistema integrado por tratamento distribuído.	39
Figura 2.4: Algoritmo para a síntese de redes de trocadores de massa apresentado no trabalho de El-Halwagi e Manousiouthakis (1990a).....	44
Figura 2.5: Exemplo de sistema com reciclo material estudado por Morud e Skogestad (1996).	45
Figura 2.6: Exemplo de sistema com integração energética estudado por Morud e Skogestad (1996).	46
Figura 3.1: Representação de uma unidade que compõe a rede de integração mássica.	52
Figura 3.2: Representação esquemática da rede de integração mássica.	53
Figura 3.3: Disposição das unidades presentes no problema com suas respectivas distâncias.	55
Figura 3.4: Representação esquemática do balanço de massa no misturador i	58
Figura 3.5: Representação esquemática do balanço de massa na unidade i	59
Figura 3.6: Representação esquemática do balanço de massa no divisor de corrente i	60
Figura 3.7: Representação esquemática do balanço de massa por componentes no misturador i	61
Figura 3.8: Representação esquemática do balanço de componente na unidade i	62
Figura 4.1: Função aplicada às variáveis contínuas para tornar seu comportamento semelhante ao das discretas.....	73
Figura 4.2: Representação esquemática de um sistema integrado	79
Figura 4.3: Representação esquemática do algoritmo para cálculo do ótimo econômico e operacional	81
Figura 4.4: Representação esquemática do algoritmo para obtenção do ótimo econômico e operacional	86
Figura 4.5: Representação esquemática do algoritmo para obtenção do ótimo econômico e operacional	88
Figura 4.6: Sistema em malha aberta.	89
Figura 4.7: Sistema em malha fechada	90
Figura 4.8: Sistema em malha semi-fechada	90
Figura 4.9: Função utilizada para a incorporação do RGA em uma otimização.	92
Figura 5.1: Esquema do controlador para o <i>holdup</i> dos processos.	105
Figura 5.2: Esquema dos regeneradores.	106
Figura 5.3: Entradas e saídas do sistema.....	108
Figura 5.4: Esquema da malha de conexões usada para a linearização da rede.	110
Figura 5.5: Exemplo do sistema em malha aberta.	111
Figura 5.6: Exemplo do sistema em malha fechada.....	111
Figura 5.7: Solução obtida dos problemas NLPs completo e reduzido, somente com considerações econômicas para a vazão máxima de água de reposição de 1 t/h.	112

Figura 5.8: Resposta da melhor solução obtida dos problemas NLPs completo e reduzido, somente com considerações econômicas, para a vazão máxima de água de reposição de 1 t/h.	113
Figura 5.9: Solução obtida dos problemas MINLPs completo e reduzido, somente com considerações econômicas, para a vazão máxima de água de reposição de 1 t/h.	113
Figura 5.10: Resposta da melhor solução obtida dos problemas MINLPs completo e reduzido, somente com considerações econômicas, para a vazão máxima de água de reposição de 1 t/h.	114
Figura 5.11: Solução obtida para o problema operacional 1 (onde é utilizado os multiplicadores de Lagrange com perturbação na função objetivo interna) para a vazão máxima de água de reposição de 1 t/h.	115
Figura 5.12: Resposta da melhor solução obtida para o problema operacional 1 (onde é utilizado os multiplicadores de Lagrange com perturbação na função objetivo interna), para a vazão máxima de água de reposição de 1 t/h.	115
Figura 5.13: Solução do problema operacional 2 (onde é utilizado os multiplicadores de Lagrange sem perturbação na função objetivo interna), para a vazão máxima de água de reposição de 1 t/h.	116
Figura 5.14: Resposta da melhor solução obtida para o problema operacional 2 (onde é utilizado os multiplicadores de Lagrange sem perturbação na função objetivo interna) para a vazão máxima de água de reposição de 1 t/h.	116
Figura 5.15: Resposta da melhor solução obtida para o problema operacional 3 (onde é usado o RGA calculado a partir da matriz de ganhos por perturbação na função objetivo interna) para a vazão máxima de água de reposição de 1 t/h.	117
Figura 5.16: Resposta da melhor solução obtida para o problema operacional 3 (onde é usado o RGA calculado a partir da matriz de ganhos por perturbação na função objetivo interna) para a vazão máxima de água de reposição de 1 t/h.	117
Figura 5.17: Solução obtida dos problemas NLPs completo e reduzido, somente com considerações econômicas, para a vazão máxima de água de reposição de 4 t/h.	118
Figura 5.18: Resposta da melhor solução obtida dos problemas NLPs completo e reduzido, somente com considerações econômicas, para a vazão máxima de água de reposição de 4 t/h.	118
Figura 5.19: Solução obtida dos problemas MINLPs completo e reduzido, somente com considerações econômicas, para a vazão máxima de água de reposição de 4 t/h.	119
Figura 5.20: Resposta da melhor solução obtida dos problemas MINLPs, completo e reduzido, somente com considerações econômicas para a vazão máxima de água de reposição de 4 t/h.	120
Figura 5.21: Solução obtida para o problema operacional 1 (onde é utilizado os multiplicadores de Lagrange com perturbação na função objetivo interna) para a vazão máxima de água de reposição de 4 t/h.	120
Figura 5.22: Resposta da melhor solução obtida para o problema operacional 1 (onde é utilizado os multiplicadores de Lagrange com perturbação na função objetivo interna) para a vazão máxima de água de reposição de 4 t/h.	121
Figura 5.23: Solução obtida para o problema operacional 2 (onde é utilizado os multiplicadores de Lagrange sem perturbação na função objetivo interna) para a vazão máxima de água de reposição de 4 t/h.	122
Figura 5.24: Resposta da melhor solução obtida para o problema operacional 2 (onde é utilizado os multiplicadores de Lagrange sem perturbação na função objetivo interna) para a vazão máxima de água de reposição de 4 t/h.	122

Figura 5.25: Solução obtida para o problema operacional 3 (onde é usado o RGA calculado a partir da matriz de ganhos por perturbação na função objetivo interna) para a vazão máxima de água de reposição de 4 t/h.....	123
Figura 5.26: Resposta da melhor solução obtida para o problema operacional 3 (onde é usado o RGA calculado a partir da matriz de ganhos por perturbação na função objetivo interna) para a vazão máxima de água de reposição de 4 t/h.	123
Figura 5.27: Resposta do melhor resultado da implementação operacional 1 em malha aberta utilizando $Ma_i = 5t$ e $Kp_i = 500.h^{-1}$	124
Figura 5.28: Resposta do melhor resultado da implementação NLP original em malha aberta utilizando $Ma_i = 5t$ e $Kp_i = 500.h^{-1}$	125
Figura 5.29: RGA dinâmico e condicionamento mínimo para a estrutura "NLP – Fmáx=1-A".	131
Figura 5.30: RGA dinâmico e condicionamento mínimo para a estrutura "NLP – Fmáx=1-B".	132
Figura 5.31: RGA dinâmico e condicionamento mínimo para a estrutura "Oper 1 – Fmáx=1".	133
Figura 5.32: RGA dinâmico e condicionamento mínimo para a estrutura "Oper 2 – Fmáx=1".	134
Figura 5.33: RGA dinâmico e condicionamento mínimo para a estrutura "Oper 3 – Fmáx=1".	134
Figura 5.34: RGA dinâmico e condicionamento mínimo para a estrutura "NLP – Fmáx=4".	136
Figura 5.35: RGA dinâmico e condicionamento mínimo para a estrutura "Oper 2 – Fmáx=4".	136
Figura 5.36: RGA dinâmico e condicionamento mínimo para a estrutura "Oper 3 – Fmáx=4".	137
Figura B.1: Resposta das vazões de cada componente na saída dos processos ($Lout_{i,1}$, $Lout_{i,2}$ e $Lout_{i,3}$) para perturbações tipo degrau nas vazões de alimentação de cada componente: $Lin_{i,1}$, $Lin_{i,2}$ e $Lin_{i,3}$	166
Figura B.2: Resposta das composições de cada componente na saída dos processos ($x_{i,1}$, $x_{i,2}$ e $x_{i,3}$) para perturbações tipo degrau nas vazões de alimentação de cada componente: $Lin_{i,1}$, $Lin_{i,2}$ e $Lin_{i,3}$	167
Figura B.3: Resposta das vazões de cada componente na saída dos processos ($Lout_{i,1}$, $Lout_{i,2}$ e $Lout_{i,3}$) para perturbações tipo degrau nas cargas de poluentes de cada componente: $M_{i,1}$, $M_{i,2}$ e $M_{i,3}$	168
Figura B.4: Resposta das composições de cada componente na saída dos processos ($x_{i,1}$, $x_{i,2}$ e $x_{i,3}$) para perturbações tipo degrau nas cargas de poluentes de cada componente: $M_{i,1}$, $M_{i,2}$ e $M_{i,3}$	169
Figura B.5: Resposta das vazões de cada componente na saída do Regenerador 1 ($Lout_{5,1}$, $Lout_{5,2}$ e $Lout_{5,3}$, $SM_{5,1}$) para perturbações tipo degrau nas vazões de alimentação de cada componente: $Lin_{5,1}$, $Lin_{5,2}$ e $Lin_{5,3}$	174
Figura B.6: Resposta das vazões de cada componente na saída do Regenerador 2 ($Lout_{6,1}$, $Lout_{6,2}$ e $Lout_{6,3}$, $SM_{6,2}$) para perturbações tipo degrau nas vazões de alimentação de cada componente: $Lin_{6,1}$, $Lin_{6,2}$ e $Lin_{6,3}$	175

Lista de Tabelas

Tabela 1.1: Distribuição da água doce em regiões dos continentes.	25
Tabela 1.2: Principais propriedades da água.	26
Tabela 1.3: Propriedades da água para aplicações em sistema de troca térmica.	26
Tabela 1.4: Volume de água consumido em diversos países para a produção de alimentos e materiais diversos.	26
Tabela 1.5: Maiores geradores de efluentes no Rio Grande do Sul em volume.	27
Tabela 1.6: Estudos de caso de integração energética apresentados em literatura.	31
Tabela 1.7: Estudos de caso de integração mássica apresentados em literatura.	31
Tabela 2.1: Ferramentas comerciais para a síntese de redes utilizando o Método <i>Pinch</i>	47
Tabela 2.2: Ferramentas comerciais para a síntese de redes utilizando programação matemática.	48
Tabela 2.3: Ferramentas genéricas de otimização para a modelagem de um problema de síntese de redes.	48
Tabela 3.1: Conexões permitidas entre as unidades da rede.	52
Tabela 3.2: Vazão operacional, carga de poluente e concentração máxima de poluente especificadas na descrição do problema.	54
Tabela 3.3: Distância entre as unidades.	55
Tabela 3.4 : Descrição das variáveis utilizadas na formulação do problema.	56
Tabela 4.1: Restrições de igualdade apresentas no problema NLP.	74
Tabela 4.2: Comparação entre os graus de liberdade dos problemas apresentados.	76
Tabela 5.1: Tempos computacionais médio e total em segundos para a resolução dos problemas descritos no Capítulo 3 e 4 para as vazões máximas de água de reposição de 1 e 4 t/h.	97
Tabela 5.2: Primeiro resultado do problema de geração de estimativas iniciais para vazão máxima de água de reposição de 1 t/h.	98
Tabela 5.3: Segundo resultado do problema de geração de estimativa inicial para vazão máxima de água de reposição de 1 t/h.	98
Tabela 5.4: Primeiro resultado do problema de geração de estimativa inicial para vazão máxima de água de reposição de 4 t/h.	98
Tabela 5.5: Segundo resultado do problema de geração de estimativa inicial para vazão máxima de água de reposição de 4 t/h.	99
Tabela 5.6: Resultado do problema de MINLP original para vazão máxima de água de reposição de 1 t/h utilizando a estimativa inicial apresentada na Tabela 5.2.	100
Tabela 5.7: Resultado do problema de MINLP original para vazão máxima de água de reposição de 4 t/h utilizando a estimativa inicial apresentada na Tabela 5.4.	100
Tabela 5.8: Resultado do problema de MINLP original para vazão máxima de água de reposição de 4 t/h utilizando a estimativa inicial apresentada na Tabela 5.5.	100
Tabela 5.9: Resultado do problema de NLP original para vazão máxima de água de reposição de 1 t/h utilizando a estimativa inicial apresentada na Tabela 5.2.	101
Tabela 5.10: Resultado do problema de NLP original para vazão máxima de água de reposição de 1 t/h utilizando a estimativa inicial apresentada na	102
Tabela 5.11: Resultado do problema de NLP reduzido para vazão máxima de água de reposição de 1 t/h utilizando a estimativa inicial apresentada na Tabela 5.2.	103
Tabela 5.12: Resultado do problema de NLP reduzido para vazão máxima de água de reposição de 1 t/h utilizando a estimativa inicial apresentada na Tabela 5.2.	103
Tabela 5.13: Variáveis controladas, manipuladas e distúrbios do processo.	109

Tabela 5.14: Critérios de seleção das variáveis manipuladas para os problemas operacionais 1 e 2.....	127
Tabela 5.15: Seleção das variáveis manipuladas para cada tipo de problema.....	128
Tabela 5.16: Zeros de transmissão para os sistemas selecionados.....	129
Tabela 5.17: RGA estacionário para a estruturas "NLP $F_{m\acute{a}x} = 1-A$ ".....	129
Tabela 5.18: RGA estacionário para a estruturas "NLP $F_{m\acute{a}x} = 1-B$ ".....	129
Tabela 5.19: RGA estacionário para as estrutura "Oper 1 – $F_{m\acute{a}x}=1$ ".....	130
Tabela 5.20: RGA estacionário para as estrutura "Oper 2 – $F_{m\acute{a}x}=1$ ".....	130
Tabela 5.21: RGA estacionário para as estrutura "Oper 3 – $F_{m\acute{a}x}=1$ ".....	130
Tabela 5.22: RGA estacionário para a estrutura "NLP– $F_{m\acute{a}x} = 4-A$ ".....	130
Tabela 5.23: RGA estacionário para as estrutura "Oper 2 – $F_{m\acute{a}x}=4$ ".....	130
Tabela 5.24: RGA estacionário para as estrutura "Oper 3 – $F_{m\acute{a}x}=4$ ".....	130
Tabela 5.25: Índices operacionais relativos às mudanças de <i>set-points</i> para as estruturas onde a vazão máxima de água de reposição é 1 t/h.....	140
Tabela 5.26: Índices operacionais relativo às mudanças de <i>set-points</i> para as estruturas onde a vazão máxima de água de reposição é 4 t/h.....	141
Tabela 5.27: Índices operacionais relativo ao distúrbio nas cargas de poluentes para as estruturas onde a vazão máxima de água de reposição é 1 t/h.....	141
Tabela 5.28: Índices operacionais relativo ao distúrbio nas cargas de poluentes para as estruturas onde a vazão máxima de água de reposição é 4 t/h.....	142
Tabela 6.1: Comparação das estruturas através de índices operacionais.....	147
Tabela 6.2: Comparação das estruturas através de índices operacionais, onde os valores marcados com "X" representam os casos onde a estrutura em estudo apresentou melhor desempenho.....	148
Tabela A.1: Variáveis envolvidas na modelagem do problema de síntese.....	157
Tabela A.2: Variáveis especificadas do problema de síntese.....	158
Tabela A.3: Equações utilizadas para descrever o problema de síntese de redes.....	158
Tabela A.4: Apresentação da seqüência para o cálculo para graus de liberdade do problema MINLP reduzido.....	159
Tabela A.5: Variáveis envolvidas na modelagem do problema para o caso NLP completo.....	160
Tabela A.6: Variáveis especificadas do problema de síntese de redes de integração mássica para o caso NLP completo.....	160
Tabela A.7: Equações utilizadas para descrever o problema de síntese de redes de integração mássica para o caso NLP completo.....	160
Tabela A.8: Apresentação da seqüência para o cálculo para graus de liberdade do problema NLP reduzido.....	161
Tabela C.1: A simbologia utilizada nas Tabela C.2, C.3 e C.4.....	181
Tabela D.1: Simbologia utilizada nas tabelas de resultados.....	189

Lista de Abreviaturas

ACEE	Ação de controle no estado estacionário (Equação 5.20)
GL	Graus de liberdade do sistema de equações.
IAAC	Integral absoluta da ação de controle (Equação 5.19).
IEA	Integral do erro absoluto (Equação 5.18).
ITAE	Integral do erro absoluto considerando .
LP	Programação linear.
MEN	Redes de trocadores de massa (Mass Exchange Networks).
MINLP	Programação não-linear inteira-mista.
NLP	Programação não-linear.
NP	Conexão entre as unidades não permitida.
OS_i	Máxima sobre-elevação da variável controlada i utilizado no projeto do controlador.
$ppmw$	Concentração na unidade de ppm em base mássica e em base isenta de poluentes.
PROC	Processos ou unidades geradoras de contaminantes.
QP	Programação quadrática.
REG	Regeneradores ou unidades removedoras de contaminantes.
RGA	Matriz de ganhos relativos.
SITAE	Soma da integral do erro absoluto considerando de todos os ITAE.
SQP	Programação quadrática seqüencial.
TS_i	Tempo de subida da variável controlada i utilizado no projeto do controlador.
TDCID	Diagrama de intervalo de composição dependente do tempo.

SIMBOLOGIA

A	Matriz resultante das linearizações.
b_1	Matriz utilizada para a determinação de $X_{out,i,1}$ e $X_{in,i,1}$ para os processos 1 a 4.
b_2	Matriz utilizada para a determinação de $X_{out,i,2}$ e $X_{in,i,2}$ para os processos 1 a 4.
B	Matriz resultante das linearizações.
C_j	Concentração do componente j expressa em base isenta de poluentes.
$C_{in,i,j}^{\max}$	Concentração máxima admissível do poluente j (expressa em ppm e em base isenta de poluentes) na entrada do processo i .
C	Matriz resultante das linearizações.
$C_{out,i,j}$	Concentração do poluente j (expressa em ppm e em base isenta de poluentes) na saída do regenerador i .
D	Matriz das distâncias (Tabela 3.3).
$D_{i,k}$	Distância da saída da unidade k até a entrada da unidade i (obtida a partir da Tabela 3.3).
$diag$	Operação que transforma um vetor em matriz diagonal.
Dl	Matriz resultante das linearizações.
e	Constante qualquer utilizada na dedução da expressão dos Multiplicadores de Lagrange.
F_i	Vazão de água de reposição que alimenta o misturador do processo i .
F_i^{ℓ}	Limite inferior da vazão F_i utilizada na otimização interna.
F_i^u	Limite superior da vazão F_i utilizada na otimização interna.
$F_{i,ss}$	Vazão de alimentação de água de reposição destinada ao processo i no estado estacionário.
$f_i(x)$	Termo da função objetivo S .
$F_{máx}$	Vazão máxima de água de reposição permitida no sistema.

GL	Graus de liberdade de um conjunto de equações de determinado problema.
$h(x_1, x_2)$	Expressão para uma restrição de igualdade função de variáveis x_1 e x_2 .
I	Matriz identidade.
K	Matriz de ganhos estacionários.
K_{Pi}	Ganho do controlador do processo i .
L	Matriz de vazões com dimensão de 6 linhas por 6 colunas onde cada elemento $L_{i,j}$ representa a vazão $L_{i,k}$.
\tilde{L}	Matriz utilizada para a determinação de $Xout_{i,j}$ e $Xin_{i,j}$ para os processos 1 a 4.
$L(x, \lambda)$	Função de Lagrange ou Lagrangeano.
$L_{i,k}$	Vazão da corrente que sai da unidade k e alimenta a unidade i .
$L_{i,k}^{\ell}$	Limite inferior da vazão $L_{i,k}$ utilizada na otimização interna.
$L_{i,k}^p$	Restrição usada para fixar a variável perturbada.
$L_{i,k}^u$	Limite superior da vazão $L_{i,k}$ utilizada na otimização interna.
L_A	Matriz de reciclós/reusos entre as unidades
Lin_i	Vazão da corrente que deixa o misturador e alimenta a unidade i .
$Lin_{i,j}$	Vazão do componente j na entrada da unidade i .
$L_{max\ i,k}$	Máxima vazão permitida na tubulação que sai da unidade k e alimenta a unidade i .
$Lmid_i$	Vazão de saída do tanque i utilizado no modelo dinâmico dos regeneradores.
$Lout_i$	Vazão que deixa a unidade i e alimenta o respectivo divisor de corrente.
$Lout_{i,j}$	Vazão do componente j na saída do processo i .
$Lout_{bias_i}$	Valor do <i>bias</i> da vazão mássica de saída do processo i .
Ls	Vetor que contém o somatório ao longo das colunas da matriz L .
$Lsup_i$	Vazão de operação do processo i .

Ma_i	Massa no interior do processo i modelado através de um tanque.
$Maset_i$	Valor do <i>set-point</i> para o acúmulo de massa do processo i .
$\dot{M}_{i,j}$	Carga do componente j adicionada na unidade i .
\overline{m}_j	Massa do componente j .
m_k	Variável manipulada k usada no cálculo do RGA.
m_{solv}	Massa de solvente.
neq	Número de equações presente em um determinado problema.
ns	Número de especificações presente em um determinado problema.
$nvar$	Número de variáveis presente em um determinado problema.
$RGAf$	Função para o cálculo do índice operacional baseado na matriz RGA.
S	Função objetivo.
s	Matriz de <i>splits</i> .
$s_{i,k}$	Elemento da matriz de <i>splits</i> que representa a parcela da vazão que sai da unidade k e entra na unidade i .
S_L	Matriz proveniente da linearização do produto $\Delta s.L$.
$SM_{i,j}$	Carga do componente j removida no regenerador i .
$Split_{i,k}$	Restrição do nó de divisão de correntes utilizada na otimização interna da implementação operacional 3.
Ss	Matriz proveniente da linearização do produto $\Delta s.L$.
t	Tempo
tf	Tempo final para a integração dos índices operacionais.
u	Variáveis de entrada utilizadas na linearização dos modelos dinâmicos.
VC	Variável controlada (obtida a partir da Tabela 5.2).
$VC_{antes da perturbação}$	Valor da variável controlada antes da perturbação na variável manipulada $L_{i,k}$.

$VC_{\text{depois da perturbação}}$	Valor da variável controlada depois da perturbação na variável manipulada $L_{i,k}$.
W_i	Vazão de água que deixa o divisor do processo i e é destinada ao despejo.
$W_{i,ss}$	Vazão destinada ao despejo pelo processo i no estado estacionário.
w_i	Peso para o termo da função objetivo $f_i(x)$.
X	Conjunto de variáveis contínuas.
\overline{X}_1	Matriz utilizada para a determinação de $X_{out,i,1}$ e $X_{in,i,1}$ para os processos 1 a 4.
\overline{X}_2	Matriz utilizada para a determinação de $X_{out,i,2}$ e $X_{in,i,2}$ para os processos 1 a 4.
X_j	Fração mássica expressa do componente j expressa em partes por milhão e em base isenta de poluentes.
x^*	Ponto ótimo de um problema de otimização.
xe	Variáveis de estado utilizados na linearização dos modelos dinâmicos.
XF_{ini}	Proveniente da linearização do sub-sistema de água fresca, definida pela Equação C.34.
XF_j	Fração mássica do componente j presente na água de reposição.
$x_{i,j}$	Fração mássica do componente j no interior do processo i .
$x_{i,j,ss}$	Composição da corrente $W_{i,ss}$.
$X_{in,i,j}$	Fração mássica do componente j que alimenta a unidade i .
$X_{in,i,j}^{\max}$	Limite superior da fração mássica do componente j que alimenta o processo i .
$x_{mid,i,j}$	Composição de saída do componente j do tanque i utilizado no modelo dinâmico dos regeneradores.
$X_{out,i,j}$	Fração mássica do componente j que deixa a unidade i .
Y	Conjunto de variáveis inteiras.
Y	Matriz com 6 linhas e 6 colunas representando com elementos 1 ou 0 a existência ou não de conexões entre as unidades.
y_i	Variável de saída i .

$y_{i,k}$	Variável binária representando a conexão entre a unidade k e i .
y_s	Variáveis de saída utilizadas na linearização dos modelos dinâmicos.
$\beta_{i,j}$	Valor do elemento da matriz de ganhos relativos ca linha i e coluna j .
δ	Variável de folga para a restrição de vazão e água de reposição utilizada na função objetivo da otimização interna.
Δ	Varição de uma variável em relação ao seu estacionário.
ε	Valor do distúrbio para obtenção da matriz de ganhos por perturbação para o problema operacional 3.
$\Phi_{i,j}$	Termo de folga da função objetivo relativo restrição de fração mássica máxima do componente j na entrada do processo i .
\mathcal{I}	Domínio dos números inteiros.
λ	Multiplicador de Lagrange.
$\lambda L_{i,k}^{\ell}$	Multiplicador de Lagrange que fixa a variável $L_{i,k}$ em seu limite inferior.
$\lambda L_{i,k}^u$	Multiplicador de Lagrange que fixa a variável $L_{i,k}$ em seu limite superior.
λF_i^{ℓ}	Multiplicador de Lagrange que fixa a variável F_i em seu limite inferior.
λF_i^u	Multiplicador de Lagrange que fixa a variável F_i em seu limite superior.
\mathcal{R}	Domínio dos números reais.

Capítulo 1: Introdução

A água é uma substância de grande importância para o planeta, suas características físicas e químicas a torna indispensável para a sobrevivência dos seres vivos e manutenção dos ciclos biogeoquímicos. Economicamente, a água é uma matéria-prima estratégica na agricultura e indústria. Na indústria, empresas de transformação dos setores de química, petroquímica e de alimentos, não só consomem grandes volumes deste recurso, como também são os principais agentes poluidores. Neste contexto, o uso racional da água na indústria vem sendo estudado na área de engenharia química, apresentando considerável potencial de redução de consumo e descarte de águas, o que motiva estudos aprofundados nesta área e especificamente neste trabalho.

1.1. Estatísticas sobre a água no mundo

O suprimento de água doce de boa qualidade é essencial para o desenvolvimento econômico, para a qualidade de vida das populações humanas e para a sustentabilidade do planeta, por isso, além de racionalizar o uso deste recurso, é importante conhecer sua distribuição no planeta. Shiklomanov (1993) estudou as fontes de água na Terra e classificou-as segundo sua distribuição. O mapeamento deste recurso segundo este trabalho é apresentado na Figura 1.1, onde é possível observar que o planeta possui somente 2,5% de água doce, deste total, apenas 0,3% está presente em rios e lagos, ou seja, apenas 0,0075% da água mundial apresenta-se facilmente disponível para captação. Segundo dados divulgados pela FAO (FAO, 2003) apresentados na Tabela 1.1, a América do Sul possui 28,3% de toda a água doce disponível para a captação, sendo o continente com maior abundância deste recurso, conforme dados desta mesma organização, o Brasil é o país mais rico neste recurso natural. No país, segundo dados divulgados pela Agência Nacional de Águas (BRASIL, 2002a), devido ao seu clima predominantemente tropical, o que leva o país a possuir grandes áreas cultiváveis, a maioria da água captada é destinada à agricultura (63%). A indústria é responsável somente por 14% do consumo total da água captada, embora seja um percentual pequeno, isto corresponde a volumes consideráveis em termos absolutos, sendo que a demanda de água pelo setor industrial em todo o país é de 299 m³/s. Além disso, a água no Brasil é considerada um recurso mal distribuído, visto que regiões do Nordeste apresentam zonas desertificadas, enquanto que a Região Amazônica apresenta a bacia hidrográfica com maior deflúvio médio de todo o Brasil (4206 Km³/ano), segundo dados apresentados no relatório Brasil (2002b).

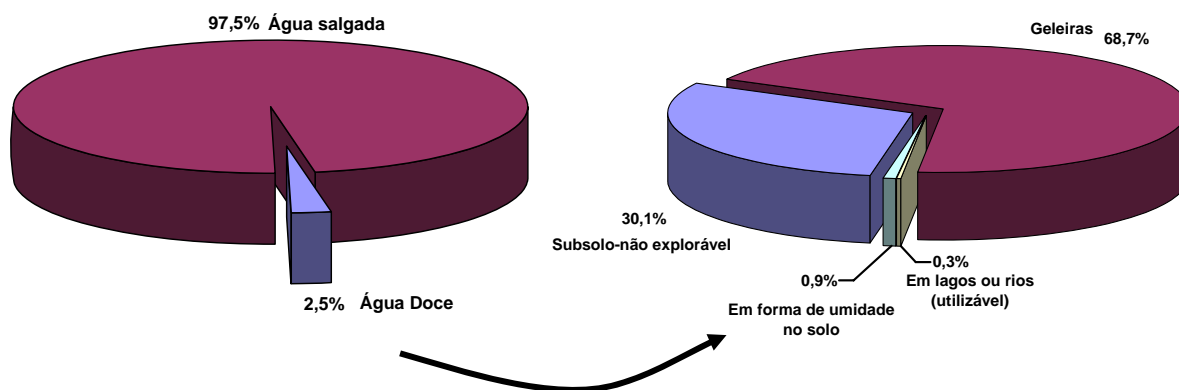


Figura 1.1: Distribuição da água no mundo

Fonte: Shiklomanov (1993)

Tabela 1.1: Distribuição da água doce em regiões dos continentes.

Região	% dos recursos mundiais
América do Sul	28,3
Sul e Leste da Ásia	26,8
América do Norte	15,2
Leste da Europa	10,2
África	9,0
Oeste e Centro da Europa	5,0
Oceania	2,1
América Central e Caribe	1,8
Oriente Médio	1,1
Ásia Central	0,6

Fonte: FAO 2003.

1.2. A água na indústria de processos

A água é considerada uma matéria-prima consumida em grande escala em nível industrial. Um dos motivos para este fato é que esta ainda é considerada um recurso em abundância em alguns países e seu custo para uso em processos industriais ainda é baixo. Entre as aplicações mais comuns da água nas indústrias, tem-se:

- consumo humano (sanitários, cozinhas, refeitórios);
- lavagem de equipamentos, matérias-primas ou produtos;
- agente de transferência térmico: sistemas de resfriamento (torres de resfriamento ou refrigeração) ou aquecimento (caldeiras);
- lubrificação de máquinas;
- processos de separação (extração, destilação, absorção, flotação e fluidização);
- como matéria-prima (fermentação, diluição ou reação química);
- transporte pneumático.

Além de suas aplicações, o uso da água na indústria se deve às suas propriedades, apresentadas na Tabela 1.2, e ainda por se tratar de uma substância relativamente inerte e que não polui o ambiente.

Na indústria de processos, além de ser usada como matéria-prima, a água também é destinada a sistemas de resfriamento, refrigeração, aquecimento ou geração de energia elétrica, as propriedades da água para tais aplicações são apresentadas na Tabela 1.3.

Tabela 1.2: Principais propriedades da água.

Propriedade	Unidade	Valor
Calor de fusão	J.mol ⁻¹	6,01
Ponto de Ebulição (1atm)	°C	100
Calor de vaporização	J.mol ⁻¹	40,73
Massa específica	kg.m ⁻³	950,927

Fonte: Perry (1999).

Tabela 1.3: Propriedades da água para aplicações em sistema de troca térmica.

Propriedade (saturada a 373,15 K)	Unidade	Fase Líquida	Fase Vapor
Cp	kJ.(kg.K) ⁻¹	4,2117	2,029
Volume específico	m ³ .kg ⁻¹	1,0133	1,044.10 ⁻³
Entalpia	kJ.kg ⁻¹	1,679	419,1
Viscosidade	N.s.m ⁻²	279.10 ⁻⁶	12,02.10 ⁻⁶
Condutividade Térmica	W.(m.K) ⁻¹	0,679	0,0245

Fonte: Perry (1999)

Justamente pelo grande número de aplicações, aliado às propriedades favoráveis e aos custos, a água vem sendo usada em grandes volumes na indústria de processos. A Tabela 1.4 apresenta os volumes utilizados nas indústrias para a produção de alimentos e materiais diversos (LEEDEN; TROISE e TODD, 1990).

No cenário regional, as indústrias do Rio Grande do Sul são grandes consumidoras de água. Na Tabela 1.5 são apresentadas as empresas que geram os maiores volumes de efluentes segundo relatório divulgado pela FEPAM (FEPAM, 2001) e Longhi (2006).

Tabela 1.4: Volume de água consumido em diversos países para a produção de alimentos e materiais diversos.

Produto	País	Unidade de Produção	Volume de água consumida (L) por unidade de produção
Pães ou Massas	Bélgica	tonelada	1100
Pães	Estados Unidos	tonelada	2100-4200
Peixe Enlatado	Bélgica	tonelada	400
Peixe em Conserva	Bélgica	tonelada	1500
Pêssegos Enlatados	Estados Unidos	tonelada	18100
Espinafre Enlatado	Estados Unidos	tonelada	49400
Carne Congelada	Nova Zelândia	tonelada	3000-8600
Carne Embalada	Estados Unidos	tonelada	23000
Salsicha	Finlândia	tonelada	20000-35000
Frangos	Estados Unidos	por ave	25
Frangos	Israel	ton. de ave depenada	33000
Perus	Estados Unidos	por ave	75
Queijo	Estados Unidos	tonelada	27500

Continua

Tabela 1.5: Volume de água consumido em diversos países para a produção de alimentos e materiais diversos (continuação).

Produto	País	Unidade de Produção	Volume de água consumida (L) por unidade de produção
Leite	Suécia	tonelada	2000-4000
Leite em pó	Nova Zelândia	tonelada	45000
Açúcar	Alemanha	ton. de beterrabas	10400-14000
Açúcar	China	ton. de cana-de-açúcar	15000
Cerveja	Reino Unido	m ³	6000-10000
Papel Craft	Finlândia	tonelada	375000
Papel para Impressão	China	tonelada	340000
Papel para Impressão	Suécia	tonelada	500000
Papel Fino	Suécia	tonelada	900000-1000000
Gasolina para Aviação	Estados Unidos	m ³	25000
Gasolina	Estados Unidos	m ³	7000-10000
Extração de Petróleo	Estados Unidos	m ³ de petróleo cru	4000
Ácido Acético	Estados Unidos		470000-1000000
Álcool	Estados Unidos	m ³	138000
Soda Cáustica (processo Dual)	China	tonelada	200000
Sabão	Bélgica	tonelada	37000
Ferro Gusa	Canadá	tonelada	130000
Aço Básico	Canadá	tonelada	22000
Cimento Portland	Bélgica	tonelada	1900
Beneficiamento de Couro	África do Sul	ton. de pele	50000-125000
Borracha de Butadieno	Estados Unidos	tonelada	83000-2750000

Fonte: Leeden; Troise e Todd (1990).

Tabela 1.5: Maiores geradores de efluentes no Rio Grande do Sul em volume.

Indústria	Município	Setor	Vazão (m ³ /dia)
Riocell S/A (Atual Aracruz)	Guaíba	Papel	31200
Gerdau S/A	Sapucaia do Sul	Metalúrgica	10200
REFAP	Canoas	Refinaria de Petróleo	9431
Bunge Alimentos – Proteína (Atual Solae)	Esteio	Alimentos	8800
Celulose Cambará	Cambará	Papel	7325
Cervejaria Brahma	Viamão	Bebidas	7280
Fabrica de Papel Sta. Therezinha	Guaíba	Papel	5760
COPEL	Triunfo	Petroquímica	5540
		Total	85536

Fonte: FEPAM (2001), Longhi (2006).

Conforme os dados apresentados nas Tabelas 1.5 e 1.6, pode-se observar que as indústrias não só consomem elevados volumes de água como também são geradoras de

grandes quantidades efluentes. Levando em consideração a importância da água no contexto ecológico e econômico e a necessidade da racionalização de seu uso, o tópico seguinte apresenta o conceito de integração de processos, sua definição, e suas potencialidades para a redução de consumo de água e minimização de geração de efluentes líquidos industriais.

1.3. Integração de Processos

1.3.1. Histórico

Na década de 1970, a política de destinação de resíduos líquidos aplicada pelas indústrias de processos era basicamente o tratamento de final de tubulação (ou *end of pipe*). Neste tipo de abordagem, as correntes de efluentes provenientes de cada unidade eram reunidas e destinadas às unidades para tratamento que, através de diversos processos físicos, químicos e biológicos, reduziam as concentrações dos contaminantes em quantidades aceitáveis para o despejo em corpos receptores; este tipo de sistema pode ser exemplificado pela Figura 1.2. Neste tipo de sistema, os efluentes não são gerenciados de forma apropriada, pois, ao reunirem-se correntes diferentes, existe a possibilidade de diluírem-se correntes concentradas e aumentar a concentração de corrente diluídas, dificultando a separação. Além disso, o custo de tratamento destes efluentes é proporcional ao volume, logo o efeito da diluição tem um impacto econômico negativo sob as unidades de tratamento final. Outro problema que existe neste tipo de configuração é devido às características particulares de cada corrente, como por exemplo o tipo de contaminante, que pode ser de origem orgânica ou inorgânica, e necessitam processos de tratamento específico. Problemas semelhantes existiam no caso energético, onde as correntes quentes ou frias que deixavam os processos eram destinadas diretamente às caldeiras ou torres de resfriamento, embora estes fluidos ainda tivessem capacidade de aquecer ou resfriar outras unidades com menor necessidade de cargas térmicas.

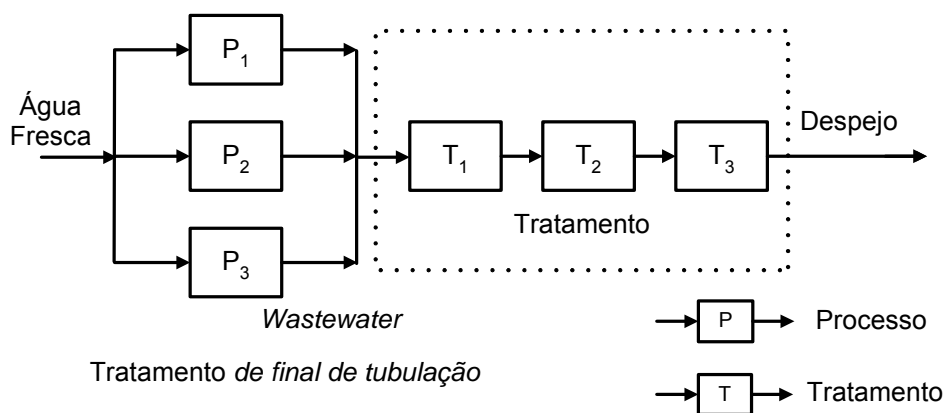


Figura 1.2: Exemplo de sistema com tratamento de final de tubulação

No final da década de 70 e início da década de 80, a crise mundial do petróleo obrigou as empresas ao uso racional da energia. Neste período surgiram várias metodologias para o reaproveitamento de energia em forma de calor dentro da planta industrial, sendo mais conhecida a Tecnologia *Pinch* ou de ponto de estrangulamento desenvolvida por Linnhoff e Hindmarsh (1983). Na integração energética, as correntes quentes e frias que deixam os processos são reaproveitadas em outras unidades antes de serem destinadas às caldeiras ou torres de resfriamento. Esta metodologia, inicialmente aplicada ao caso energético, começou a ser aplicada em sistemas de transferência de massa com o objetivo de reduzir a geração de poluentes a partir de 1989 (EL-HALWAGI; MANOUSIOUTHAKIS, 1989, 1990a, 1990b e WANG; SMITH, 1994a, 1994b), dando início à aplicação de ferramentas de integração mássica para a minimização efluentes líquidos.

1.3.2. Definições

Existem várias definições formais para o termo "Integração de Processos", a definição usada pela Agência Internacional de Energia (International Energy Agency) segundo Gundersen (2004a) é: "*A integração de processos consiste de métodos gerais e sistemáticos para o projeto de sistemas integrados de produção, desde processos individuais até complexos industriais, com ênfase especial no uso eficiente da energia e na redução dos efeitos ao meio ambiente*".

Segundo El-Halwagi (1997), um dos autores consagrados neste tema, a integração de processos é assim definida: "*Integração de processos é uma abordagem holística da síntese, replanejamento e operação de processos que enfatiza a unicidade de cada processo*".

Baseada nestas definições, observa-se que a integração de processos está associada à síntese de processos. A síntese de processos pode ser definida como (WESTENBERG, 1987): "*é o processo de decisão relativo a quais os componentes disponíveis devem ser usados em um problema de projeto e como estes devem estar interconectados para estruturar a solução ótima de tal problema*". Embora os procedimentos de integração mássica possam ser aplicados tanto para efluentes líquidos quanto gasosos, o foco principal deste trabalho é o uso de técnicas de integração voltadas à minimização de efluentes líquidos e ao consumo de água. No caso da integração mássica, alguns procedimentos são aplicados para sintetizar redes com o objetivo de minimizar a geração de efluentes líquidos e são definidos segundo El-Halwagi (1997) e exemplificados na Figura 1.3 e Figura 1.4.

Segregação: Consiste, simplesmente, em evitar a mistura de correntes. A segregação de correntes com diferentes composições evita diluições desnecessárias, reduzindo o custo de remoção de poluente a partir de uma corrente mais concentrada.

Reuso: Efluentes de processos podem ser reutilizados diretamente em outras unidades em que o nível de poluente não interfere com as operações dos equipamentos da unidade.

Regeneração-reuso: Efluentes de processos podem ser regenerados através do tratamento parcial ou total para remoção de poluentes para então serem reutilizados em outras unidades.

Regeneração-reciclo: Efluentes de processos podem ser regenerados através do tratamento parcial ou total para remoção de poluentes para serem reciclados na mesma unidade.

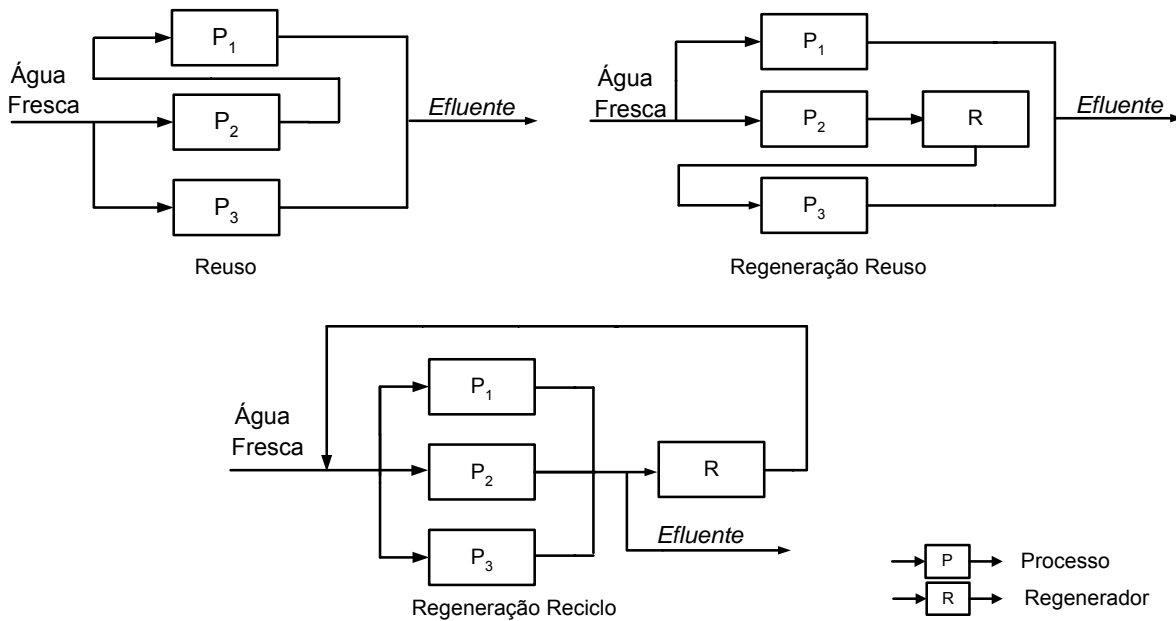


Figura 1.3: Exemplos de sistemas com reuso, regeneração-reuso e regeneração-reciclo.

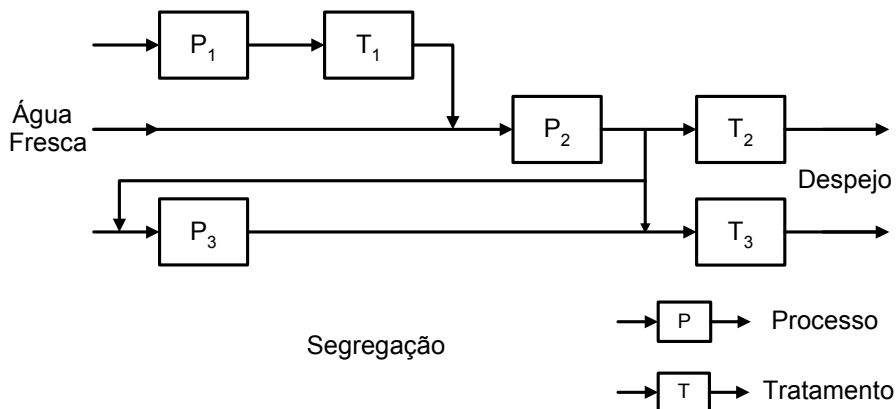


Figura 1.4: Exemplo de sistema com segregação, reuso e regeneração-reuso.

As definições descritas acima serão usadas nos capítulos seguintes da dissertação para descrever e analisar sistemas integrados massivamente, assim como apresentar as metodologias descritas por cada autor.

1.3.3. **Potenciais de ganho com a aplicação da integração mássica**

Um dos principais incentivos à aplicação de ferramentas de integração mássica e energética aos processos industriais são os ganhos econômicos proporcionados. Na Tabela 1.6 e 1.7 são apresentados os principais casos de aplicação da metodologia de integração mássica e energética obtidos de literatura e seus respectivos resultados econômicos.

Tabela 1.6: Estudos de caso de integração energética apresentados em literatura.

País	Aplicação	Economia	Retorno do Investimento
Canadá	Celulose e Papel	500.000 USD/ano	16 meses
Canadá	Celulose e Papel	470.000 USD/ano	12 meses
Dinamarca	Indústria de Alimentos	95.000 USD/ano	39 meses
Finlândia	Celulose e Papel	34 MW de calor	4 meses
Portugal	Petroquímica	410.000 USD/ano	13 meses
Portugal	Têxtil	110.000 USD/ano	6-24 meses
Portugal	Química	aprox. 2 MW de calor	3 meses
Dinamarca	Celulose e Papel	5 MW de calor	36 meses
Dinamarca	Química	140.000 USD/ano	17 meses
	Valor Médio	282.000 USD/ano	18 meses

Fonte: Gundersen (2004b)

Tabela 1.7: Estudos de caso de integração mássica apresentados em literatura.

Fonte	Aplicação	Componente economizado	Economia
Fontana (2002)	Teórico	Água	89%
Farenzena et al. (2004)	Curtumes	Água	69%
Raghava Rao et al. (2003)	Curtumes	Água e insumos	60% água e 24% de insumos
Mann e Liu (1999)	Petroquímica	Água	17%
El-Halwagi (1997)	Petroquímica	Água	58%
El-Halwagi (1997)	Petroquímica	Água	60%
Wang e Smith (1994)	Teórico	Água	58%
Gomes (2002)	Teórico	Água	37%
		Valor Médio	53%

Analisando as tabelas acima, é possível observar a economia obtida com a aplicação de tais metodologias. No caso energético, a média de economia foi de 282.000 USD por ano, com um tempo de retorno de investimento médio de 18 meses. Em casos onde foram aplicados os métodos de integração mássica, o consumo de água captada foi reduzido em média de 53%. Caso fosse considerado o consumo total de água nas indústrias apresentadas na Tabela 1.5, e a redução média da água captada (53%), a aplicação das metodologias

evitaria o descarte de 45.334 m³/dia de efluentes nas bacias hidrográficas do Estado (considerando que nos casos onde os efluentes são reduzidos, a água captada também sofre redução na mesma proporção). Cabe salientar que para chegar em condições para uso na indústria, a água deve passar por uma série de operações, conforme apresentado pela Figura 1.5, e ao diminuir o consumo da água, também é reduzido o consumo de produtos químicos, energia para o bombeamento e tratamento, assim como o transporte e disposição de rejeitos.

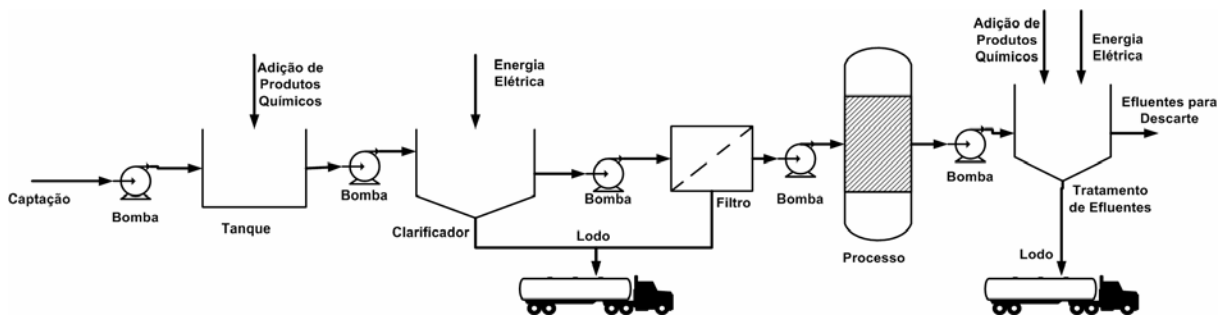


Figura 1.5: Operações envolvidas na captação e tratamento de água na indústria.

A aplicação da integração de processos às indústrias é tão vantajosa que algumas empresas e órgãos governamentais com uma visão holística da integração de processos, estão desenvolvendo zonas industriais não só com os processos mas com as indústrias integradas entre si, como em uma simbiose (onde seres de diferentes espécies vivem em conjunto tirando proveito mutuamente). Na simbiose industrial, os rejeitos, a água e energia de algumas indústrias são reaproveitados como matéria-prima pelas demais. Diversos países já possuem parques industriais simbióticos, como: Dinamarca (o país pioneiro neste conceito), Holanda, Estados Unidos e Austrália. A apresentação de tais parques e os benefícios proporcionados por tal integração é discutida em Heeres; Vermeulen e de Walle (2004) e Roberts (2004).

No caso energético, onde a economia no consumo de utilidades representarem ganhos diretos com as metodologias de integração, existem ainda outras vantagens com a aplicação de tais técnicas. Com a ratificação do Protocolo de Kyoto (UNITED NATIONS, 1998) pela Rússia em setembro de 2004, cujo objetivo é a redução da emissão de gases causadores do Efeito Estufa, tal acordo entrará em vigor a partir de fevereiro de 2005. Um dos instrumentos citado neste documento para a redução de emissões é o "comércio de emissões", que determina que os países que não conseguirem cumprir sua meta de redução de geração de gases devem investir em países em desenvolvimento que irão reduzir suas emissões e "vender" essa redução de emissões para os países que realizaram tal investimento. Como a energia térmica nas indústrias provém, na maioria das vezes, da queima de combustíveis fósseis e as técnicas de integração energética reduzem o consumo energético (conforme Tabela 1.6), é possível, através do comércio de emissões, aumentar a rentabilidade de investimentos na área de integração ou até mesmo implementar projetos de redes de integração energética que, sem este subsídio, seriam economicamente inviáveis.

Além das indústrias, outros setores que fazem uso dos recursos hídricos estão começando a estudar a aplicação de metodologias de segregação, reuso, regeneração-reuso e regeneração-reciclo às suas necessidades. As aplicações de conceitos utilizados na integração

de processos para racionalização do uso da água no consumo doméstico são apresentadas no estudo realizado por Vinneras e Jonsson (2002), onde foi estudada a segregação de matéria fecal e urina humana em sanitários para o tratamento separado, visto que a interação entre os microorganismos que consomem matéria orgânica (presente nas fezes) e os consumidores de compostos nitrogenados (presentes na urina) é negativa, ou seja, diminui a eficiência do tratamento (METCALF&EDDY, 2003). Também considerando o reaproveitamento de resíduos domésticos, Dixon; Butler e Fewkes (1999) apresentaram os potenciais de reuso de águas provenientes de lavatórios, chuveiros (denominadas água cinzas ou *greywater*) e da chuva. March; Gual e Orozco (2004) estudaram o reaproveitamento de águas cinzas para descargas de sanitários em um hotel após um tratamento prévio, onde foi observada a redução de 23% do consumo total de água. No trabalho apresentado por Nolde (2000), são descritos os sistemas para tratamento e reaproveitamento de águas cinzas utilizados em residências de Berlim, sendo que um opera desde 1989 e outro desde 1995. Na agricultura, o reuso de águas residuárias também vem sendo abordado, como no estudo publicado por Hussain e Al-Saati (1999) que aborda o uso de efluentes domésticos após um tratamento prévio em fazendas na Arábia Saudita. No trabalho publicado por Skjelhaugen (1999), foi desenvolvido, em fazendas da Noruega, um sistema experimental onde todos os rejeitos (sólidos e líquidos) são reaproveitados. Capra e Scicolone (2004) e Gotor et al. (2001) foram desenvolvidos sistemas para regeneração de efluentes para redução de poluentes em níveis aceitáveis para uso na agricultura.

Como apresentado anteriormente, a integração de processos apresenta uma série de vantagens econômicas para as áreas onde é aplicada. Particularmente no caso industrial, a integração pode apresentar desvantagens operacionais que serão apresentadas e discutidas no tópico seguinte.

1.4. Integração e controlabilidade

Nos processos industriais, busca-se atingir a qualidade desejada do produto final associada à segurança do processo. Em termos práticos, a maioria dos processos industriais está sujeito a distúrbios provenientes da variação de qualidade das matérias-primas, das condições ambientais ou de unidades que fazem parte do próprio processo. Com a finalidade de manter as variáveis de interesse do processo em um determinado nível, denominadas variáveis controladas, são realizadas ações em determinadas variáveis, denominadas variáveis manipuladas, tal sistema é exemplificado através da Figura 1.6.

Neste exemplo, o objetivo é manter a composição do fundo da coluna de destilação, X_B , constante, manipulando a quantidade de vapor no revedor, V , sujeito a distúrbios proveniente do reator, como composição, temperatura e vazão. Este sistema caracteriza um típico cenário de uma indústria de processos químicos, onde se deseja que o sistema de controle possua resiliência (LUYBEN, 1993), ou seja, tenha a capacidade de manter as variáveis de saída em seus níveis mesmo com o processo estando sujeito a distúrbios.

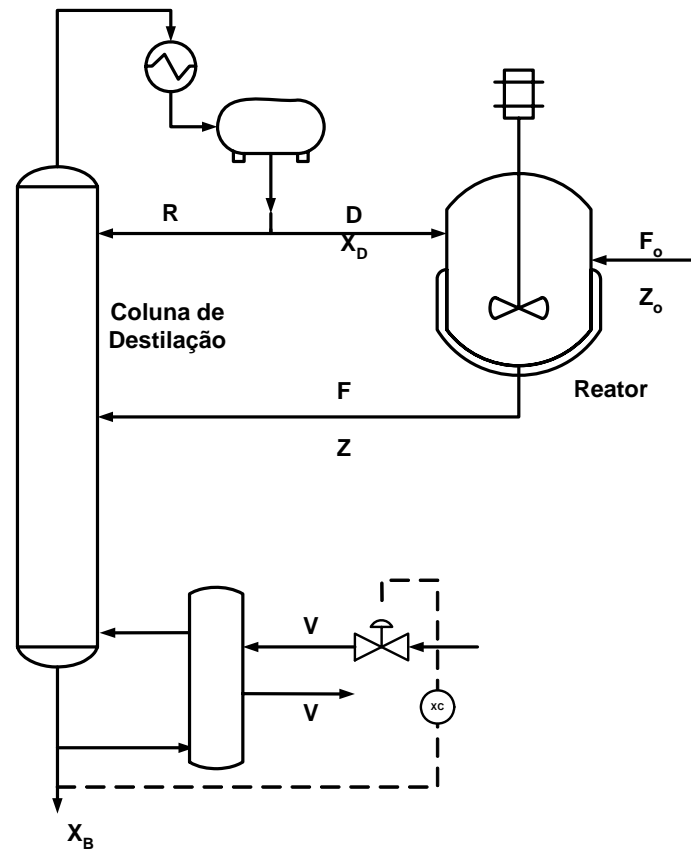


Figura 1.6: Exemplo de um processo típico da indústria química Papadourakis; Doherty e Douglas (1987).

No caso de problemas de síntese de redes para integração mássica, o principal objetivo é a redução do consumo de insumos ou a minimização da carga de poluentes enviada para despejo ou para a unidade de tratamento de efluentes. Para cumprir tal meta, muitas vezes é necessário reciclar, reusar ou regenerar correntes entre as unidades que compõem o sistema. Tal procedimento, porém, aumenta as interações entre os processos, visto que uma unidade recebe correntes de vários equipamentos. Este fenômeno pode ser melhor exemplificado pelo sistema apresentado na Figura 1.7, onde é possível observar que existem muitas correntes interligadas. Logo, se o processo 1 (PROC1) causar uma perturbação na composição de seus efluentes, as unidades subseqüentes (processos 4, 2, 3 e 1) também sofrerão estas perturbações em menor ou maior grau, podendo causar um problema de resiliência do sistema. Além disso, se alguma mudança nas variáveis manipuladas for realizada, todos os processos à jusante desta serão afetados, perturbando todas as demais unidades. Desta forma, embora possa trazer vantagens econômicas e ambientais para os processos, a integração mássica pode ocasionar problemas na controlabilidade do sistema, resultando, por exemplo, em perda na qualidade dos produtos, danos aos equipamentos ou insegurança no processo.

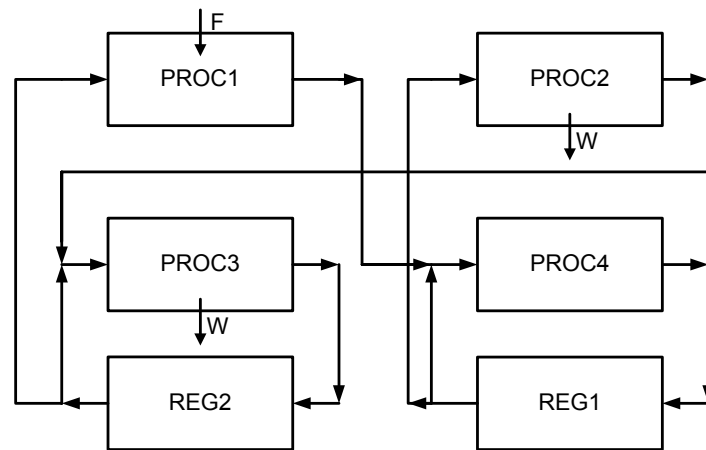


Figura 1.7: Exemplo de um processo integrado massivamente.

1.1. Objetivos do trabalho

Considerando o potencial de ganho com a aplicação de metodologias de integração de processos (apresentados na Seção 1.3.3) e os problemas que surgem com as redes integradas (apresentados na Seção 1.4), o presente trabalho tem como objetivo o desenvolvimento e aplicação de metodologias de integração de processos que sintetizem redes integradas massivamente trazendo, além de vantagens econômicas e ambientais, resiliência e operabilidade ao mesmo.

1.5. Estrutura da Dissertação

A aplicação das metodologias utilizadas para realizar a síntese de redes integradas massivamente requer um conhecimento avançado do processo industrial e o uso de ferramentas com certo grau de complexidade. No Capítulo 2 são apresentados os métodos utilizados para realização dos procedimentos de integração encontrados na literatura conforme a área de aplicação.

O Capítulo 3 é apresenta o problema padrão de síntese de redes para recuperação de águas de processo apresentado em Fontana (2002), no qual este trabalho foi baseado. Também será apresentado o equacionamento matemático do problema para a resolução por programação matemática.

No Capítulo 4 são apresentadas as metodologias utilizadas para a síntese de redes de integração mássica baseadas no problema proposto. Inicialmente é abordada a síntese com considerações econômicas, em seguida são propostas metodologias para obtenção de redes considerando fatores econômicos e operacionais.

Os resultados referentes às propostas são apresentados no Capítulo 5 juntamente com a modelagem dinâmica das redes sintetizadas, utilizada para avaliar a eficiência do método proposto. Neste mesmo capítulo, são discutidas as implementações realizadas e os resultados referentes aos métodos aplicados.

No Capítulo 6 são apresentadas resumidamente as principais contribuições do trabalho assim como as principais conclusões. Também são apresentadas sugestões para futuros trabalhos.

Capítulo 2: Revisão Bibliográfica

No presente capítulo são abordadas as metodologias presentes na literatura para realizar a síntese de redes, sua classificação conforme as aplicações, principais vantagens e desvantagens, assim como as ferramentas comerciais disponíveis para a realização desta tarefa.

2.1. Abordagens para a Realização da Integração Mássica

Os métodos de integração de processos aplicados à redução de consumo de água e emissão de rejeitos líquidos vêm sendo estudados há mais de uma década. Na literatura são apresentadas diversas abordagens e metodologias para a realização da integração mássica. As diferentes abordagens consideram as características particulares de cada processo que podem ser melhor representadas por seus modelos específicos.

Na abordagem de síntese de redes de trocadores de massa, desenvolvida inicialmente por El-Halwagi e Manousiouthakis (1989), a redução de água e rejeitos é realizada integrando correntes ricas em contaminantes, que devem ter sua concentração reduzida, com correntes diluídas. Essas correntes que podem ser provenientes do próprio processo ou de fontes externas. Neste caso, a integração é feita dispondo equipamentos que irão realizar esta troca de massa entre as correntes, conforme apresentado na Figura 2.1. Logo, além de encontrar as conexões, equipamentos adicionais são incorporados ao sistema para realizar tal tarefa.

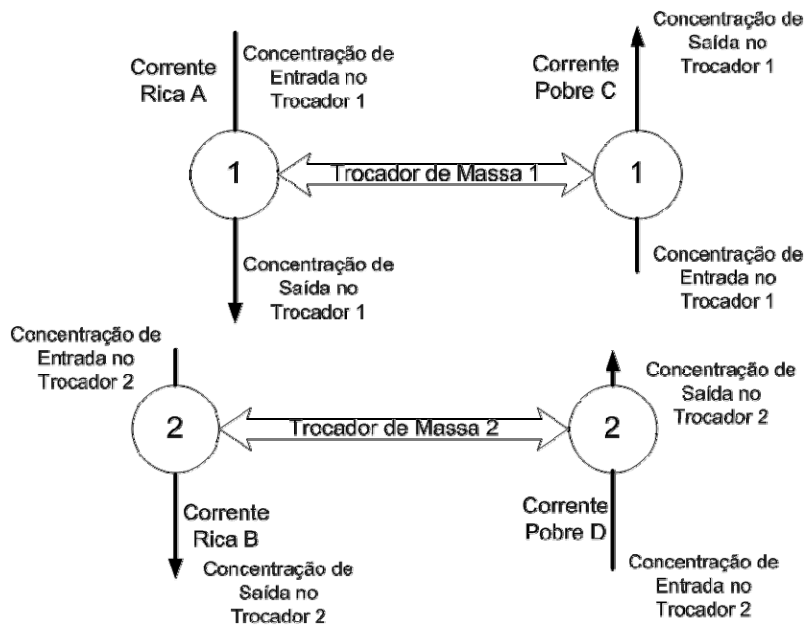


Figura 2.1: Exemplo da construção de uma rede de trocadores de massa.

No caso da abordagem de síntese de processos que utilizam água, cada unidade presente no sistema consome água (para diluição ou para reposição) e gera uma determinada carga de poluentes. Estes processos possuem ainda seus limites de vazões e contaminantes na entrada. Neste tipo de problema, o objetivo é aplicar as técnicas de reuso, regeneração-reuso e regeneração-reciclo para sintetizar uma rede com baixo consumo de água e despejo de efluentes. Neste caso, as correntes são misturadas (sem a adição de um equipamentos para a troca de massa, como no caso anterior) de forma a tender as especificações de vazão e contaminantes na entrada dos processos. Neste caso, cabe salientar que o foco é o processo ao

invés das correntes como no caso de síntese de redes de trocadores de massa. A abordagem citada acima foi formulada inicialmente por Wang e Smith (1994) e é apresentada em maiores detalhes em Mann e Liu (1999). A Figura 2.2 apresenta um exemplo típico de sistemas que utilizam água, sem integração (a) e com integração (b).

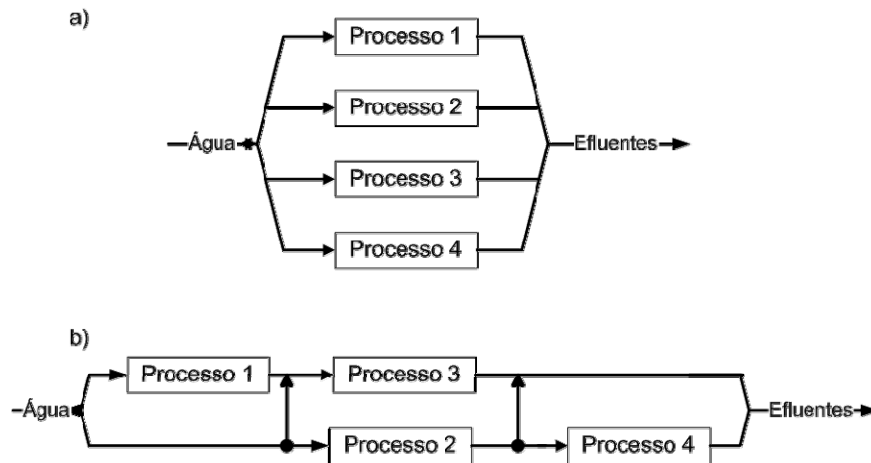


Figura 2.2: Exemplo de síntese de processos que utilizam água: a) sem integração; b) com integração

Outra metodologia disponível para a minimização de água e rejeitos é a síntese de tratamento distribuído. Neste caso, semelhantemente ao caso acima, estão presentes processos com uma demanda de água, carga de poluentes e restrições operacionais, porém neste caso, o foco são as unidades de regeneração e tratamento de efluentes de processos que são alocadas e conectadas no sistema com a finalidade de evitar diluições de correntes e maximizar o reuso, conforme Figura 2.3.

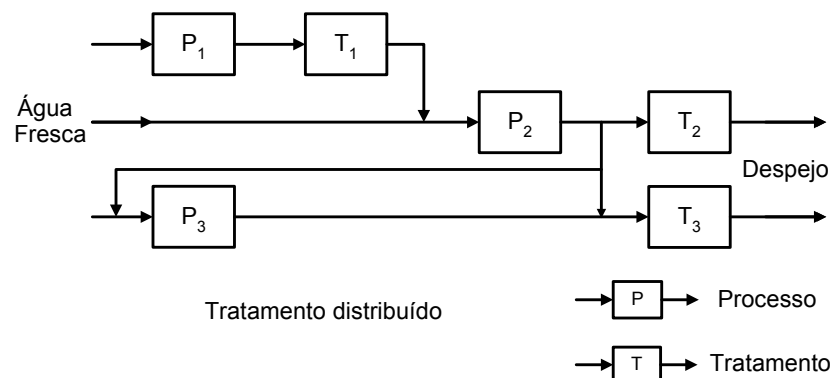


Figura 2.3: Exemplo de sistema integrado por tratamento distribuído.

2.2. Métodos de Síntese de Redes de Integração Mássica

Existem diversos métodos descritos na literatura para a resolução de problemas de síntese de redes de integração de mássica. Para cada uma das abordagens descritas na Seção 2.1, existem metodologias de resolução associadas. Através da revisão bibliográfica realizada, foi possível observar a existência de duas linhas de estudo distintas para a resolução de problemas de integração mássica de processos: a primeira aplica procedimentos heurístico-teóricos baseados em restrições termodinâmicas seguindo a linha da Metodologia *Pinch*, enquanto que a segunda desenvolve seus trabalhos utilizando a programação matemática.

2.2.1. Técnicas Heurístico-Teóricas

As técnicas heurístico-teóricas são assim denominadas porque baseiam-se em teorias termodinâmicas e heurísticas para a síntese de redes de trocadores de massa. A metodologia mais utilizada é a metodologia *Pinch* (ou Ponto de Estrangulamento). Neste tipo de abordagem, um conjunto de correntes de processo ricas em poluentes é transferida para um conjunto de correntes pobres. O desenho da rede de trocadores de massa é realizado com o auxílio dos fundamentos da termodinâmica, baseado em heurísticas e no conhecimento do processo. As principais limitações deste método dizem respeito ao número de contaminantes que podem ser incluídos no problema e na síntese da rede de trocadores (disposição das conexões entre as unidades), a qual não é feita de forma automática. Além disso, é considerado que cada coeficiente de transferência de massa é uma função linear da composição, o que nem sempre reflete o caso real.

Metodologia *Pinch* ou Ponto de Estrangulamento

O método *Pinch* energético começou a ser desenvolvido por Linnhoff e Flower (1978), onde foi apresentada a construção do diagrama de intervalos de temperatura e desenvolvidas regras heurísticas, baseadas em fundamentos termodinâmicos, para a síntese de redes de trocadores em cada intervalo do diagrama. Naquele trabalho, já era ressaltada a importância da diferença de temperatura mínima entre as correntes de saída dos trocadores, indicando sua influência na recuperação de calor. Alguns anos mais tarde, Linnhoff e Hindmarsh (1983) apresentaram o Método *Pinch* para a síntese de redes de trocadores de calor, apresentando a definição de Ponto de Estrangulamento Energético, e ressaltando a importância deste para determinar a quantidade mínima de utilidades quentes e frias a serem utilizadas no processo. Também foram formuladas heurísticas para a síntese de redes de trocadores a partir do Ponto de Estrangulamento e apresentada a influência da diferença mínima de temperatura nos custos totais.

Alguns anos mais tarde, El-Halwagi e Manousiouthakis (1989), utilizando os conceitos desenvolvidos por Linnhoff e Hindmarsh (1983) de diagrama de intervalo de temperatura, diferença mínima de temperatura e Ponto de Estrangulamento Energético, desenvolveram a Metodologia *Pinch* para o caso da síntese de redes de trocadores de massa (MEN). Naquele trabalho, um problema análogo ao caso energético foi formulado de modo a transferir poluentes de um conjunto de correntes ricas para correntes pobres (semelhante a

transferir energia de uma fonte quente a uma fonte fria), levando em consideração uma diferença mínima de concentração (semelhante à diferença mínima de temperatura). Também é apresentado o método de obtenção do Ponto de Estrangulamento Mássico e como determinar a quantidade mínima de agentes de transferência de massa externo a partir do mesmo, assim como as heurísticas para a obtenção da rede de trocadores de massa com a quantidade mínima de unidades. O método proposto pode ser aplicado para correntes com um único poluente ou para múltiplos contaminantes, desde que as metas para ambos os componentes sejam as mesmas, ou seja, reduzir ou aumentar a concentração de ambos os contaminantes. Cabe ressaltar que no caso multicomponente, o problema torna-se um pouco mais complexo pois as relações de equilíbrio dos contaminantes devem ser consideradas simultaneamente. Como exemplo de aplicação, foi realizada a síntese de redes de trocadores de massa para remover sulfeto de hidrogênio dos efluentes gasosos de um processo de coqueificação a partir da metodologia desenvolvida.

No ano seguinte, os mesmos autores apresentaram dois trabalhos de síntese de redes de trocadores de massa baseada em programação matemática utilizando como base o Método de Ponto de Estrangulamento (EL-HALWAGI; MANOUSIOUTHAKIS, 1990a e 1990b) que serão discutidos no próximo item.

Baseada na metodologia do Ponto de Estrangulamento Mássico, Wang e Smith (1994a) apresentaram a aplicação deste método para a síntese de processos que utilizam água. Neste trabalho, foram apresentadas técnicas para determinar a quantidade mínima de água a ser utilizada em processos e as heurísticas para a síntese dos mesmos. Foi abordada ainda, a utilização do método em sistemas com múltiplos contaminantes. Neste caso o problema torna-se mais complicado, pois ambas as restrições de vazão e concentração nos processos devem ser satisfeitas, porém são apresentadas algumas regras para a realização de tal tarefa. Também são desenvolvidas heurísticas para a síntese de redes com regeneração-reuso e regeneração-reciclo. O método apresentado foi aplicado na resolução de um problema de minimização do consumo de água de uma refinaria de petróleo.

No mesmo ano, os mesmo autores (WANG; SMITH, 1994b) apresentaram a aplicação do Método Pinch para a síntese de sistemas distribuídos de tratamento de efluentes, sendo esta metodologia semelhante à anterior. O trabalho proposto foi aplicado para sistemas de tratamento de efluentes onde os contaminantes são removidos, sendo determinada a mínima de vazão de efluentes, ao invés de obter-se a quantidade mínima de água. Neste trabalho também foram apresentadas regras para a síntese da rede, além disso, foram desenvolvidos métodos onde somente um tipo de sistema de tratamento está presente e para tipos de tratamentos diferentes, além da abordagem de um único contaminante e múltiplos poluentes. Os métodos apresentados também são aplicados na resolução de um problema real de síntese de sistemas de tratamento de efluentes em uma refinaria de petróleo.

Um grande problema dos métodos de síntese de redes utilizando o Método Pinch, é que o número mínimo de unidades não garante o mínimo dos custos totais, conforme apresentado por Hallale e Fraser (1998). Neste trabalho, foi provado que o uso do número mínimo de equipamentos e os procedimentos para divisão de correntes, podem trazer penalidades em relação ao número de estágios de equipamentos de transferência de massa ao

diminuírem-se as forças motrizes envolvidas nos processos, aumentando o custo dos mesmos. Estes autores apresentaram uma metodologia para a predição do custo de investimento de uma rede de trocadores de massa previamente a sua síntese. A metodologia desenvolvida é aplicada a uma rede de colunas de absorção para remoção de SO₂ de um conjunto de correntes.

A aplicação de ferramentas de integração mássica para processos em batelada foi abordada por Foo et al. (2004), onde a metodologia previamente desenvolvida por Kemp e Deakin (1989) para a aplicação em integração energética em batelada foi utilizada. Neste estudo, foi introduzido o Diagrama de Intervalo de Composição Dependente no Tempo (TDCID), uma extensão do Diagrama de Intervalo de Composição desenvolvido por El-Halwagi e Manousiouthakis (1989), sendo este aplicado ao caso onde a disponibilidade das correntes variam no tempo. A metodologia para a síntese da rede foi desenvolvida para três casos: para processos com batelada única sem armazenamento, batelada única com armazenamento e processos com múltiplas bateladas com armazenamento. O método desenvolvido foi aplicado ao caso de forno de coqueificação modificado para o caso de operação em batelada. No exemplo resolvido foi observado que processos na forma de batelada única sem armazenamento consomem agentes de transferência de massa externos em maior quantidade do que agentes internos, enquanto que, quando há armazenamento, o oposto é observado.

2.2.2. *Técnicas de Programação Matemática*

Formulando o problema como programação matemática, a síntese da rede é obtida a partir de uma otimização. O problema de otimização para a obtenção da rede de integração mássica segue modelos matemáticos dos processos e é apresentado da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \min z &= f(x, y) \\ h(x, y) &= 0 \\ g(x, y) &\leq 0 \\ x &\in X \subseteq \mathfrak{R}^n \\ y &\in Y \subseteq \mathfrak{S}^m \end{aligned}$$

onde $f(x, y)$ representa a função objetivo, $h(x, y)$, as restrições de igualdade (balanços de massa, componentes equações termodinâmicas) e $g(x, y)$, as restrições de desigualdade (condições limites de cada processo). Nesta representação, a variável “z” representa o critério a ser minimizado; “x” representa as variáveis contínuas e “y” representa as variáveis discretas. A principal vantagem deste método é a maior flexibilidade para trabalhar com múltiplos poluentes. Além disso, a síntese da rede de trocadores é automática, ou seja, as conexões entre os processos e suas composições são os resultados do problema de otimização. As desvantagens destes métodos estão associadas aos algoritmos de otimização disponíveis que, em geral, possuem dificuldades em encontrar o ótimo global de problemas não-convexos.

Programação Matemática

Em seu trabalho, El-Halwagi e Manousiouthakis (1990a) apresentaram uma metodologia de síntese automática de redes de trocadores de massa por programação matemática a partir dos conceitos desenvolvidos no seu trabalho anterior (EL-HALWAGI; MANOUSIOUTHAKIS, 1989). Neste estudo, o sistema é modelado baseado no balanço de massa do diagrama de intervalo de composição. O problema é resolvido em duas etapas: na primeira, o objetivo é a minimização do custo de utilidades (agentes de separação) sendo necessária a resolução de um problema de programação linear (LP); na segunda, o objetivo é a minimização do número de conexões entre os processos, sendo este um problema de programação linear inteira-mista (MILP). O algoritmo utilizado para a resolução do problema apresenta-se na Figura 2.4. A metodologia proposta foi aplicada resolvendo três problemas de literatura envolvendo unidades industriais.

Em um segundo trabalho publicado no mesmo ano, El-Halwagi e Manousiouthakis (1990b) apresentaram um trabalho utilizando a mesma abordagem do artigo anterior, porém para a síntese de redes de trocadores de massa e regeneradores motivados pelo fato de muitas vezes, por razões econômicas ou ambientais, não ser possível descartar os produtos removidos nas redes. O problema neste caso torna-se um pouco mais complicado, e foi resolvido em duas etapas: na primeira, o objetivo é a minimização do uso das correntes pobres (ponderadas no custo) na rede de trocadores de massa e de regeneradores, através das resolução de um problema de programação não-linear inteira-mista (MINLP); na segunda, o objetivo é minimizar o número total de trocadores de massa no processo e na rede de regeneração, sendo este problema resolvido através de programação linear inteira-mista (MILP). A metodologia foi aplicada resolvendo um problema de recuperação de fenóis de uma planta de carvão.

Considerando a síntese de redes de tratamento de efluentes distribuída, Galan e Grossmann (1998) desenvolveram um trabalho sobre o assunto mostrando que a origem das não-convexidades provém do balanço de massa por componente quando o sistema é abordado sob a forma de uma superestrutura. Para contornar tal dificuldade, que gera mínimos locais e dificuldade de convergência, foi aplicada uma linearização nos balanços por componente proposto por Quesada e Grossmann (1995), resolvendo uma série de problemas de programação linear (LP) com a função objetivo modificada para gerar múltiplos pontos iniciais e determinar limites inferiores das variáveis de decisão para resolver o problema de programação não-linear (NLP) original. A metodologia foi aplicada para resolução de exemplos de literatura. Na segunda etapa do trabalho, foi formulado o problema de síntese de redes de tratamento distribuído para a seleção dos equipamentos mais apropriados para reduzir a emissão de determinado poluente, apresentando o problema na forma de programação não-linear inteira-mista (MINLP).

A aplicação de programação matemática para integração de processos em batelada foi abordada por Almato et al. (1997). Neste trabalho, as operações que usam água foram representadas de forma gráfica no tempo (Gráfico de Gantt) e em relação à exigência de pureza. O problema foi conduzido com a adição de tanques "pulmão" para o depósito de correntes dos efluentes dos processos para posterior reuso e foi formulado um problema de programação não-linear (NLP) para determinar a melhor configuração da conexão entre os tanques. Devido às dificuldades provenientes da não-linearidade, foi formulada uma

heurística para a geração de estimativas iniciais do problema de otimização. Além disso, foi desenvolvido um procedimento iterativo para determinar qual a melhor seqüência de produção para a minimização do consumo de água para plantas que produzem múltiplos produtos. A metodologia proposta foi aplicada a uma indústria de produção de bebidas com três diferentes produtos, resultando no reuso de 33% a 34% de água de acordo com o número de tanques pulmão adicionado, sendo que o máximo permitido pelo processo é o reuso de 37% de água.

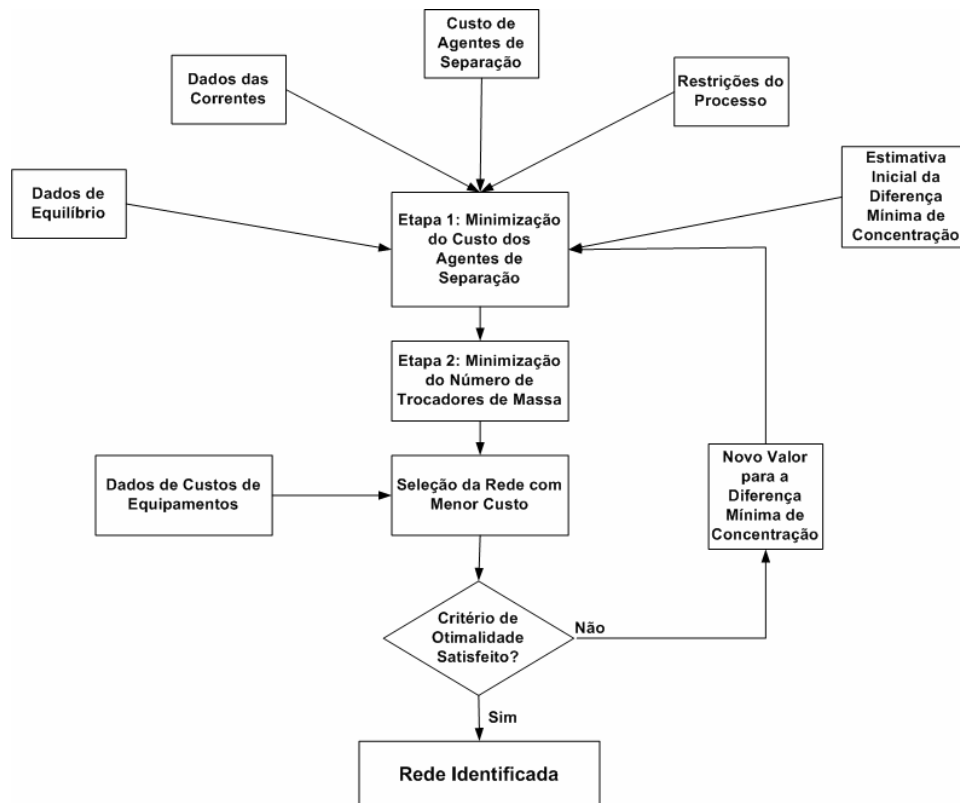


Figura 2.4: Algoritmo para a síntese de redes de trocadores de massa apresentado no trabalho de El-Halwagi e Manousiouthakis (1990a)

2.3. Operabilidade de Redes Integradas

Conforme apresentado no capítulo anterior, redes integradas podem apresentar dificuldades operacionais quando submetidas a distúrbios ou quando algumas variáveis de processo são manipuladas devido à interação entre os balanços materiais existente nos reciclos. Em seu trabalho, Luyben (1993), utilizando modelos linearizados, realizou análises operacionais em um sistema com reciclo material. No sistema estudado, em malha aberta, foi utilizada uma função de transferência de primeira ordem, tanto no caminho direto quanto no reciclo, sendo que o sistema resultante apresentava características de segunda ordem, devido ao polinômio característico do denominador. Além disso, foi possível observar, que em sistemas em malha aberta com reciclo, existe uma dependência do mesmo com o ganho total

do reciclo. Em malha fechada, foram realizados testes utilizando um controlador proporcional-integral no caminho direto e funções de transferência de primeira ordem no caminho do reciclo e de segunda ordem para o caminho direto. Neste tipo de sistema, foi possível observar que o sistema apresenta estabilidade condicional, de acordo com o ganho do processo de reciclo, o que não ocorria no sistema de primeira ordem. Neste trabalho, foram avaliadas a influência do ganho e do tempo característico do reciclo nas variáveis controladas frente a variações tipo degrau nas variáveis manipuladas. Foram apresentados os comportamentos quantitativos do sistema quando o ganho do reciclo variou desde a faixa de estabilidade até a instabilidade para diversos tempos característicos.

No seu trabalho sobre sistemas com reciclo, Morud e Skogestad (1996) apresentaram um sistema composto por um reator e uma coluna de separação perfeita, sem dinâmica, conforme apresentado na Figura 2.5. Neste caso, comparou-se a resposta do sistema com e sem reciclo, avaliando o comportamento da fração molar do destilado da coluna de destilação frente a variações tipo degrau na fração molar do reagente na alimentação do reator. Foi observado que, em sistemas com reciclo, o ganho estacionário é maior e o processo é mais lento comparado a um sistema sem reciclo. O mesmo efeito pode ser observado em um sistema com integração energética apresentado na Figura 2.6. Neste caso, o pré-aquecimento do reator com a corrente efluente do mesmo leva o sistema a possuir as mesmas características do processo com reciclo material.

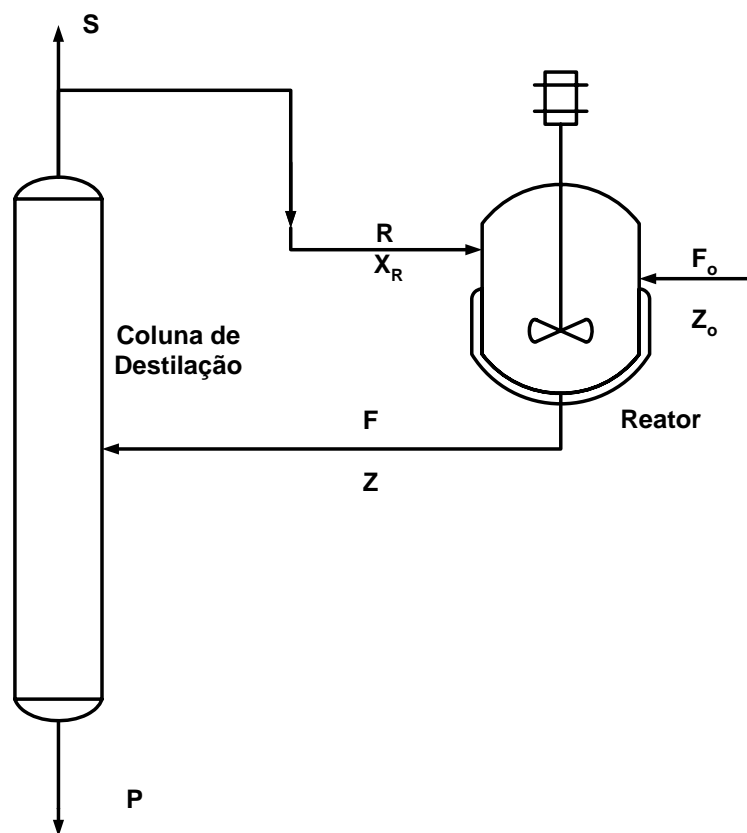


Figura 2.5: Exemplo de sistema com reciclo material estudado por Morud e Skogestad (1996).

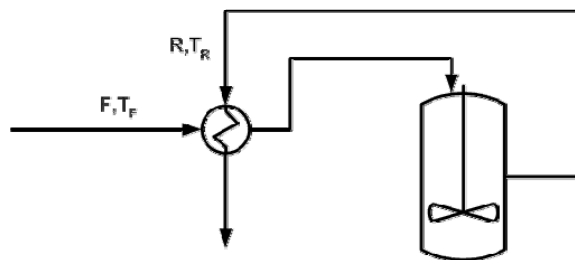


Figura 2.6: Exemplo de sistema com integração energética estudado por Morud e Skogestad (1996).

A utilização de programação matemática como ferramenta para integração de processos foi abordada no trabalho de Fontana (2002), onde um problema padrão foi proposto e as redes resultantes foram testadas quanto a sua operabilidade, utilizando índices de controlabilidade existentes na literatura. Cabe ressaltar que no trabalho mencionado a operabilidade foi avaliada após a síntese da rede, ao invés da sua avaliação ao longo da otimização.

No contexto de síntese de processos, Bansal; Perkins e Pistikopoulos (2002) realizaram o projeto de uma coluna de destilação para separação de benzeno e tolueno, considerando a modelagem rigorosa da mesma e incluindo os índices operacionais diretamente na função objetivo. O problema foi resolvido através de programação dinâmica inteira-mista. As variáveis de decisão do problema foram o número de pratos, o prato de alimentação, o diâmetro da coluna, a área do condensador e do refeedor, a estrutura de controle, os ganhos dos controladores, os *set-points* e as constantes de tempo da ação integral.

Uma metodologia para a síntese de redes de trocadores de calor, considerando fatores econômicos e operacionais, foi abordada por Oliveira (2002). Neste trabalho, a síntese da rede de trocadores foi realizada de duas formas: através de otimização mono-objetivo em seqüência e através de otimização multi-objetivo. Na síntese através de otimizações em seqüência, foi determinada, em um primeiro passo, a área e a fração de *by-pass* minimizando o custo total da rede para um conjunto de distúrbios; em uma segunda etapa, utilizando como variáveis de decisão a fração de *by-pass*, foi realizada a minimização do consumo de utilidades para o mesmo conjunto de distúrbios. Na síntese de trocadores através de otimização multi-objetivo, foram incorporados na função objetivo índices econômicos e operacionais. Os índices operacionais se basearam na matriz de Ganhos Relativos (RGA), condicionamento do sistema, ganhos entre as perturbações e as variáveis de saída e os ganhos entre as variáveis manipuladas e as variáveis de saída. O problema de otimização multi-objetivo foi resolvido pelo método de alcance de metas.

2.4. Ferramentas Computacionais para a Integração de Processos

Diversos *softwares* comerciais estão disponíveis para a realização da integração de processos tanto para o caso mássico quanto para o caso energético. Através de uma pesquisa bibliográfica, estes *softwares* foram classificados conforme o tipo de método utilizado.

2.4.1. Ferramentas Baseadas no Método do Ponto de Estrangulamento

O estudo da integração de processos iniciou-se com o desenvolvimento do Método *Pinch* para o caso energético e se estendeu em seguida para o caso mássico. A Tabela 2.1 apresenta os principais *softwares* comerciais para a integração de processos utilizando este método.

Tabela 2.1: Ferramentas comerciais para a síntese de redes utilizando o Método *Pinch*.

Nome	Fabricante	Aplicação
AspenPinch	AspenTech	Trocadores de Calor
HX-NET	HyproTech	Trocadores de Calor
Pinch-Express	Linhhoff March Limited	Trocadores de Calor
Supertarget	Linhhoff March Limited	Trocadores de Calor
WaterPinch	Linhhoff March Limited	Água/Efluentes
HEATNET	National Engineering Laboratory (NEL), Glasgow, UK	Trocadores de Calor
PinchLeni	Laboratory of industrial Energy systems (Swiss Federal Institute of Technology)	Trocadores de Calor
The Heat Exchanger Network	Mineral Processing Research Institute (Louisiana State University).	Trocadores de Calor

2.4.2. Ferramentas Baseadas em Programação Matemática

Ferramentas comerciais para a integração de processos que utilizam programação matemática são pouco comuns, talvez devido à complexidade do problema e à escassez de algoritmos robustos para resolvê-los. Uma das desvantagens do uso destes *softwares* é que não é possível acessar as equações utilizadas como restrição, assim como a função objetivo a ser minimizada pelos mesmos. A Tabela 2.2 apresenta as principais ferramentas comerciais para a integração de processos utilizando este método.

Tabela 2.2: Ferramentas comerciais para a síntese de redes utilizando programação matemática.

Nome	Fabricante	Aplicação
AspenWater	AspenTech	Água/Efluentes
EnviroPro Designer	Intelligen	Água/Efluentes
Chemical Complex Analysis System	Mineral Processing Research Institute (Louisiana State Univesity).	Processos em Geral

2.4.3. Ferramentas Genéricas de Otimização

Em trabalhos onde redes de trocadores são sintetizadas por programação matemática, geralmente o problema é escrito em uma linguagem de programação qualquer, pois as restrições e funções objetivos da otimização são facilmente visualizadas e manipuladas. As ferramentas comerciais de otimização mais conhecidas são apresentadas na Tabela 2.3.

Tabela 2.3: Ferramentas genéricas de otimização para a modelagem de um problema de síntese de redes

Nome	Fabricante	Aplicação
Matlab	Mathworks	NLP, LP,QP,Multiobjetivo
Tomlab	Tomblab	NLP, LP,QP, MILP, MINLP (toolbox para Matlab)
AMPL*	AMPL	NLP, QP,LP, MILP
LINGO*	LINDO Systems Inc.	NLP,QP, LP, MILP, MINLP
X-Press MP	Dash Optimization	NLP,QP, LP, MILP, MINLP
GAMS*	GAMS Development Corporation	NLP,QP, LP, MILP, MINLP
CPLEX	ILOG	LP,QP,MILP,MIQP

Os softwares assinalados com "*" possuem uma linguagem própria para descrever o problema de otimização. Estes aplicativos interpretam o problema e o enviam a um programa externo (*solvers*) que resolve o problema e retorna o resultado ao usuário. Para cada problema específico de otimização (LP, NLP, MILP, etc) existem programas externos que podem ser adquiridos individualmente.

Através da pesquisa realizada observou-se que nenhum dos aplicativos comerciais para integração de processos incorpora considerações operacionais durante a etapa de síntese de rede, sendo esta mais uma motivação deste trabalho.

Após a revisão bibliográfica, foi determinado que o método mais adequado para o desenvolvimento do trabalho é a formulação do problema por programação matemática, pois como neste caso o problema é modelado por equações matemáticas, a incorporação de restrições e termos na função objetivo pode ser realizada de forma simplificada, sendo esta

uma das principais vantagens desta metodologia. Uma consequência desta vantagem é a facilidade de incorporação de múltiplos poluentes no problema, assim como a adição de termos na função objetivo que contemplem a operabilidade da rede de trocadores de massa, que é o principal objetivo do trabalho. Outra vantagem da formulação por programação matemática é a síntese da rede, que é automática, ou seja, as conexões, vazões e composições das correntes são o resultado direto do problema. É possível observar na Tabela 2.3 que existe uma quantidade considerável de ferramentas de otimização disponíveis comercialmente, o que também vem a facilitar a resolução do problema quando formulado por programação matemática.

No próximo capítulo será apresentado o problema padrão estudado e a modelagem matemática para a representação do mesmo.

Capítulo 3: Descrição e Equacionamento do Problema

O presente capítulo tem por objetivo descrever os modelos matemáticos utilizados neste trabalho para representar o problema de projeto de redes de integração mássica. Inicialmente, é apresentado o problema padrão proposto por Fontana (2002), seguido da sua formulação sob a forma de programação não-linear inteira-mista (MINLP). Também são apresentadas as modificações realizadas no problema original.

3.1. Descrição do Problema de Síntese de Redes de Integração Mássica

O problema de síntese de redes de integração mássica segue o trabalho descrito por Fontana (2002) com algumas modificações. Inicialmente, o problema original é descrito e as modificações são destacadas ao longo do Capítulo. A diferença entre o problema original e o trabalho proposto foi a alteração da função objetivo, restrições de balanço de massa global e restrições de desigualdade, que são apresentadas na Seção 3.2.

No trabalho original, foi elaborado um problema padrão de projeto de redes de integração mássica (fazendo uso da abordagem de processos que utilizam água) com múltiplos poluentes, constituído por unidades geradoras e regeneradoras de contaminantes, fontes de água de reposição e um sumidouro de correntes. Foram considerados a existência de dois poluentes no sistema, 4 unidades geradoras de ambos contaminantes (PROC), chamadas de processos, e 2 unidades regeneradoras (REG), denominadas regeneradores. Cada processo adiciona ao sistema uma vazão constante de ambos os contaminantes, enquanto cada regenerador remove apenas um dos poluentes. Além disso, está presente no sistema uma fonte de água de reposição contaminada com ambos os poluentes que pode alimentar determinadas unidades. Também está incluída no problema, uma unidade de sumidouro, despejo ou tratamento final, que recebe correntes contaminadas provenientes dos processos que, devido à concentração de poluentes, não podem ser reutilizadas. As unidades estão separadas por diferentes distâncias e o objetivo do problema de síntese de redes de integração mássica é minimizar a distância total entre as conexões sujeito às seguintes restrições:

- equações de balanço de massa global e por componentes em cada uma das unidades da síntese;
- vazão máxima de cada conexão, pois o projeto leva em conta um diâmetro máximo de tubulação e capacidade de bombeamento;
- concentração máxima de poluente na entrada de cada processo, imposta operacionalmente;
- seletividade dos regeneradores, pois cada regenerador é seletivo a apenas um dos poluentes;
- concentração de poluente na saída dos regeneradores fixa, pois na sua modelagem, por simplificação, foi considerado que os regeneradores operam em equilíbrio e em condições de não saturação, o que garante a concentração de saída constante;
- vazão de entrada nos processos igual ao seu limite operacional.
- não é permitido reciclo direto entre as unidades.

Para efeitos de representação matemática, cada unidade, tanto geradora quanto regeneradora de poluentes, é composta por 3 etapas: um misturador, um processo ou regenerador e um divisor de correntes. Os misturadores reúnem as correntes provenientes das demais unidades que irão alimentar os processos ou regeneradores. Nos processos, os contaminantes são adicionados a uma taxa constante, enquanto que nos regeneradores estes são seletivamente removidos. A corrente proveniente da saída do processo ou regenerador alimenta um divisor de correntes que realiza a distribuição para as demais unidades. A representação do modelo de uma unidade utilizada na rede de integração mássica é apresentada na Figura 3.1, onde Lin_i e $Lout_i$ são as vazões que alimentam e deixam o processo (ou regenerador) i respectivamente, $M_{i,j}$ é a carga do poluente j adicionada ao processo i e $SM_{i,j}$ a carga do poluente j removido no regenerador i .

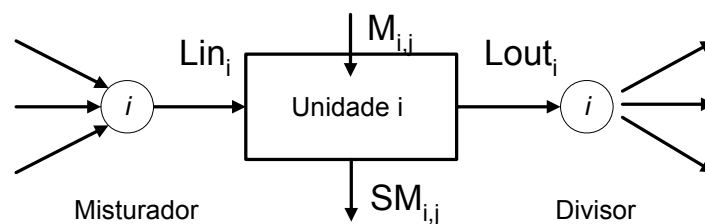


Figura 3.1: Representação de uma unidade que compõe a rede de integração mássica.

No problema em estudo, existem restrições relativas às possibilidades de conexões entre as unidades, apresentadas na Tabela 3.1.

Tabela 3.1: Conexões permitidas entre as unidades da rede.

Unidades	Pode alimentar	Pode receber conexão
Fonte de água	Processos	Nenhuma Unidade
Processos	Processos*, Regeneradores, Despejo	Processos*, Regeneradores, Fonte
Regeneradores	Processos, Regeneradores*	Processos, Regeneradores*
Despejo	Nenhuma Unidade	Processos

* Não é permitido o reciclo direto entre unidades, ou seja, a corrente que deixa um processo não pode voltar a alimentá-lo.

O esquema da rede de integração mássica com suas possíveis conexões é apresentado na Figura 3.2. Para a formulação dos modelos que representam o sistema, algumas hipóteses são assumidas, entre elas:

- não existe acúmulo de massa nas unidades, por consequência, toda a água de reposição que entra no sistema, sai do mesmo para a unidade de despejo (o balanço de massa global é satisfeito);
- os regeneradores operam em equilíbrio na condição de não saturação;
- as espécies envolvidas não interagem entre si;

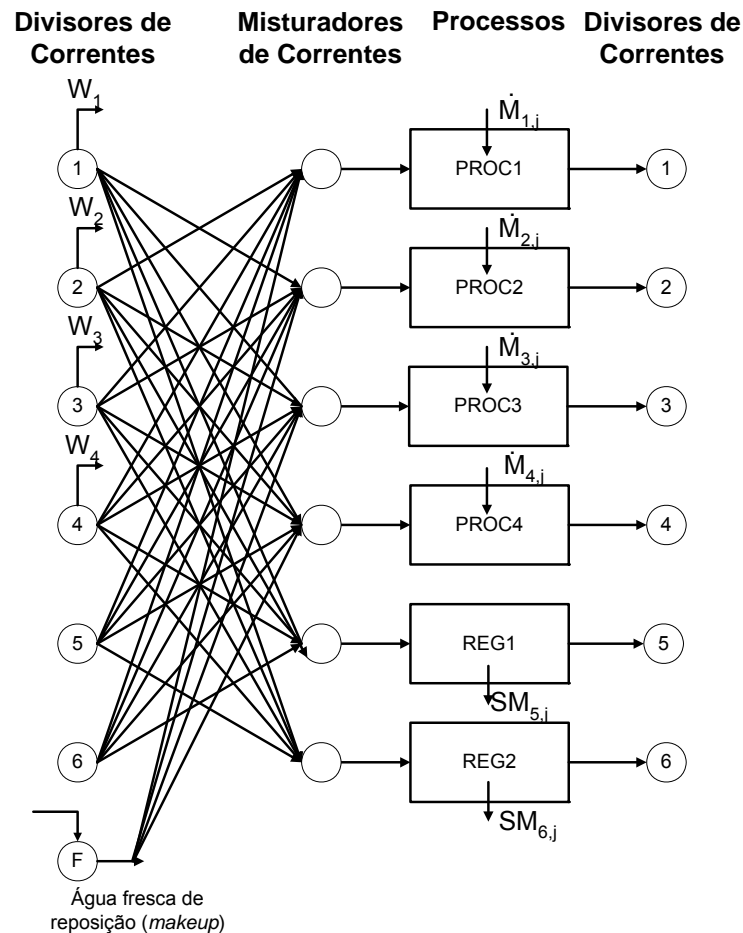


Figura 3.2: Representação esquemática da rede de integração mássica.

As especificações para o problema proposto são as seguintes:

- vazão máxima entre os processos: 9 t/h;
- fração mássica do poluente 1 e 2 na água de reposição: $XF_1 = 4$ ppmw (obtida a partir da Equação 3.1 e 3.4) e $XF_2 = 4$ ppmw (conforme a Equação 3.1 e 3.4), expressos em partes por milhão em base mássica e isenta de poluentes;
- concentração de poluentes na saída dos regeneradores: $C_{out,5,1} = 4$ ppmw e $C_{out,5,2} = 20$ ppmw, $C_{out,6,1} = 40$ ppmw e $C_{out,6,2} = 12$ ppmw (expressos em partes por milhão em base mássica e isenta de poluentes conforme Equação 3.1);

$$C_j(\text{ppmw}) = \frac{m_j(t) \cdot 10^6}{m_{\text{Sol}}(t)} \quad (3.1)$$

onde C_j é a concentração do poluente j em base isenta de poluentes, m_j é a massa do poluente j e m_{Sol} é a massa de solvente, ambas expressas em toneladas, sendo que o fator 10^6 converte a

concentração em base isenta de poluentes em concentração em partes por milhão em base isenta de poluentes. Utilizando a Equação 3.2 para expressar a fração mássica do componente e dividindo o numerador e denominador pela massa de solvente (m_{solv}) temos a Equação 3.3.

$$X_1 = \frac{\overline{m_1}}{\overline{m_1 + m_2 + m_{solv}}} \quad (3.2)$$

$$X_1 = \frac{\frac{\overline{m_1}}{\overline{m_{solv}}}}{\frac{\overline{m_1}}{\overline{m_{solv}}} + \frac{\overline{m_2}}{\overline{m_{solv}}} + \frac{\overline{m_{solv}}}{\overline{m_{solv}}}} \quad (3.3)$$

Substituindo a Equação 3.1 na Equação 3.3, é obtida a Equação 3.4, que converte a concentração expressa em ppmw para fração mássica expressa na mesma unidade

$$X_j(ppmw) = \frac{C_j(ppmw)}{1 + 10^{-6} \cdot \sum_{j=1}^2 C_j(ppmw)} \quad (3.4)$$

onde X_j é a fração mássica expressa em partes por milhão e em base isenta de poluentes.

As condições de operação dos processos, cargas de poluente geradas e concentrações máximas de poluentes permitidas na entrada dos processos são mostradas na Tabela 3.2. A disposição das unidades constituintes do problema é apresentada na Figura 3.3, enquanto que as distâncias entre as unidades são mostradas de forma simplificada na Tabela 3.3.

Tabela 3.2: Vazão operacional, carga de poluente e concentração máxima de poluente especificadas na descrição do problema.

Processo	Vazão operacional [t/h] (<i>Lsup</i>)	Carga de Poluente [g/h]		Cin^{max} – base isenta de poluentes [ppmw]	
		Poluente 1	Poluente 2	Poluente 1	Poluente 2
1	2	15	9	22	8
2	2	42	218	4	20
3	3	30	30	30	90
4	3	37	15	21	15

Tabela 3.3: Distância entre as unidades.

Distância entre a saída do processo k (colunas) e a entrada do processo i (linhas) [m]						
i / k	Processo 1	Processo 2	Processo 3	Processo 4	Regenerador 1	Regenerador 2
Processo 1	NP*	70	50	90	75	35
Processo 2	10	NP*	30	50	35	75
Processo 3	50	90	NP*	70	55	15
Processo 4	30	50	10	NP*	15	55
Regenerador 1	75	35	55	15	NP*	70
Regenerador 2	35	75	15	55	10	NP*

NP*: Reciclo na própria unidade não permitida.

Layout do sistema

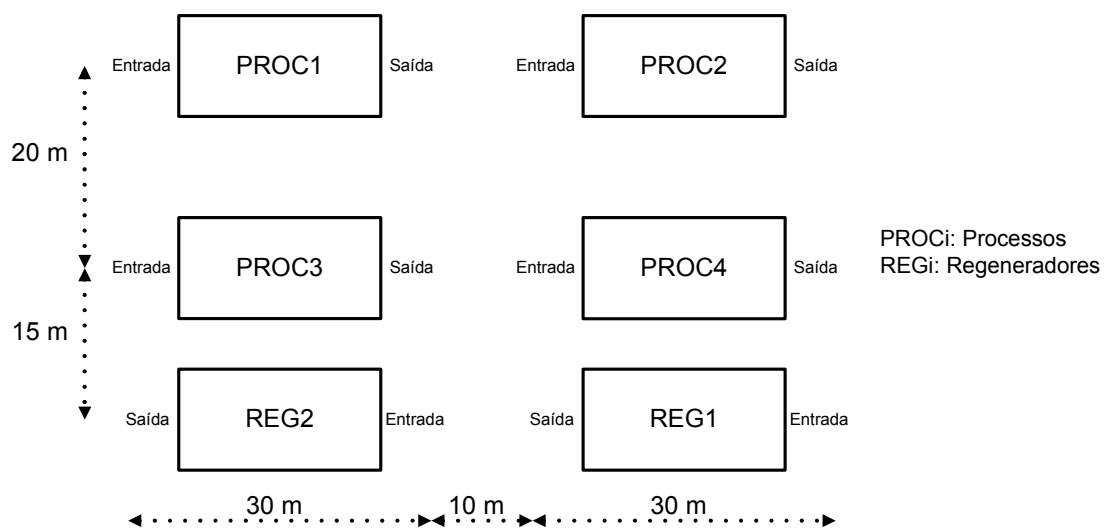


Figura 3.3: Disposição das unidades presentes no problema com suas respectivas distâncias.

3.2. Equacionamento do Problema

3.2.1. Equacionamento do problema MINLP completo

Para a resolução do problema proposto por Fontana (2002), foram utilizadas, inicialmente, ferramentas de otimização aplicando algoritmos de programação não-linear inteira-mista (MINLP), conforme proposto pela autora. Um problema genérico de otimização com restrição é constituído de uma função objetivo, a ser minimizada ou maximizada, sujeita a restrições de igualdade e desigualdade. No caso de problemas MINLP, as variáveis de decisão podem ser tanto contínuas quanto discretas. No problema da síntese de redes de integração abordado, as variáveis contínuas são as vazões das correntes entre os processos e as respectivas composições, enquanto que as discretas são variáveis binárias que representam

a existência das conexões entre os processos. A representação genérica de um problema de otimização MINLP é apresentada na Equação 3.5. A descrição das variáveis utilizadas na formulação do problema são apresentadas na Tabela 3.4.

$$\begin{aligned}
 \min S &= f(x, y), \text{ sujeito a} \\
 h(x, y) &= 0 \\
 g(x, y) &\leq 0 \\
 x &\in X \subseteq \mathfrak{R}^n \\
 y &\in Y \subseteq \mathfrak{S}^m
 \end{aligned} \tag{3.5}$$

Tabela 3.4 : Descrição das variáveis utilizadas na formulação do problema.

Variável	Descrição da Variável	Número	Unidade
$L_{i,k}$	Vazão da corrente que sai da unidade k e alimenta a unidade i .	36	t/h
$y_{i,k}$	Variável binária representando a conexão entre a unidade k e i .	36	-
Lin_i	Vazão da corrente que deixa o misturador e alimenta a unidade i .	6	t/h
$Lsup_i$	Vazão de operação do processo i .	4	t/h
$Lout_i$	Vazão que deixa a unidade i e alimenta o respectivo divisor de corrente .	6	t/h
F_i	Vazão de água de reposição que alimenta o misturador do processo i .	4	t/h
W_i	Vazão de água que deixa o divisor do processo i e é destinada ao despejo.	4	t/h
$M_{i,j}$	Carga do componente j adicionada no processo i .	12	g/h
$SM_{i,j}$	Carga do componente j removida no regenerador i .	12	g/h
$Xin_{i,j}$	Fração mássica do componente j que alimenta a unidade i .	12	ppmw
$Xout_{i,j}$	Fração mássica do componente j que deixa a unidade i .	12	ppmw
XF_j	Fração mássica do componente j presente na água de reposição.	2	ppmw
$\Phi_{i,j}$	Termo de folga relativo a fração mássica do componente j na entrada do processo i .	8	ppmw

Função Objetivo

No problema original, a função objetivo contemplava somente os custos fixos relativos à existência das conexões entre os processos conforme apresentado na Equação 3.6. O presente trabalho propôs a formulação do problema na forma multi-objetivo, utilizando o método de resolução da estratégia das somas ponderadas proposto por GASS e SAATY

(1955). Neste tipo de formulação, a função objetivo é expressa como um vetor composto de diversos elementos, cada um ponderado por seu respectivo peso. A formulação do problema de otimização multi-objetivo segue a Equação 3.7, sendo a função objetivo formada por três elementos: os custos variáveis relativo às vazões entre os processos, os custos fixos relativo à existência das conexões e um termo de folga em relação às restrições de composição de entrada nos processos, conforme apresentado na Equação 3.8. O termo de folga, f_3 , foi adicionado à função objetivo e às restrições de desigualdade com o intuito de aumentar a robustez do método de otimização, visto que, em algumas condições, o algoritmo de otimização falhava. Ao adicionar o termo de folga a algumas restrições de desigualdade (Equação 3.30), é permitida uma violação das mesmas, no entanto, para que esta violação das restrições seja pequena, é necessário que este termo também seja minimizado, através da adição do mesmo à função objetivo. Este artifício garantiu a resolução do problema de otimização satisfazendo as restrições de desigualdade que envolvem as composições máximas permitidas na entrada dos processos (Equação 3.30), que não estavam sendo satisfeitas.

$$S = \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq k}}^6 \sum_{k=1}^6 D_{i,k} \cdot y_{i,k} \quad (3.6)$$

$$S = \sum_{i=1}^k w_i \cdot f_i(x)$$

sujeito a:

$$0 \leq w_i \leq 1 \text{ para todo } i = 1..k \text{ e} \quad (3.7)$$

$$\sum_{i=1}^k w_i = 1$$

$$S = w_1 \cdot (f_1 + f_2) + w_2 \cdot f_3$$

onde:

$$f_1 = \sum_{i=1}^6 \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^6 D_{i,k} \cdot y_{i,k} \quad (3.8)$$

$$f_2 = \frac{1}{2} \cdot \sum_{i=1}^6 \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^6 D_{i,k} \cdot L_{i,k}$$

$$f_3 = \sum_{i=1}^4 \sum_{j=1}^1 \Phi_{i,j}$$

onde os índices i,k representam a saída do processo k e entrada no processo i . No caso da Equação 3.8, $D_{i,k}$ representa a distância entre a saída do processo k e a entrada do processo i , $y_{i,k}$, a existência da conexão entre os processos k e i , e $L_{i,k}$ as vazões entre os respectivos

processos. Os pesos w_i são apresentados na Tabela D.14 do Apêndice D. Os termos f_1, f_2 e f_3 da Equação 3.8 foram representados sob a forma de somatórios e por operações matriciais para facilitar a demonstração de manipulações algébricas. A Equação 3.8 representada matricialmente é expressa pela Equação 3.9 .

$$S = w_1 \cdot (f_1 + f_2) + w_2 \cdot f_3$$

onde

$$f_1 = (1 \ 1 \ 1 \ 1 \ 1 \ 1) \times (D \otimes y) \times (1 \ 1 \ 1 \ 1 \ 1 \ 1)^T$$

$$f_2 = \frac{1}{2} \cdot (1 \ 1 \ 1 \ 1 \ 1 \ 1) \times (D \otimes L) \times (1 \ 1 \ 1 \ 1 \ 1 \ 1)^T \quad (3.9)$$

$$f_3 = (1 \ 1 \ 1 \ 1) \times \begin{pmatrix} \Phi_{1,1} & \Phi_{1,2} \\ \Phi_{2,1} & \Phi_{2,2} \\ \Phi_{3,1} & \Phi_{3,2} \\ \Phi_{4,1} & \Phi_{4,2} \end{pmatrix} \times (1 \ 1)^T$$

onde o símbolo " \otimes " representa o operador de multiplicação matricial elemento a elemento, " \times " a multiplicação matricial, o sobrescrito " T " representa a operação de transposição, D a matriz de distâncias entre os processos apresentada na Tabela 3.3, L a matriz de vazões com dimensão de 6 linhas por 6 colunas onde cada elemento $L_{i,j}$ representa a vazão $L_{i,k}$ e y a matriz com 6 linhas e 6 colunas representando com elementos 1 ou 0 a existência ou não de conexões entre os processos.

Restrições de igualdade

A cada misturador, unidade e divisor de correntes estão associados balanços de massa e de componentes expressos através de restrições de igualdade. No sistema em estudo, estão presentes 6 misturadores, sendo 4 relativos aos processos e os demais pertencentes às unidades regeneradoras. A representação esquemática dos balanços nos misturadores é apresentada na Figura 3.4 Como os balanços nos processos e regeneradores são distintos, devido à restrição da conexão de água de reposição, foram gerados dois conjuntos de equações. A equação de balanço de massa sob a forma de somatório para cada um dos misturadores de processos e regeneradores é representada, respectivamente, pelas Equações 3.10 e 3.11, ou ambas sob a forma matricial pela Equação 3.12.

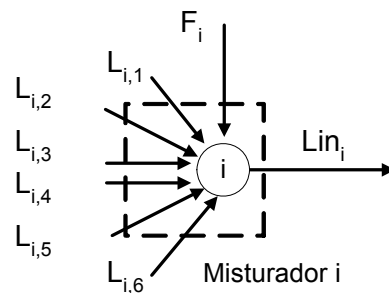


Figura 3.4: Representação esquemática do balanço de massa no misturador i .

$$F_i + \sum_{\substack{k=1 \\ i \neq k}}^6 L_{i,k} = Lin_i \quad i=1..4 \quad (3.10)$$

$$\sum_{\substack{k=1 \\ i \neq k}}^6 L_{i,k} = Lin_i \quad i=5..6 \quad (3.11)$$

$$\begin{pmatrix} F_1 \\ F_2 \\ F_3 \\ F_4 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & L_{1,2} & L_{1,3} & L_{1,4} & L_{1,5} & L_{1,6} \\ L_{2,1} & 0 & L_{2,3} & L_{2,4} & L_{2,5} & L_{2,6} \\ L_{3,1} & L_{3,2} & 0 & L_{3,4} & L_{3,5} & L_{3,6} \\ L_{4,1} & L_{4,2} & L_{4,3} & 0 & L_{4,5} & L_{4,6} \\ L_{5,1} & L_{5,2} & L_{5,3} & L_{5,4} & 0 & L_{5,6} \\ L_{6,1} & L_{6,2} & L_{6,3} & L_{6,4} & L_{6,5} & 0 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Lin_1 \\ Lin_2 \\ Lin_3 \\ Lin_4 \\ Lin_5 \\ Lin_6 \end{pmatrix} \quad (3.12)$$

onde F_i representa a corrente de água de reposição e Lin_i a corrente que deixa o misturador i e alimenta cada unidade.

Os balanços de massa para as unidades são representados esquematicamente na Figura 3.5. As expressões para os balanços sob a forma de somatório para as unidades de processos e regeneradores seguem as Equações 3.13 e 3.14, respectivamente, enquanto que as formas matriciais dos balanços seguem as Equações 3.15 e 3.16, respectivamente.

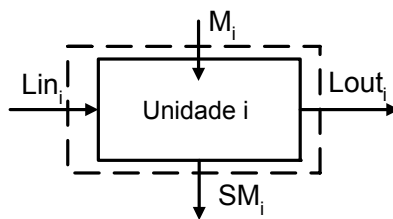


Figura 3.5: Representação esquemática do balanço de massa na unidade i .

$$Lin_i + \sum_{j=1}^2 \dot{M}_{i,j} \cdot 10^{-6} = Lout_i \quad i=1..4 \quad (3.13)$$

$$Lin_i = Lout_i + \dot{SM}_{i,j} \cdot 10^{-6} \quad \text{para } i=5, j=1; \text{ para } i=6, j=2 \quad (3.14)$$

$$\begin{pmatrix} Lin_1 \\ Lin_2 \\ Lin_3 \\ Lin_4 \end{pmatrix} + 10^{-6} \cdot \begin{pmatrix} \dot{M}_{1,1} & \dot{M}_{1,2} \\ \dot{M}_{2,1} & \dot{M}_{2,2} \\ \dot{M}_{3,1} & \dot{M}_{3,2} \\ \dot{M}_{4,1} & \dot{M}_{4,2} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Lout_1 \\ Lout_2 \\ Lout_3 \\ Lout_4 \end{pmatrix} \quad (3.15)$$

$$\begin{pmatrix} Lin_5 \\ Lin_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Lout_5 \\ Lout_6 \end{pmatrix} + 10^{-6} \cdot \begin{pmatrix} \dot{SM}_{5,1} \\ \dot{SM}_{6,2} \end{pmatrix} \quad (3.16)$$

onde $M_{i,j}$ representa a carga de contaminante j gerada em cada processo i , $SM_{i,j}$ a carga de poluentes j removida pelo regenerador i e $Lout_i$ a corrente que deixa a unidade i e alimenta o divisor de correntes.

Os balanços de massa para os divisores de correntes das unidades são representados esquematicamente na Figura 3.6. As expressões para os balanços sob a forma de somatório de processos e regeneradores seguem as Equações 3.17 e 3.18, respectivamente, enquanto que os balanços de massa em todos os divisores sob a forma matricial seguem a Equação 3.19.

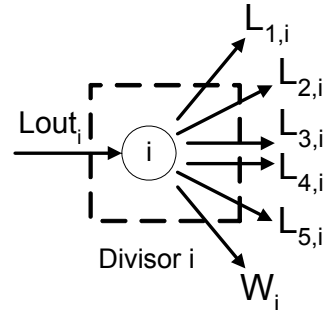


Figura 3.6: Representação esquemática do balanço de massa no divisor de corrente i .

$$Lout_i = W_i + \sum_{\substack{k=1 \\ i \neq k}}^6 L_{k,i} \quad i=1..4 \quad (3.17)$$

$$Lout_i = \sum_{\substack{k=1 \\ i \neq k}}^6 L_{k,i} \quad i=5..6 \quad (3.18)$$

$$\begin{pmatrix} Lout_1 \\ Lout_2 \\ Lout_3 \\ Lout_4 \\ Lout_5 \\ Lout_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} W_1 \\ W_2 \\ W_3 \\ W_4 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \left((1 \ 1 \ 1 \ 1 \ 1 \ 1) \times \begin{pmatrix} 0 & L_{1,2} & L_{1,3} & L_{1,4} & L_{1,5} & L_{1,6} \\ L_{2,1} & 0 & L_{2,3} & L_{2,4} & L_{2,5} & L_{2,6} \\ L_{3,1} & L_{3,2} & 0 & L_{3,4} & L_{3,5} & L_{3,6} \\ L_{4,1} & L_{4,2} & L_{4,3} & 0 & L_{4,5} & L_{4,6} \\ L_{5,1} & L_{5,2} & L_{5,3} & L_{5,4} & 0 & L_{5,6} \\ L_{6,1} & L_{6,2} & L_{6,3} & L_{6,4} & L_{6,5} & 0 \end{pmatrix} \right)^T \quad (3.19)$$

onde W_i representa as vazões destinadas ao despejo ou sumidouro e o sobrescrito " T " representa a operação de transposição.

Os balanços por componentes para os misturadores das unidades de processos e regeneradores são representados esquematicamente através da Figura 3.7. As expressões para tais balanços sob a forma de somatório para ambos os contaminantes seguem as equações 3.20 e 3.21, enquanto que os balanços de componentes nos misturadores de todas as unidades para os contaminantes 1 e 2 sob a forma matricial seguem as equações 3.22 e 3.23, respectivamente.

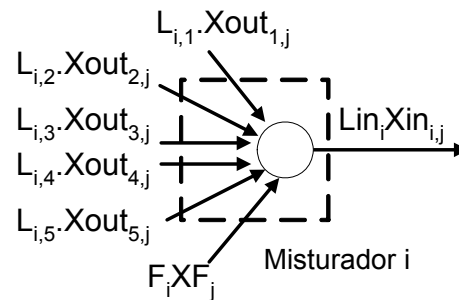


Figura 3.7: Representação esquemática do balanço de massa por componentes no misturador i .

$$XF_j \cdot F_k + \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq k}}^6 Xout_{i,j} \cdot L_{k,i} = Xin_{k,j} \cdot Lin_k \quad k=1..4, j=1..2 \quad (3.20)$$

$$\sum_{\substack{i=1 \\ i \neq k}}^6 Xout_{i,j} \cdot L_{k,i} = Xin_{k,j} \cdot Lin_k \quad k=5..6, j=1..2 \quad (3.21)$$

$$\begin{pmatrix} F_1 \\ F_2 \\ F_3 \\ F_4 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} XF_1 \\ XF_1 \\ XF_1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & L_{1,2} & L_{1,3} & L_{1,4} & L_{1,5} & L_{1,6} \\ L_{2,1} & 0 & L_{2,3} & L_{2,4} & L_{2,5} & L_{2,6} \\ L_{3,1} & L_{3,2} & 0 & L_{3,4} & L_{3,5} & L_{3,6} \\ L_{4,1} & L_{4,2} & L_{4,3} & 0 & L_{4,5} & L_{4,6} \\ L_{5,1} & L_{5,2} & L_{5,3} & L_{5,4} & 0 & L_{5,6} \\ L_{6,1} & L_{6,2} & L_{6,3} & L_{6,4} & L_{6,5} & 0 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} Xout_{1,1} \\ Xout_{2,1} \\ Xout_{3,1} \\ Xout_{4,1} \\ Xout_{5,1} \\ Xout_{6,1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Lin_1 \\ Lin_2 \\ Lin_3 \\ Lin_4 \\ Lin_5 \\ Lin_6 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} Xin_{1,1} \\ Xin_{2,1} \\ Xin_{3,1} \\ Xin_{4,1} \\ Xin_{5,1} \\ Xin_{6,1} \end{pmatrix} \quad (3.22)$$

$$\begin{pmatrix} F_1 \\ F_2 \\ F_3 \\ F_4 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} XF_2 \\ XF_2 \\ XF_2 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & L_{1,2} & L_{1,3} & L_{1,4} & L_{1,5} & L_{1,6} \\ L_{2,1} & 0 & L_{2,3} & L_{2,4} & L_{2,5} & L_{2,6} \\ L_{3,1} & L_{3,2} & 0 & L_{3,4} & L_{3,5} & L_{3,6} \\ L_{4,1} & L_{4,2} & L_{4,3} & 0 & L_{4,5} & L_{4,6} \\ L_{5,1} & L_{5,2} & L_{5,3} & L_{5,4} & 0 & L_{5,6} \\ L_{6,1} & L_{6,2} & L_{6,3} & L_{6,4} & L_{6,5} & 0 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} Xout_{1,2} \\ Xout_{2,2} \\ Xout_{3,2} \\ Xout_{4,2} \\ Xout_{5,2} \\ Xout_{6,2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Lin_1 \\ Lin_2 \\ Lin_3 \\ Lin_4 \\ Lin_5 \\ Lin_6 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} Xin_{1,2} \\ Xin_{2,2} \\ Xin_{3,2} \\ Xin_{4,2} \\ Xin_{5,2} \\ Xin_{6,2} \end{pmatrix} \quad (3.23)$$

onde XF_j é a fração mássica do componente j na água de reposição, $Xin_{i,j}$ é a fração mássica do componente j na entrada do processo i e $Xout_{i,j}$ é a fração mássica do componente j na saída do processo i ; todas as frações mássicas são expressas em partes por milhão em base mássica e isenta de poluentes (ppmw).

Os balanços por componentes em cada unidade são representados esquematicamente pela Figura 3.8 e sua expressão sob a forma de somatório para as unidades de processos e regeneradores, para ambos os contaminantes, seguem as equações 3.24 e 3.25, enquanto que as formas matriciais seguem as equações 3.26 e 3.27, respectivamente.

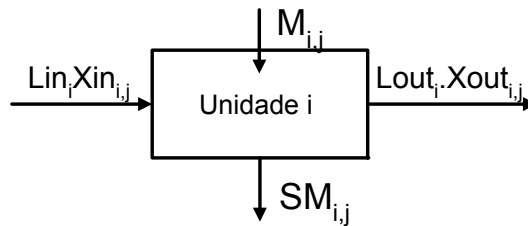


Figura 3.8: Representação esquemática do balanço de componente na unidade i .

$$M_{i,j} + Xin_{i,j} \cdot Lin_i = Xout_{i,j} \cdot Lout_i \quad i=1..4, j=1..2 \quad (3.24)$$

$$Xin_{i,j} \cdot Lin_i = SM_{i,j} + Xout_{i,j} \cdot Lout_i \quad \text{para } i=5, j=1 \text{ e para } i=6, j=2 \quad (3.25)$$

$$\begin{pmatrix} Lin_1 \\ Lin_2 \\ Lin_3 \\ Lin_4 \\ Lin_5 \\ Lin_6 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} Xin_{1,1} \\ Xin_{2,1} \\ Xin_{3,1} \\ Xin_{4,1} \\ Xin_{5,1} \\ Xin_{6,1} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} M_{1,1} \\ M_{2,1} \\ M_{3,1} \\ M_{4,1} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Lout_1 \\ Lout_2 \\ Lout_3 \\ Lout_4 \\ Lout_5 \\ Lout_6 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} Xout_{1,1} \\ Xout_{2,1} \\ Xout_{3,1} \\ Xout_{4,1} \\ Xout_{5,1} \\ Xout_{6,1} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ SM_{5,1} \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.26)$$

$$\begin{pmatrix} Lin_1 \\ Lin_2 \\ Lin_3 \\ Lin_4 \\ Lin_5 \\ Lin_6 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} Xin_{1,2} \\ Xin_{2,2} \\ Xin_{3,2} \\ Xin_{4,2} \\ Xin_{5,2} \\ Xin_{6,2} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} M_{1,2} \\ M_{2,2} \\ M_{3,2} \\ M_{4,2} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Lout_1 \\ Lout_2 \\ Lout_3 \\ Lout_4 \\ Lout_5 \\ Lout_6 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} Xout_{1,2} \\ Xout_{2,2} \\ Xout_{3,2} \\ Xout_{4,2} \\ Xout_{5,2} \\ Xout_{6,2} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ SM_{6,2} \end{pmatrix} \quad (3.27)$$

A expressão da fração mássica do componente j na saída do regenerador i em função da concentração em base isenta de poluentes do componente j que deixa o regenerador i é expressa pela Equação 3.28.

$$Xout_{i,j}(ppmw) = \frac{Cout_{i,j}(ppmw)}{1 + 10^{-6} \cdot \sum_{j=1}^2 Cout_{i,j}(ppmw)} \quad (3.28)$$

onde $Cout_{i,j}$ é a concentração do poluente j (expressa em ppm em base mássica e isenta de poluentes) na saída do regenerador i . Como o regenerador 1 é seletivo apenas para o componente 1 e o regenerador 2 ao poluente 2 temos que $Xin_{5,2} = Xout_{5,2}$ e $Xin_{6,1} = Xout_{6,1}$.

A vazão de entrada Lin_i que alimenta os processos possui uma vazão operacional que deve ser mantida constante, esta restrição pode ser representada por uma restrição de igualdade expressa pela Equação 3.29.

$$Lin_i = Lsup_i \quad \text{para } i=1..4 \quad (3.29)$$

Restrições de Desigualdade

No problema em estudo, algumas unidades estão sujeitas a restrições relativas aos limites operacionais que não podem ser ultrapassados, expressos matematicamente por restrições de desigualdade. No caso específico dos processos, existe a restrição de fração mássica na entrada que não deve ultrapassar um valor máximo, esta limitação é expressa pela Equação 3.30.

$$Xin_{i,j}(ppmw) \leq \frac{Cin_{i,j}^{\max}(ppmw)}{1 + 10^{-6} \cdot \sum_{j=1}^2 Cin_{i,j}^{\max}(ppmw)} + \Phi_{i,j} \quad (3.30)$$

onde $Cin_{i,j}^{\max}$ é a concentração máxima admissível do poluente j (expressa em ppm em base mássica e isenta de poluentes) na entrada do processo i .

Em problemas de síntese de redes integradas massivamente um dos principais objetivos é a redução do consumo de água de reposição. No presente problema, esta meta é expressa através de uma restrição de desigualdade apresentada na Equação 3.31.

$$\sum_{i=1}^4 F_i \leq F_{\max} \quad (3.31)$$

onde F_{\max} é a vazão máxima de água de reposição que alimenta o sistema.

Semelhantemente a um cenário industrial, no sistema proposto existe uma vazão máxima permitida na tubulação. Este limite é imposto pelo diâmetro da tubulação ou vazão de operação do sistema de bombeamento, sendo também expressas por restrições de desigualdade conforme a Equação 3.32.

$$L_{i,k} - y_{i,k} \cdot L_{\max} \leq 0 \quad \text{para } i=1..6, k=1..6 \text{ e } i \neq k \quad (3.32)$$

onde L_{\max} é a máxima vazão permitida na tubulação que sai do processo k e alimenta o processo i . Embora a equação acima seja de importância em um caso industrial, não foi necessária a inclusão desta no problema em estudo, pois as vazões resultantes ficaram muito abaixo da vazão máxima permitida utilizada no problema original (9 t/h).

Análise de Graus de Liberdade do Sistema

Para avaliar a consistência da modelagem proposta, foi realizada a análise de graus de liberdade do sistema proposto. Nesta análise foram contabilizadas as variáveis envolvidas, as equações e especificações do sistema. A descrição detalhada dos graus de liberdade do sistema é apresentada no Apêndice A. O cálculo dos graus de liberdade do sistema foi realizado aplicando-se a Equação 3.33.

$$GL = nvar - ns - neq \quad (3.33)$$

onde GL é o número de graus de liberdade do sistema, $nvar$ é o número de variáveis do sistema (apresentadas na Tabela A.1 do Apêndice A), ns é o número de especificações (apresentadas na Tabela A.2 do Apêndice A) e neq é o número de equações do problema

(apresentadas na Tabela A.3 do Apêndice A). Substituindo na equação acima os respectivos valores, tem-se:

$$GL = 132 - 30 - 42 = 60$$

Logo, o problema de otimização possui 60 graus de liberdade, referentes às variáveis de decisão y_{ik} (totalizando 30 variáveis livres) e L_{ik} (totalizando 30 variáveis livres), que estão presentes na função objetivo.

Resumidamente as principais modificações no problema original proposto por Fontana (2002) foram:

- A modificação da função objetivo, representada pela Equação 3.6 pela 3.7.
- A adição do termo de folga na função objetivo e restrição de desigualdade (Equação 3.7 e 3.30, respectivamente).
- A eliminação da restrição de desigualdade referente a vazão máxima de água entre as unidades (Equação 3.32).
- A eliminação da restrição de igualdade referente ao balanço de massa global.

Para contornar as dificuldades provenientes da resolução de algoritmos MINLP e problemas operacionais resultantes de redes com grande integração entre as correntes, foram propostas estratégias de soluções apresentadas no capítulo seguinte.

Capítulo 4: Métodos de Resolução para o Problema

O presente capítulo tem por objetivo apresentar as metodologias aplicadas para resolver o problema de síntese de redes de integração mássica descrito e equacionado no capítulo anterior. São apresentadas, inicialmente, as metodologias propostas de redução de variáveis e relaxação de variáveis discretas. A seguir é apresentada a metodologia utilizada para gerar estimativas iniciais para os problemas de otimização. Finalmente, é apresentada a formulação da função objetivo com índices econômicos e de operabilidade, também proposto pelo trabalho.

4.1. Descrição do problema MINLP reduzido

Devido ao número elevado de variáveis e restrições, que resulta em considerável tempo computacional para a resolução do problema, foi proposta a redução do número de variáveis e restrições deste. Este procedimento foi realizado utilizando as variáveis de decisão $L_{i,k}$, e as equações de balanço lineares e não-lineares, para expressar as demais variáveis através de cálculos sequenciais. O problema resultante deste procedimento foi resolvido pelo método de programação não-linear inteira-mista e por esta razão foi denominado MINLP reduzido, sendo este idêntico ao problema no que diz respeito às variáveis e equações utilizadas. Seguem abaixo as operações realizadas para aplicar tal procedimento.

Inicialmente, utilizando a Equação 3.12 e com a identidade $Lin_i = Lsup$ para os 4 primeiros processos, foi possível calcular F_i para as unidades de processo, tal procedimento é apresentado na Equação 4.1. O cálculo de Lin_i para os regeneradores foi realizado a partir da Equação 3.12, conforme apresentado na Equação 4.2.

$$\begin{pmatrix} F_1 \\ F_2 \\ F_3 \\ F_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Lin_1 \\ Lin_2 \\ Lin_3 \\ Lin_4 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & L_{1,2} & L_{1,3} & L_{1,4} & L_{1,5} & L_{1,6} \\ L_{2,1} & 0 & L_{2,3} & L_{2,4} & L_{2,5} & L_{2,6} \\ L_{3,1} & L_{3,2} & 0 & L_{3,4} & L_{3,5} & L_{3,6} \\ L_{4,1} & L_{4,2} & L_{4,3} & 0 & L_{4,5} & L_{4,6} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (4.1)$$

$$\begin{pmatrix} Lin_5 \\ Lin_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} L_{5,1} & L_{5,2} & L_{5,3} & L_{5,4} & 0 & L_{5,6} \\ L_{6,1} & L_{6,2} & L_{6,3} & L_{6,4} & L_{6,5} & 0 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (4.2)$$

Cabe ressaltar que para o balanço nos processos, $Lin_i = Lsup_i$ (para $i = 1..4$). A partir do cálculo do Lin_i foi possível calcular a vazão de saída para os processos 1 a 4, através do balanço de massa por unidade expresso pela Equação 3.15. Este cálculo é apresentado na Equação 4.3.

$$\begin{pmatrix} Lout_1 \\ Lout_2 \\ Lout_3 \\ Lout_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Lin_1 \\ Lin_2 \\ Lin_3 \\ Lin_4 \end{pmatrix} + 10^{-6} \cdot \begin{pmatrix} \dot{M}_{1,1} & \dot{M}_{1,2} \\ \dot{M}_{2,1} & \dot{M}_{2,2} \\ \dot{M}_{3,1} & \dot{M}_{3,2} \\ \dot{M}_{4,1} & \dot{M}_{4,2} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (4.3)$$

Com Lin_i e $Lout_i$ calculados para os 4 primeiros processos, foi possível através da resolução de um sistema de equações, calcular $Xin_{i,j}$ e $Xout_{i,j}$. Tal cálculo foi realizado a partir de um balanço por componente no conjunto unidade e misturador de correntes (Equações 3.20 e 3.24). As representações matriciais do balanço para os componentes 1 e 2 são apresentadas nas Equações 4.4 e 4.5, respectivamente.

$$\underbrace{\begin{pmatrix} Lout_1 & 0 & 0 & 0 & -Lin_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & Lout_2 & 0 & 0 & 0 & -Lin_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & Lout_3 & 0 & 0 & 0 & -Lin_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & Lout_4 & 0 & 0 & 0 & -Lin_4 \\ 0 & L_{1,2} & L_{1,3} & L_{1,4} & -Lin_1 & 0 & 0 & 0 \\ L_{2,1} & 0 & L_{2,3} & L_{2,4} & 0 & -Lin_2 & 0 & 0 \\ L_{3,1} & L_{3,2} & 0 & L_{3,4} & 0 & 0 & -Lin_3 & 0 \\ L_{4,1} & L_{4,2} & L_{4,3} & 0 & 0 & 0 & 0 & -Lin_4 \end{pmatrix}}_{\tilde{L}} \times \underbrace{\begin{pmatrix} Xout_{1,1} \\ Xout_{2,1} \\ Xout_{3,1} \\ Xout_{4,1} \\ Xin_{1,1} \\ Xin_{2,1} \\ Xin_{3,1} \\ Xin_{4,1} \end{pmatrix}}_{\tilde{X}_1} = \begin{pmatrix} M_{1,1} \\ M_{2,1} \\ M_{3,1} \\ M_{4,1} \\ -F_1 \\ -F_2 \\ -F_3 \\ -F_4 \end{pmatrix} \otimes \underbrace{\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ XF_1 + \frac{\sum_{i=5}^6 L_{1,i} \cdot Xout_{i,1}}{F_1} \\ XF_1 + \frac{\sum_{i=5}^6 L_{2,i} \cdot Xout_{i,1}}{F_2} \\ XF_1 + \frac{\sum_{i=5}^6 L_{3,i} \cdot Xout_{i,1}}{F_3} \\ XF_1 + \frac{\sum_{i=5}^6 L_{4,i} \cdot Xout_{i,1}}{F_4} \end{pmatrix}}_{b_1} \quad (4.4)$$

onde as primeiras 4 linhas das Equações 4.4 e 4.5 representam o balanço por componente na unidade, enquanto que as demais linhas representam o balanço por componente no nó de mistura.

$$\underbrace{\begin{pmatrix} Lout_1 & 0 & 0 & 0 & -Lin_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & Lout_2 & 0 & 0 & 0 & -Lin_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & Lout_3 & 0 & 0 & 0 & -Lin_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & Lout_4 & 0 & 0 & 0 & -Lin_4 \\ 0 & L_{1,2} & L_{1,3} & L_{1,4} & -Lin_1 & 0 & 0 & 0 \\ L_{2,1} & 0 & L_{2,3} & L_{2,4} & 0 & -Lin_2 & 0 & 0 \\ L_{3,1} & L_{3,2} & 0 & L_{3,4} & 0 & 0 & -Lin_3 & 0 \\ L_{4,1} & L_{4,2} & L_{4,3} & 0 & 0 & 0 & 0 & -Lin_4 \end{pmatrix}}_{\tilde{L}} \times \underbrace{\begin{pmatrix} Xout_{1,2} \\ Xout_{2,2} \\ Xout_{3,2} \\ Xout_{4,2} \\ Xin_{1,2} \\ Xin_{2,2} \\ Xin_{3,2} \\ Xin_{4,2} \end{pmatrix}}_{\tilde{X}_2} = \begin{pmatrix} M_{1,2} \\ M_{2,2} \\ M_{3,3} \\ M_{4,2} \\ -F_1 \\ -F_2 \\ -F_3 \\ -F_4 \end{pmatrix} \otimes \underbrace{\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ XF_2 + \frac{\sum_{i=5}^6 L_{1,j} \cdot Xout_{i,2}}{F_1} \\ XF_2 + \frac{\sum_{i=5}^6 L_{2,j} \cdot Xout_{i,2}}{F_2} \\ XF_2 + \frac{\sum_{i=5}^6 L_{3,j} \cdot Xout_{i,2}}{F_3} \\ XF_2 + \frac{\sum_{i=5}^6 L_{4,j} \cdot Xout_{i,2}}{F_4} \end{pmatrix}}_{b_2} \quad (4.5)$$

Para encontrar os valores de $Xout_{i,j}$ e $Xin_{i,j}$ através das equações acima, é necessário resolver um sistema linear, cuja resolução é apresentada simplificada para os componentes 1 e 2 através das Equações 4.6 e 4.7, respectivamente.

$$\bar{X}_1 = \tilde{L}^{-1} \times b_1 \quad (4.6)$$

$$\bar{X}_2 = \tilde{L}^{-1} \times b_2 \quad (4.7)$$

A partir da equação de balanço de componente nos misturadores (Equação 3.20), foi possível obter as expressões para calcular a composição de entrada dos regeneradores para ambos os componentes, conforme Equações 4.8, 4.9, 4.10 e 4.11.

$$(Xin_{5,1}) = (L_{5,1} \quad L_{5,2} \quad L_{5,3} \quad L_{5,4} \quad L_{5,6}) \times \begin{pmatrix} Xout_{1,1} \\ Xout_{2,1} \\ Xout_{3,1} \\ Xout_{4,1} \\ Xout_{6,1} \end{pmatrix} \cdot \left(\frac{1}{Lin_5} \right) \quad (4.8)$$

$$(Xin_{6,1}) = (L_{6,1} \quad L_{6,2} \quad L_{6,3} \quad L_{6,4} \quad L_{6,5}) \times \begin{pmatrix} Xout_{1,1} \\ Xout_{2,1} \\ Xout_{3,1} \\ Xout_{4,1} \\ Xout_{5,1} \end{pmatrix} \cdot \left(\frac{1}{Lin_6} \right) \quad (4.9)$$

$$(Xin_{5,2}) = (L_{5,1} \quad L_{5,2} \quad L_{5,3} \quad L_{5,4} \quad L_{5,6}) \times \begin{pmatrix} Xout_{1,2} \\ Xout_{2,2} \\ Xout_{3,2} \\ Xout_{4,2} \\ Xout_{6,2} \end{pmatrix} \cdot \left(\frac{1}{Lin_5} \right) \quad (4.10)$$

$$(Xin_{6,2}) = (L_{6,1} \quad L_{6,2} \quad L_{6,3} \quad L_{6,4} \quad L_{6,5}) \times \begin{pmatrix} Xout_{1,2} \\ Xout_{2,2} \\ Xout_{3,2} \\ Xout_{4,2} \\ Xout_{5,2} \end{pmatrix} \cdot \left(\frac{1}{Lin_6} \right) \quad (4.11)$$

A partir da equação de balanço por componente dos regeneradores (Equação 3.25), e conhecendo a condição de seletividade dos mesmos ($SM_{5,2}=SM_{6,1}=0$), foi possível obter a expressão para o cálculo da vazão de saída, $Lout_i$, para estas unidades, apresentada na Equação 4.12.

$$\begin{pmatrix} Lout_5 \\ Lout_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Lin_5 \\ Lin_6 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} Xin_{5,2} \\ Xin_{6,1} \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1/Xout_{5,2} \\ 1/Xout_{6,1} \end{pmatrix} \quad (4.12)$$

Utilizando as 2 equações restantes dos balanços por componentes nos regeneradores (Equação 3.25), foi possível calcular as cargas de poluentes removidas nos regeneradores, $SM_{i,j}$ conforme Equação 4.13.

$$\begin{pmatrix} SM_{5,1} \\ SM_{6,2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Lin_5 \\ Lin_6 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} Xin_{5,1} \\ Xin_{6,2} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} Lout_5 \\ Lout_6 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} Xout_{5,1} \\ Xout_{6,2} \end{pmatrix} \quad (4.13)$$

A partir das equações de balanço de massa nos divisores de correntes (Equação 3.17), foi possível obter uma expressão para o cálculo da vazão de água para o despejo, esta é apresentada na Equação 4.14.

$$\begin{pmatrix} W_1 \\ W_2 \\ W_3 \\ W_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Lout_1 \\ Lout_2 \\ Lout_3 \\ Lout_4 \end{pmatrix} - \left((1 \ 1 \ 1 \ 1 \ 1 \ 1) \times \begin{pmatrix} 0 & L_{1,2} & L_{1,3} & L_{1,4} \\ L_{2,1} & 0 & L_{2,3} & L_{2,4} \\ L_{3,1} & L_{3,2} & 0 & L_{3,4} \\ L_{4,1} & L_{4,2} & L_{4,3} & 0 \\ L_{5,1} & L_{5,2} & L_{5,3} & L_{5,4} \\ L_{6,1} & L_{6,2} & L_{6,3} & L_{6,4} \end{pmatrix} \right)^T \quad (4.14)$$

4.1.1. Função Objetivo

Como a função objetivo depende somente das variáveis $L_{i,j}$ e $y_{i,j}$, esta não sofreu modificações, sendo assim representada pela Equação 3.8, a qual é repetida por motivos de complementaridade. Os pesos w_i para todas as formulações descritas são apresentados na Tabela D.14 do Apêndice D.

$$S = w_1 \cdot (f_1 + f_2) + w_2 \cdot f_3$$

onde:

$$f_1 = \sum_{i=1}^6 \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^6 D_{i,k} \cdot y_{i,k} \quad (3.8)$$

$$f_2 = \frac{1}{2} \cdot \sum_{i=1}^6 \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^6 D_{i,k} \cdot L_{i,k}$$

$$f_3 = \sum_{i=1}^4 \sum_{j=1}^1 \Phi_{i,j}$$

4.1.2. Restrições de Igualdade

Para o cálculo das variáveis contínuas em função das variáveis de decisão, não foram utilizadas as equações de balanço de massa nos divisores dos regeneradores e duas das quatro equações de balanço de massa para os regeneradores. Por isso, para o balanço de massa do sistema ficar completo, é necessário a inclusão destas como restrições de igualdade, apresentadas na Equação 4.15 e Equação 4.16, respectivamente.

$$\begin{pmatrix} Lout_5 \\ Lout_6 \end{pmatrix} = \left((1 \ 1 \ 1 \ 1 \ 1 \ 1) \times \begin{pmatrix} L_{1,5} & L_{1,6} \\ L_{2,5} & L_{2,6} \\ L_{3,5} & L_{3,6} \\ L_{4,5} & L_{4,6} \\ 0 & L_{5,6} \\ L_{6,5} & 0 \end{pmatrix} \right)^T \quad (4.15)$$

$$\begin{pmatrix} Lin_5 \\ Lin_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Lout_5 \\ Lout_6 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \dot{SM}_{5,1} \\ \dot{SM}_{6,2} \end{pmatrix} \cdot 10^{-6} \quad (4.16)$$

4.1.3. Restrições de Desigualdade

As restrições de desigualdade do problema são a composição máxima permitida da corrente de alimentação nos processos e vazão máxima de água fresca utilizada pelo sistema, representadas pelas Equações 3.30 e 3.31, respectivamente. A Equação 3.32 não foi utilizada, pois foi verificado que as vazões entre as correntes que conectam as unidades eram muito menores que as impostas por esta restrição.

4.1.4. Análise de Graus de Liberdade do Sistema

No caso do problema MINLP reduzido, também foi avaliada a consistência da modelagem proposta, através da análise de graus de liberdade do sistema. Nesta análise foram contabilizadas as variáveis envolvidas, as equações e especificações do sistema. A descrição detalhada dos graus de liberdade do sistema é apresentada no Apêndice A. O cálculo dos graus de liberdade do sistema foi realizado aplicando-se a Equação 3.33, onde $nvar$, ns e neq são apresentados na Tabela A.4. Substituindo na equação acima os respectivos valores, tem-se:

$$GL = 64 - 0 - 4 = 60$$

Logo, o problema de otimização possui 60 graus de liberdade, estes são referentes às variáveis de decisão y_{ik} (totalizando 30 variáveis livres) e L_{ik} (totalizando 30 variáveis livres), que estão presentes na função objetivo. A principal diferença entre o problema MINLP completo e reduzido é a formulação. No caso MINLP completo, existem 132 variáveis no problema de otimização, destas, somente 60 são livres, sendo que as demais são determinadas pelas equações de balanço de massa e componentes, que são usadas diretamente como restrições no problema de otimização, tornando-o mais complexo, pois das 42 restrições de igualdade, 24 são não-lineares (relativo ao balanço por componente nos misturadores e unidades, conforme a Tabela A.3 do Apêndice A). Já na formulação MINLP reduzida, existem somente 60 variáveis no problema de otimização, as demais são calculadas através de rotinas internas (a partir das restrições de igualdade) para a avaliação de algumas restrições, reduzindo o número de restrições de igualdade não-lineares para 4. Com este procedimento foi possível diminuir o número de variáveis e restrições de igualdade lineares e não-lineares, reduzindo o tempo de otimização.

4.2. Problema NLP completo

Na resolução da maioria dos problemas de programação não-linear inteira-mista, são utilizados algoritmos de busca em árvore que geralmente são onerosos computacionalmente, pois resolvem uma série de problemas internos de programação não-linear. Para evitar esta dificuldade, foi implementada uma versão onde as variáveis binárias (conexões entre equipamentos) foram eliminadas, permanecendo como variáveis de decisão somente as vazões entre os equipamentos, sendo possível representar o problema MINLP como NLP. As equações de balanço de massa e componentes, utilizadas nesta formulação, são as mesmas do problema MINLP original, com exceção da função objetivo e algumas restrições de desigualdade que contém variáveis binárias.

4.2.1. Função Objetivo

A função objetivo do problema MINLP é representada pela Equação 3.8 e possui 3 termos: um relativo ao custo fixo de projeto (onde se encontram as variáveis binárias y_{ik}), outro relativo ao custo de operação, onde foram incluídas as variáveis contínuas L_{ik} e um terceiro termo relativo à folga na composição de entrada dos processos. Após a eliminação das variáveis binárias do problema, o termo referente ao custo fixo foi reescrito de forma que as vazões (variáveis contínuas) entre os equipamentos tivessem um comportamento semelhante às variáveis inteiras. A função escolhida para tornar as variáveis contínuas com comportamento semelhante às discretas é apresentada na Equação 4.17 e seu comportamento é representado na Figura 4.1.

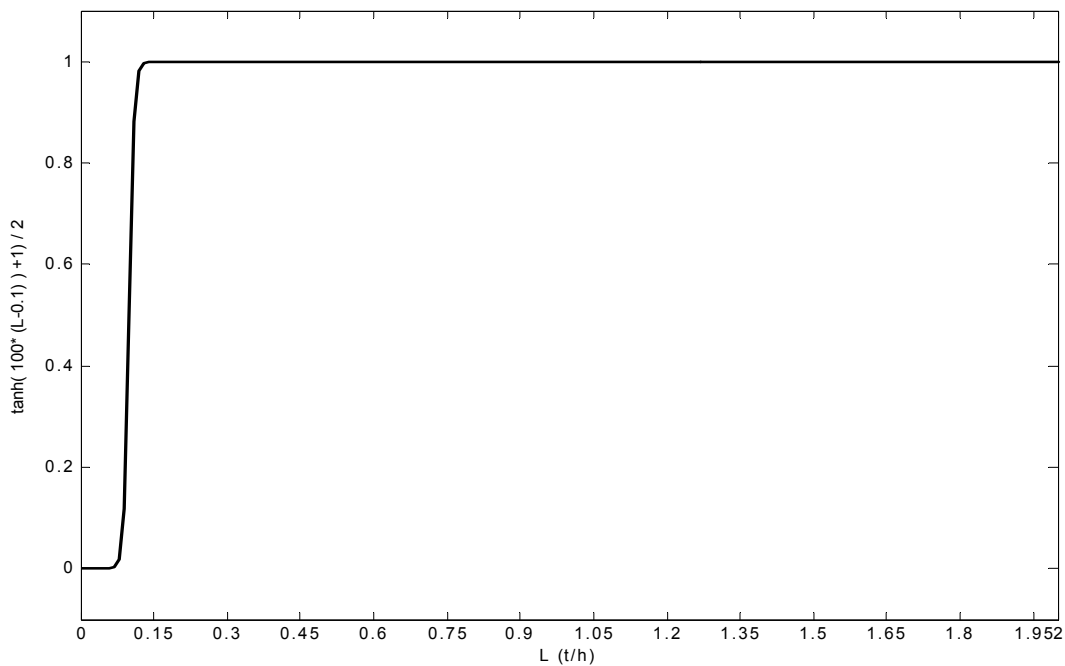


Figura 4.1: Função aplicada às variáveis contínuas para tornar seu comportamento semelhante ao das discretas

$$\frac{\tanh(100.(L_{i,k} - 0.1)) + 1}{2} \quad (4.17)$$

É possível observar através da

Figura 4.1, que a função acima apresenta um comportamento semelhante ao das variáveis binárias, pois para vazões pequenas esta apresenta valor 0 e para vazões maiores que 0,15 (valor considerado pequeno para o exemplo) esta apresenta valor unitário.

A função objetivo do problema NLP completo é apresentada na Equação 4.18.

$$\begin{aligned} S &= w_1.(f_1 + f_2) + w_2.f_3 \\ f_1 &= \sum_{i=1}^6 \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^6 D_{i,k} . (\tanh(100.(L_{i,k} - 0.1)) + 1) \\ f_2 &= \frac{1}{2} . \sum_{i=1}^6 \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^6 D_{i,k} . L_{i,k} \\ f_3 &= \sum_{i=1}^4 \sum_{j=1}^2 \Phi_{i,j} \end{aligned} \quad (4.18)$$

4.2.2. Restrições de Igualdade

As restrições de igualdade são apresentadas na Tabela 4.1. Como nestas restrições não estão envolvidas variáveis inteiras, estas não sofreram modificações ao eliminar tais variáveis.

Tabela 4.1: Restrições de igualdade apresentas no problema NLP.

Descrição da Restrição	Equação sob a forma de somatório	Equação sob a forma matricial
Balanço de massa no misturador	3.10 e 3.11	3.12
Balanço de massa para as unidades	3.13 e 3.14	3.15 e 3.16
Balanço de massa nos divisores	3.17 e 3.18	3.19
Balanço por componentes nos misturadores	3.20 e 3.21	3.22 e 3.23
Balanço por componentes nas unidades	3.24 e 3.25	3.26 e 3.27
Concentração dos poluentes na saída dos regeneradores	3.28	-
Vazão operacional dos processos	3.29	-

4.2.3. Restrições de Desigualdade

Das três restrições de desigualdade do problema original, somente duas delas foram utilizadas: composição máxima permitida na alimentação dos processos e vazão máxima de água fresca utilizada pelo sistema, representadas pelas equações 3.30 e 3.31, respectivamente. A Equação 3.32 não foi utilizada, pois foi verificado que as vazões entre as correntes que conectam os processos eram muito menores que as impostas por esta restrição. Como somente estas restrições envolviam correntes inteiras não foi necessário aplicar a Equação 4.17 para as restrições.

4.2.4. Análise de Graus de Liberdade do Sistema

No caso do problema NLP completo, também foi avaliada a consistência da modelagem proposta através da análise de graus de liberdade do sistema. Nesta análise foram contabilizadas as variáveis envolvidas, as equações e as especificações do sistema. A descrição detalhada dos graus de liberdade do sistema é apresentada no Apêndice A. O cálculo dos graus de liberdade do sistema foi realizado aplicando-se a Equação 3.33, com $nvar$ obtido da Tabela A.5 do Apêndice A, ns da Tabela A.6 e neq da Tabela A.7 do Apêndice A. Substituindo na equação acima os respectivos valores, tem-se:

$$GL = 96 - 24 - 42 = 30$$

Logo, o problema de otimização possui 30 graus de liberdade, estes são referentes às variáveis de decisão L_{ik} (totalizando 30 variáveis livres), que estão presentes na função objetivo.

4.3. Problema NLP reduzido

Nesta implementação, semelhantemente ao problema MINLP reduzido, algumas variáveis contínuas foram expressas em função das variáveis de decisão ($L_{i,k}$) utilizando as restrições de igualdade. Este artifício é possível pois as variáveis discretas, eliminadas no problema NLP, não fazem parte de nenhuma das restrições de igualdade usadas no cálculo das demais variáveis contínuas. Este procedimento reduz consideravelmente a dimensionalidade do problema comparado com o NLP completo, sendo que o problema NLP reduzido permanece idêntico ao NLP completo no que diz respeito às variáveis e equações utilizadas.

4.3.1. Função Objetivo

A função objetivo desta implementação não possui modificações em relação ao caso anterior, sendo representada pela Equação 4.18.

4.3.2. Restrições de Igualdade

As restrições de igualdade foram utilizadas para, a partir das vazões entre processos ($L_{i,k}$), calcular as demais variáveis, ficando como restrições somente as equações não utilizadas nestes cálculos, apresentadas nas Equações 4.15 e 4.16.

4.3.3. Restrições de Desigualdade

As restrições de desigualdade do problema seguem as mesmas equações do problema NLP completo (composição máxima permitida na corrente de alimentação dos processos e vazão máxima de água fresca utilizada pelo sistema), representadas pelas equações 3.30 e 3.31, respectivamente. Como no problema NLP completo, as equações de vazão máxima de reciclo ou reuso de 9 t/h foram removidas, pois foi observado que nos problemas MINLP completo, tais restrições não foram atingidas.

4.3.4. Análise de Graus de Liberdade do Sistema

No caso do problema NLP reduzido, também foi avaliada a consistência da modelagem proposta, através da análise de graus de liberdade do sistema. Nesta análise, foram contabilizadas as variáveis envolvidas, as equações e especificações do sistema. A descrição detalhada dos graus de liberdade do sistema é apresentada no Apêndice A. O cálculo dos graus de liberdade do sistema foi realizado aplicando-se a Equação 3.33, com $nvar$, ns e neq obtidos a partir da Tabela A.8 do Apêndice A. Substituindo na equação acima os respectivos valores, tem-se:

$$GL = 34 - 0 - 4 = 30$$

Logo, o problema de otimização possui 30 graus de liberdade, estes são referentes às variáveis de decisão L_{ik} (totalizando 30 variáveis livres), que estão presentes na função objetivo.

Comparando os graus de liberdade das formulações previamente descritas, conforme apresentado na Tabela 4.2, é possível observar que problema NLP reduzido possui o menor número de equações e variáveis envolvidas. Este fato acaba reduzindo a dimensão do problema de otimização resultando em menor tempo computacional e maior robustez para a resolução do mesmo.

Tabela 4.2: Comparação entre os graus de liberdade dos problemas apresentados.

Problema	Número de Variáveis ($nvar$)	Número de Equações (neq)	Número de Especificações (ns)	Graus de Liberdade (GL)
MINLP Completo	132	42	30	60
MINLP Reduzido	64	4	0	60
NLP Completo	96	42	24	30
NLP Reduzido	34	4	0	30

4.4. Gerando estimativas iniciais

Todos os problemas de otimização onde estão presentes termos não-lineares, tanto na função objetivo quanto nas restrições, podem levar os algoritmos de otimização a encontrar soluções sub-ótimas (mínimos locais) como resultados. Nos problemas de otimização descritos nos itens anteriores, a presença de não linearidades do tipo bilinear nas restrições de igualdade pode levar os algoritmos de otimização a mínimos locais ao invés de mínimos globais. Para contornar esta dificuldade, foi realizada uma implementação que, a partir de vazões $L_{i,k}$ iniciais aleatórias, gera estimativas iniciais viáveis (que satisfazem os balanços e as restrições de desigualdade) para os demais problemas de otimização. Com diversas estimativas, é possível encontrar um número maior de mínimos da otimização e com isso aumentar a chance de encontrar o ótimo global.

Inicialmente são geradas estimativas aleatórias para vazões entre processos utilizando uma semente aleatória. Como esta estimativa é não viável, ou seja, não satisfaz as equações de balanço, é necessário realizar uma otimização para que estas respeitem as restrições de igualdade e desigualdade. Esta implementação é baseada no problema NLP reduzido, pois este realiza a otimização em menor tempo comparado às outras implementações. Nesta metodologia, todas as equações de igualdade e desigualdade são incluídas no problema para garantir que os balanços e demais restrições do processo sejam obedecidas.

4.4.1. Função objetivo

A função objetivo do problema de otimização é simplesmente a minimização do resíduo entre a composição de alimentação nos processos e a composição máxima permitida nos mesmos, expressa pela Equação 4.19.

$$S = w_1 \cdot \sum_{i=1}^4 \sum_{j=1}^2 \Phi_{i,j} \quad (4.19)$$

4.4.2. Restrições de Igualdade

As restrições de igualdade foram utilizadas para, a partir das vazões entre processos ($L_{i,k}$), calcular as demais variáveis, ficando como restrições restantes, somente as equações não utilizadas nestes cálculos, apresentadas nas Equações 4.15 e 4.16.

4.4.3. Restrições de Desigualdade

Assim como no problema NLP reduzido, o resultado desta implementação deve ser viável, desta maneira, as restrições de desigualdade do problema seguem as mesmas equações do problema anterior, representadas pelas equações 3.30 e 3.31. A restrição de desigualdade

de vazão máxima de reciclo ou reuso do problema original foi novamente desconsiderada pelo mesmo motivo descrito anteriormente.

4.4.4. Análise de Graus de Liberdade do Sistema

Neste problema, semelhantemente ao caso NLP reduzido, também foi avaliada a consistência da modelagem proposta, através da análise de graus de liberdade do sistema. Nesta análise, foram contabilizadas as variáveis envolvidas, as equações e especificações do sistema. A descrição detalhada dos graus de liberdade do sistema é apresentada no Apêndice A. O cálculo dos graus de liberdade do sistema foi realizado aplicando-se a Equação 3.33, com $nvar$, ns e neq obtidos a partir da Tabela A.8 do Apêndice A. Substituindo na equação acima os respectivos valores, tem-se:

$$GL = 34 - 0 - 4 = 30$$

Logo, o problema de otimização possui 30 graus de liberdade, estes são referentes às 30 variáveis $L_{i,k}$ livres, que, neste caso, não estão presentes na função objetivo.

4.5. Equacionamento do Problema com Considerações Operacionais

Em problemas de projetos de redes de integração mássica, o principal objetivo é a redução do consumo de insumos (principalmente a água) e/ou a minimização da vazão de poluentes enviada para despejo ou para a unidade de tratamento de efluentes. Para cumprir tal meta, muitas vezes é necessário reciclar, reusar ou regenerar correntes entre as unidades que compõem o sistema. Este procedimento aumenta as interações entre os processos, visto que uma determinada unidade pode receber correntes de vários equipamentos. Este fenômeno pode ser melhor exemplificado pelo sistema apresentado na Figura 4.2, onde pode-se observar que existem muitas correntes interligadas. Logo, se o processo 1 receber uma perturbação de qualquer natureza (em termos de vazão ou composição), as unidades subsequentes (processos 4, 2, 3 e 1) também sofrerão estas perturbações em menor ou maior grau, caracterizando um problema de operabilidade da rede. Desta forma, embora possa trazer vantagens econômicas para os processos, a integração mássica pode ocasionar problemas na controlabilidade de sistemas, resultando, por exemplo, em perda na qualidade dos produtos, danos a equipamentos ou insegurança no processo. Para resolver este problema, buscou-se neste trabalho desenvolver uma metodologia para sintetizar redes com resultados econômicos e operacionais satisfatórios, através da incorporação de índices de operabilidade diretamente na função objetivo, para garantir que as redes finais sintetizadas apresentem um ótimo econômico e operacional. Neste trabalho foram propostas três formulações, sendo estas descritas nos tópicos seguintes. Tais formulações são baseadas no problema NLP reduzido, pois este apresenta um bom custo-benefício em relação ao tempo computacional além de ser equivalente (em relação aos balanços de massa e componente) ao problema MINLP original.

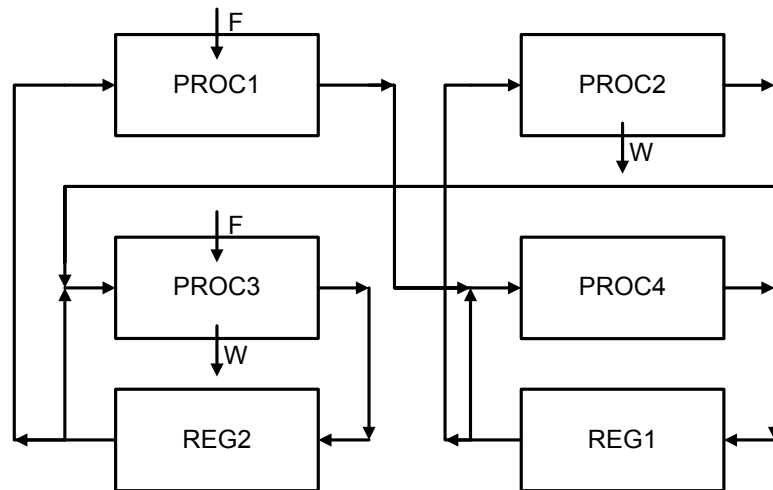


Figura 4.2: Representação esquemática de um sistema integrado

4.5.1. *Formulação Operacional 1*

Nesta formulação, foram utilizados os multiplicadores de Lagrange para obtenção do índice operacional da função objetivo, obtidos a partir de métodos de otimização com restrição, que resolvem a Função de Lagrange (ou Lagrangeano) para a obtenção de extremos de funções.

Em problemas de otimização onde restrições de igualdade ou desigualdade estão presentes, o ótimo deve necessariamente respeitá-las. Para resolver estes casos existem alguns métodos disponíveis, entre eles o Método dos multiplicadores de Lagrange descrito a seguir.

Seja um problema de otimização descrito pelas equações abaixo:

$$\begin{aligned} \min f(x_1, x_2) \\ x_1, x_2 \end{aligned} \quad (4.20)$$

sujeito à seguinte restrição de igualdade:

$$h(x_1, x_2) = e \quad (4.21)$$

onde "e" é uma constante qualquer. A Equação 4.22 pode ser reescrita como:

$$h(x_1, x_2) - e = 0 \quad (4.22)$$

Uma maneira de resolver o problema definido pelas Equações 4.20 e 4.21 é reescrever a função objetivo e as restrições como uma única equação da seguinte forma:

$$L(x, \lambda) = f(x) + \lambda \cdot (h(x) - e) \quad (4.23)$$

onde λ é o multiplicador de Lagrange associado à equação anterior.

Para que um ponto seja ótimo para o problema com restrição, é necessário que as Equações 4.24, 4.25 e 4.26 sejam satisfeitas.

$$\frac{\partial L}{\partial x_1} = \frac{\partial f}{\partial x_1} + \lambda \frac{\partial h}{\partial x_1} = 0 \quad (4.24)$$

$$\frac{\partial L}{\partial x_2} = \frac{\partial f}{\partial x_2} + \lambda \frac{\partial h}{\partial x_2} = 0 \quad (4.25)$$

$$\frac{\partial L}{\partial \lambda} = h - e = 0 \quad (4.26)$$

Também, é possível provar que:

$$\left. \frac{\partial f}{\partial e} \right|_{x=x^*} = \left. \frac{\partial L}{\partial e} \right|_{x=x^*} = -\lambda \quad (4.27)$$

onde x^* representa o ponto ótimo do problema.

A partir da Equação 4.27 pode-se concluir que o parâmetro λ tem uma interpretação importante em problemas de otimização; este indica o quanto a função objetivo é sensível a uma determinada mudança na restrição quando se está no ponto ótimo do problema. Logo, é possível conhecer a sensibilidade de uma função objetivo em relação a suas restrições a partir dos multiplicadores de Lagrange. Nos métodos propostos para resolver o problema de síntese de redes com considerações operacionais, os multiplicadores de Lagrange são utilizados para fornecer a sensibilidade de determinadas variáveis em relação à função objetivo, e a partir desta, escolher a melhor configuração operacional.

Para a incorporação de índices operacionais no problema de síntese, foi utilizada a modelagem matemática do problema NLP reduzido, pois esta apresentou menor tempo de execução do algoritmo, visto que a incorporação de índices operacionais gera um problema que exige maior carga computacional.

Como na maioria de sistemas onde se aplica controle, as variáveis manipuladas para tentar especificar as variáveis controladas são as vazões, buscou-se formular um índice operacional que penalize estruturas que necessitem tomar ações muito bruscas nas vazões

para diluir distúrbios. Para isso, foram utilizados os multiplicadores de Lagrange para obter a sensibilidade das vazões frente a distúrbios. No caso em estudo, a otimização foi realizada em dois níveis: um nível externo, onde são avaliados os termos econômicos e operacionais, e um nível interno que retorna para a rotina externa o índice operacional. Para a realização da otimização interna, as vazões que ligam os processos são mantidas fixas através de restrições de desigualdade. Em seguida as cargas de poluentes nos processos e água de reposição são perturbadas positivamente, e uma otimização interna é executada. Como resultado do problema, o otimizador retorna o valor dos multiplicadores de Lagrange do ponto ótimo encontrado, sendo estes utilizados para calcular o índice de operabilidade utilizados na função objetivo externa. O algoritmo para realização da síntese da rede com índices operacionais é representado pela Figura 4.3.

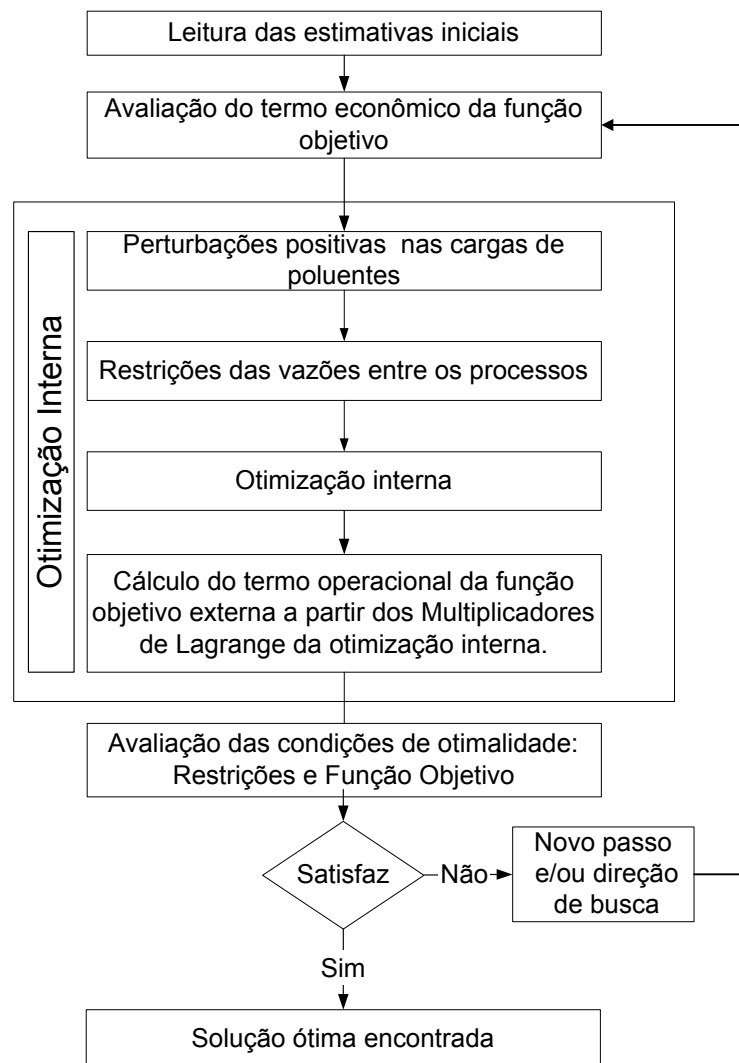


Figura 4.3: Representação esquemática do algoritmo para cálculo do ótimo econômico e operacional

Função Objetivo da Otimização Externa

A função objetivo externa desta formulação é composta pelos termos econômicos e de folga da Equação 4.18 (f_1 , f_2 e f_3), adicionada do termo operacional, calculado a partir dos multiplicadores de Lagrange da otimização interna, ponderado pelo seu respectivo peso, Equação 4.28.

$$\begin{aligned}
 S &= w_1(f_1 + f_2) + w_2 \cdot f_3 + w_3 \cdot f_4 \\
 f_1 &= \sum_{i=1}^6 \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^6 D_{i,k} \cdot (\tanh(100 \cdot (L_{i,k} - 0.1) + 1)) \\
 f_2 &= \frac{1}{2} \cdot \sum_{i=1}^6 \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^6 L_{i,k} \\
 f_3 &= \sum_{i=1}^4 \sum_{j=1}^2 \Phi_{i,j} \\
 f_4 &= \sum_{i=1}^6 \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^6 (|\lambda L_{i,k}^{\ell}| \cdot L_{i,k} + |\lambda L_{i,k}^u| \cdot L_{i,k}) + \sum_{i=1}^4 (|\lambda F_i^{\ell}| \cdot F_i + |\lambda F_i^u| \cdot F_i)
 \end{aligned} \tag{4.28}$$

onde $L_{i,k}$ são as vazões das correntes que ligam a saída da unidade k à unidade i , F_i são as vazões de água de reposição que alimentam os processos i , $\lambda L_{i,k}^{\ell}$ representa os multiplicadores de Lagrange da restrição de desigualdade que fixam $L_{i,k}$ no seu limite inferior, $\lambda L_{i,k}^u$ os multiplicadores de Lagrange da restrição de desigualdade que fixam $L_{i,k}$ no seu limite superior, λF_i^{ℓ} são os multiplicadores de Lagrange da restrição de desigualdade que fixam F_i no seu limite inferior e λF_i^u são os multiplicadores de Lagrange da restrição de desigualdade que fixam F_i no seu limite superior. O termo f_4 da Equação 4.28 representa o termo operacional da função objetivo, para o cálculo desta parcela, é necessário obter os multiplicadores de Lagrange da otimização interna. Na otimização interna, as vazões entre os processos e água de reposição são mantidas fixas através da adição de restrições e, após encontrado o ponto ótimo, os multiplicadores de Lagrange relativos a cada uma destas restrições são ponderados pela vazão correspondente, formando o termo f_4 da Equação 4.28. O objetivo desta ponderação é evitar que multiplicadores de Lagrange com valor elevado relativo a correntes com vazões pequenas tenham grande impacto na função objetivo, pois vazões pequenas não conseguirão diluir suficientemente os poluentes na entrada dos processos. Cabe ressaltar que na otimização interna, para cada vazão ($L_{i,k}$ e F_i) existem dois conjuntos de restrições: o primeiro fixa as vazões em seus limites inferiores, enquanto que os outros em seus limites superiores, sendo que cada um possui seu respectivo multiplicador de Lagrange, por este motivo cada somatório é composto por dois termos.

Função Objetivo da Otimização Interna

O problema interno de otimização tem como objetivo retornar para o problema externo de otimização os multiplicadores de Lagrange para o cálculo dos índices operacionais. Nesta etapa, são recebidas as vazões do problema externo de otimização, que serão fixas

através de restrições de desigualdade e o parâmetro δ , que representa a maior violação possível desta restrição.

Os termos presentes na função objetivo da otimização interna contemplam a minimização da água de reposição, das vazões de poluentes destinadas à unidade de tratamento, a minimização da violação da restrição de alimentação nos processos e a minimização das restrições das vazões. Desta maneira, o ótimo do problema interno de otimização contempla aspectos ambientais, representado pelos termos f_1 e f_2 , assim como restrições dos processos, representado por f_3 e f_4 . A função objetivo interna é representada pela Equação 4.29.

$$\begin{aligned}
 S &= w_1 \cdot (f_1 + f_2) + w_2 \cdot f_3 + w_3 \cdot f_4 \\
 f_1 &= \sum_{i=1}^4 F_i \\
 f_2 &= \sum_{i=1}^4 \sum_{\substack{j=1 \\ k \neq i}}^2 W_i \cdot X_{out_{i,j}} \\
 f_3 &= \sum_{i=1}^4 \sum_{j=1}^2 \Phi_{i,j} \\
 f_4 &= \delta
 \end{aligned} \tag{4.29}$$

Restrições da Otimização Externa

As restrições de igualdade e desigualdade da otimização externa seguem a implementação NLP reduzido, e são apresentadas nas Equações 4.15, 4.16, 3.30 e 3.31.

Restrições da Otimização Interna

As restrições de igualdade e desigualdade da otimização interna seguem a implementação NLP reduzido, e são apresentadas nas Equações 4.15, 4.16, 3.30 e 3.31. Porém, foram adicionadas equações correspondentes aos limites das vazões entre os processos, ou seja:

$$L_{i,k}^{\ell} - \delta \leq L_{i,k} \leq L_{i,k}^u + \delta \tag{4.30}$$

onde $L_{i,k}^{\ell}$ e $L_{i,k}^u$ correspondem às vazões mínimas e máximas que $L_{i,k}$ pode assumir. Esses limites são fixados para que a otimização interna retorne à função objetivo externa a sensibilidade (os multiplicadores de Lagrange) em relação a estas restrições. Para facilitar a implementação, a Equação 4.30 foi dividida em duas, uma relativa ao limite inferior (lado esquerdo) e outra relativa ao limite superior (lado direito), apresentadas nas Equações 4.31 e 4.32, respectivamente.

$$L_{i,k}^{\ell} - L_{i,k} - \delta \leq 0 \quad (4.31)$$

$$L_{i,k} - L_{i,k}^u - \delta \leq 0 \quad (4.32)$$

Semelhantemente, foram adicionadas equações de desigualdade relativas à vazão de água de reposição permitida no sistema, conforme equação abaixo :

$$F_i^{\ell} - \delta \leq F_i \leq F_i^u + \delta \quad (4.33)$$

onde F_i^{ℓ} e F_i^u representam o limite inferior e superior de vazão de água fresca que alimenta o processo i , respectivamente. Para facilitar a implementação, a Equação 4.33 foi dividida em duas, uma relativa ao limite inferior (lado esquerdo) e outra relativa ao limite superior (lado direito), apresentadas nas Equações 4.34 e 4.35, respectivamente.

$$F_i^{\ell} - F_i - \delta \leq 0 \quad (4.34)$$

$$F_i - F_i^u - \delta \leq 0 \quad (4.35)$$

Ao encontrar o ponto ótimo, obtém-se também os multiplicadores de Lagrange $\lambda L_{i,k}^{\ell}$, $\lambda L_{i,k}^u$, λF_i^{ℓ} e λF_i^u associados respectivamente às Equações 4.31, 4.32, 4.34 e 4.35, para calcular os índices operacionais. A partir da Equação 4.27, é possível deduzir a expressão para os multiplicadores encontrados, por exemplo, para a restrição dada pela Equação 4.31 tem-se:

$$\left. \frac{\partial S}{\partial L_{i,k}^{\ell}} \right|_{x=x^*} = -\lambda L_{i,k}^{\ell} \quad (4.36)$$

como

$$S = w_1 \cdot \sum_{i=1}^4 F_i + w_2 \cdot \sum_{i=1}^4 \sum_{j=1}^2 W_i \cdot Xout_{i,j} + w_3 \cdot \sum_{i=1}^4 \sum_{j=1}^2 \Phi_{i,j} + w_4 \cdot \delta \quad (4.29)$$

logo,

$$\left. \frac{\partial S}{\partial L_{i,k}^{\ell}} \right|_{x=x^*} = -\lambda L_{i,k}^{\ell} = \frac{\partial (w_1 \cdot \sum_{i=1}^4 F_i + w_2 \cdot \sum_{i=1}^4 \sum_{j=1}^2 W_i \cdot Xout_{i,j} + w_3 \cdot \sum_{i=1}^4 \sum_{j=1}^2 \Phi_{i,j} + w_4 \cdot \delta)}{\partial L_{i,k}^{\ell}} \quad (4.37)$$

rearranjando a Equação 4.37 e aproximando o operador ∂ por Δ , temos que:

$$-\lambda L_{i,k}^{\ell} \cdot \Delta L_{i,k}^{\ell} = \Delta (w_1 \cdot \sum_{i=1}^4 F_i + w_2 \sum_{i=1}^4 \sum_{j=1}^2 W_i \cdot X_{out_{i,j}} + w_3 \sum_{i=1}^4 \sum_{j=1}^2 \Phi_{i,j} + w_4 \cdot \delta) \quad (4.38)$$

ou seja, a partir da Equação 4.38 observa-se que, quando se realiza um distúrbio na vazão $L_{i,k}$, a corrente que tiver o maior multiplicador de Lagrange, será mais sensível em relação à vazão de água de reposição, à carga de poluentes gerados ou a composição de entrada nos processos. Logo, a configuração que propagará menor distúrbio (positivos ou negativos) será a que apresentar o menor módulo dos multiplicadores de Lagrange, sendo esta, a estrutura mais robusta operacionalmente. Esta interpretação pode ser estendida aos demais multiplicadores de Lagrange $\lambda L_{i,k}^u$, λF_i^{ℓ} e λF_i^u .

4.5.2. *Formulação Operacional 2*

Neste problema, pelo mesmo motivo descrito no problema anterior, foi utilizada a implementação NLP reduzida, sendo realizada uma otimização em dois níveis para a obtenção da rede: uma externa e outra interna. Porém, na otimização interna foi utilizada uma função objetivo diferente da formulação anterior.

Para a realização da otimização interna, as vazões que ligam os processos são mantidas fixas através de restrições de desigualdade, e em seguida, a otimização interna é executada. A diferença é que neste caso, ao invés de perturbar as cargas de poluentes, procurou-se maximizar as cargas de poluentes nos processos e na água de reposição. Como no problema anterior, o otimizador retorna o valor dos multiplicadores de Lagrange do ponto ótimo encontrado, sendo estes utilizados para calcular o índice de operabilidade utilizados na função objetivo externa. O algoritmo para realização da síntese da rede com índices operacionais é representado pela Figura 4.4.

Função Objetivo da Otimização Externa

Assim como na formulação anterior, a função objetivo externa é composta por termos econômicos, de folga e operacional, conforme a Equação 4.28.

Função Objetivo da Otimização Interna

Nesta segunda formulação, a função interna foi modificada para avaliar qual a carga máxima de poluentes que o processo suportaria respeitando as restrições. Para isso foram inseridas como variáveis de decisão as cargas de poluentes $M_{i,j}$ e XF_j , à função objetivo, representada pela Equação 4.39

$$\begin{aligned}
 S &= w_1 \cdot f_1 + w_2 \cdot (f_2 + f_3) + w_3 \cdot f_4 \\
 f_1 &= \sum_{i=1}^4 F_i \\
 f_2 &= -\sum_{i=1}^4 \sum_{j=1}^2 M_{i,j} \\
 f_3 &= -\sum_{j=1}^2 XF_j \\
 f_4 &= \delta
 \end{aligned}
 \tag{4.39}$$

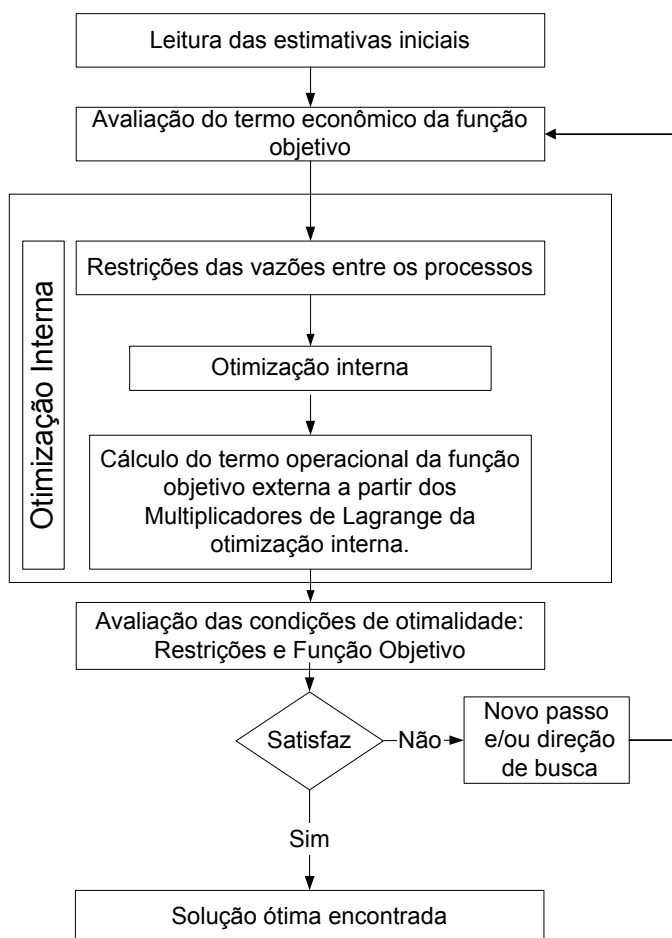


Figura 4.4: Representação esquemática do algoritmo para obtenção do ótimo econômico e operacional

Restrições da Otimização Externa

As restrições de igualdade e desigualdade da otimização externa seguem a implementação NLP reduzido, e são apresentadas nas Equações 4.15, 4.16, 3.30 e 3.31.

Restrições da Otimização Interna

As restrições de igualdade da otimização interna seguem a implementação NLP reduzido, apresentadas nas Equações 4.15 e 4.16. A restrição de desigualdade de composição máxima de entrada nos processos (Equação 3.30) foi removida, restando a restrição de vazão máxima de água fresca (Equação 3.31). As restrições de vazão mínima e máxima das correntes F_i e $L_{i,k}$ são apresentadas nas Equações 4.31, 4.32, 4.34 e 4.35.

A partir das equações de restrições (Equações 4.31, 4.32, 4.34 e 4.35) e da função objetivo (Equação 4.39) é possível escrever uma expressão para os multiplicadores de Lagrange. Assim tem-se:

$$\left. \frac{\partial S}{\partial L_{i,k}^\ell} \right|_{x=x^*} = -\lambda L_{i,k}^\ell = \frac{\partial (w_1 \sum_{i=1}^4 F_i - w_2 \sum_{i=1}^4 \sum_{j=1}^2 (M_{i,j}) - w_3 \sum_{j=1}^2 (XF_j) + w_4 \cdot f_4)}{\partial L_{i,k}^\ell} \quad (4.40)$$

Neste caso, os multiplicadores de Lagrange, diferentemente do caso anterior, fornecem a sensibilidade das correntes $L_{i,k}$ frente a variações nas cargas de poluentes e vazões na alimentação, e do mesmo modo, a configuração mais robusta é a que apresenta o menor módulo dos multiplicadores de Lagrange. Esta interpretação pode ser estendida aos demais multiplicadores de Lagrange $\lambda L_{i,k}^u$, λF_i^ℓ e λF_i^u .

4.5.3. Formulação Operacional 3

Esta última formulação segue a mesma estrutura das anteriores, diferindo apenas na otimização interna. A otimização interna é realizada para a obtenção da matriz de ganhos estacionários por perturbações. A partir desta, é calculada a matriz de ganhos relativos (ou RGA) onde são realizadas operações para se obter um índice operacional, que é retornado para a otimização externa, que avalia a função objetivo e prossegue com a otimização.

O cálculo da matriz de ganhos do sistema é realizado em um nível interno de otimização, esta é obtida perturbando uma corrente $L_{i,k}$, fixando as razões entre as correntes que deixam os divisores e avaliando o efeito destas nas variáveis controladas. O cálculo do ganho da perturbação em $L_{i,k}$ na variável controlada VC é realizado através da Equação 4.41. A descrição do algoritmo é representada pela Figura 4.5.

$$\frac{\partial VC}{\partial L_{i,k}} = \frac{VC_{\text{depois da perturbação}} - VC_{\text{antes da perturbação}}}{\varepsilon} \quad (4.41)$$

onde ε é o incremento na perturbação da corrente $L_{i,k}$.

Após perturbadas todas as correntes para uma dada configuração, é realizada a seleção do conjunto de variáveis manipuladas para cada variável controlada e montada a matriz de ganhos e com esta é calculada a matriz RGA.

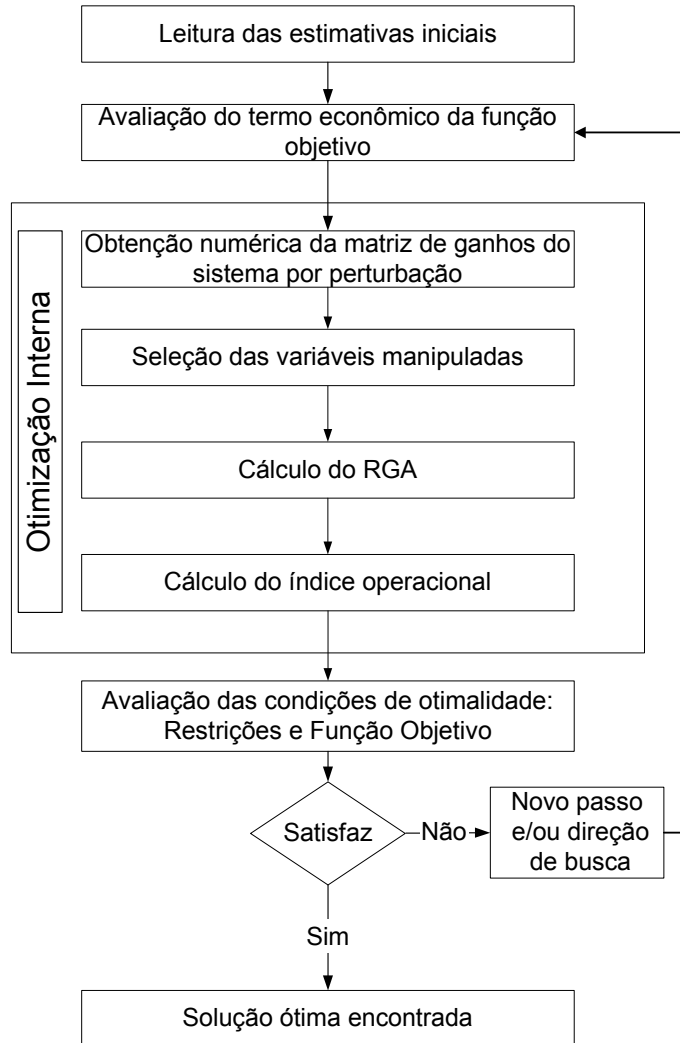


Figura 4.5: Representação esquemática do algoritmo para obtenção do ótimo econômico e operacional

O uso da matriz de ganhos relativos para caracterização operacional de sistemas foi introduzido por Bristol (1966) e é utilizada como uma medida de interação entre malhas de controle. Em um sistema de controle multivariável com mesmo número de variáveis manipuladas e controladas, a matriz RGA é definida como a relação entre o ganho em malha aberta e o ganho em malha semi-fechada. Na Figura 4.6 é apresentado um sistema multivariável em malha aberta, ou seja, sem a presença de controladores. Este é um sistema interativo, pois manipulações em m_1 e m_2 afetam as variáveis y_1 e y_2 . Já na Figura 4.7 é apresentado o mesmo sistema visto anteriormente, porém as variáveis y_1 e y_2 são mantidas especificadas através do uso de controladores, que atuam sobre as variáveis m_1 e m_2 , tais ações são percebidas por ambas as malhas, podendo estas interações indiretas ser benéficas ou

não para a malha de controle. Na Figura 4.8 é apresentado um terceiro tipo de sistema denominado de malha semi-fechada. Este tipo de sistema é muito comum em cenários industriais, onde o operador atua sobre uma variável manualmente, enquanto que as demais variáveis são manipuladas por um controlador automático. No caso de uma malha semi-fechada, ao manipular-se uma variável, por exemplo m_1 , y_1 é afetado, porém o controlador presente na outra malha, não permitirá que y_2 sofra com esta ação, gerando uma ação de controle que afetará y_1 novamente. A interação da ação do controlador sobre y_1 pode ser benéfica ao mesmo ou pode causar um distúrbio maior ou menor. A relação entre o ganho em malha aberta e semi-fechada é a própria definição da matriz RGA, que pode ser calculada a partir da Equação 4.42.

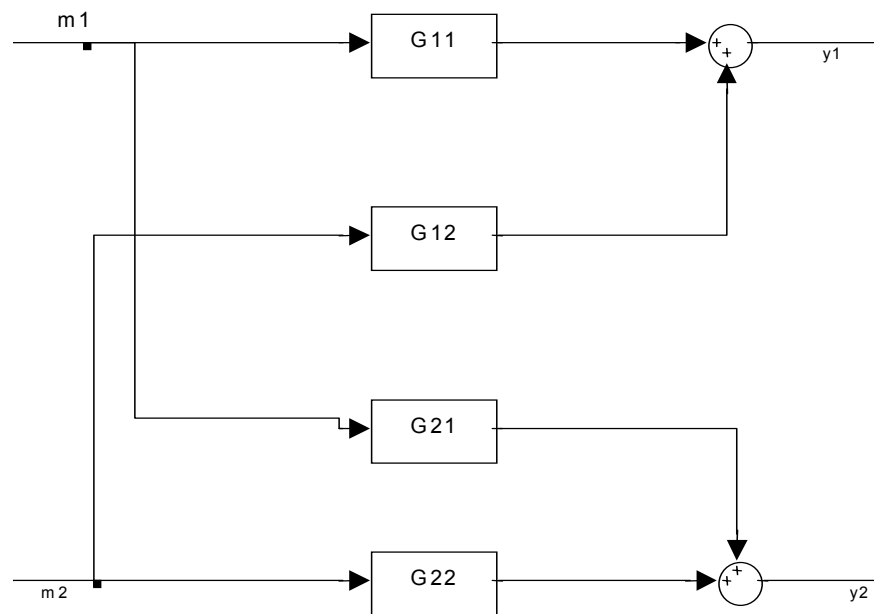


Figura 4.6: Sistema em malha aberta.

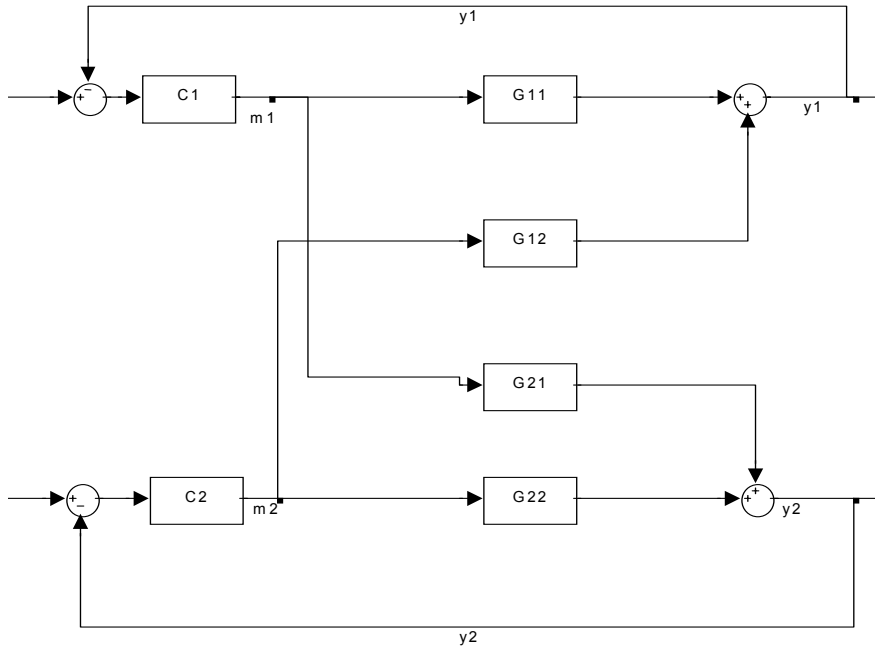


Figura 4.7: Sistema em malha fechada

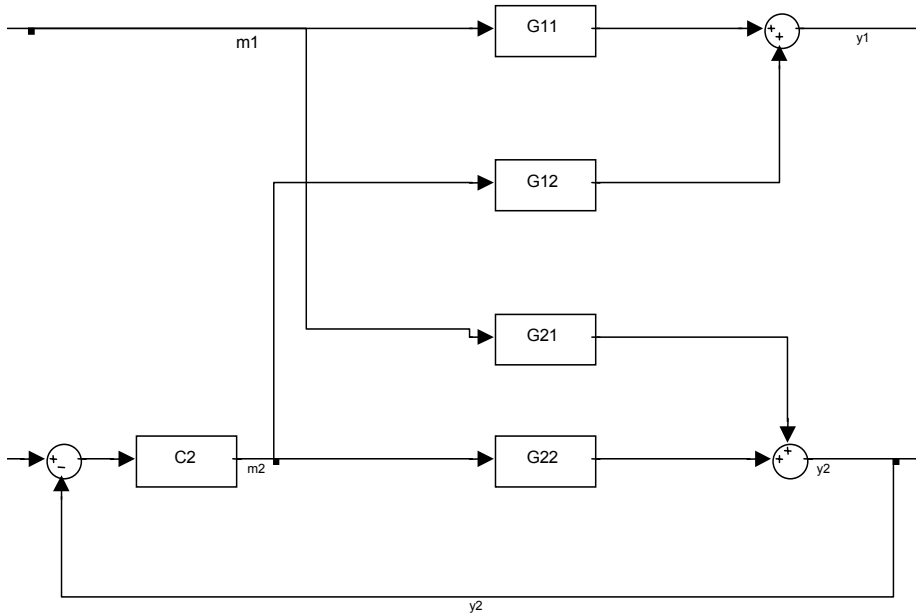


Figura 4.8: Sistema em malha semi-fechada

$$\beta_{i,j} = \frac{\left(\frac{\partial y_i}{\partial m_k} \right)_{\text{todos os loops abertos}}}{\left(\frac{\partial y_i}{\partial m_k} \right)_{\text{loop } j \text{ fechado e os demais loops abertos}}} = \left(\frac{\text{ganho em malha aberta}}{\text{ganho em malha semi-fechada}} \right) \quad (4.42)$$

A matriz RGA é quadrada, calculada para sistemas onde haja o mesmo número de variáveis controladas e manipuladas, cada elemento da matriz é calculado pela Equação 4.42. A matriz RGA também pode ser calculada a partir da matriz de ganhos estacionários através da Equação 4.43.

$$RGA = K \otimes (K^{-1})^T \quad (4.43)$$

onde K^{-1} representa a inversa da matriz de ganhos estacionários e o sobrescrito "T" representa a operação de transposição matricial, ou seja, troca de linhas por colunas.

A utilização da matriz RGA como medida do grau de acoplamento tem a seguinte interpretação:

$\beta_{i,j} = 0$: A variável de saída i não sofre influência da entrada j .

$\beta_{i,j} = 1$: A variável de saída i sofre influência apenas da entrada j , ou seja, o ganho em malha aberta é igual ao em malha semi-fechada. Com isso é possível concluir que as malhas de controle não interagem entre si.

$\beta_{i,j} > 1$ ou $0 < \beta_{i,j} < 1$: Existe interação entre as malhas de controle em todas direções.

$\beta_{i,j} < 0$: Neste caso o efeito da entrada i sobre a saída j é forte e em direção oposta ao efeito da entrada i , e assim, os efeitos de interação entre as malhas são negativos.

Para o problema de síntese de redes, o cálculo da matriz RGA envolve o conhecimento das variáveis controladas e manipuladas do sistema. No problema em questão, foi arbitrado que as variáveis controladas seriam as composições de entrada nos processos, $Xin_{1,1}$, $Xin_{2,1}$, $Xin_{3,2}$ e $Xin_{4,1}$, e as variáveis manipuladas seriam as vazões entre os processos, $L_{i,k}$, e as vazões de água de reposição F_i , sendo assim a matriz de ganhos tem a dimensão de 4 linhas e 4 colunas. A variável escolhida para ser manipulada é a que apresentar menor valor (ou seja, maior módulo do valor negativo), para garantir que a perturbação em determinada corrente realizará diminuição da fração mássica na entrada do processo. Para realizar tal escolha, é aplicado um algoritmo automático de seleção de variáveis, onde inicialmente é avaliado o menor ganho para a variável controlada $Xin_{1,1}$; a corrente que apresentar o menor ganho é selecionada para ser a variável manipulada, sendo que esta não pode ser usada para controlar outra variável. O procedimento é repetido até que todas as variáveis controladas sejam pareadas com as variáveis manipuladas.

Para o uso da matriz RGA como medida de operabilidade, é necessário escrever uma função que, a partir desta matriz, calcule um número para a incorporação na função objetivo. Baseada na interpretação da matriz RGA, foi construída uma função que realiza cálculos nos elementos da diagonal da RGA e expressa a matriz em um único número, esta função é apresentada na Equação 4.44 e seu gráfico é representado pela Figura 4.9.

$$RGAf(\beta_{i,j}) = 2 \cdot (\beta_{i,j} - 1,7) \cdot (3,8 - e^{-(\beta_{i,j}-1,7)}) + 10 \quad (4.44)$$

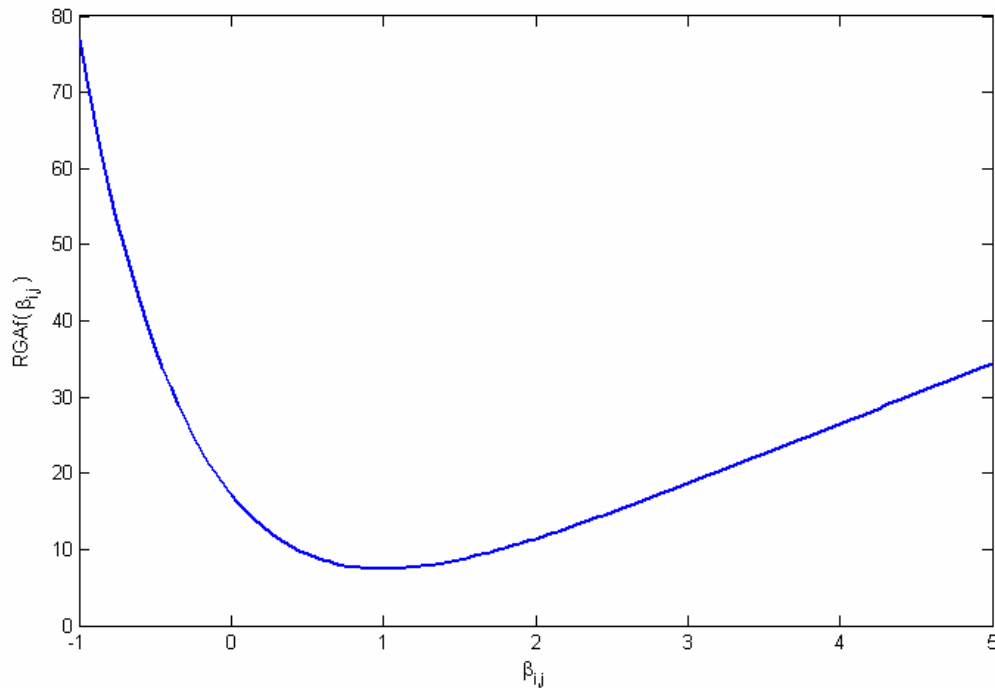


Figura 4.9: Função utilizada para a incorporação do RGA em uma otimização.

Nesta função, valores do RGA próximos a 1 são pouco penalizados, enquanto que RGAs negativos e maiores que um sofrem uma maior penalização pois tem um efeito indesejável nas malhas de controle.

O índice operacional para a incorporação na função objetivo externa é calculado a partir da Equação 4.44, conforme Equação 4.45.

$$\sum_{i=1}^4 RGAf(\beta_{i,j}) \quad \text{para } i=j=1..4 \quad (4.45)$$

Função Objetivo da Otimização Externa

A função objetivo externa, como na formulação anterior, é composta pela soma de fatores econômicos, de folga e operacionais, resultando na Equação 4.46.

$$\begin{aligned}
S &= w_1 \cdot f_1 + w_2 \cdot f_2 + w_3 \cdot f_3 + w_4 \cdot f_4 \\
f_1 &= \sum_{i=1}^6 \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^6 D_{i,k} \cdot (\tanh(100 \cdot (L_{i,k} - 0.1) + 1)) \\
f_2 &= \frac{1}{2} \cdot \sum_{i=1}^6 \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^6 D_{i,k} \cdot L_{i,k} \\
f_3 &= \sum_{i=1}^4 \sum_{j=1}^2 \Phi_{i,j} \\
f_4 &= \sum_{i=1}^4 RGAf(\beta_{i,j})
\end{aligned} \tag{4.46}$$

Função Objetivo da Otimização Interna

No nível interno de otimização, são realizadas perturbações para a obtenção da matriz de ganhos estacionária. Logo, é necessário somente que as restrições sejam respeitadas e por este motivo a função objetivo é uma constante.

Restrições da Otimização Externa

As restrições de igualdade e desigualdade da otimização externa seguem a implementação NLP reduzido e são apresentadas nas Equações 4.15, 4.16, 3.30 e 3.31.

Restrições da Otimização Interna

Para o cálculo da matriz de ganhos estacionários por perturbações, são incorporadas ao problema as restrições de igualdade e desigualdade do problema NLP reduzido, estas são representadas pelas Equações 3.30, 3.31, 4.15 e 4.16. Para perturbar as correntes em um nível superior é adicionada uma restrição de igualdade, dada pela Equação 4.47.

$$L_{i,k}^p = L_{i,k} + \varepsilon \tag{4.47}$$

onde ε é o incremento na vazão a ser perturbada e $L_{i,k}^p$ é a corrente $L_{i,k}$ perturbada.

Após a perturbação da corrente, é necessário manter constantes as razões entre as correntes que deixam os divisores, denominadas *Splits*, através de restrições de igualdade. O divisor de corrente de onde parte a corrente perturbada segue a Equação 4.48, enquanto que os demais *Splits* podem variar livremente.

$$Split_{i,k} = \frac{L_{i,k}}{\sum_{\substack{m=1 \\ m \neq k}}^6 L_{m,k} - L_{i,k}^p} \quad (4.48)$$

$$Split_{i,k}^{\text{antes da perturbação}} = Split_{i,k}^{\text{depois da perturbação}} \quad (4.49)$$

Com a Equação 4.49 é garantido que as correntes do *Split* que sofre a perturbação irão se distribuir como no problema externo, e, com isso, a perturbação na vazão irá se propagar para as demais unidades do sistema, sendo possível obter o efeito da perturbação sobre as variáveis controladas (composição de poluentes na entrada dos processos). O efeito de cada perturbação sobre cada variável controlada são os elementos da matriz de ganhos estacionários, sendo esta obtida por aproximação numérica através da Equação 4.41.

A partir da resolução dos problemas acima descritos, é possível sintetizar redes utilizando fatores econômicos e operacionais. Os resultados das otimizações das diversas implementações são apresentados no capítulo seguinte.

Capítulo 5: Resultados e Discussão

No presente capítulo são apresentados os resultados da implementação para a geração de estimativas iniciais, das propostas de redução de complexidade do problema e de incorporação de índices operacionais ao mesmo. Os resultados referentes às implementações são discutidos, apresentando suas vantagens e limitações.

5.1. Obtenção dos Resultados

O problema padrão estudado foi implementado e resolvido utilizando o módulo de otimização *Optimization Toolbox 2.2* do software Matlab (THE MATHWORKS 1999). Das diversas funções matemáticas para otimização disponíveis neste software, foi escolhida a função *fmincon*, que utiliza o algoritmo de Programação Quadrática Seqüencial (ou SQP; HAN, 1977, POWELL, 1978), capaz de resolver problemas de otimização NLP com funções objetivo, restrições de igualdade e desigualdade não-lineares. Os problemas MINLPs foram resolvidos através do algoritmo Spacial Branch and Bound (SMITH; PANTELIDES, 1997) implementado no Matlab. Para a resolução dos problemas foi utilizado um computador Pentium 4 1.2 GHz com 128 Mb de memória.

Todas as 8 implementações descritas no Capítulo 3 e 4 foram resolvidas para dois casos: o primeiro, onde a vazão máxima de água fresca (ou reposição) é 1 t/h, correspondente a um sistema com elevada integração mássica, e o segundo, onde a vazão máxima de água de reposição é de 4 t/h, com um menor grau de integração.

5.2. Resultados dos Problemas com Considerações Econômicas

As quatro implementações com considerações econômicas descritas no Capítulo 3 e 4, utilizam funções objetivo onde os termos relativos aos custos fixos (existência das conexões), custos variáveis (proporcional a cada vazão) e termos de folga das restrições foram considerados. Os resultados das otimizações foram comparados entre si, para avaliar a existência de mínimos locais, e com suas respectivas estimativas iniciais para avaliar se houve mudança significativa entre os mesmos.

5.2.1. Problema de Geração de Estimativas Iniciais

Inicialmente foram resolvidos 22 problemas para a obtenção de estimativas iniciais aleatórias viáveis, 11 para vazão máxima de água fresca de 1 t/h e 11 para a vazão máxima de água fresca de 4 t/h. Para chegar às estimativas iniciais, foram geradas matrizes de números aleatórios, com sementes aleatórias baseadas no relógio interno do computador. Estas matrizes aleatórias geradas possuem dimensões de seis linhas por seis colunas correspondentes às vazões entre as unidades, variáveis de decisão do otimizador para o caso da implementação NLP reduzida. Com tais matrizes foram resolvidos os problemas descritos no Capítulo 4 no item 4.4. Os resultados de tais problemas apresentam-se no Apêndice D na Tabela D.2 (para vazão máxima de água de reposição de 1 t/h) e D.3 (para vazão máxima de água de reposição de 4 t/h). Também são apresentados na Tabela D.4 do Apêndice D, para as 11 estimativas iniciais, os tempos computacionais para a resolução de todas as implementações realizadas, com exceção do problema de geração de estimativas iniciais, para

os quais não foram registrados. Os dados da Tabela D.4 são apresentados resumidamente na Tabela 5.1.

Tabela 5.1: Tempos computacionais médio e total, em segundos, para a resolução dos problemas descritos no Capítulo 3 e 4 para as vazões máximas de água de reposição de 1 e 4 t/h.

Problema/ tempo(s)	MINLP Original	MINLP Reduzido	NLP Original	NLP Reduzido	Implementação Operacional 1	Implementação Operacional 2	Implementação Operacional 3
Total $F_{max}=1$	5824.55	1227.97	75.22	21.77	15118.59	1074.25	5126.92
Médio $F_{max}=1$	529.50	111.63	6.84	1.98	1679.84	153.46	1025.38
Total $F_{max}=4$	6729.81	2029.73	286.05	66.73	23964.48	22183.05	11029.80
Médio $F_{max}=4$	611.80	184.52	26.00	6.07	2995.56	2464.78	3676.60

Através da análise dos dados presentes na Tabela 5.1 e D.3, é possível observar que o tempo computacional para a resolução do problema NLP reduzido é menor, por este motivo foi escolhida esta implementação para a geração de estimativas iniciais viáveis.

Para fins de comparação, foram considerados os dois primeiros resultados do problema de geração de estimativas iniciais, estes são apresentados na Tabela 5.2 e Tabela 5.3, onde a coluna representa a corrente que sai do processo k e entra no processo representado pela linha i . É possível observar que os resultados apresentam pequena diferença nas conexões e na vazão entre as unidades. Através da análise da Tabela D.2, onde um número maior de resultados estão presentes, também é possível observar que para o caso onde a vazão máxima de água fresca é 1 t/h, as 11 configurações resultantes diferem pouco entre si em relação à existência de conexões e de vazões entre os processos, além disso, a alimentação de água de reposição é sempre no processo 1. Tais fatos ocorrem possivelmente devido à necessidade de satisfação de restrições de concentração de entrada dos processos e da vazão máxima de água fresca, que para este caso são muito rígidas. Tal observação pode ser comprovada pelas composições de entrada nas unidades (apresentadas na Tabela D.2) que em todos os processos atingem o valor limite permitido, com exceção do contaminante 2 na unidade 4.

No caso onde a vazão máxima de água de reposição é de 4 t/h, também, foram considerados, para fins de comparação, os dois primeiros resultados do problema de geração de estimativas iniciais, estes são apresentados na Tabela 5.4 e Tabela 5.5.

Através da comparação entre a Tabela 5.4 e Tabela 5.5, é possível observar que quando a vazão máxima de água fresca é 4 t/h, existe maior diferença nas configurações e vazões entre os processos, além disso, em alguns casos o regenerador 6 não é utilizado. Tal comportamento ocorre, possivelmente, porque a vazão de água de reposição é maior, resultando em correntes mais diluídas, logo existe maior flexibilidade nas estruturas e vazões, e, conseqüentemente, a água fresca pode ser alimentada em outros processos. Tal fato pode

ser comprovado pela análise da Tabela D.3, onde é possível observar que a composição de entrada nos processos, em muitos casos, não atinge o limite, o oposto do que é observado quando a vazão máxima de água de reposição é 1 t/h. É possível observar ainda, que a vazão de água de reposição, em alguns resultados, não chega ao seu limite de 4 t/h, como pode ser observado na Tabela 5.5.

Tabela 5.2: Primeiro resultado do problema de geração de estimativas iniciais para vazão máxima de água de reposição de 1 t/h.

$L_{i,k}$ (entrada, saída)	$k=1$	$k=2$	$k=3$	$k=4$	$k=5$	$k=6$	F
$i=1$	0	0	0	0	0	1	1
$i=2$	0	0	0	0	2	0	0
$i=3$	0	1.123	0	1.383	0.109	0.385	0
$i=4$	2	0	0	0	1	0	0
$i=5$	0	0.118	0	1.38	0	1.611	0
$i=6$	0	0	2.996	0	0	0	0
W_i	0	0,759	4E-03	0,24	0	0	0

Tabela 5.3: Segundo resultado do problema de geração de estimativa inicial para vazão máxima de água de reposição de 1 t/h.

$L_{i,k}$ (entrada, saída)	$k=1$	$k=2$	$k=3$	$k=4$	$k=5$	$k=6$	F
$i=1$	0	0	0	0	0	1	1
$i=2$	0	0	0	0	2	0	0
$i=3$	0	0,912	0	1,28	0,216	0,592	0
$i=4$	2	0	0	0	1	0	0
$i=5$	0	0,087	0,035	1,72	0	1,373	0
$i=6$	0	2E-04	2,965	0	0	0	0
W_i	0	1	0	0	0	0	0

Tabela 5.4: Primeiro resultado do problema de geração de estimativa inicial para vazão máxima de água de reposição de 4 t/h.

$L_{i,k}$ (entrada, saída)	$k=1$	$k=2$	$k=3$	$k=4$	$k=5$	$k=6$	F
$i=1$	0	0	0	0,104	0,395	0	1,500
$i=2$	0	0	0	0	1,683	0	0,317
$i=3$	0,372	0,051	0	1,033	0,377	0	1,168
$i=4$	0,375	0,027	0,243	0	1,339	0	1,015
$i=5$	1,253	0	2,020	0,520	0	0	0
$i=6$	0	0	0	0	0	0	0
W_i	0	1,921	0,7361	1,3422	0	0	0

Tabela 5.5: Segundo resultado do problema de geração de estimativa inicial para vazão máxima de água de reposição de 4 t/h.

$L_{i,k}$ (entrada, saída)	k=1	k=2	k=3	k=4	k=5	k=6	F
$i=1$	0	0	0	0,001	0	0,993	1,005
$i=2$	0	0	0	0	2,000	0	0
$i=3$	2,00	0,116	0	0,160	0,001	0,560	0,163
$i=4$	0	0,178	0	0	0	0,258	1,565
$i=5$	0	0	0,068	1,933	0	0	0
$i=6$	0	0	2,811	0	0	0	0
W_i	0	1,7	0,12	0,906	0	0	0

Através da comparação entre as demais configurações resultantes do problema onde a vazão máxima de água de reposição é 4 t/h, conforme apresentado na Tabela D.2 e D.3, é possível observar que estas são consideravelmente distintas entre si. Basedo em tal fato, é possível concluir que no problema onde a vazão máxima de água de reposição é 4 t/h existe maior quantidade de mínimos locais, em comparação com a outra condição operacional.

5.2.2. Problema MINLP Original

No problema MINLP original, apresentado no Capítulo 3 item 3.2.1, estão presentes tanto variáveis inteiras quanto contínuas, e a função objetivo do problema de otimização apresenta termos econômicos e de folga.

Os resultados do problema MINLP original são apresentados no Apêndice D na Tabela D.5, onde é possível observar que, no caso onde a vazão máxima de água de reposição é 1 t/h, as configurações finais não diferem entre si, apresentando a mesma estrutura como resultado (apresentada na Tabela 5.6). Quando comparadas com suas respectivas estimativas iniciais, os resultados apresentaram-se significativamente diferentes, sendo que em todos os processos, com exceção do processo 1, houveram modificações nas vazões e conexões entre os mesmos. Tal fato pode ser comprovado através da comparação entre a Tabela 5.2 e Tabela 5.6. Este comportamento pode ter sido ocasionado pela natureza dos problemas de otimização, que no caso de obtenção de estimativas iniciais trata-se de programação não-linear (NLP) e no problema resolvido, de programação não-linear inteira-mista (MINLP). Outro fato que pode ter contribuído para esta diferença são as funções objetivos, que para ambos os problemas são distintas.

Para o caso onde a vazão máxima de água fresca é 4 t/h foram obtidos resultados significativamente distintos entre as configurações iniciais e finais, como pode ser observado através da comparação entre a Tabela 5.4 e Tabela 5.7. Os resultados finais, quando comparados entre si, também apresentaram configurações distintas, conforme dados apresentados na Tabela 5.7 e Tabela 5.8, sendo que os dados relativos aos demais resultados são apresentados na Tabela D.5 do Apêndice D. Este fato ocorreu, possivelmente, devido à maior vazão de água de reposição, o que leva a correntes mais diluídas e maior flexibilidade

nas estruturas. O tempo computacional para resolução deste problema foi o maior quando comparado com as demais implementações conforme apresentado na Tabela D.4 do Apêndice D, o que leva a inviabilizar computacionalmente o uso da implementação MINLP original para a obtenção de estimativas iniciais viáveis e implementações operacionais.

Tabela 5.6: Resultado do problema de MINLP original para vazão máxima de água de reposição de 1 t/h utilizando a estimativa inicial apresentada na Tabela 5.2.

$L_{i,k}$ (entrada, saída)	$k=1$	$k=2$	$k=3$	$k=4$	$k=5$	$k=6$	F
$i=1$	0	0	0	0	0	1	1
$i=2$	0	0	0	0	2	0	0
$i=3$	0	2	0	0	0	1	0
$i=4$	2	0	0	0	1	0	0
$i=5$	0	0	0	3	0	0	0
$i=6$	0	0	2	0	0	0	0
W_i	0	0	1	0	0	0	0

Tabela 5.7: Resultado do problema de MINLP original para vazão máxima de água de reposição de 4 t/h utilizando a estimativa inicial apresentada na Tabela 5.4.

$L_{i,k}$ (entrada, saída)	$k=1$	$k=2$	$k=3$	$k=4$	$k=5$	$k=6$	F
$i=1$	0	0	0	0	0	0	2,000
$i=2$	0	0	0	0	2,000	0	0
$i=3$	1,205	0	0	0	0	0	1,795
$i=4$	0	0	2,795	0	0	0	0,205
$i=5$	0	0	0	2,000	0	0	0
$i=6$	0	0	0	0	0	0	0
W_i	0,795	2	0,205	1	0	0	0

Tabela 5.8: Resultado do problema de MINLP original para vazão máxima de água de reposição de 4 t/h utilizando a estimativa inicial apresentada na Tabela 5.5.

$L_{i,k}$ (entrada, saída)	$k=1$	$k=2$	$k=3$	$k=4$	$k=5$	$k=6$	F
$i=1$	0	0	0	0	0	0	2
$i=2$	0	0	0	0	0,833	0	1,167
$i=3$	0	0	0	0	0	2,167	0,833
$i=4$	2,000	0	0,833	0	0,167	0	00
$i=5$	0	0,027	0	0,974	0	0	0
$i=6$	0	0	2,167	0	0	0	0
W_i	0	1,974	0	2,026	0	0	0

5.2.3. Problema MINLP reduzido

No problema MINLP reduzido, onde as vazões e as restrições de igualdade foram utilizadas para expressar algumas variáveis de decisão, foram observados os mesmos resultados do problema MINLP original. Para as formulações MINLP reduzido e original, tanto para vazão máxima de água de reposição de 1 t/h quanto para 4 t/h, o menor valor da função objetivo encontrado e a configuração correspondente foram idênticos. As configurações resultantes deste problema apresentam-se na Tabela D.6 do Apêndice D. A principal diferença nos resultados entre as implementações MINLP original e reduzida é o tempo computacional, que na abordagem MINLP reduzida é em média 79% menor, como pode ser observado na Tabela 5.1.

5.2.4. Problema NLP completo

No problema NLP completo, as variáveis inteiras, referentes à existência das conexões entre os processos, foram eliminadas do problema restando apenas as variáveis contínuas. A primeira estimativa inicial apresentada na Tabela 5.2 foi comparada com o resultado do problema NLP completo, apresentado na Tabela 5.9, onde foi possível observar que o resultado deste problema, nesta condição, apresentou uma rede significativamente diferente de sua respectiva estimativa inicial.

Tabela 5.9: Resultado do problema de NLP original para vazão máxima de água de reposição de 1 t/h utilizando a estimativa inicial apresentada na Tabela 5.2.

$L_{i,k}$ (entrada, saída)	$k=1$	$k=2$	$k=3$	$k=4$	$k=5$	$k=6$	F
$i=1$	0	0	0	0	0	1	1
$i=2$	0	0	0	0	2	0	0
$i=3$	0	1,876	0	0	0,052	1,073	0
$i=4$	2	0	0	0	1	0	0
$i=5$	0	0,003	7E-04	3	0	0,048	0
$i=6$	0	0	2,121	0	2E-04	0	0
W_i	0	0,122	0,879	0	0	0	0

Através da comparação entre o resultado apresentado na Tabela 5.9 e Tabela 5.10, onde as estimativas iniciais são distintas (apresentadas pela Tabela 5.2 e Tabela 5.3, respectivamente) é possível observar que as redes obtidas também são significativamente diferentes.

Tabela 5.10: Resultado do problema de NLP original para vazão máxima de água de reposição de 1 t/h utilizando a estimativa inicial apresentada na Tabela 5.3.

$L_{i,k}$ (entrada, saída)	$k=1$	$k=2$	$k=3$	$k=4$	$k=5$	$K=6$	F
$i=1$	0	0	0	0	0	1	1
$i=2$	0	0	0	0	2	0	0
$i=3$	0	0,995	0	0	0,419	1,586	0
$i=4$	2	0	0	0	1	0	0
$i=5$	0	0,005	0,055	3	0	0,358	0
$i=6$	0	0	2,945	0	1E-04	0	0
W_i	0	1	0	0	0	0	0

Os demais resultados referentes ao problema NLP completo não apresentaram diferenças significativas entre si em relação às vazões e configuração da rede, conforme apresentado na Tabela D.7 do Apêndice D.

Para o caso onde a vazão máxima de água de reposição é de 4 t/h, foram observados os mesmos resultados para o caso do problema MINLP completo, ou seja, as configurações são diferentes em relação às estimativas iniciais e apresentam maior diferença quando comparadas entre si, conforme apresentado na Tabela D.7 do Apêndice D. Na implementação NLP completa são obtidas, em média, um número maior de conexões, com menores vazões quando comparadas com as implementações MINLP original e reduzida. Este fato ocorre possivelmente devido à natureza do problema e às funções objetivo, distintas entre si. Os menores valores para as funções objetivo dos problemas NLPs e MINLPs encontrados foram os mesmos, tanto para vazão máxima de água de reposição de 1 t/h quanto para 4 t/h (474 e 204), embora as vazões e configurações entre as implementações sejam um pouco diferentes, possivelmente devido à diferença entre as funções objetivos. O tempo computacional para a resolução deste tipo de problema é em média menor, pois o problema NLP é resolvido uma só vez, o que não ocorre com as implementações MINLP, onde vários subproblemas NLP são resolvidos.

5.2.5. Problema NLP reduzido

No problema NLP reduzido, além da eliminação das variáveis inteiras, as restrições de igualdade foram utilizadas para expressar algumas variáveis de decisão em função das vazões. No caso onde a vazão máxima de água de reposição é 1 t/h, é possível observar que as configurações resultantes não diferem significativamente entre si, porém as vazões de algumas correntes apresentam uma diferença considerável, como pode ser observado na Tabela 5.11 e na Tabela 5.12. As redes resultantes, quando comparadas com as respectivas estimativas iniciais apresentaram uma diferença significativa em relação às vazões que saem dos processos 4 e 6, sendo que nas demais unidades, esta diferença é desprezível. Cabe ressaltar que, em média, o termo de violação das restrições de concentração de entrada nos processos, presente na função objetivo, é maior na implementação MINLP que na NLP quando a vazão máxima de água de reposição é de 1 t/h, conforme apresentado na Tabela

D.12 do Apêndice D. O tempo computacional nesta implementação foi o menor comparado com as outras abordagens, por este motivo esta implementação foi escolhida para desenvolver o algoritmo de estimativas iniciais viáveis e para os problemas com considerações operacionais. Na condição onde vazão máxima de água de reposição é 1 t/h, os problemas NLP reduzido e completo apresentaram resultados bem próximos, quando foi utilizada a mesma estimativa inicial, como pode ser observado através da comparação da Tabela 5.9 e Tabela 5.11, para a primeira estimativa inicial; e Tabela 5.10 e Tabela 5.12. para a segunda estimativa inicial.

Tabela 5.11: Resultado do problema de NLP reduzido para vazão máxima de água de reposição de 1 t/h utilizando a estimativa inicial apresentada na Tabela 5.2.

$L_{i,k}$ (entrada, saída)	$k=1$	$k=2$	$k=3$	$k=4$	$k=5$	$k=6$	F
$i=1$	0	0	0	0	0	1	1
$i=2$	0	0	0	0	2	0	0
$i=3$	0	1,844	0	0	0,065	1,091	0
$i=4$	2	0	0	0	1	0	0
$i=5$	0	0,004	0	3	0	0,061	0
$i=6$	0	0	2,152	0	2E-04	0	0
W_i	0	0,152	0,848	0	0	0	0

Tabela 5.12: Resultado do problema de NLP reduzido para vazão máxima de água de reposição de 1 t/h utilizando a estimativa inicial apresentada na Tabela 5.2.

$L_{i,k}$ (entrada, saída)	$k=1$	$k=2$	$k=3$	$k=4$	$k=5$	$k=6$	F
$i=1$	0	0	0	0	0	1	1
$i=2$	0	0	0	0	2	0	0
$i=3$	0	0,995	0	0	0,419	1,596	0
$i=4$	2	0	0	0	1	0	0
$i=5$	0	0,005	0,055	3	0	0,358	0
$i=6$	0	0	2,945	0	1E-04	0	0
W_i	0	1	0	0	0	0	0

Para o caso onde a vazão máxima de água de reposição é 4 t/h, observa-se uma diferença considerável entre as configurações resultantes assim como maior distinção entre as estruturas finais em relação às estimativas iniciais. Em todas as 44 otimizações desta última condição (11 para cada uma das 4 implementações considerando somente os problemas com considerações econômicas), foi possível observar que o menor valor da função objetivo alcançado foi de 204, indicando que este é um possível ótimo global. No problema NLP reduzido, foi possível observar, que, na condição onde a vazão máxima de água de reposição é 4 t/h, este convergiu para uma solução sub-ótima (valor da função objetivo de 211) quando comparado com o ótimo encontrado pelas demais implementações (204). Como esta

implementação possui um tempo computacional reduzido em relação às demais, o problema de mínimos locais seria possivelmente resolvido fornecendo um número maior de estimativas iniciais ao otimizador, podendo resolver o problema como um todo em um tempo computacional menor do que o das demais implementações.

5.3. Avaliação da Operabilidade e Economicidade das Estruturas Desenvolvidas

Para a avaliação da eficiência dos métodos propostos para obtenção de redes com considerações econômicas e operacionais, foram elaborados modelos dinâmicos de acúmulo simples para as unidades. Para a elaboração dos modelos, foram usadas as seguintes hipóteses:

- Os tanques possuem seção transversal constante.
- A densidade do fluido é constante.
- A dinâmica da mistura do poluente com a corrente de entrada é muito rápida.

Em seguida, realizou-se a linearização dos mesmos para a aplicação dos métodos de análise disponíveis na literatura.

5.3.1. Modelagem dos processos

A versão dinâmica do balanço de massa global dos processos é dada por:

$$\frac{dMa_i}{dt} = Lin_i - Lout_i + \sum_{j=1}^2 \dot{M}_{i,j} \cdot 10^{-6}, \text{ para } i=1,\dots,4 \quad (5.1)$$

Para determinar a vazão de saída dos processos ($Lout_i$), foi inserida a equação de um controlador proporcional, onde o acúmulo de massa (*holdup*) dos processos, M_i , foi controlado, para manter o nível no valor desejado (*setpoint*). A ação de controle imposta pelo controlador é dada por:

$$Lout_i = Lout_{bias_i} - Kp_i \cdot (M_{aset_i} - Ma_i), \text{ para } i=1,\dots,4 \quad (5.2)$$

onde:

$Lout_{bias_i}$ = valor do *bias* da vazão mássica de saída do processo i ;
 M_{aset_i} = valor do *setpoint* para o acúmulo de massa do processo i ;
 Kp_i = ganho do controlador do processo i .

A Figura 5.1 mostra um esquema do controlador para o *holdup* dos processos.

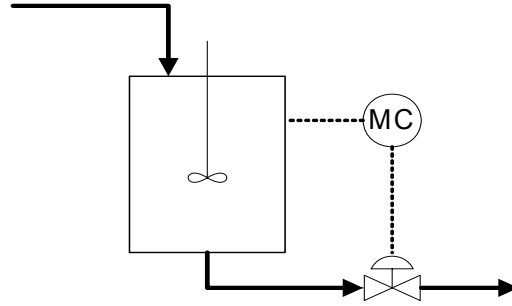


Figura 5.1: Esquema do controlador para o *holdup* dos processos.

Inserindo a Equação 5.2 na Equação 5.1, tem-se:

$$\frac{dMa_i}{dt} = Lin_i - Lout_{bias_i} + Kp_i \cdot (Maset_i - Ma_i) + \sum_{j=1}^2 \dot{M}_{i,j} \cdot 10^{-6}, \text{ para } i=1,\dots,4 \quad (5.3)$$

O balanço de massa por componente para os processos é dado por:

$$\frac{dMa_i x_{i,j}}{dt} = Lin_{i,j} - Lout_i \cdot x_{i,j} + \dot{M}_{i,j}, \text{ para } i=1,\dots,4 \text{ e } j=1,\dots,3 \quad (5.4)$$

onde i representam os 4 processos geradores de poluentes e o índice j representa os componentes presentes no sistema, sendo o índice 3 da água pura, com: $\dot{M}_{i,3} = 0$ e $x_{i,j}$ expresso em ppmw.

Como tanto a fração mássica do componente j quanto o *holdup* do processo i podem variar com o tempo, tem-se:

$$\frac{dMa_i x_{i,j}}{dt} = Ma_i \frac{dx_{i,j}}{dt} + x_{i,j} \frac{dMa_i}{dt}, \quad (5.5)$$

Substituindo a Equação 5.1 e Equação 5.4, na Equação 5.5, obtém-se:

$$Ma_i \frac{dx_{i,j}}{dt} = Lin_{i,j} - Lin_i \cdot x_{i,j} + \dot{M}_{i,j} - x_{i,j} \cdot \sum_{j=1}^2 \dot{M}_{i,j} \cdot 10^{-6}, \text{ para } i=1,\dots,4 \text{ e } j=1,\dots,3. \quad (5.6)$$

5.3.2. Modelagem dos regeneradores

Visando simplificar a modelagem, na dinâmica dos regeneradores foi considerada a inclusão de um vaso pulmão acoplado a um separador perfeito, conforme ilustra a Figura 5.2. O acúmulo do vaso pulmão é dado por:

$$\frac{dMa_i}{dt} = Lin_i - Lmid_i, \text{ para } i=5,6 \quad (5.7)$$

De modo similar à modelagem dos processos, o acúmulo de massa (*holdup*) do vaso pulmão, M_i , foi controlado através de um controlador proporcional, cuja ação de controle é dada por:

$$Lmid_i = Lmid_{bias_i} - Kp_i \cdot (Maset_i - Ma_i), \text{ para } i=5,6 \quad (5.8)$$

onde:

$Lout_{bias_i}$ = valor do *bias* da vazão mássica de saída do regenerador i ;
 $Maset_i$ = valor do *setpoint* para o acúmulo de massa do regenerador i ;
 Kp_i = ganho do controlador do regenerador i .

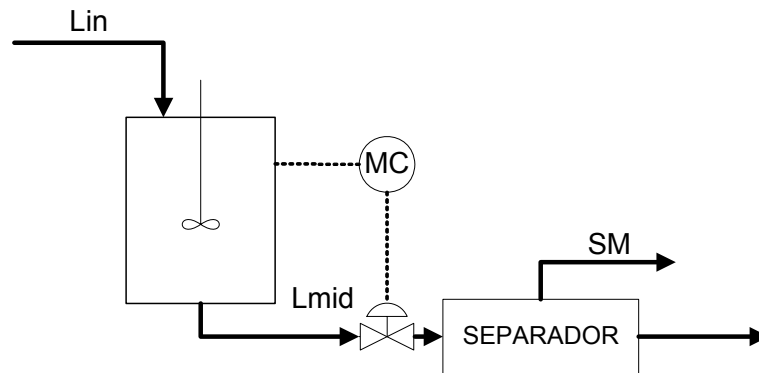


Figura 5.2: Esquema dos regeneradores.

O separador perfeito, usado na modelagem dinâmica dos regeneradores, é descrito pela Equação 5.9.

$$Lout_i = Lmid_i - \sum_{j=1}^2 SM_{i,j} \cdot 10^{-6}, \text{ para } i=5,6 \quad (5.9)$$

Sendo cada regenerador restrito quanto à seletividade dos poluentes, tem-se:

$$SM_{5,2} = 0, SM_{6,1} = 0 \text{ e } SM_{i,3} = 0$$

O balanço de massa por componentes no vaso pulmão é dado por:

$$Ma_i \cdot \frac{dxmid_{i,j}}{dt} = Lin_{i,j} - Lin_i \cdot xmid_{i,j}, \text{ para } i=5,6 \text{ e } j=1,\dots,3 \quad (5.10)$$

e no separador perfeito por:

$$Lout_i \cdot x_{i,j} = Lmid_i \cdot xmid_{i,j} - SM_{i,j}, \text{ para } i=5,6 \text{ e } j=1,\dots,3 \quad (5.11)$$

com $SM_{i,3}=0$:

5.3.3. Correntes do processo

Na implementação do modelo dinâmico da superestrutura, as conexões entre as unidades, vazões da água fresca e do efluente líquido que saem do sistema foram incluídas na forma matricial, através de uma matriz de divisores de corrente (ou matriz de *splits*). Previamente à matriz de *splits* é necessário definir a matriz de reciclos/reusos, L , que apresenta a seguinte forma:

$$L_A = \begin{bmatrix} L_{1,1} & \cdots & L_{1,6} & F_1 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ L_{6,1} & \cdots & L_{6,6} & F_6 \\ W_1 & \cdots & W_6 & 0 \end{bmatrix} \quad (5.12)$$

onde:

- $L_{i,k}$ = vazão mássica que sai da unidade k e entra na unidade i ;
- F_i = vazão de água fresca de *makeup* que entra na unidade i ;
- W_i = vazão mássica de efluente líquido que sai da unidade i .

É importante salientar que as seis primeiras colunas da matriz L_A representam as correntes de saída de cada unidade, enquanto que as seis primeiras linhas representam as correntes de entrada de cada uma das unidades. Todos os elementos que compõem a matriz L_A são provenientes do resultado da otimização. A partir da matriz de reciclos/reusos, define-se a matriz de *splits*, s , como sendo:

$$s = L_A \cdot [\text{diag}(Ls)]^{-1}, \quad (5.13)$$

onde:

- L_A = matriz de reciclos/reusos entre as unidades;
- diag = operação que transforma um vetor em matriz diagonal;
- Ls = vetor que contém o somatório ao longo das colunas de L_A .

Cada elemento $s_{i,k}$ da matriz de *splits* representa a parcela da vazão que sai da unidade k e entra na unidade i . Por exemplo, o elemento $s_{2,3}$, representa a fração da corrente que sai do processo 3 e entra no processo 2, ou seja,

$$s_{2,3} = \frac{L_{2,3}}{Ls_3} = \frac{L_{2,3}}{W_3 + \sum_{i=1}^6 L_{i,3}} \quad (5.14)$$

As equações que definem a vazão e concentração de cada uma das espécies envolvidas no efluente líquido que sai do sistema são mostradas a seguir:

$$Lout_{\gamma} = \sum_{i=1}^6 W_i \quad (5.15)$$

$$x_{7,j} = \frac{\sum_{i=1}^6 W_i \cdot x_{i,j}}{Lout_7}, \text{ para } j=1,\dots,3 \quad (5.16)$$

Com os resultados da solução do modelo dinâmico, é possível obter, para cada uma das configurações analisadas, a vazão de saída de cada uma das unidades ($Lout_i$, $i=1,\dots,6$), a vazão do efluente líquido que sai do sistema ($Lout_7$) e a concentração de saída das espécies envolvidas (poluente 1, poluente 2 e água) de cada uma das unidades e do efluente líquido que sai do sistema ($x_{i,j}$, $i=1,\dots,7$, e $j=1,\dots,3$).

5.3.4. Especificações, Distúrbios, Variáveis Controladas e Manipuladas

No modelo dinâmico da superestrutura, as seguintes variáveis foram fixadas:

- parâmetro K_p do controlador proporcional (ganho) do *holdup* de cada unidade igual a 100 h^{-1} ;
- valor do *setpoint* para o *holdup* mássico das unidades fixada em 2 t;
- valor do *bias* da vazão mássica de saída de cada unidade igual a 2 t/h.

Para a realização dos testes dinâmicos foram selecionadas variáveis controladas, as quais deseja-se manter em um determinado nível; variáveis manipuladas, que sofrerão ações externas com o objetivo de manter as variáveis controladas em seus níveis; distúrbios típicos dos processos que podem levar as variáveis controladas aos níveis indesejados. A descrição das variáveis manipuladas, controladas e dos distúrbios são apresentados na

Tabela 5.13. Uma representação esquemática do sistema é apresentada na Figura 5.3.

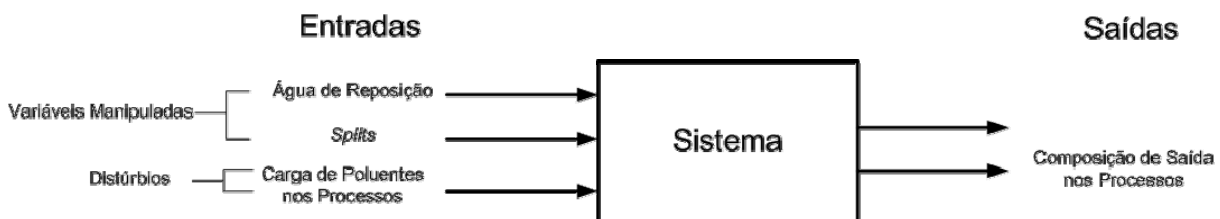


Figura 5.3: Entradas e saídas do sistema.

Tabela 5.13: Variáveis controladas, manipuladas e distúrbios do processo

Variável	Descrição	Papel no Sistema
$x_{1,1}$	Fração mássica do componente 1 na entrada do processo 1	Variável controlada
$x_{2,2}$	Fração mássica do componente 2 na entrada do processo 2	Variável controlada
$x_{3,2}$	Fração mássica do componente 2 na entrada do processo 3	Variável controlada
$x_{4,1}$	Fração mássica do componente 1 na entrada do processo 4	Variável controlada
s_{ij}	Split que sai do processo j e entra no processo i (quando existente)	Variáveis manipuladas
F_i	Vazão de água de reposição (quando existente)	Variáveis manipuladas
$M_{1,1}$	Carga de poluente 1 do processo adicionada ao processo 1	Distúrbios
$M_{2,2}$	Carga de poluente 2 do processo adicionada ao processo 2	Distúrbios
$M_{3,2}$	Carga de poluente 2 do processo adicionada ao processo 3	Distúrbios
$M_{4,1}$	Carga de poluente 1 do processo adicionada ao processo 4	Distúrbios

5.3.5. Linearização dos Modelos Dinâmicos

Para a utilização de ferramentas de análises operacionais disponíveis na literatura, é necessário realizar a linearização do sistema dinâmico não-linear apresentado nas seções anteriores. Sendo conhecidos os modelos que compõem o sistema, é possível linearizá-lo, expandindo as funções não lineares em série de *Taylor* em um determinado ponto operacional e truncado-as no termo linear. O mesmo pode ser feito para as funções que representam as saídas do sistema, gerando assim a representação na forma de espaço de estados. Esta representação é definida da seguinte forma:

$$\begin{aligned}\Delta x_e &= A \cdot \Delta x_e + B \cdot \Delta u \\ \Delta y_s &= C \cdot \Delta x_e + D I \cdot \Delta u\end{aligned}\tag{5.17}$$

onde: xe = estados, ou seja, variáveis que caracterizam o sistema;
 Δxe = variação nos estados em relação ao estacionário;
 Δu = variação nas entradas em relação ao estacionário;
 Δys = variação nas saídas em relação ao estacionário;
 A, B, C, D, I = matrizes resultantes das linearizações.

A partir dos modelos das unidades que compõem o sistema (processos e regeneradores), das matrizes de vazões e de *splits*, das vazões de água de reposição e de água de descarte, procedeu-se com a linearização de cada componente do sistema com o intuito de realizar a conexão entre os mesmos e avaliar a resposta do sistema linearizado. O procedimento realizado para a linearização de cada componente do sistema apresenta-se no Apêndice B.

A partir das matrizes em espaço de estados que representam o modelo linear de cada uma das unidades e das matrizes de reciclo/reuso, a rede integrada foi implementada no *software* MATLAB (THE MATHWORKS, 1999), com auxílio do módulo *μ -toolbox*. O *μ -toolbox* apresenta uma rotina chamada *sysic* que forma a conexão linear das matrizes do sistema, através da resolução da malha de conexões entre as unidades, gerando uma única representação na forma de espaço de estado para todo o sistema. A malha resultante apresenta-se na Figura 5.4, onde as vazões de água fresca, as cargas de poluentes e os *splits* representam os conjuntos de entradas, enquanto que as saídas do sistema são as vazões de saída de cada componente, concentrações de saídas das unidades e vazão por componente no efluente líquido.

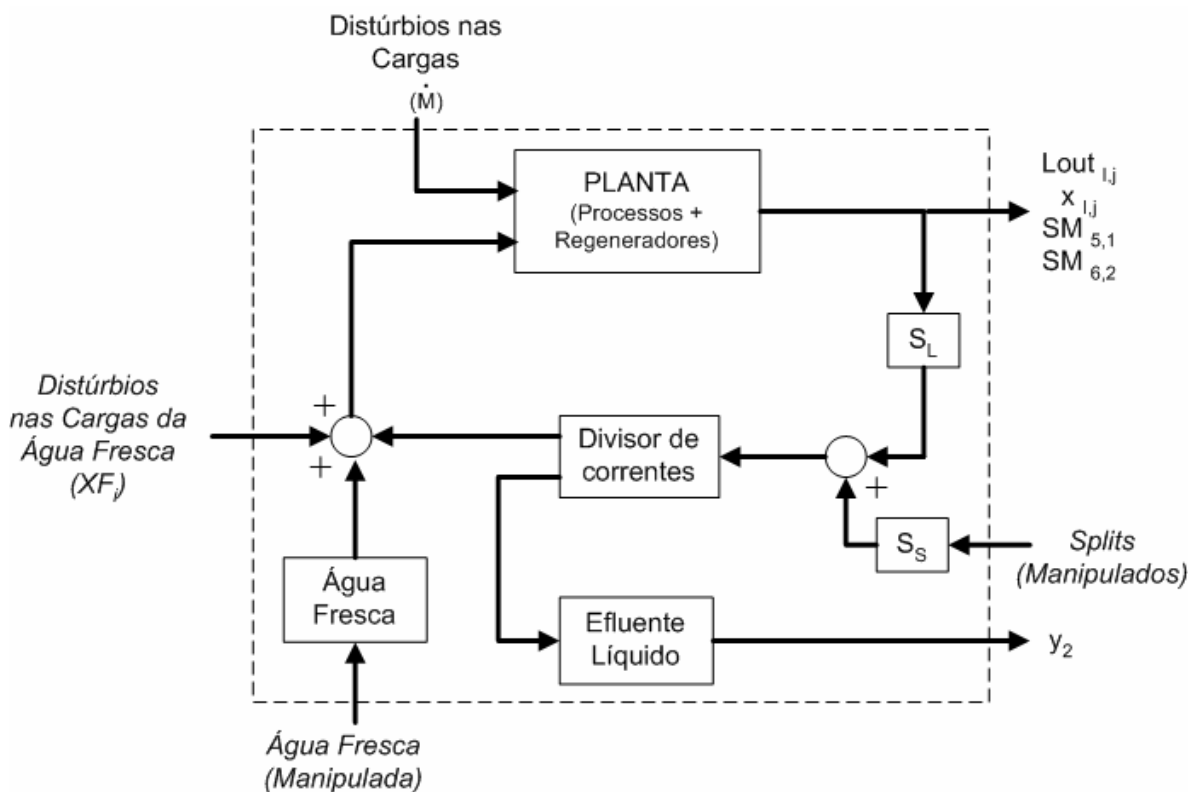


Figura 5.4: Esquema da malha de conexões usada para a linearização da rede.

A linearização tem três aplicações na análise das redes resultantes: (i) análise em malha aberta, ou seja, é avaliada a resposta nas composições controladas quando o sistema for sujeito a distúrbios nas cargas dos poluentes; (ii) avaliação em malha aberta das estruturas obtidas utilizando índices operacionais disponíveis na literatura; (iii) análise em malha fechada, onde são adicionados controladores no sistema, seguido da aplicação de distúrbios nas cargas de contaminantes. O esquema simplificado dos testes em malha aberta e malha fechada são apresentados nas Figuras 5.5 e 5.6, respectivamente.

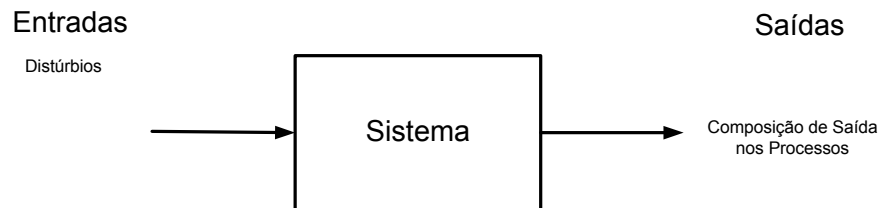


Figura 5.5: Exemplo do sistema em malha aberta.

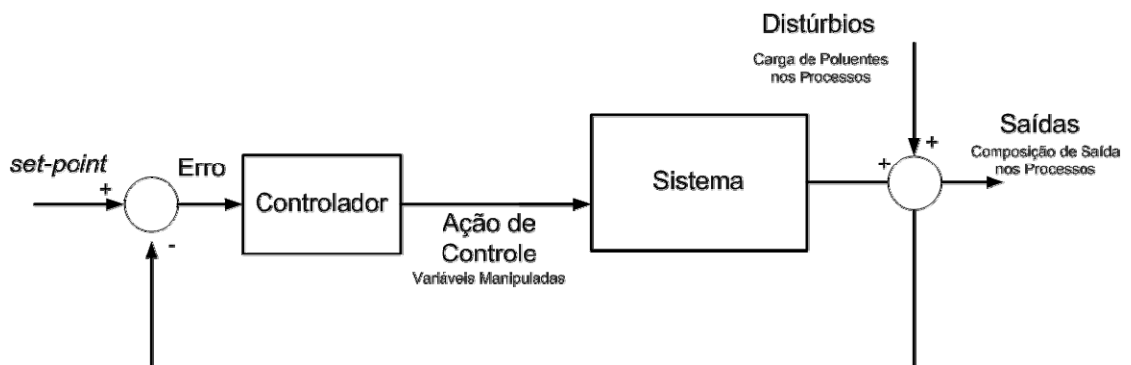


Figura 5.6: Exemplo do sistema em malha fechada.

5.3.6. Resultados dos Problemas em Malha Aberta

Para a realização de testes dinâmicos com os modelos linearizados em malha aberta, foi selecionada somente uma configuração de cada problema. O critério de escolha para cada configuração foi o sistema que apresentou menor valor da função objetivo. Foram selecionadas 10 configurações, 5 para a vazão máxima de água de reposição de 1 t/h e 5 configurações para a vazão de 4 t/h. As configurações selecionadas para os testes dinâmicos são apresentadas nas figuras seguintes, enquanto que suas vazões e composições apresentam-se na Tabela D.13 do Apêndice D.

A partir da representação linearizada em espaço de estado dos sistemas com suas respectivas interconexões (apresentado na Figura 5.4), foram selecionadas as cargas de poluentes nos processos para a realização de distúrbios. Os sistemas em estudo foram submetidos a perturbações do tipo degrau unitário nas cargas de poluentes, com o intuito de avaliar tal

influência nas variáveis controladas (descritas na Tabela 5.13). As respostas dos sistemas são apresentadas da Figura 5.7 a Figura 5.24. Inicialmente os resultados somente com considerações econômicas são comparados entre si, destacando com linhas tracejadas as conexões diferentes entre as estruturas. O mesmo procedimento de destaque foi aplicado para a comparação entre as estruturas com considerações operacionais e econômicas. Através da análise das figuras, é possível observar que a resposta do sistema é coerente com os modelos dos processos e conexões propostos. Como exemplo da representatividade dos modelos, tem-se a Figura 5.7 e Figura 5.8, onde a primeira coluna da Figura 5.8 apresenta a sensibilidade dos processos 1 e 4 ao poluente 1. Como o processo 1 está conectado ao processo 4, é possível observar a sensibilidade de ambos ao mesmo poluente. Esta característica de propagação de distúrbio também está presente no processo 2 e 3 em relação ao contaminante 2. Embora exista um caminho indireto conectando o processo 4 ao 1, este último não sofre influência quando a carga do poluente 1 é perturbada no processo 4, pois existe uma conexão direta do processo 4 com o regenerador 1, que elimina o poluente A do sistema e, conseqüentemente, uma perturbação sobre o mesmo. Da mesma forma, ao realizar um distúrbio no processo 3, visto que este se conecta com o regenerador 2 que remove o poluente que sofreu a perturbação. As mesmas conclusões podem ser obtidas para os demais resultados, visto que a diferença entre os mesmos é basicamente o ganho do sistema no estado estacionário, que varia conforme a composição e vazão de entrada no processo.

Através da comparação dos melhores resultados dos problemas NLP (Figura 5.7), e MINLP (Figura 5.9), é possível observar que neste último problema estão presentes um número menor de conexões. Este fato ocorre possivelmente devido à diferença entre as funções objetivos, que no problema MINLP "penaliza" vazões maiores que 1.10^{-4} e no problema NLP maiores que $1,5.10^{-1}$ (Equação 4.17). É possível observar ainda que o comportamento dinâmico e estacionário das variáveis controladas varia pouco de um problema para outro quando são realizados distúrbios nas cargas de poluentes conforme pode ser observado através da Figura 5.8 e Figura 5.10.

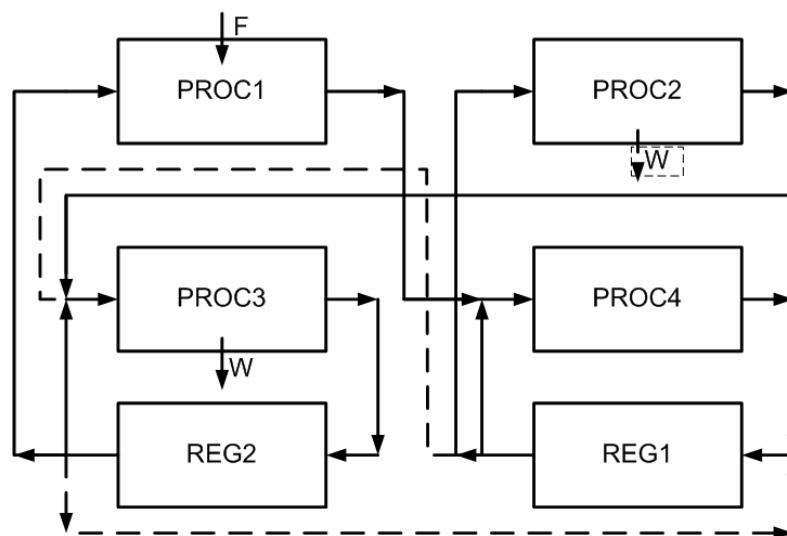


Figura 5.7: Solução obtida dos problemas NLPs completo e reduzido, somente com considerações econômicas para a vazão máxima de água de reposição de 1 t/h.

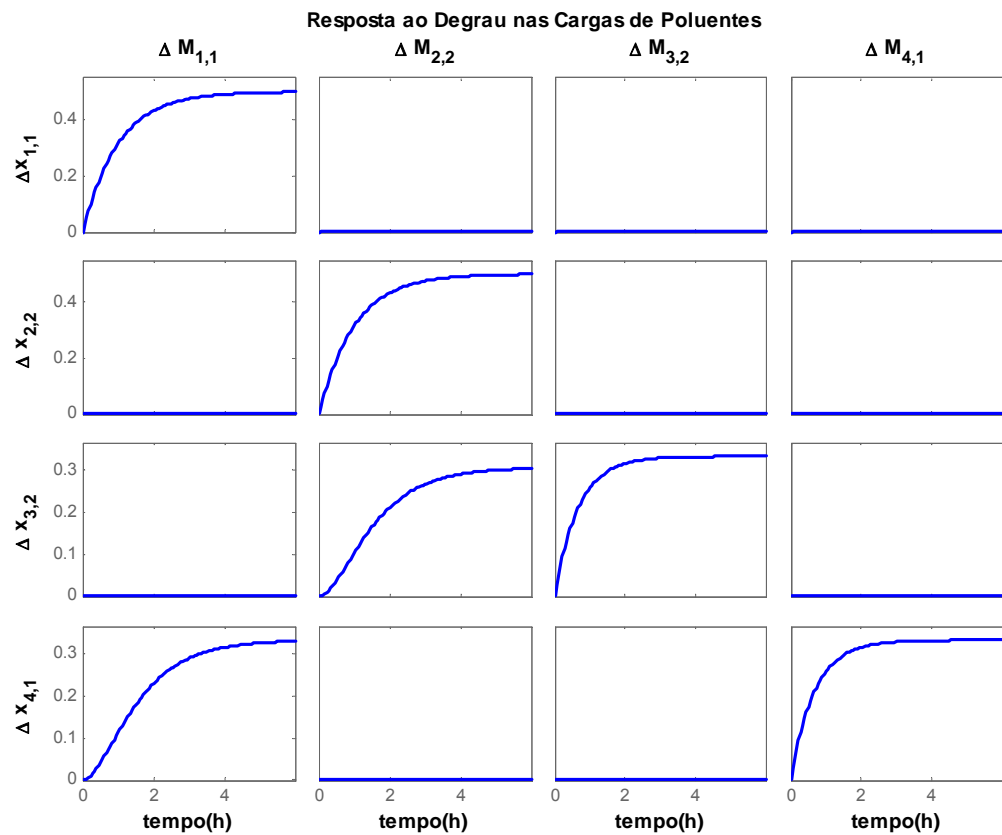


Figura 5.8: Resposta da melhor solução obtida dos problemas NLPs completo e reduzido, somente com considerações econômicas, para a vazão máxima de água de reposição de 1 t/h.

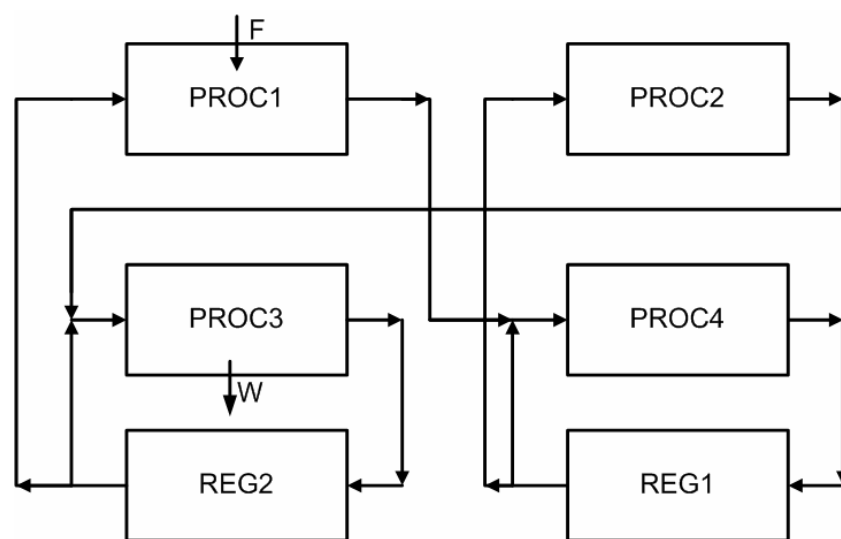


Figura 5.9: Solução obtida dos problemas MINLPs completo e reduzido, somente com considerações econômicas, para a vazão máxima de água de reposição de 1 t/h.

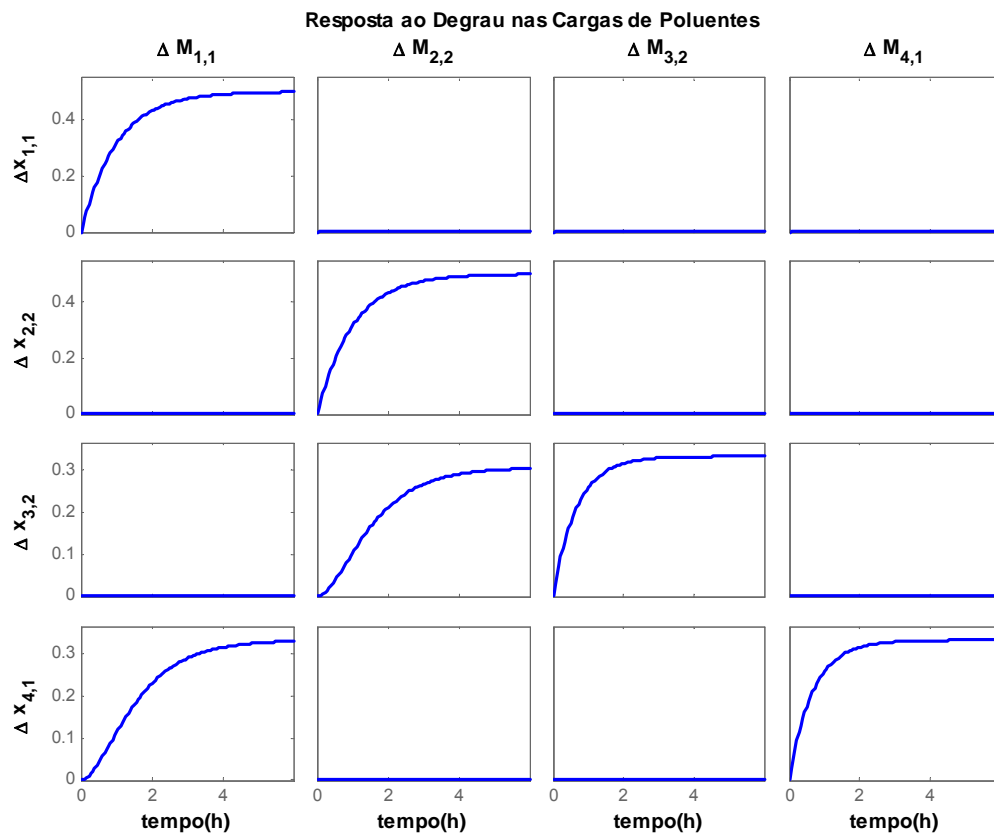


Figura 5.10: Resposta da melhor solução obtida dos problemas MINLPs completo e reduzido, somente com considerações econômicas, para a vazão máxima de água de reposição de 1 t/h.

Através da análise das vazões e configurações do melhor resultado do problema operacional 1, foi possível observar que as conexões com maiores vazões não se diferenciaram muito dos problemas NLP e MINLP, conforme pode ser observado através da análise da Tabela D.13 e Figura 5.11. Tal fato possivelmente ocorreu devido a restrição de vazão máxima de água de reposição que impõe limites que não permitiriam as correntes e conexões fossem mais diversificadas. É possível observar ainda, através da Figura 5.12, que comportamento dinâmico do problema se diferencia pouco dos problemas NLP e MINLP.

O melhor resultado para o problema operacional 2 e 3 (menor valor da função objetivo), possui o mesmo comportamento que o melhor resultado do problema operacional 1, tanto em relação às vazões e conexões, quanto ao comportamento dinâmico, conforme pode ser observado através da Figura 5.13 e Figura 5.14 para o problema operacional 2 e Figura 5.15 e Figura 5.16 para o problema operacional 3.

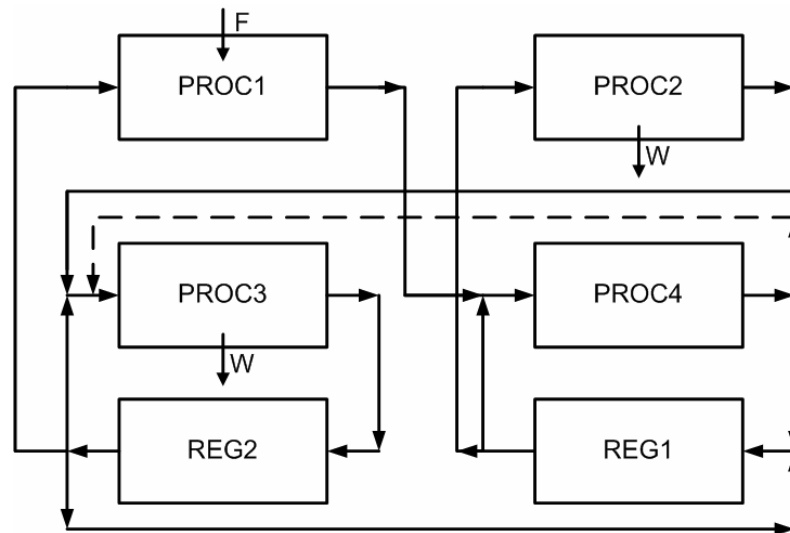


Figura 5.11: Solução obtida para o problema operacional 1 (onde é utilizado os multiplicadores de Lagrange com perturbação na função objetivo interna) para a vazão máxima de água de reposição de 1 t/h.

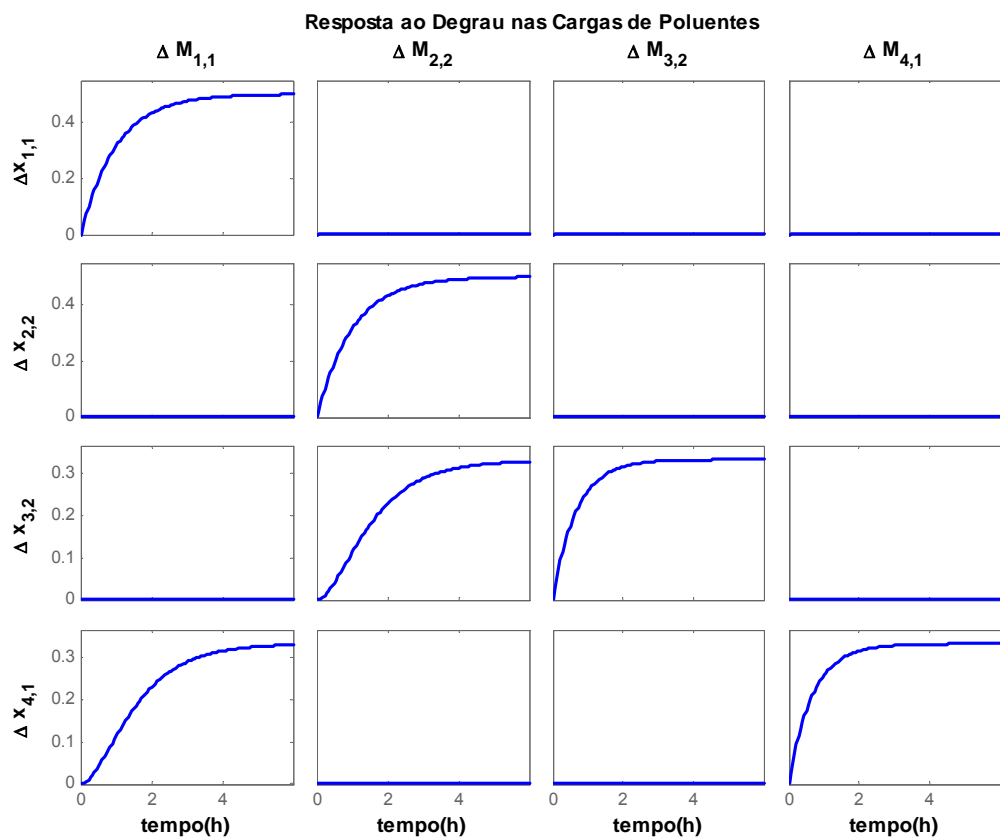


Figura 5.12: Resposta da melhor solução obtida para o problema operacional 1 (onde é utilizado os multiplicadores de Lagrange com perturbação na função objetivo interna), para a vazão máxima de água de reposição de 1 t/h.

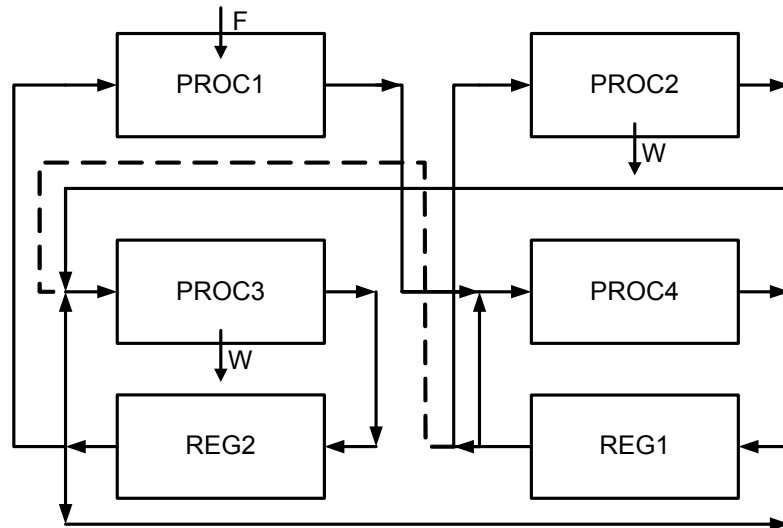


Figura 5.13: Solução do problema operacional 2 (onde é utilizado os multiplicadores de Lagrange sem perturbação na função objetivo interna), para a vazão máxima de água de reposição de 1 t/h.

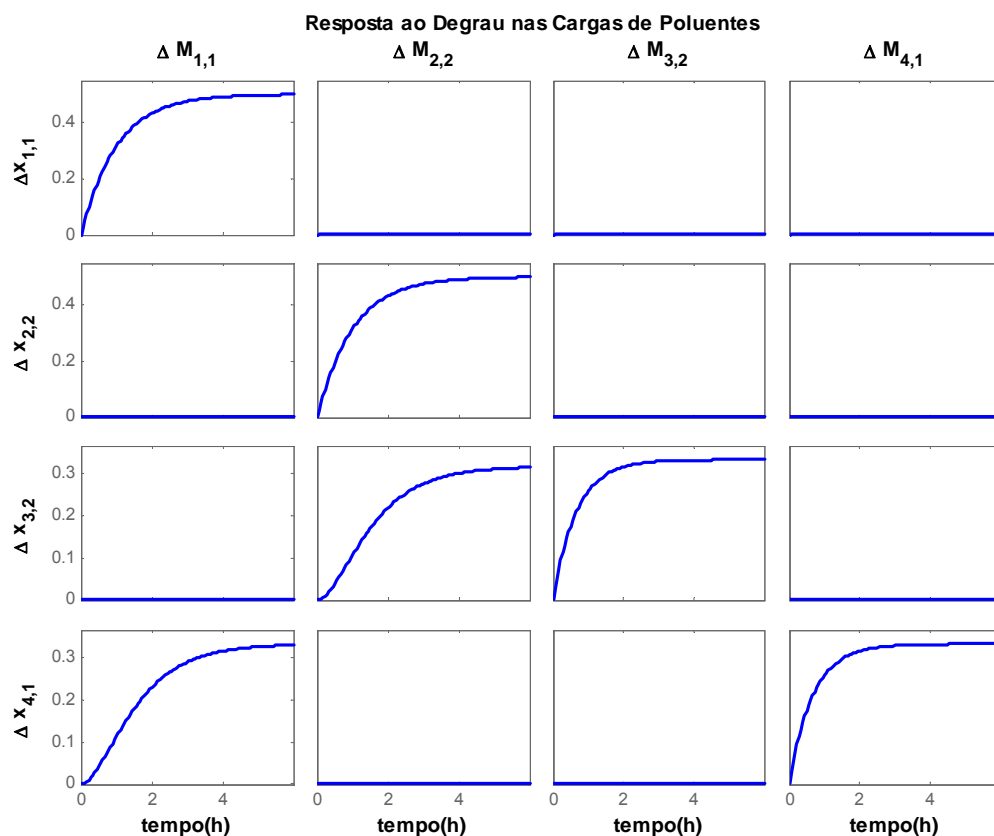


Figura 5.14: Resposta da melhor solução obtida para o problema operacional 2 (onde é utilizado os multiplicadores de Lagrange sem perturbação na função objetivo interna) para a vazão máxima de água de reposição de 1 t/h.

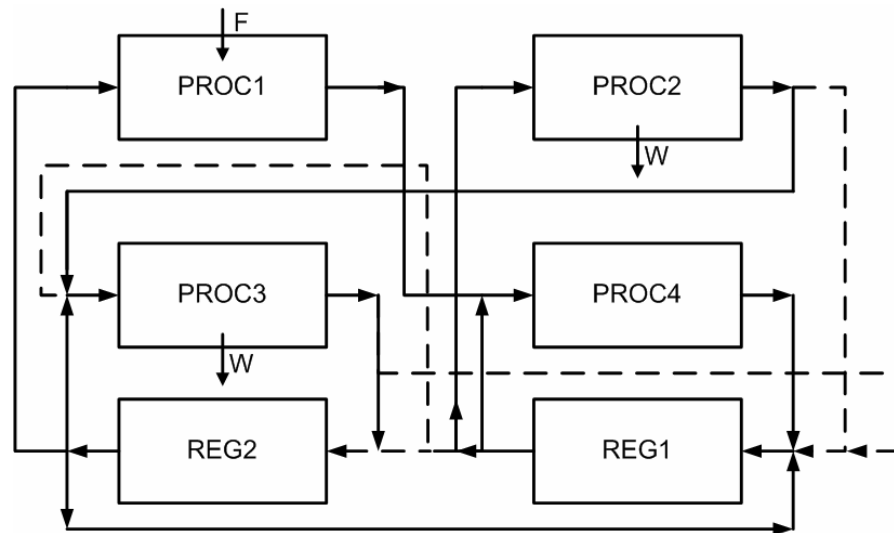


Figura 5.15: Resposta da melhor solução obtida para o problema operacional 3 (onde é usado o RGA calculado a partir da matriz de ganhos por perturbação na função objetivo interna) para a vazão máxima de água de reposição de 1 t/h.

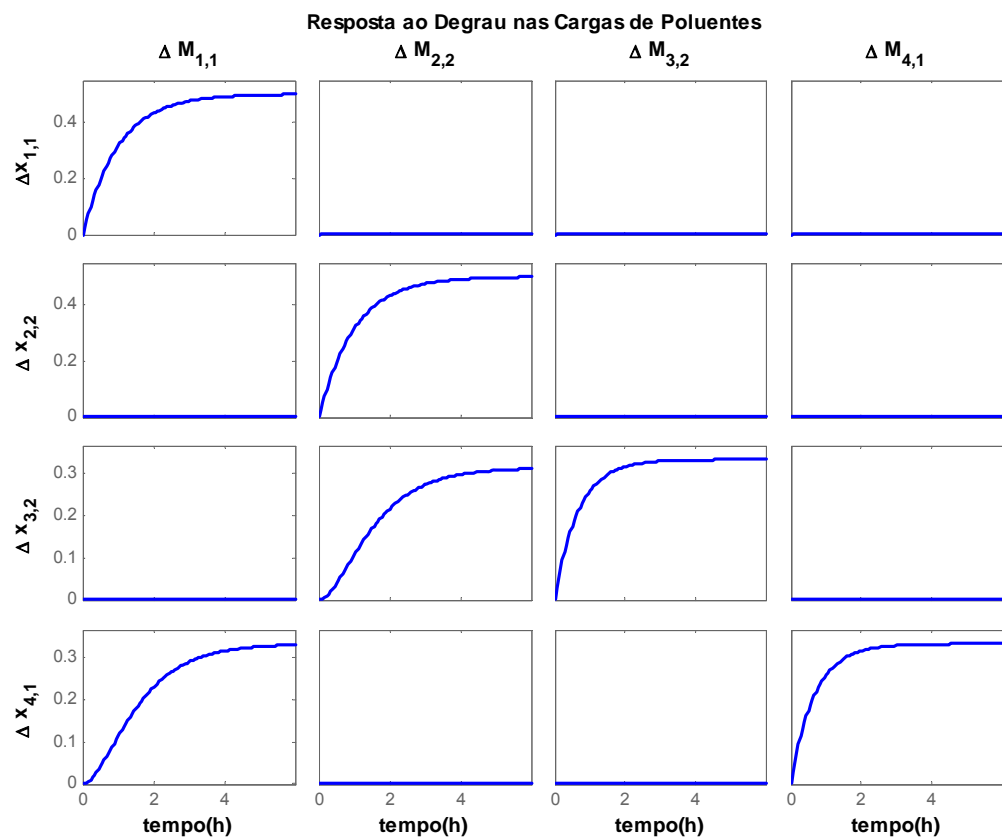


Figura 5.16: Resposta da melhor solução obtida para o problema operacional 3 (onde é usado o RGA calculado a partir da matriz de ganhos por perturbação na função objetivo interna) para a vazão máxima de água de reposição de 1 t/h.

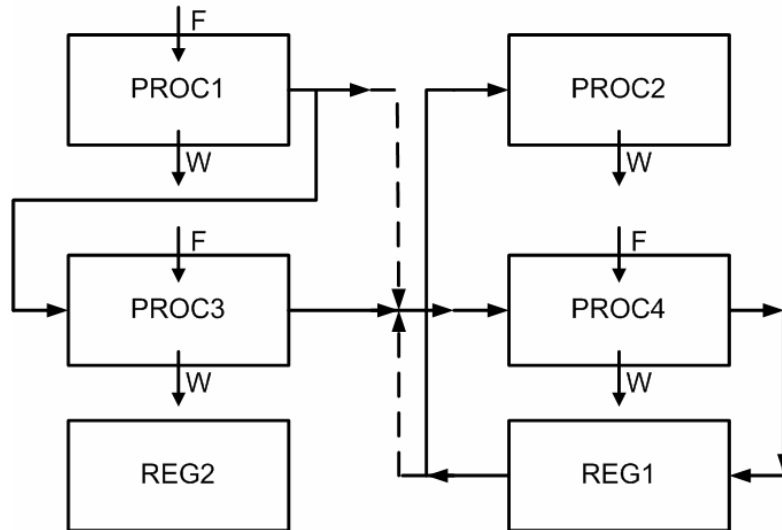


Figura 5.17: Solução obtida dos problemas NLPs completo e reduzido, somente com considerações econômicas, para a vazão máxima de água de reposição de 4 t/h.

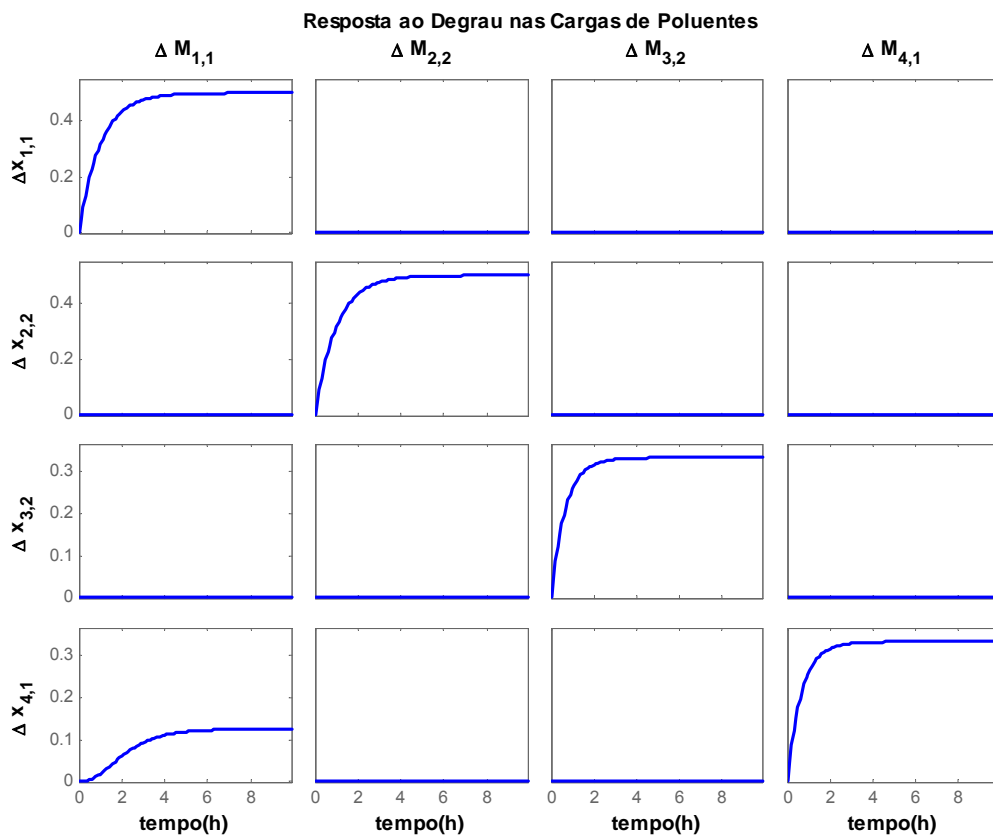


Figura 5.18: Resposta da melhor solução obtida dos problemas NLPs completo e reduzido, somente com considerações econômicas, para a vazão máxima de água de reposição de 4 t/h.

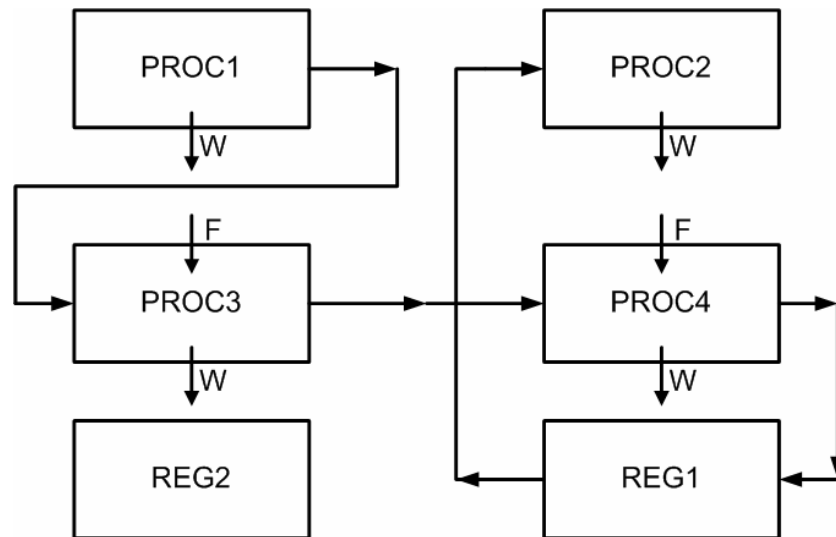


Figura 5.19: Solução obtida dos problemas MINLPs completo e reduzido, somente com considerações econômicas, para a vazão máxima de água de reposição de 4 t/h.

No caso onde a vazão máxima de água de reposição é de 4 t/h, através da comparação entre a Figura 5.17 e Figura 5.19 e dos dados apresentados na Tabela D.13 do Apêndice D, é possível observar que o problema NLP apresenta um número maior de conexões comparado com o problema MINLP, embora as conexões novas adicionadas não possuam vazões muito elevadas. Este comportamento também pôde ser observado no caso onde a vazão máxima de água de reposição é de 1 t/h. Além disso, devido à maior quantidade de água de reposição no sistema, que possibilita correntes mais diluídas, o regenerador 2 não foi utilizado. O comportamento dinâmico das duas implementações não apresentou comportamento significativamente distinto como pode ser observado na Figura 5.18 e Figura 5.20.

No melhor resultado do problema operacional 1 (menor valor da função objetivo), apresentado na Figura 5.21, é possível observar maior número de conexões entre os processos, sendo estas com menores vazões quando comparadas com os problemas MINLP e NLP. O fato de existir um número maior de conexões leva o sistema a diluir perturbações positivas nas cargas de poluentes através das sucessivas misturas ao longo do processo, o que é vantajoso operacionalmente, embora um número maior de conexões levaria a redes com maiores custos. Através da análise da dinâmica do problema operacional 1, apresentado na Figura 5.22, é possível observar que, quando comparado com outras configurações onde a vazão máxima de água de reposição é 4 t/h, a maior diferença apresenta-se na resposta do processo 4 frente a distúrbios na carga de poluentes do processo 1, que teve sua dinâmica distinta em relação aos problemas NLP e MINLP

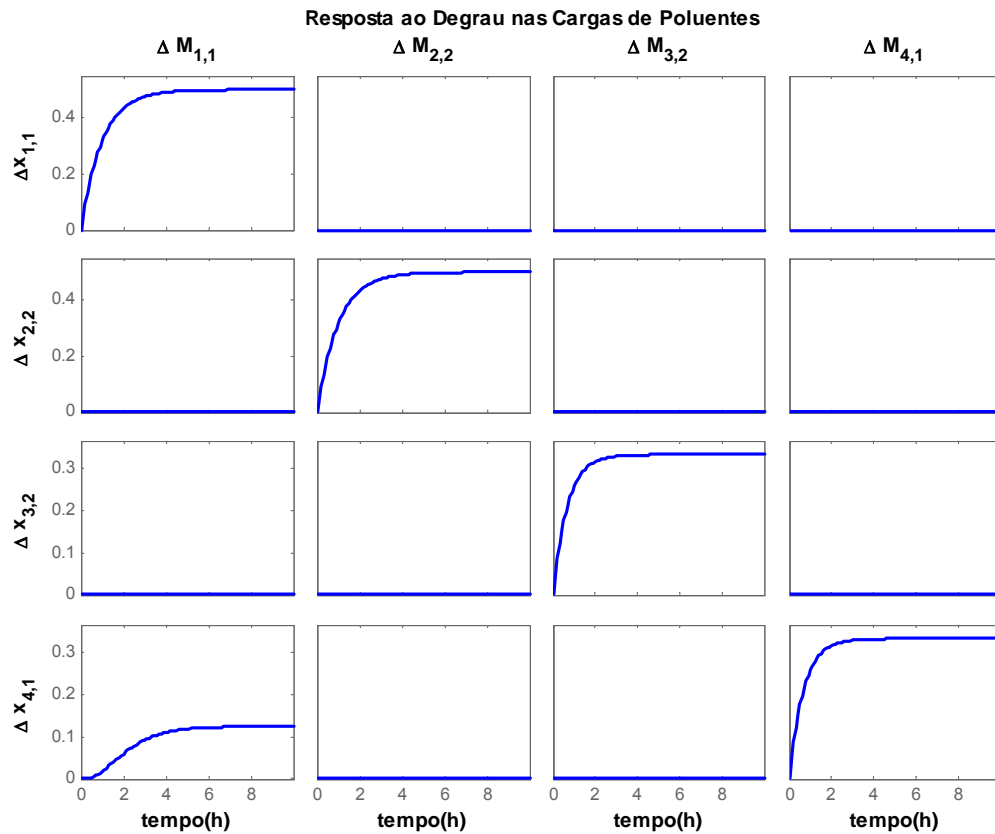


Figura 5.20: Resposta da melhor solução obtida dos problemas MINLPs, completo e reduzido, somente com considerações econômicas para a vazão máxima de água de reposição de 4 t/h.

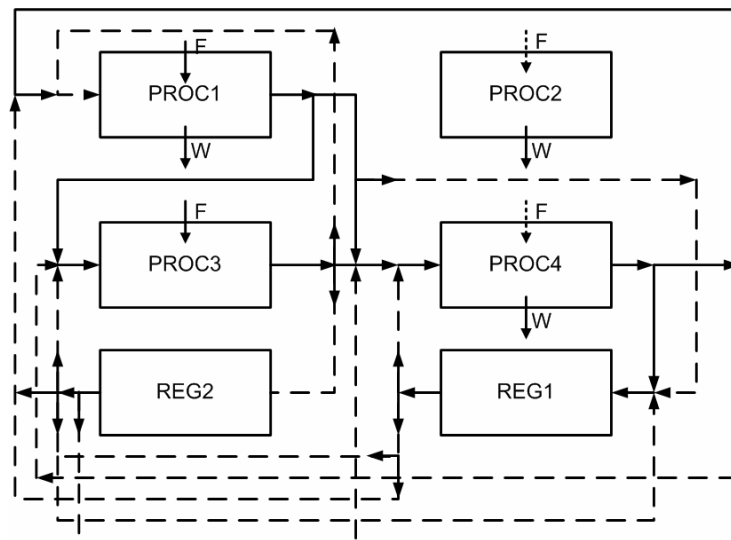


Figura 5.21: Solução obtida para o problema operacional 1 (onde é utilizado os multiplicadores de Lagrange com perturbação na função objetivo interna) para a vazão máxima de água de reposição de 4 t/h.

No melhor resultado do problema operacional 2, apresentado na Figura 5.23, é possível observar um comportamento semelhante ao do problema operacional 1, tanto em

relação às vazões e conexões adicionadas quanto ao comportamento dinâmico. A configuração resultante da rede e seu comportamento dinâmico, são apresentados na Figura 5.23 e Figura 5.24, respectivamente.

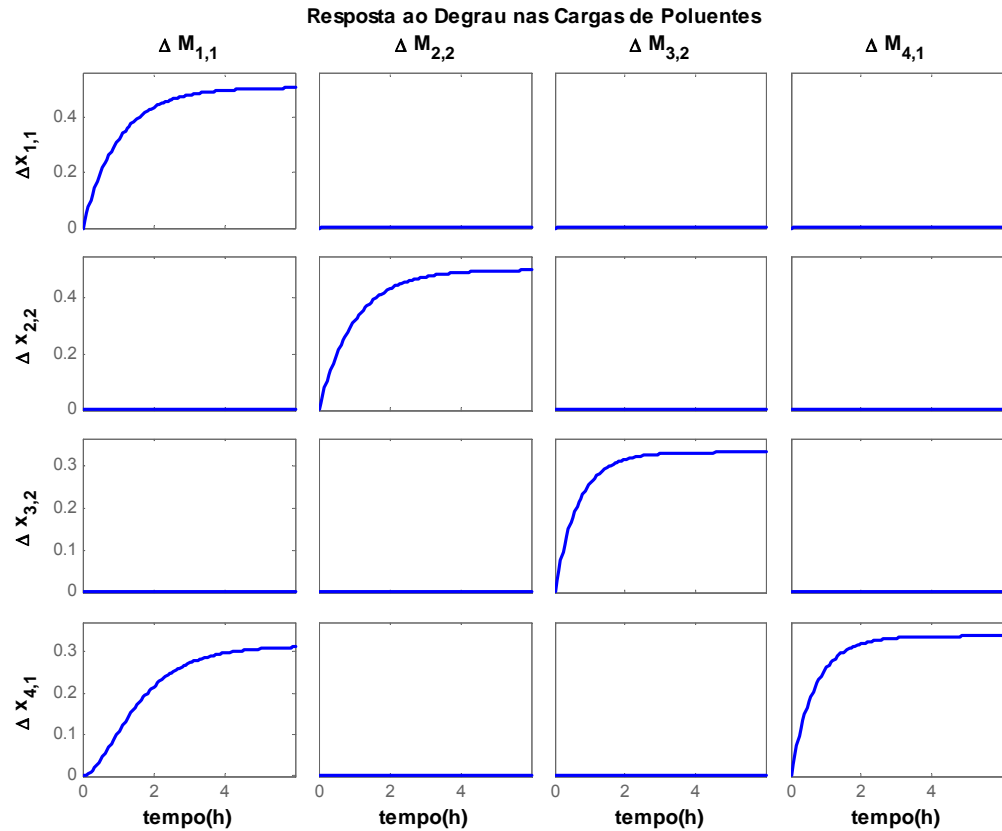


Figura 5.22: Resposta da melhor solução obtida para o problema operacional 1 (onde é utilizado os multiplicadores de Lagrange com perturbação na função objetivo interna) para a vazão máxima de água de reposição de 4 t/h.

O melhor resultado do problema operacional 3 apresentou um número menor de conexões quando comparado com os demais problemas operacionais, além de não utilizar o regenerador 2 no sistema. Quando comparado com os resultados das demais implementações na condição onde a vazão máxima de água de reposição é 4 t/h, o comportamento dinâmico apresentou diferença significativa somente na sensibilidade do processo 4 frente a distúrbios na carga de poluentes do processo 1. A configuração resultante da rede e seu comportamento dinâmico, para o problema operacional 3, são apresentados na Figura 5.25 e Figura 5.26, respectivamente.

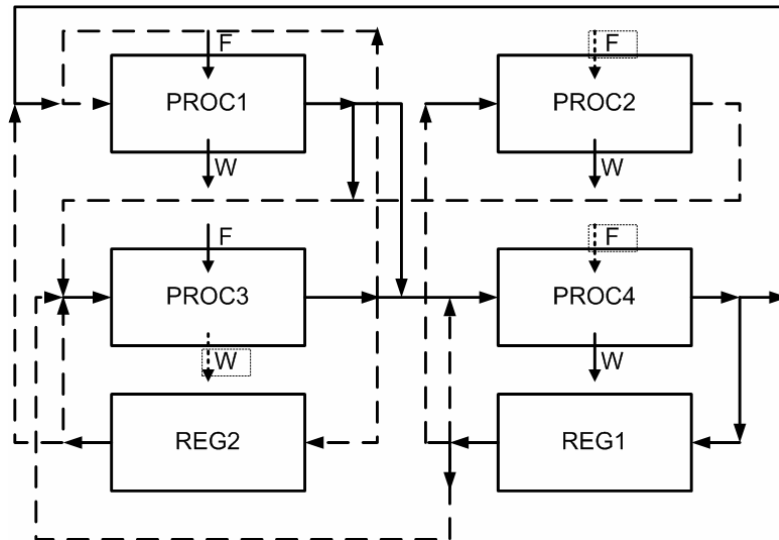


Figura 5.23: Solução obtida para o problema operacional 2 (onde é utilizado os multiplicadores de Lagrange sem perturbação na função objetivo interna) para a vazão máxima de água de reposição de 4 t/h.

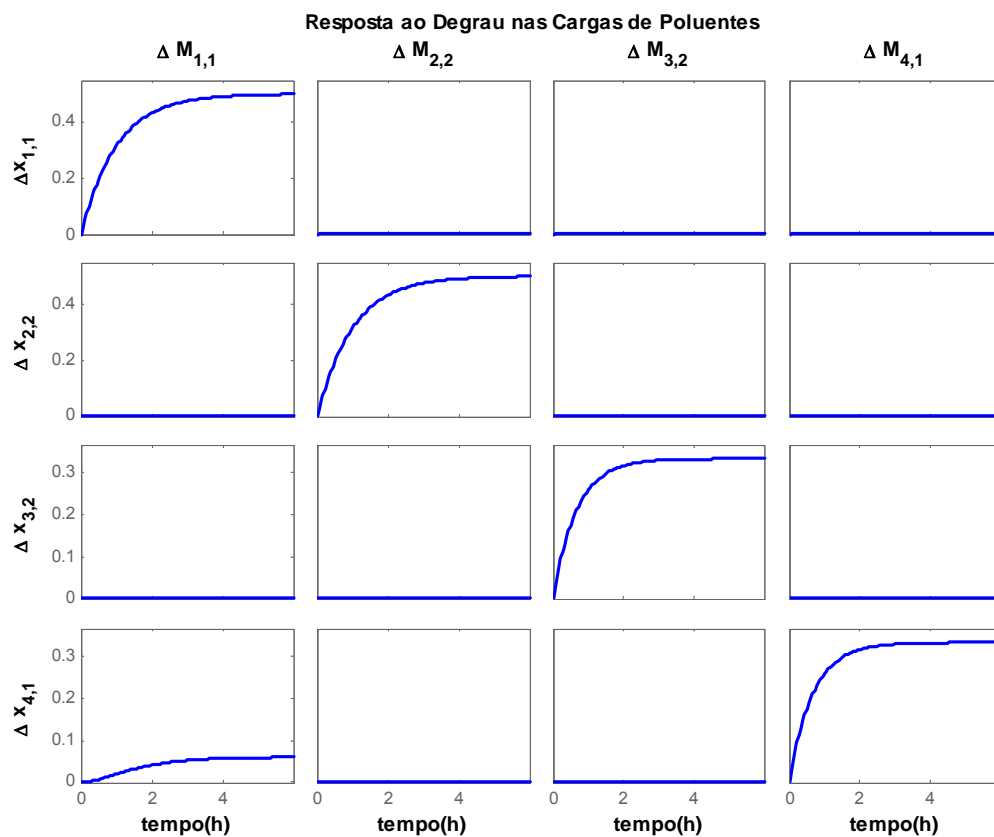


Figura 5.24: Resposta da melhor solução obtida para o problema operacional 2 (onde é utilizado os multiplicadores de Lagrange sem perturbação na função objetivo interna) para a vazão máxima de água de reposição de 4 t/h

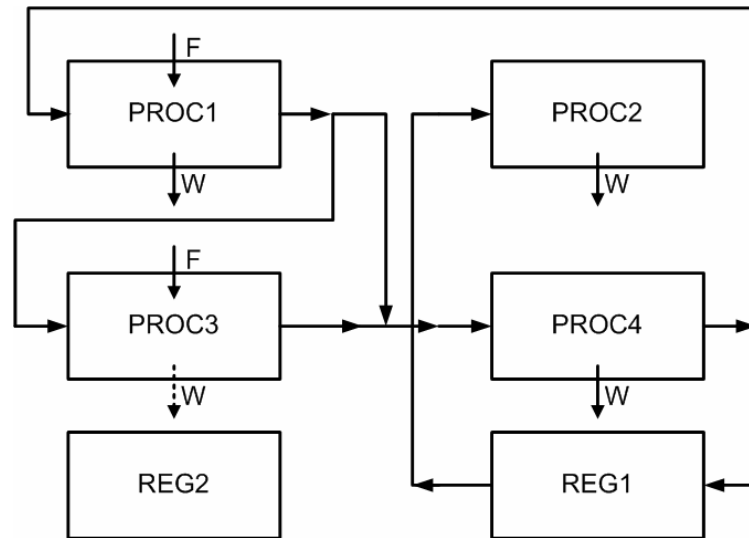


Figura 5.25: Solução obtida para o problema operacional 3 (onde é usado o RGA calculado a partir da matriz de ganhos por perturbação na função objetivo interna) para a vazão máxima de água de reposição de 4 t/h.

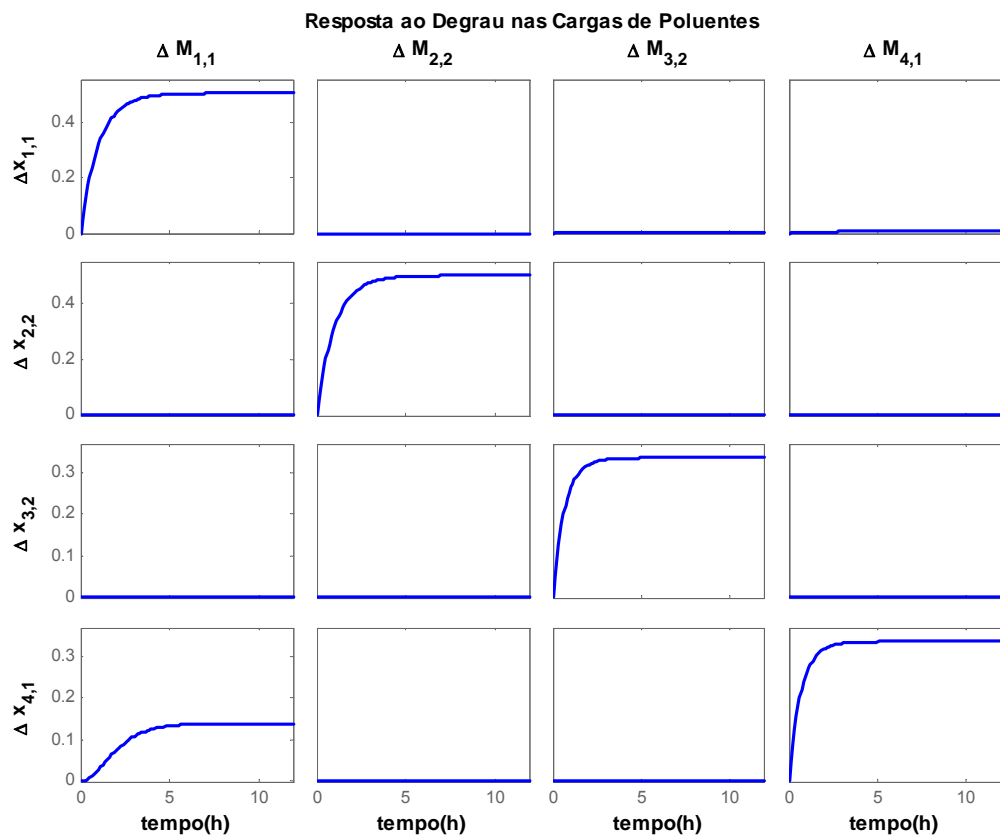


Figura 5.26: Resposta da melhor solução obtida para o problema operacional 3 (onde é usado o RGA calculado a partir da matriz de ganhos por perturbação na função objetivo interna) para a vazão máxima de água de reposição de 4 t/h.

Além de realizar testes em malha aberta, foi avaliada a influência do aumento do tempo característico dos processos, definido com Ma_i/Lin_i , e do ganho do controlador, Kp_i , sobre o sistema. No primeiro teste, foi utilizado o melhor resultado da implementação operacional 1, cuja configuração é apresentada na Figura 5.11. Nesta configuração foi observado que, para Ma_i de 5 t, e ganho de $500.h^{-1}$, sistema torna-se instável em malha aberta conforme pode ser observado pela Figura 5.27. Este fato ocorre porque processos integrados massivamente formam recilos que constituem malhas com realimentação (ou *feed-back*) positivas, gerando sistemas com estabilidade condicional. Neste tipo de situação é observado que, em uma determinada faixa de ganho e/ou tempo característico, o sistema apresenta-se estável em malha aberta e em outras faixas operacionais o mesmo se torna instável; neste último caso é necessário a adição de um controlador para a estabilização. A instabilidade devido ao surgimento de um pólo no semi-plano direito poderia ocorrer devido ao não cancelamento de um pólo e um zero devido à tolerância numérica da função *minreal* do Matlab. Para descartar esta possibilidade, a precisão para o cancelamento foi variada de 1.10^{-8} a 1.10^1 , sendo que o fenômeno da instabilidade continuou presente, o que descarta a possibilidade de instabilidade devido a erros de precisão numérica. Na Figura 5.28 é apresentado um sistema com os mesmos parâmetros (ganho do controlador proporcional e tempo característico) do caso anterior instável, porém com uma configuração diferente, correspondente ao melhor resultado da implementação NLP completo, cuja configuração é apresentada na Figura 5.7. Neste caso é possível perceber que o sistema é estável em malha aberta, onde as conexões afetam o ganho total do sistema, levando o processo como um todo à faixa de estabilidade.

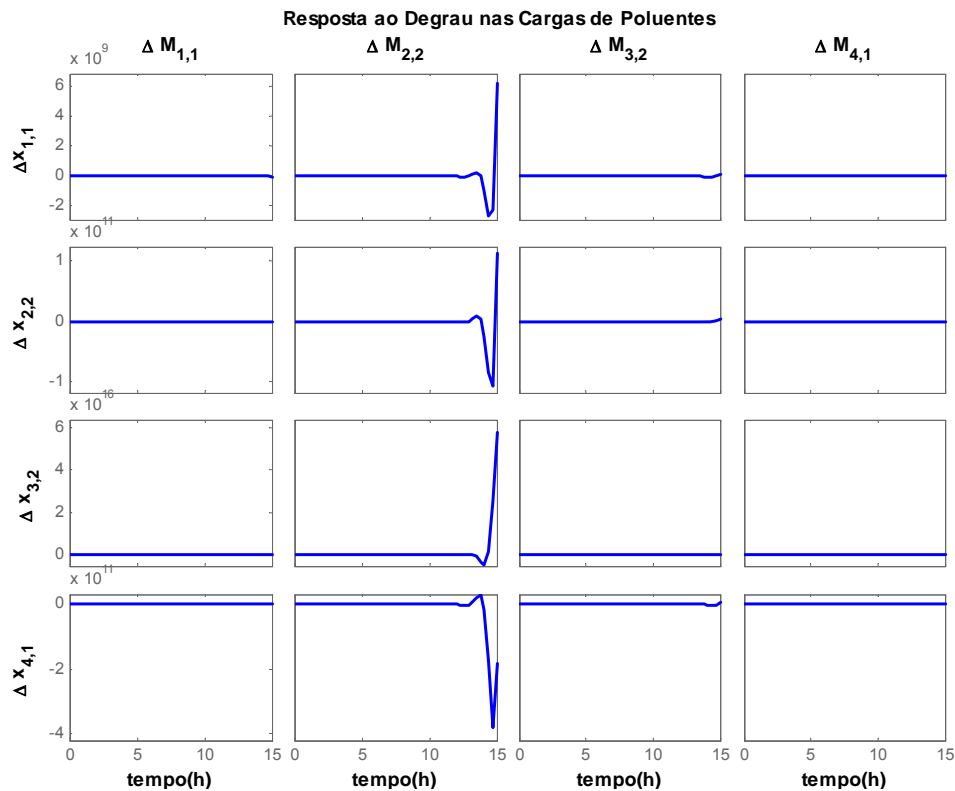


Figura 5.27: Resposta do melhor resultado da implementação operacional 1 em malha aberta utilizando $Ma_i=5t$ e $Kp_i=500.h^{-1}$.

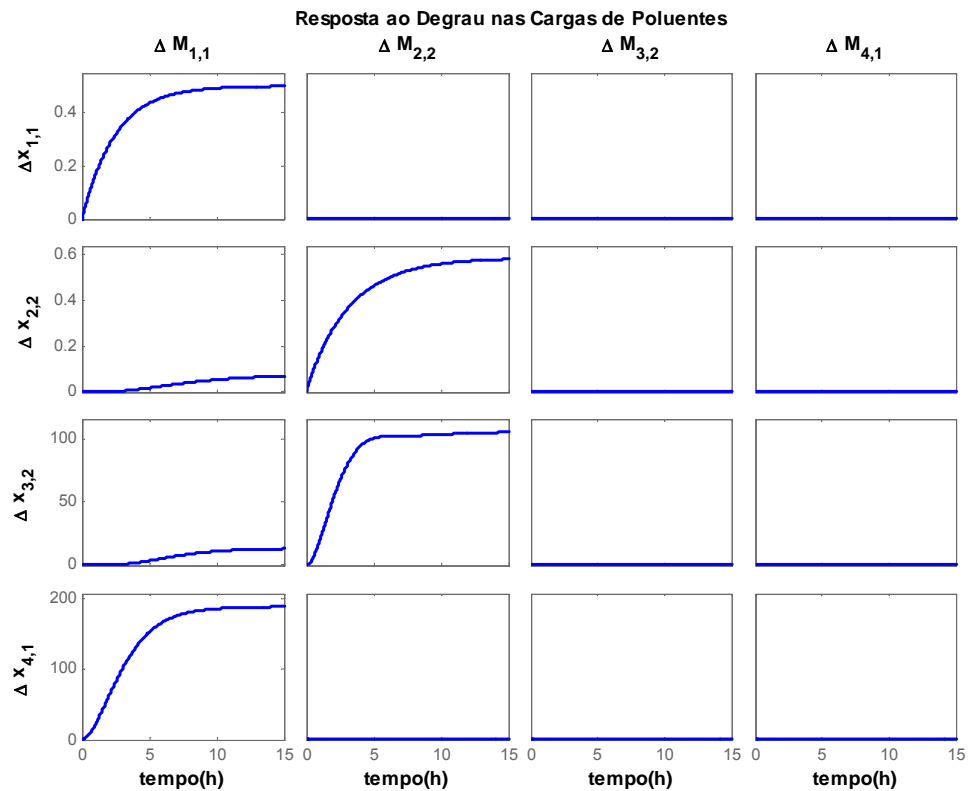


Figura 5.28: Resposta do melhor resultado da implementação NLP original em malha aberta utilizando $Ma_i=5t$ e $Kp_i=500.h^{-1}$.

5.3.7. Resultados dos Problemas em Malha Fechada

Na análise em malha fechada, um controlador é adicionado ao sistema, tomando ações nas variáveis manipuladas (*splits* e vazões de água de reposição) para corrigir o erro entre o *set-point* e as variáveis de saída (composições), conforme apresentado na Figura 5.6. A análise de sistemas em malha fechada consiste na abordagem mais utilizada para a avaliação de operabilidade de processos, além de representar cenários industriais reais, onde controladores estão presentes para manter os processos em suas faixas operacionais de segurança e de especificação dos produtos. Como a análise em malha fechada é mais complexa que a análise em malha aberta, foram selecionados somente alguns problemas para realizar tal avaliação. O critério de seleção foi o grau de integração dos problemas, pois quando a vazão máxima de água de reposição é de 1 t/h, o sistema possui mais conexões que podem dificultar a operabilidade, por isso foram selecionadas 5 configurações nestas condições (duas relativas à resposta do problema NLP original, problema operacional 1, problema operacional 2 e problema operacional 3) e 3 configurações, com a condição da vazão máxima de água de reposição de 4 t/h (relativa à resposta do problema NLP original, problema operacional 2 e problema operacional 3). Cabe ressaltar que na melhor resposta do problema NLP original para a vazão máxima de água de reposição de 4 t/h, obtida a partir da otimização, não foi selecionada a configuração com o menor valor da função objetivo para a avaliação dinâmica, pois nestas condições de menor integração ocorre menor propagação de distúrbios, levando a matriz de ganhos do modelo dinâmico do sistema a apresentar linhas

linearmente dependentes, sendo que a resolução deste tipo de problema não foi tratada neste trabalho. Tal fato, presente na modelagem dinâmica, não havia sido previsto no problema de otimização e para contorná-lo foi selecionada a segunda melhor configuração, onde tal fato não foi observado.

Critério de Seleção de Variáveis Manipuladas

Como o controlador toma ações nas variáveis manipuladas, é necessário realizar a seleção das mesmas. Os critérios de seleção das variáveis manipuladas foram distintos para os sistemas resultantes dos problemas com considerações econômicas e para os sistemas com considerações econômicas e operacionais. As variáveis manipuladas são os *splits* (ou divisores de correntes) que deixam as unidades e alimentam os processos ou regeneradores os quais se deseja controlar. Cabe ressaltar que, na estrutura de controle por *splits*, a vazão que entra em um divisor de corrente é constante, logo, ao aumentar uma vazão de saída, as demais vazões devem ser reduzidas proporcionalmente. Uma consequência desta limitação é que em unidades onde está presente somente uma conexão de saída, esta não pode ser manipulada, pois a corrente que entra em um divisor deve ter vazão constante.

O primeiro critério de seleção, válido para todos os problemas, foi a escolha das correntes que deixam os *splits* e alimentam os processos controlados, com vazão maior que 10 kg/h. Para os problemas com considerações econômicas, o primeiro critério de seleção foi a escolha de correntes de água de reposição que alimentam os processos, no caso onde estas existam. Caso uma corrente de água de reposição não esteja presente, o segundo critério é selecionar a corrente que alimenta o processo e possui a maior vazão.

Para os sistemas obtidos dos problemas com considerações operacionais, os critérios de seleção são baseados nos multiplicadores de Lagrange da função objetivo interna. Conforme apresentado no Capítulo 4, os multiplicadores de Lagrange representam a sensibilidade da Função de Lagrange em relação às restrições, quando o processo é submetido a distúrbios nas cargas de poluentes (implementação operacional 1) ou ao aumento das cargas de contaminantes dos processos (implementação operacional 2).

Ao nível de otimização interna, quando o sistema sofre aumento nas cargas de poluentes, este tenta rearranjar as vazões para satisfazer as restrições de poluentes na entrada dos processos. Como as vazões estão propositalmente fixas sob a forma de restrições, estas vazões alcançarão as restrições ativando-as. Quando o multiplicador de Lagrange da restrição que fixa a vazão em seu limite inferior ou superior (Equações 4.31, 4.32, 4.34 e 4.35) não é nulo, indica que tal restrição está ativa, ou seja, que a vazão encontra-se na restrição e é sensível ao aumento nas cargas de poluentes. Quando o multiplicador de Lagrange da restrição que fixa a vazão em seu limite inferior ou superior é nulo, indica que a corrente relativa àquela restrição não é sensível ao aumento nas cargas de contaminantes no sistema. Existem dois motivos principais para uma restrição não encontrar-se ativa, o primeiro indica que a corrente relativa àquela restrição tem vazão baixa e não consegue diluir o poluente na entrada do processo, o segundo é que a corrente possui uma vazão alta com concentração baixa e dilui suficientemente o poluente na entrada do processo de modo que não há necessidade de modificá-la, neste último caso, esta corrente é uma boa candidata à variável

manipulada. Para diferenciar tais casos, é necessário avaliar a vazão e a composição das correntes. Quando o multiplicador de Lagrange possuir valor pequeno, ou seja, a corrente é pouco sensível a distúrbios nas cargas de poluentes, logo não é interessante utilizá-la como variável manipulada. O valor elevado do multiplicador de Lagrange pode decorrer de dois motivos: o primeiro é devido à concentração alta e vazão baixa, o que leva o otimizador a diminuir a corrente até a restrição inferior, e o segundo deve-se ao fato da corrente possuir concentração baixa e vazão alta, neste caso o otimizador é levado a aumentar a mesma até chegar na restrição.

Baseados nestes fatos, os critérios de seleção foram classificados conforme sua importância relativa, tal ordenamento apresenta-se na Tabela 5.14. No caso da implementação operacional 3, a otimização interna realiza perturbações nas correntes presentes de uma determinada configuração (determinada pela otimização externa) e avalia como esta perturbação afeta as variáveis controladas. Nesta implementação, a escolha das variáveis manipuladas são determinadas de forma que a variável escolhida (a corrente) é a que apresenta o menor ganho para a variável controlada, calculando-se assim a matriz de ganhos relativo e o índice é devolvido à otimização externa (Equação 4.44). É possível observar que o resultado do problema operacional 3, além de fornecer a configuração da rede, apresenta ainda as variáveis manipuladas.

Tabela 5.14: Critérios de seleção das variáveis manipuladas para os problemas operacionais 1 e 2.

Critério Principal	Critério Secundário	Critério Terciário
Vazão Maior que 0,01 t/h	Corrente que chegou na restrição superior da otimização interna ($\lambda \neq 0$).	Maior λ
	Corrente com vazão elevada que não chegou à restrição ($\lambda = 0$) com vazão alta e concentração baixa.	Maior vazão
	Corrente que chegou na restrição inferior da otimização interna ($\lambda \neq 0$).	

Utilizando os critérios apresentados na Tabela 5.14, foram propostas estruturas de controle para cada configuração. No caso do resultado do problema NLP, foram propostas duas estruturas. Na primeira estrutura, "NLP – Fmáx=1-A", procurou-se deixar as variáveis manipuladas semelhantes à estrutura "Oper 1 – Fmáx=1" com o objetivo de avaliar se a utilização da estrutura de controle, a partir do resultado de um problema operacional, poderia servir como critério de seleção de variáveis manipuladas de um problema sem considerações operacionais. Na segunda estrutura, "NLP – Fmáx=1-B", foi utilizado o critério de seleção de

variáveis manipuladas de problemas com considerações econômicas. As variáveis manipuladas para cada uma das estruturas são apresentadas na Tabela 5.15

Tabela 5.15: Seleção das variáveis manipuladas para cada tipo de problema.

Estrutura	Variáveis Manipuladas	Variáveis Controladas
NLP – F _{máx} =1-A	$L_{1,6}$	$x_{1,1}$
	$L_{2,5}$	$x_{2,2}$
	$L_{3,2}$	$x_{3,2}$
	$L_{4,5}$	$x_{4,1}$
NLP – F _{máx} =1-B	F_1	$x_{1,1}$
	$L_{2,5}$	$x_{2,2}$
	$L_{3,6}$	$x_{3,2}$
	$L_{3,4}$	$x_{4,1}$
Oper 1 – F _{máx} =1	$L_{1,6}$	$x_{1,1}$
	$L_{2,5}$	$x_{2,2}$
	$L_{3,2}$	$x_{3,2}$
	$L_{3,4}$	$x_{4,1}$
Oper 2 – F _{máx} =1	$L_{1,6}$	$x_{1,1}$
	$L_{2,5}$	$x_{2,2}$
	$L_{3,2}$	$x_{3,2}$
	$L_{4,5}$	$x_{4,1}$
Oper 3 – F _{máx} = 1	$L_{1,6}$	$x_{1,1}$
	$L_{2,5}$	$x_{2,2}$
	$L_{3,6}$	$x_{3,2}$
	F_1	$x_{4,1}$
NLP – F _{máx} = 4	F_1	$x_{1,1}$
	F_2	$x_{2,2}$
	F_3	$x_{3,2}$
	$L_{4,1}$	$x_{4,1}$
Oper 2 – F _{máx} = 4	F_1	$x_{1,1}$
	F_2	$x_{2,2}$
	$L_{3,6}$	$x_{3,2}$
	$L_{4,1}$	$x_{4,1}$
Oper 3 – F _{máx} = 4	$L_{4,3}$	$x_{1,1}$
	$L_{1,4}$	$x_{2,2}$
	$L_{4,1}$	$x_{3,2}$
	$L_{5,4}$	$x_{4,1}$

Avaliação das Estruturas através de Índices Operacionais

Após a determinação das estruturas de controle, foi realizada a avaliação das mesmas utilizando índices operacionais disponíveis na literatura. As estruturas selecionadas foram sujeitas ao cancelamento de zeros e pólos através da função do *Matlab minreal* (presente no módulo μ -Toolbox). Os índices operacionais selecionados foram o RGA (estacionário e dinâmico), o condicionamento mínimo (estacionário e dinâmico), os pólos no semi-plano direito e os zeros de transmissão. Mais detalhes sobre a interpretação da matriz RGA suas propriedades e relação com outros índices de controlabilidade podem ser encontrados em Ogunnaike e Ray (1994), Skogestad e Postlethwaite (1996) e Grosdidler e Morari (1985). Os índices dinâmicos, RGA e condicionamento mínimo, foram avaliados na mesma faixa de frequência e são apresentados da Figura 5.29 a Figura 5.36. O papel dos índices operacionais

citados para seleção de estruturas de controle e projeto de controladores é apresentado em Witcher (1977) (RGA dinâmico), Hovd e Skogestad (1992), Farina (2000) (condicionamento, condicionamento mínimo, RGA, pólos e zeros), Trierweiler (1997) (condicionamento e condicionamento mínimo), Waller; Sagfors e Waller (1994) (condicionamento e condicionamento mínimo) e Oliveira (2002) (RGA e condicionamento mínimo).

Os sistemas estudados não apresentaram pólo no semi-plano direito, o que vem a demonstrar que os mesmos são estáveis em malha aberta, ou seja, uma perturbação limitada em alguma variável de entrada resultará em uma resposta limitada na variável de saída. Os zeros de transmissão são apresentados na Tabela 5.16. A matriz RGA estacionária para as estruturas selecionadas são apresentadas da Tabela 5.17 a Tabela 5.24, onde são apresentados os elementos da matriz RGA, $\beta_{i,j}$, sendo que as colunas, j , são as entradas e as linhas, i , são as saídas.

Tabela 5.16: Zeros de transmissão para os sistemas selecionados.

Estrutura	Zeros de Transmissão no Semi-Plano Direito	Direção de Entrada dos Zeros	Direção de Saída dos Zeros
NLP – Fmáx = 1-A	-	-	-
NLP – Fmáx = 1-B	35,47	-0,12; 0,59; -0,55; 0,58	-0,66; 0,33; 0,34; 0,58
Oper 1 – Fmáx = 1	55,38, 1,85.10 ¹⁰ *	-0,18; 0; 0,98; 0,02	0,84; -0,21; -0,14; 0,48
Oper 2 – Fmáx = 1	54.31	-0,18; -2,06.10 ⁻⁹ ; 0,98; -2,55.10 ⁻³	0,95; -0,12; -0,12; -0,27
Oper 3 – Fmáx = 1	12	-0,7; -0,71 0,07; 0,06	0,94; -0,18 -0,18; -0,23
NLP – Fmáx = 4-A	-	-	-
Oper 2 – Fmáx = 4	53,92	0,24; 0,18; -0,14; -0,94	2,9.10 ⁻³ ; -2,4.10 ⁻⁴ ; -0,05; -0,99
Oper 3 – Fmáx = 4	-	-	-

* direções não apresentadas

Tabela 5.17: RGA estacionário para a estruturas "NLP Fmáx =1-A".

i/j	$\beta_{i,j}$			
	j=1	j=2	j=3	j=4
i=1	8,560	0,000	-7,560	0
i=2	19,986	3,329	-22,315	0
i=3	-27,546	-2,328	30,875	0
i=4	0	0	0	1

Tabela 5.18: RGA estacionário para a estruturas "NLP Fmáx =1-B".

i/j	$\beta_{i,j}$			
	j=1	j=2	j=3	j=4
i=1	0,439	-0,004	0,565	0
i=2	0,039	0,855	0,107	0
i=3	0,523	0,149	0,328	0
i=4	0	0	0	1

Tabela 5.19: RGA estacionário para as estrutura "Oper 1 – Fmáx=1".

i/j	$\beta_{i,j}$			
	j=1	J=2	j=3	j=4
i=1	0,940	0	0,054	0,007
i=2	-0,005	0,005	0,012	0,988
i=3	0,066	0	0,934	0
i=4	0	0,995	0	0,005

Tabela 5.20: RGA estacionário para as estrutura "Oper 2 – Fmáx=1".

i/j	$\beta_{i,j}$			
	j=1	J=2	j=3	j=4
i=1	0,903	0	0,051	0,046
i=2	-0,032	0,018	0,083	0,931
i=3	0,130	0,000	0,866	0,004
i=4	0	0,981	0	0,019

Tabela 5.21: RGA estacionário para as estrutura "Oper 3 – Fmáx=1".

i/j	$\beta_{i,j}$			
	j=1	j=2	j=3	j=4
i=1	0	0,064	0,977	-0,041
i=2	0	0,747	0,13	0,123
i=3	0	0,189	-0,107	0,918
i=4	1	0	0	0

Tabela 5.22: RGA estacionário para a estrutura "NLP– Fmáx =4-A".

i/j	$\beta_{i,j}$			
	j=1	J=2	j=3	j=4
i=1	0,996	0	-0,002	0,005
i=2	0	1	0	0
i=3	0,001	0	1,002	-0,004
i=4	0,002	0	-0,001	0,998

Tabela 5.23: RGA estacionário para as estrutura "Oper 2 – Fmáx=4".

i/j	$\beta_{i,j}$			
	j=1	j=2	j=3	j=4
i=1	1,097	0,000	-0,049	-0,048
i=2	0,001	1,002	-0,001	-0,002
i=3	-0,035	-0,001	1,044	-0,009
i=4	-0,063	-0,001	0,006	1,058

Tabela 5.24: RGA estacionário para as estrutura "Oper 3 – Fmáx=4".

i/j	$\beta_{i,j}$			
	j=1	j=2	j=3	j=4
i=1	0	1,018	0,001	-0,019
i=2	0	-0,02	0	1,02
i=3	0	0,01	1	-0,01
i=4	1	0	-0,001	0,01

Para a estrutura "NLP – Fmáx=1-A", a ausência de zeros de transmissão não impõe limite à frequência de trabalho do controlador, logo é possível trabalhar em frequências mais elevadas. Esta estrutura possui RGA dinâmico e condicionamento mínimo elevados, conforme apresentado na Figura 5.29, o que levaria o sistema a dificuldades operacionais

mesmo em frequências mais elevadas. Esta estrutura possui estrutura de controle semelhante à estrutura "Oper 1 – Fmáx=1", embora as vazões de algumas correntes sejam um pouco diferentes. Neste sistema, foi utilizada uma estrutura de controle semelhante à estrutura "Oper 1 – Fmáx=1" para avaliar se os critérios de seleção de variáveis manipuladas para casos com considerações operacionais podem ser utilizados para os sistemas sem estas considerações. Para este caso, foi observado, através da análise dos índices RGA e condicionamento mínimo, que a escolha de seleção de estruturas de controle obtidas somente com considerações econômicas, utilizando os critérios de problemas operacionais, leva a dificuldades de controle.

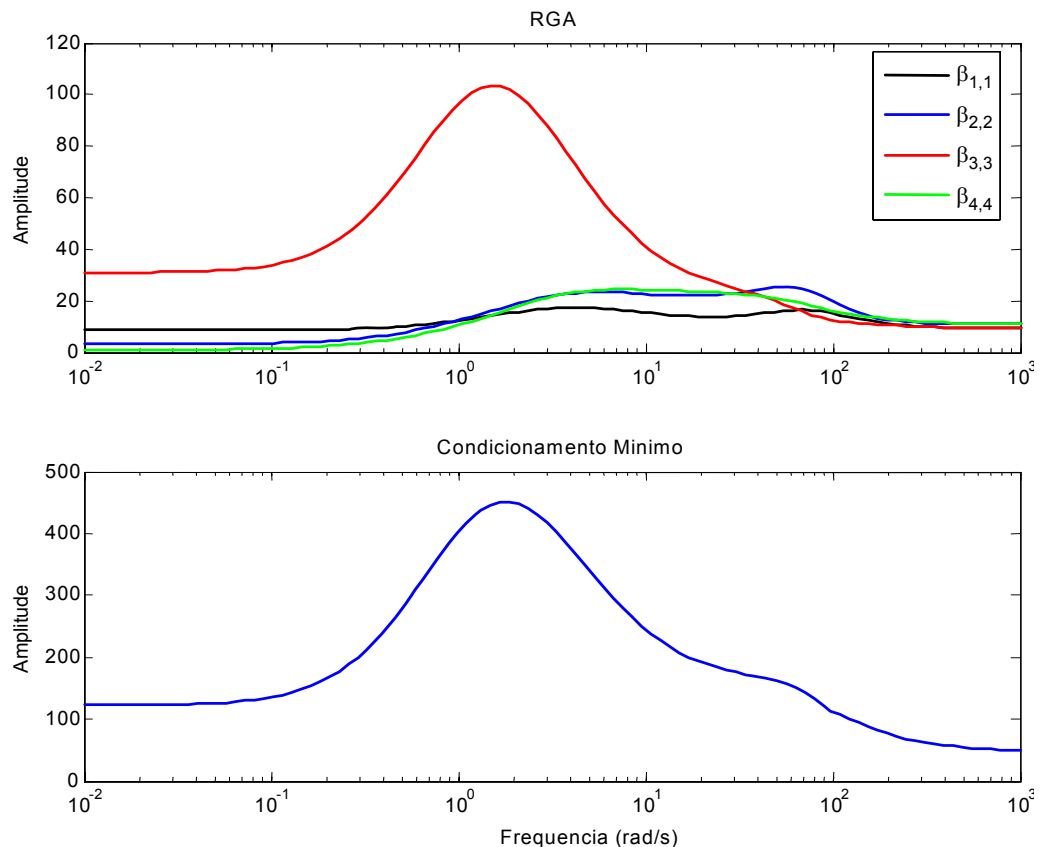


Figura 5.29: RGA dinâmico e condicionamento mínimo para a estrutura "NLP – Fmáx=1-A".

Para a estrutura "NLP – Fmáx=1-B", a presença de zeros de transmissão impõe restrições ao projeto dos controladores, que devem operar em frequências inferiores aos zeros, sendo que nesta faixa de trabalho o sistema possui um menor condicionamento mínimo e menor RGA dinâmico para os elementos da diagonal da matriz quando comparado com a estrutura "NLP – Fmáx=1-A" como pode ser observado na Figura 5.30. Neste caso, o mesmo resultado do problema de otimização porém com estruturas de controle diferentes, possuirá um melhor desempenho em malha fechada que o sistema anteriormente analisado ("NLP – Fmáx=1-A").

Na estrutura "Oper 1 – Fmáx=1", os multiplicadores de Lagrange foram utilizados para a seleção das variáveis manipuladas, sendo possível observar a presença de dois zeros de transmissão, onde o menor zero é o que limita o desempenho do controlador. Através da

análise do RGA estacionário, conforme apresentado na Figura 5.31, observa-se que a variável manipulada mais adequada para o controle da variável $x_{2,2}$ é a vazão $L_{5,4}$, enquanto que a melhor variável para o controle de $x_{4,1}$ é a vazão $L_{2,5}$, ou seja, neste caso as variáveis manipuladas estão trocadas. Como o pareamento entre as variáveis controladas e manipuladas não foram considerados na etapa de obtenção de redes com considerações operacionais, (foram sintetizadas usando apenas os multiplicadores de Lagrange) esta troca pode ocorrer.

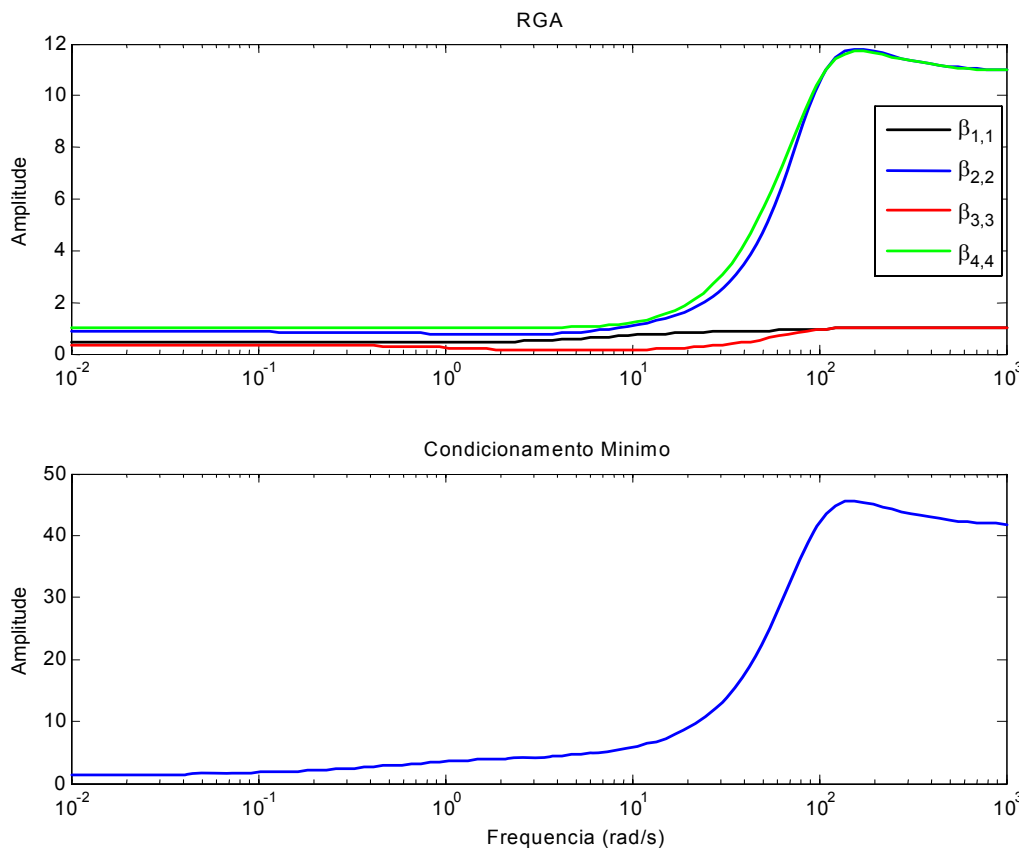


Figura 5.30: RGA dinâmico e condicionamento mínimo para a estrutura "NLP – Fmáx=1-B".

Na estrutura "Oper 2 – Fmáx=1", ocorre a presença de um zero de transmissão em uma região próxima à do problema anterior. Através da análise do RGA estacionário, conforme apresentado na Figura 5.32, é possível observar o mesmo efeito da troca de emparelhamentos, das variáveis $L_{5,4}$ e $L_{2,5}$ devido ao mesmo motivo descrito anteriormente. Além disso, os problemas com considerações operacionais apresentam menores valores de condicionamento mínimo e RGA dinâmico, indicando que possuem uma melhor operabilidade do que problema anterior.

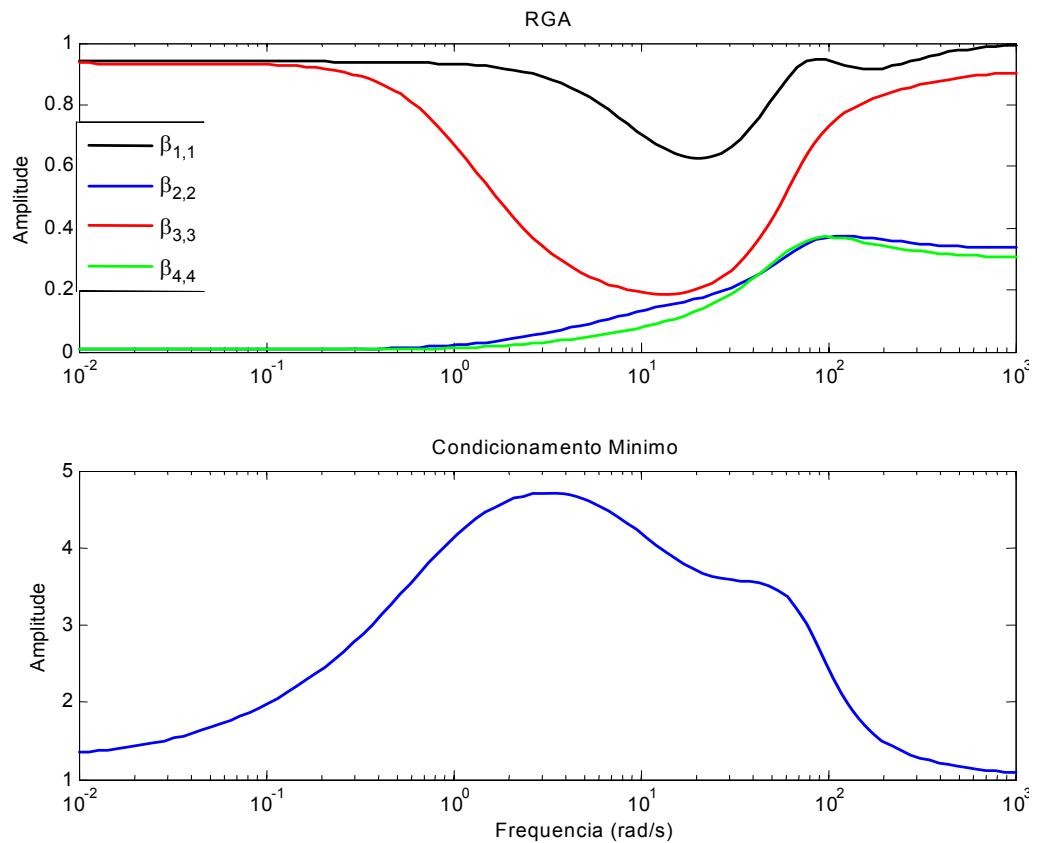


Figura 5.31: RGA dinâmico e condicionamento mínimo para a estrutura "Oper 1 – Fmáx=1".

Na estrutura "Oper 3 – Fmáx = 1", observa-se um zero de transmissão no semi-plano direito em frequências mais baixas, logo é necessário o projeto de controladores mais lentos. Através da análise da matriz RGA dinâmica, conforme apresentada na Figura 5.33, e estacionária, apresentada na Tabela 5.21, é possível observar a troca das variáveis manipuladas. Este efeito ocorre porque o critério utilizado para a seleção das variáveis manipuladas foi a matriz RGA obtida por otimização. Logo, conclui-se que a implementação proposta não se apresentou satisfatória para a melhoria da operabilidade.

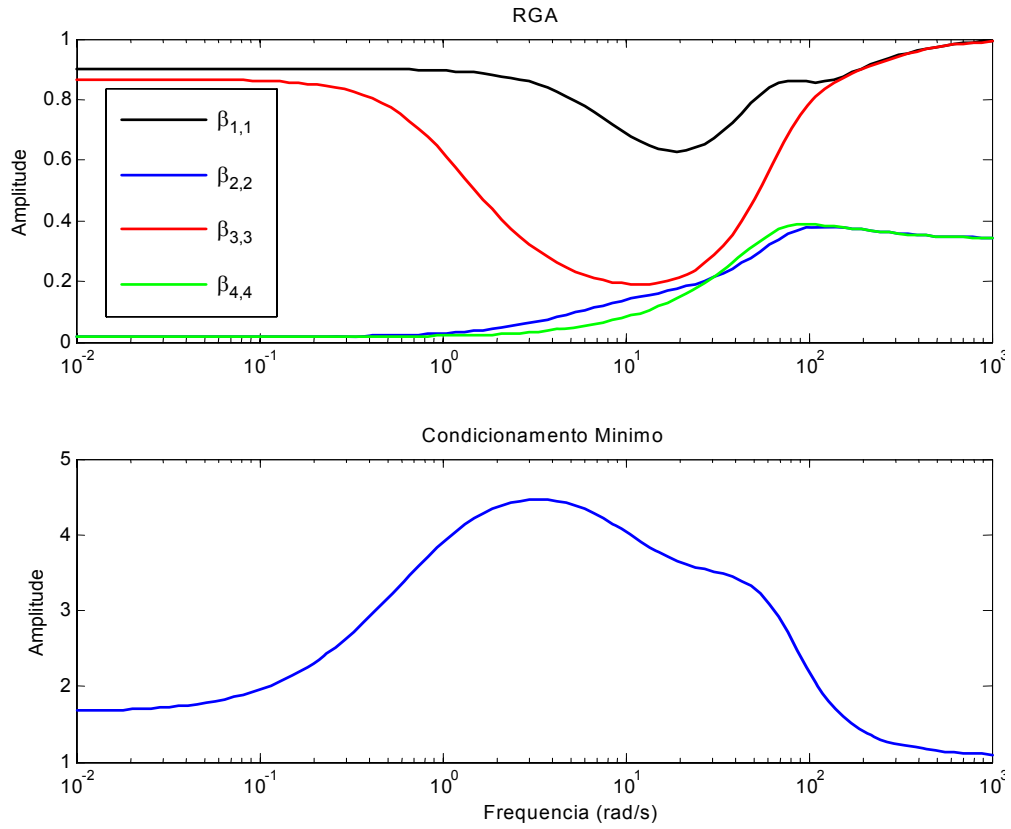


Figura 5.32: RGA dinâmico e condicionamento mínimo para a estrutura "Oper 2 – F_{máx}=1".

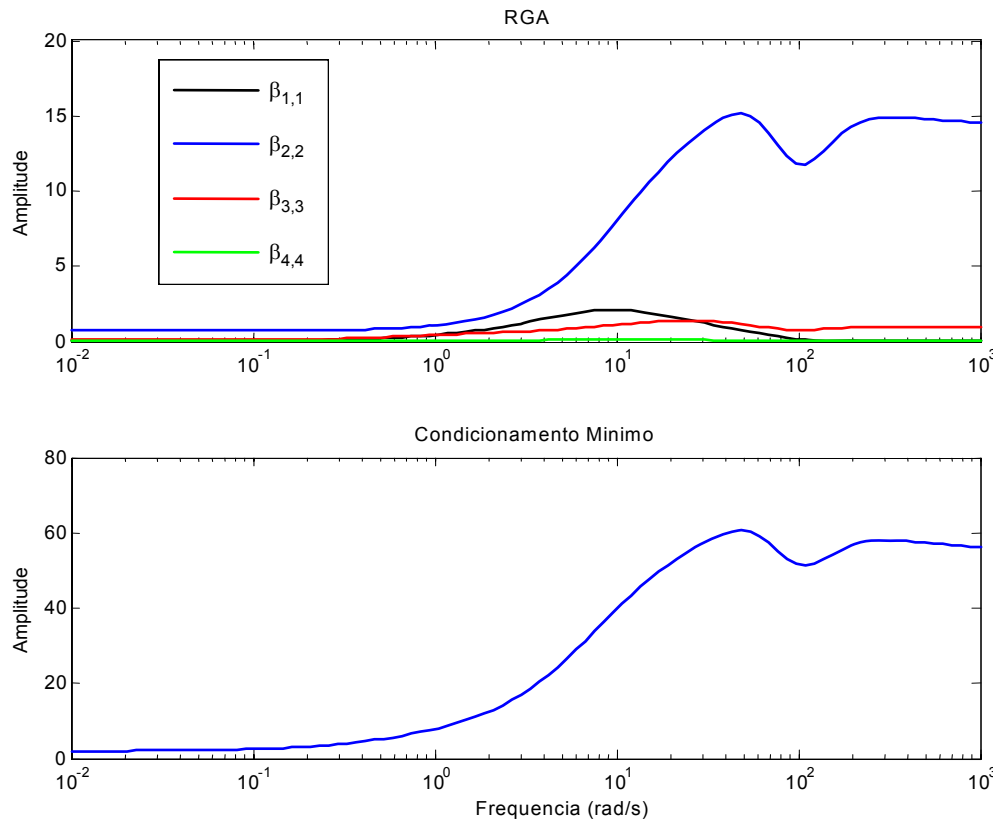


Figura 5.33: RGA dinâmico e condicionamento mínimo para a estrutura "Oper 3 – F_{máx}=1".

Na estrutura "NLP – $F_{\text{máx}}=4$ " não estão presentes zeros de transmissão. Ainda é possível observar, que o problema possui emparelhamento adequado e condicionamento mínimo menor devido, basicamente, ao menor grau de integração, que leva ao maior consumo de água de reposição, diminuindo a interação entre as malhas de controle, levando a diagonal da matriz RGA a elementos unitários. Considerando a matriz RGA dinâmica e o condicionamento mínimo, conforme apresentado na Figura 5.34, é possível trabalhar em frequências mais elevadas, ou seja, projetar controladores mais rápidos.

Na estrutura "Oper 2 – $F_{\text{máx}}=4$ ", ocorre um zero de transmissão e, através da análise da matriz RGA, é possível observar que o problema possui emparelhamento adequado e menor condicionamento mínimo pelo mesmo motivo do caso anterior. O fato do sistema possuir menor integração quando a vazão máxima de água de reposição é 4 t/h, descarta problemas com controlabilidade, o que torna desnecessário a análise de um maior número de estruturas, sendo este fato também comprovado através da análise do RGA dinâmico e condicionamento mínimo, apresentados na Figura 5.35.

A estrutura obtida como resultado da implementação operacional 3 para a vazão máxima de água de reposição de 4 t/h apresenta discrepância entre a matriz de ganhos e RGA obtidos por otimização quando comparados com os mesmos índices calculados pelo modelo linearizado. Através da análise da matriz RGA dinâmica, conforme apresentada na Figura 5.36, e estacionária, apresentada na Tabela 5.24, é possível observar a troca das variáveis manipuladas, da mesma maneira que o resultado da implementação operacional 3 para vazão máxima de água de reposição 1 t/h. A estrutura de controle apresentada pelo otimizador não faz uso das correntes de água de reposição para o controle, o que resulta em um sistema com maior grau de economia de água, porém com maiores dificuldades operacionais, quando comparado com as demais estruturas nas mesmas condições (relativo à vazão máxima de água de reposição).

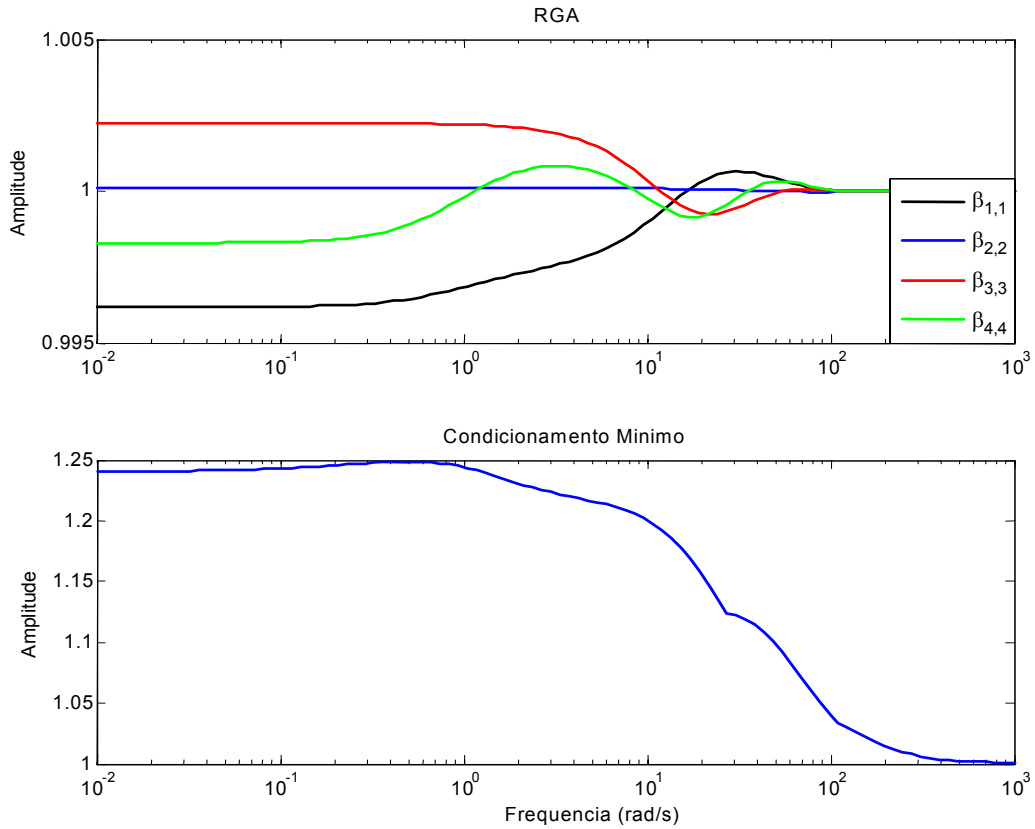


Figura 5.34: RGA dinâmico e condicionamento mínimo para a estrutura "NLP – Fmáx=4".

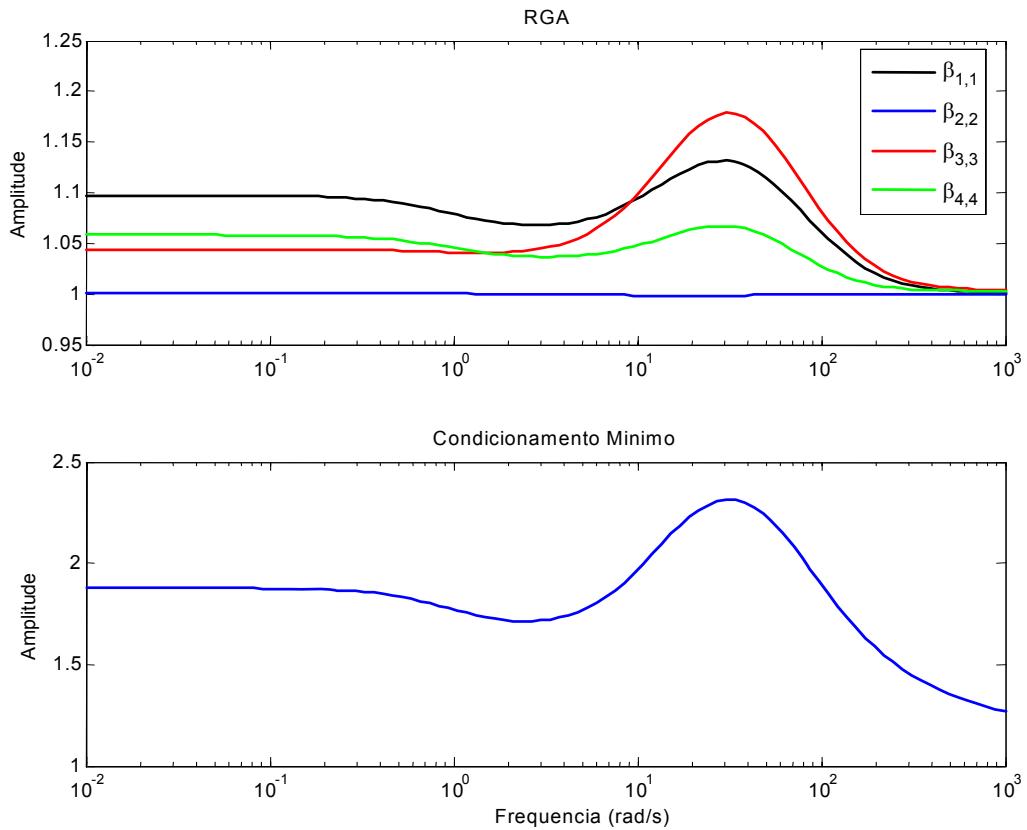


Figura 5.35: RGA dinâmico e condicionamento mínimo para a estrutura "Oper 2 – Fmáx=4".

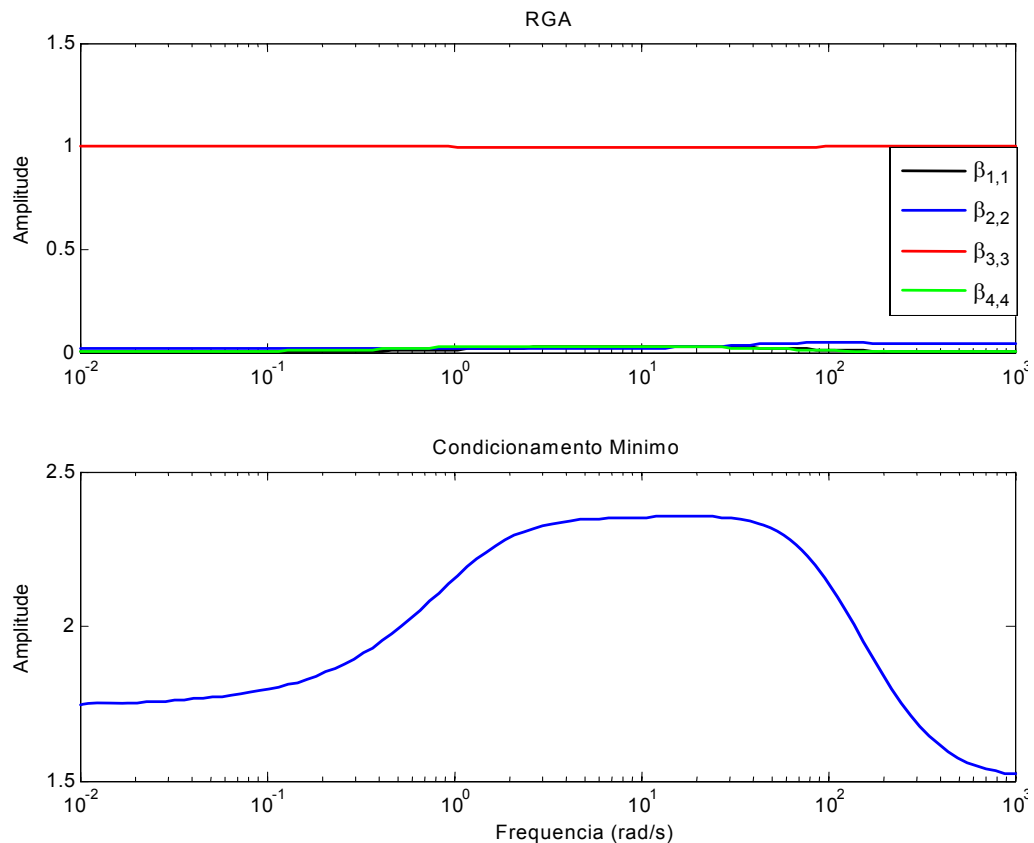


Figura 5.36: RGA dinâmico e condicionamento mínimo para a estrutura "Oper 3 – F_{máx}=4".

Avaliação das Estruturas para Rejeição de Distúrbios

No presente trabalho, os problemas operacionais foram desenvolvidos buscando estruturas que apresentassem um comportamento mais robusto quando submetidas a distúrbios na carga de poluentes. Com o objetivo de avaliar os sistemas resultantes, para cada um dos problemas foram projetados controladores proporcionais-integrais multivariáveis para avaliação das estruturas quando sujeitas a mudanças de *set-points* e distúrbios nas cargas de poluentes. Os controladores foram projetados com base nos zeros no semi-plano direito (quando os mesmos estavam presentes) e no RGA, utilizando a metodologia de escalonamento desenvolvida por Trierweiler (1997), fornecendo como parâmetros o tempo de subida e a sobre-elevação (*overshooting*) na função de desempenho alcançado. No projeto do controlador, a sobre-elevação foi mantida constante e os tempos de subida foram determinados buscando controladores com pouca interferência nas variáveis de saída, ou seja, que as perturbações em uma composição ou *set-points* não afetassem as demais, tais parâmetros são apresentados na Tabela C.2 do Apêndice C. Após o projeto do controlador, as estruturas foram sujeitas a mudanças em *set-points* e distúrbios nas cargas de poluentes. Para a avaliação das estruturas, foram utilizados índices para a determinação dos melhores sistemas. Os índices escolhidos foram a integral do erro absoluto (definida pela Equação 5.18), a integral absoluta da ação de controle (definida pela Equação 5.19), o valor absoluto da ação de controle no estado estacionário (definida pela Equação 5.20), a carga total de poluentes destinada à unidade de tratamento (definida pela Equação 5.21) e o consumo total de água no período (definida pela Equação 5.22). A integral do erro absoluto é um parâmetro muito utilizado para o ajuste de controladores; quanto maior seu valor, maior a dificuldade do

controlador para atingir determinada meta, seja de mudança de *set-point* ou rejeição de distúrbios. A integral absoluta da ação de controle foi um índice escolhido para mensurar a ação de controle ao longo do tempo, visto que a otimização interna nos problemas operacionais 1 e 2 visa obter uma estrutura capaz de minimizar a variação nas vazões (variáveis manipuladas) quando o sistema é submetido ao aumento na carga de poluentes. A ação de controle no estado estacionário foi um índice escolhido para determinar qual a configuração que levaria à menor ação de controle sem considerar aspectos dinâmicos. Como nas implementações operacionais 1 e 2 a função objetivo interna busca minimizar a carga de poluentes e vazão da água de *make-up*, estes índices foram selecionados para validar esta implementação. Em todos os índices utilizados, a melhor estrutura será a que apresentar o menor valor dos mesmos. Para cada perturbação, a integral do erro absoluto, a integral absoluta da ação de controle e a ação de controle no estado estacionário foram somadas em cada um dos canais, e comparados entre as implementações, estes são apresentados da Tabela 5.25 a Tabela 5.28, onde os valores destacados em negrito representam o caso onde as implementações com considerações operacionais apresentaram o pior desempenho quando comparadas com as implementações somente com considerações econômicas. No Apêndice C, as Tabelas C.3 e C.4 apresentam os índices individuais por canal para cada mudança de *set-point* e perturbação, respectivamente.

$$IEA = \int_{t=0}^{t=tf} |\text{Valor do set-point} - \text{Valor da variável controlada}|.dt \quad (5.18)$$

$$IAAC = \int_{t=0}^{t=tf} |\text{Valor da ação de controle}|.dt \quad (5.19)$$

$$ACEE = |\text{Ação de controle em estado estacionário}| \quad (5.20)$$

$$\text{Carga de Poluentes} = \int_{t=0}^{t=tf} \left(\sum_{i=1}^4 \sum_{j=1}^2 W_i(t).x_{i,j}(t) - W_{i_{ss}}.x_{i,j_{ss}} \right).dt \quad (5.21)$$

$$\text{Consumo de Água} = \int_{t=0}^{t=tf} \sum_{i=1}^4 F_i(t) - F_{i_{ss}} dt \quad (5.22)$$

Através da análise da Tabela 5.25 à Tabela 5.28, é possível observar que na maioria das perturbações as integrais dos erros absolutos, tanto em mudanças no *set-point* quanto em distúrbios nas cargas de poluentes, são maiores nas implementações operacionais quando comparadas com os resultados dos problemas com considerações econômicas. Isto ocorre porque, nas implementações com considerações operacionais 1 e 2, o índice operacional é

calculado através de uma otimização que realiza aumento nas cargas de poluentes (ao invés de mudanças de *set-points*) buscando a estrutura que realize a menor mudança nas vazões (variáveis manipuladas), minimizando ainda o consumo de água e a carga de poluentes destinadas à unidade de tratamento. Neste caso, para a análise da eficiência das duas implementações mencionadas é necessário avaliar a integral absoluta da ação de controle e a ação de controle no estado estacionário, além da vazão de água de reposição usada para atingir as metas (quando esta é manipulada) e a carga total de poluentes destinada à unidade de despejo. Através da análise da integral absoluta da ação de controle e da ação de controle no estado estacionário, apresentados da Tabela 5.25 à Tabela 5.28, é possível observar que os desempenhos das implementações operacionais 1 e 2 são superiores quando comparado com os problemas com considerações econômicas para a maioria dos distúrbios e mesmo para mudanças de *set-points*.

Nas implementações operacionais 1 e 2, os índices relativos ao uso da vazão de água de reposição e à carga de poluentes destinada à unidade de despejo quando realizadas mudanças de *set-points* não apresentam resultados satisfatórios quando comparados com os mesmos índices dos problemas com consideração econômica; isto se deve ao fato do problema interno de otimização não considerar mudanças de *set-points*, mas somente aumento nas cargas de poluentes, conforme mencionado anteriormente. Já no caso onde foram realizados distúrbios nas cargas de poluentes, os índices mencionados dos problemas operacionais apresentaram, em geral, melhores resultados que nos problemas com considerações econômicas.

Assim como as implementações operacionais 1 e 2, a implementação operacional 3 não apresentou resultados satisfatórios em relação às mudanças de *set-points* quando comparada com os problemas com considerações econômicas, porém quando realizados distúrbios nas cargas de poluentes, tal implementação obteve em média um desempenho melhor, embora a otimização interna deste problema não contemplasse termos correspondentes à perturbação nas cargas de contaminantes, mas somente perturbações nas correntes.

Os resultados descritos anteriormente são apresentados da Tabela 5.25 à Tabela 5.28, onde os valores destacados em negrito correspondem aos casos onde as implementações com considerações operacionais tiveram um desempenho inferior às implementações somente com considerações econômicas, ou seja, onde a metodologia proposta de incorporação de índices operacionais ao problema de síntese de redes não apresentou resultados satisfatórios.

Tabela 5.25: Índices operacionais relativos às mudanças de *set-points* para as estruturas onde a vazão máxima de água de reposição é 1 t/h.

Estrutura	Variável que sofreu a mudança de <i>set-point</i>	Soma da integral do erro absoluto das 4 variáveis	Soma da integral do absoluto ação de controle das 4 variáveis	Soma do módulo da ação de controle em estado estacionário das 4 variáveis	Consumo de Água	Carga de Poluentes
NLP – Fmáx = 1-A	1	0,7480	19,8811	1,6049	0	0,5922
NLP – Fmáx = 1-A	2	0,2035	12,0484	0,8827	0	-3,4367
NLP – Fmáx = 1-A	3	0,0834	52,8171	5,6913	0	-17,2980
NLP – Fmáx = 1-A	4	0,0715	2,4175	0,0225	0	-0,2264
NLP – Fmáx = 1-A	1; 2; 3; 4	0,6998	48,2243	4,9915	0	-20,3688
NLP – Fmáx = 1-B	1	1,0337	1,9002	0,1938	-0,5680	-97,8479
NLP – Fmáx = 1-B	2	0,3077	1,1025	0,1194	-0,0079	0,8616
NLP – Fmáx = 1-B	3	0,2622	1,6898	0,1747	-0,0660	-0,5389
NLP – Fmáx = 1-B	4	0,5267	0,2239	0,0225	-0,0007	0,2054
NLP – Fmáx = 1-B	1; 2; 3; 4	1,6225	2,1818	0,2200	-0,6426	-97,3199
Oper 1 – Fmáx = 1	1	2,4308	1,4501	0,1649	0	-4,5346
Oper 1 – Fmáx = 1	2	0,2232	0,1054	0,0083	0	1,4702
Oper 1 – Fmáx = 1	3	0,4491	0,2031	0,0214	0	9,3448
Oper 1 – Fmáx = 1	4	1,5772	0,2003	0,0231	0	0,3771
Oper 1 – Fmáx = 1	1; 2; 3; 4	4,0939	1,6673	0,1833	0	6,6574
Oper 2 – Fmáx = 1	1	1,7965	1,4998	0,1601	0	-14,5508
Oper 2 – Fmáx = 1	2	0,4797	0,1014	0,0091	0	1,2688
Oper 2 – Fmáx = 1	3	0,4665	0,1892	0,0200	0	9,1431
Oper 2 – Fmáx = 1	4	0,6597	0,2380	0,0243	0	0,3198
Oper 2 – Fmáx = 1	1; 2; 3; 4	2,8683	1,7215	0,1796	0	-3,8190
Oper 3 – Fmáx = 1	1	3,467	17,159	1,9296	0,0549	-4,9712
Oper 3 – Fmáx = 1	2	1,231	1,0951	0,1374	-0,0181	-1,1883
Oper 3 – Fmáx = 1	3	0,704	3,706	0,3885	-0,1121	-7,2898
Oper 3 – Fmáx = 1	4	0,97	0,265	0,0225	-0,0021	0,0183
Oper 3 – Fmáx = 1	1; 2; 3; 4	5,151	15,015	1,7106	-0,0774	-13,4310

Tabela 5.26: Índices operacionais relativo às mudanças de *set-points* para as estruturas onde a vazão máxima de água de reposição é 4 t/h.

Estrutura	Variável que sofreu a mudança de <i>set-point</i>	Soma da integral do erro absoluto das 4 variáveis	Soma da integral da ação de controle das 4 variáveis	Soma do módulo da ação de controle em estado estacionário das 4 variáveis	Consumo de Água	Carga de Poluentes
NLP – Fmáx = 4	1	0,883	1,7989	0,19425	-0,8969	-21,4964
NLP – Fmáx = 4	2	0,019	0,183	0,01833	-0,1826	-3,8256
NLP – Fmáx = 4	3	0,152	2,0387	0,19861	-1,2960	-46,9549
NLP – Fmáx = 4	4	0,202	0,8059	0,08438	0,0333	-2,7584
NLP – Fmáx = 4	1; 2; 3; 4	1,053	3,2136	0,32708	-2,3422	-75,0353
Oper 2 – Fmáx = 4	1	0,525	1,4408	0,15064	-1,1201	-24,4913
Oper 2 – Fmáx = 4	2	0,248	0,1761	0,01781	-0,1748	-3,8006
Oper 2 – Fmáx = 4	3	0,4	0,7066	0,07338	0,2454	6,9268
Oper 2 – Fmáx = 4	4	0,377	1,9861	0,20842	0,9544	28,7830
Oper 2 – Fmáx = 4	1; 2; 3; 4	1,325	2,2898	0,23733	-0,0952	7,4180
Oper 3 – Fmáx = 4	1	0,816	1,0195	0,1026	0	-6,5755
Oper 3 – Fmáx = 4	2	0,034	0,0675	0,0068	0	2,1409
Oper 3 – Fmáx = 4	3	1,112	6,338	0,6916	0	4,1882
Oper 3 – Fmáx = 4	4	0,439	1,3747	0,1461	0	-30,5652
Oper 3 – Fmáx = 4	1; 2; 3; 4	2,146	7,9104	0,8358	0	-30,8116

Tabela 5.27: Índices operacionais relativo ao distúrbio nas cargas de poluentes para as estruturas onde a vazão máxima de água de reposição é 1 t/h.

Estrutura	Variável que sofreu a perturbação	Soma da integral do erro absoluto das 4 variáveis	Soma da integral da ação de controle das 4 variáveis	Soma do módulo da ação de controle em estado estacionário das 4 variáveis	Consumo de Água	Carga de Poluentes
NLP – Fmáx = 1-A	1	0,1945	8,03234	0,80083	0	-0,2220
NLP – Fmáx = 1-A	2	0,0334	18,8769	2,18754	0	5,9196
NLP – Fmáx = 1-A	3	0,0158	16,3356	1,89649	0	5,3255
NLP – Fmáx = 1-A	4	0,0126	0,43993	0,00777	0	0,0740
NLP – Fmáx = 1-A	1; 2; 3; 4	0,1969	27,6692	3,29534	0	11,0970
NLP – Fmáx = 1-B	1	0,3558	0,77651	0,0894	0,2549	43,8289
NLP – Fmáx = 1-B	2	0,0527	0,111	0,01249	0,0206	-0,2012
NLP – Fmáx = 1-B	3	0,0315	0,52321	0,05821	0,0205	0,1757
NLP – Fmáx = 1-B	4	0,1236	0,06681	0,00749	0,0002	-0,0680
NLP – Fmáx = 1-B	1; 2; 3; 4	0,4593	1,13921	0,1297	0,2962	43,7355
Oper 1 – Fmáx = 1	1	1,3015	0,6349	0,07997	0	1,9186
Oper 1 – Fmáx = 1	2	0,1462	0,09899	0,01113	0	-3,1911
Oper 1 – Fmáx = 1	3	0,1027	0,06268	0,00713	0	-2,8853
Oper 1 – Fmáx = 1	4	0,4827	0,06147	0,00769	0	-0,1236
Oper 1 – Fmáx = 1	1; 2; 3; 4	1,9143	0,79498	0,09851	0	-4,2814
Oper 2 – Fmáx = 1	1	0,6559	0,66531	0,07845	0	6,4033
Oper 2 – Fmáx = 1	2	0,2377	0,09371	0,01065	0	-2,9451
Oper 2 – Fmáx = 1	3	0,1074	0,05849	0,00665	0	-2,8238
Oper 2 – Fmáx = 1	4	0,138	0,07256	0,00811	0	-0,1058
Oper 2 – Fmáx = 1	1; 2; 3; 4	0,9723	0,82525	0,09681	0	0,5286
Oper 3 – Fmáx = 1	1	1,484	7,6566	0,9694	-0,0240	2,1503
Oper 3 – Fmáx = 1	2	0,5832	0,5449	0,0555	0,0375	2,4988
Oper 3 – Fmáx = 1	3	0,1486	1,1487	0,1294	0,0347	2,2704
Oper 3 – Fmáx = 1	4	0,2572	0,0757	0,0076	0,0007	-0,0066
Oper 3 – Fmáx = 1	1; 2; 3; 4	1,9764	6,1788	0,8027	0,0490	6,9130

Tabela 5.28: Índices operacionais relativo ao distúrbio nas cargas de poluentes para as estruturas onde a vazão máxima de água de reposição é 4 t/h.

Estrutura	Variável que sofreu a perturbação	Soma da integral do erro absoluto das 4 variáveis	Soma da integral da ação de controle das 4 variáveis	Soma do módulo da ação de controle em estado estacionário das 4 variáveis	Consumo de Água	Carga de Poluentes
NLP – F _{máx} = 4	1	0,3472	0,57544	0,06954	0,3917	10,4896
NLP – F _{máx} = 4	2	0,0072	0,08232	0,00916	0,0821	1,8385
NLP – F _{máx} = 4	3	0,0131	0,59614	0,0662	0,4023	14,5746
NLP – F _{máx} = 4	4	0,0477	0,24974	0,02813	-0,0103	0,8812
NLP – F _{máx} = 4	1; 2; 3; 4	0,3988	1,00506	0,11686	0,8657	27,7839
Oper 2 – F _{máx} = 4	1	0,1619	0,546	0,06274	0,4546	9,6431
Oper 2 – F _{máx} = 4	2	0,053	0,0788	0,00886	0,0780	1,8084
Oper 2 – F _{máx} = 4	3	0,0853	0,21878	0,02447	-0,0762	-2,1582
Oper 2 – F _{máx} = 4	4	0,0799	0,6137	0,06923	-0,2942	-8,8812
Oper 2 – F _{máx} = 4	1; 2; 3; 4	0,3175	0,85186	0,09652	0,1623	0,4121
Oper 3 – F _{máx} = 4	1	0,2488	0,51623	0,0595	0	6,4155
Oper 3 – F _{máx} = 4	2	0,0147	0,03036	0,0034	0	-0,8453
Oper 3 – F _{máx} = 4	3	0,2921	1,96433	0,2314	0	-1,2759
Oper 3 – F _{máx} = 4	4	0,1041	0,43164	0,0495	0	9,5563
Oper 3 – F _{máx} = 4	1; 2; 3; 4	0,5863	2,64089	0,2998	0	13,8506

5.4. Considerações Finais

Em relação às implementações realizadas, observou-se que a formulação NLP reduzida apresentou, em média, o menor tempo computacional, embora para a vazão máxima de água de reposição de 4 t/h, o ótimo não tenha sido alcançado em relação à implementação NLP original. A partir da implementação NLP reduzida, foi possível desenvolver um algoritmo capaz de obter estimativas iniciais aleatórias em um baixo tempo computacional, além de viabilizar, em termos de tempo computacional, a implementação dos problemas operacionais 1 e 2. Em geral, as implementações MINLPs apresentam conexões com vazões maiores, isto ocorre devido à natureza da função objetivo que penaliza a existência de qualquer vazão, mesmo muito pequena, entre os processos. O oposto é observado para o caso de problemas NLPs, onde somente as vazões maiores que 0,15 t/h são penalizadas (conforme Equação 4.17), neste caso é possível perceber redes com vazões mais fracionadas.

Embora os resultados das avaliações dinâmicas considerando a incorporação do controlador multivariável podem depender do ajuste do controlador, este efeito foi minimizado ajustando os parâmetros do controlador utilizando o mesmo critério para todos os sistemas estudados. O primeiro critério escolhido foi manter a sobre-elevação constante para todos os sistemas em estudo. O segundo critério foi em relação ao tempo de subida, que foi determinado de forma a obter controladores cuja ação de controle em uma variável manipulada (vazão) tivesse pouca interferência nas demais variáveis controladas quando o sistema fosse sujeito a distúrbios nas cargas de poluentes e mudanças de *set-points*.

O uso dos multiplicadores de Lagrange para a obtenção de índices operacionais apresentou resultados satisfatórios; além disso, estes podem ser usados ainda para a seleção de variáveis manipuladas. Os resultados dos problemas operacionais 1 e 2 apresentaram ação de controle sob as variáveis manipuladas menor, tanto na dinâmica quanto em estado estacionário, para a maioria dos conjuntos de distúrbios. Além disso, o consumo de água e a carga de poluentes destinada ao despejo também apresentaram, para a maioria dos conjuntos de distúrbios, valores menores que nos problemas sem considerações operacionais.

Na modelagem do problema estudado foram utilizados modelos distintos para a otimização e para a análise dinâmica. Nas implementações operacionais 1 e 2, no nível interno de otimização, as correntes conectadas eram fixas por restrições de desigualdade e dentro de uma tolerância podiam variar livremente, quando sujeitas ao aumento nas cargas de poluentes. Já na implementação operacional 3, a perturbação na corrente era dividida proporcionalmente à vazão (pela razão de *splits*) no nó de divisão, onde era realizada a perturbação e poderia se propagar livremente nos demais nós. Este motivo provavelmente pode ter originado as discrepâncias na matriz de ganho e RGA entre a implementação 3 e o modelo linearizado, pois no problema linearizado, nos *splits* que eram manipulados (4 no total, um para cada variável controlada) as correntes sofriam um acréscimo e redução proporcional, sendo que determinadas vazões eram reduzidas e outras aumentadas.

Os problemas com considerações operacionais (resolvidos por otimização), onde existe a propagação de distúrbios, representam os piores casos quando comparados com os problemas simulados através de modelos linearizados. No caso dos problemas com considerações operacionais, os distúrbios se propagam positivamente por todos os processos, enquanto que no modelo linearizado, alguns distúrbios se propagam positivamente e outros negativamente, devido à diferença entre os modelos dos *splits*. Como o modelo linearizado propaga distúrbios negativamente em algumas direções e o modelo utilizado na otimização propaga distúrbios em todas as direções, o desempenho dinâmico da planta utilizando o modelo linearizado (com os quais foram realizados os testes para a avaliação da operabilidade) não será pior que o obtido por otimização, indicando a robustez da metodologia proposta para resolver este tipo de problema. Todos os modelos utilizados podem representar cenários industriais, porém dependendo de cada caso, determinados modelos podem ter maior representatividade, logo para um estudo mais realista é necessário determinar as condições de propagação de distúrbios presentes.

Capítulo 6: Conclusões e Sugestões para Trabalhos Futuros

No presente capítulo são apresentadas as contribuições realizadas neste trabalho, assim como os principais resultados obtidos. Além disso, são apresentadas sugestões para trabalhos futuros com o objetivo de complementar o tema de integração mássica com e sem considerações operacionais.

6.1. Conclusões

No presente trabalho foram realizadas 8 implementações para a resolução do problema de síntese de redes de integração mássica: 4 envolvendo funções objetivos com considerações econômicas, 3 envolvendo considerações econômicas e operacionais e 1 para a determinação das estimativas iniciais. Nesta seção, são apresentadas, resumidamente, as contribuições do presente trabalho envolvidas em cada implementação e os principais resultados e conclusões obtidos.

6.1.1. Principais contribuições

A primeira modificação implementada no problema MINLP original foi a eliminação das variáveis inteiras com o objetivo de reduzir o número de variáveis de decisão. Com esta modificação foi possível resolver o problema por métodos de otimização NLP, que solucionam o problema de forma mais rápida que os métodos MINLP. Para a resolução do problema por este método, foi proposta uma função objetivo capaz de tornar as correntes, variáveis contínuas, com comportamento semelhante às variáveis discretas.

Para aumentar a eficiência computacional do problema, também foi proposta a expressão de algumas das variáveis de decisão (Lin_i , $Lout_i$, F_i , W_i , $Xin_{i,j}$, $Xout_{i,j}$ e $SM_{i,j}$) em função das variáveis de decisão $L_{i,j}$ utilizando as restrições de igualdade.

A função objetivo foi expressa na forma multi-objetivo, contemplando em seus termos (no caso NLP e MINLP) os custos fixos relativos às conexões e os custos variáveis relativos às vazões. Foi proposta ainda, a inclusão de uma variável de folga na função objetivo relativa à restrição de composição de entrada nos processos, o que veio a facilitar a resolução do problema.

Através da formulação NLP reduzida foi possível implementar um gerador de estimativas iniciais viáveis, a partir de números aleatórios, através de um problema de otimização. Utilizando esta implementação, foram geradas estimativas iniciais viáveis para todas as formulações desenvolvidas.

Para a resolução dos problemas com considerações operacionais, foi proposta a resolução em dois níveis: um externo, onde é avaliado o termo econômico da função objetivo e, outro interno, onde é avaliado o termo operacional. Assim, é possível sintetizar uma rede integrada considerando aspectos econômicos e operacionais. A diferença entre os problemas operacionais encontra-se na formulação da otimização interna, distinta para cada caso.

No problema operacional 1, o sistema recebe uma carga de poluentes e deve redirecionar as correntes, minimizando a função objetivo, sujeito às restrições provenientes do problema externo. A função objetivo interna minimiza o uso da água de reposição, a carga de poluentes destinada ao despejo e a variável de folga das restrições internas. Obtido o ponto

ótimo do problema de otimização interna, os multiplicadores de Lagrange relativos às restrições do problema interno são passados ao problema externo. A configuração mais sensível a distúrbios é a que apresentar os maiores módulos dos multiplicadores de Lagrange, sendo esta a pior configuração. Logo, o otimizador deve buscar regiões do espaço das soluções que minimizem os termos econômicos e operacionais, satisfazendo as restrições do problema.

No problema operacional 2, o distúrbio direto da carga de poluentes não ocorre, pois a função objetivo interna contempla a maximização da carga de poluentes no sistema e minimização do uso de água. Desta maneira, os multiplicadores de Lagrange da otimização interna já fornecem diretamente a sensibilidade das vazões frente ao aumento na carga de poluentes. Semelhantemente ao problema anterior, a configuração mais sensível a distúrbios é a que apresenta os maiores módulos dos multiplicadores de Lagrange, sendo esta a pior configuração.

O uso de uma otimização para obtenção dos multiplicadores de Lagrange e, a partir destes, calcular índices operacionais é uma contribuição importante deste trabalho. Além do uso dos multiplicadores para obtenção de índices operacionais, é possível fazer a escolha das variáveis manipuladas, pois as correntes com maior multiplicador de Lagrange são as mais sensíveis e mais indicadas para serem manipuladas.

No problema operacional 3, a otimização interna é realizada para a obtenção da matriz de ganhos por perturbação. A partir da matriz de ganhos são selecionadas as variáveis manipulada e, em seguida, é obtida a matriz de ganhos relativos (RGA). A partir desta matriz é calculado, através de uma função proposta, um índice operacional para a incorporação na função objetivo externa.

6.1.2. *Resumo dos Resultados*

As propostas de eliminação de variáveis inteiras e de redução de variáveis de decisão apresentaram resultados satisfatórios, pois o tempo computacional foi reduzido consideravelmente, conforme apresentado na Tabela 5.1, repetida aqui para fins de demonstração.

Tabela 5.1: Tempos computacionais médios e total, em segundos, para a resolução dos problemas descritos nos Capítulos 3 e 4 para as vazões máximas de água de reposição de 1 e 4 t/h.

Problema/ tempo	MINLP Original	MINLP Reduzido	NLP Original	NLP Reduzido	Implementação Operacional 1	Implementação Operacional 2	Implementação Operacional 3
Total $F_{max}=1$	5824,55	1227,97	75,22	21,77	15118,59	1074,25	5126,92
Médio $F_{max}=1$	529,50	111,63	6,84	1,98	1679,84	153,46	1025,38
Total $F_{max}=4$	6729,81	2029,73	286,05	66,73	23964,48	22183,05	11029,80
Médio $F_{max}=4$	611,80	184,52	26,00	6,07	2995,56	2464,78	3676,60

Através da formulação NLP reduzida, a que apresentou, em média, o menor tempo computacional de resolução, foi possível realizar a implementação do gerador de estimativas iniciais e as implementações operacionais.

A implementação do gerador de estimativas iniciais viáveis foi importante para avaliar as configurações resultantes, a partir dos diferentes pontos iniciais, avaliando a existência de mínimos locais e globais. No caso onde a vazão máxima de água de reposição é de 1 t/h, foi possível observar que os resultados obtidos são pouco diferentes entre si, devido à restrição de vazão de água de reposição. Baseado neste fato, é possível concluir que nesta condição o sistema apresenta menor quantidade de mínimos locais, quando comparado com o caso onde a vazão máxima de água de reposição é 4 t/h.

Para avaliação do desempenho das estruturas, foram utilizados índices operacionais descritos na literatura. Os índices operacionais selecionados foram o RGA (estacionário e dinâmico), o condicionamento mínimo (estacionário e dinâmico), os pólos no semi-plano direito e os zeros de transmissão. Foi observado que nenhuma estrutura apresentou pólos no semi-plano direito e algumas estruturas apresentaram zeros de transmissão, sendo que neste último caso, suas direções de entrada e saída foram apresentadas. A partir da análise do RGA estacionário, foi verificado, em alguns casos, a não dominância diagonal desta matriz, indicando que o pareamento da variável controlada e manipulada proposto poderia ser trocado caso fosse necessária uma estrutura de controle descentralizada. Além disso, foi verificado que a matriz RGA prevista pelo problema operacional 3 não apresentou o mesmo valor quando comparado com a matriz obtida pelo modelo dinâmico; isto ocorreu possivelmente pela diferença entre os modelos dos *splits* utilizados na otimização e na modelagem dinâmica. Na Tabela 6.1 são apresentados os resultados resumidos de alguns dos índices operacionais citados acima.

Tabela 6.1: Comparação das estruturas através de índices operacionais.

Estrutura	RGA estacionário	Condicionamento Mínimo (estacionário)	Zeros de Transmissão
NLP – $F_{\text{máx}}=1-A$	Ruim	Ruim	não apresentou
NLP – $F_{\text{máx}}=1-B$	Razoável	Bom	presente
Oper 1 – $F_{\text{máx}}=1$	Bom*	Bom	presente
Oper 2 – $F_{\text{máx}}=1$	Bom*	Bom	presente
Oper 3 – $F_{\text{máx}}=1$	Bom*	Bom	presente
NLP – $F_{\text{máx}}=4$	Bom	Bom	não apresentou
Oper 2 – $F_{\text{máx}}=4$	Bom	Bom	presente
Oper 3 – $F_{\text{máx}}=4$	Ruim	Bom	presente

* Neste caso o RGA estacionário apresentou valores bons (segundo critérios apresentados na Seção 4.2.3), porém para o uso de um sistema de controle descentralizado, seria necessária a troca das variáveis manipuladas.

As estruturas obtidas como resultado dos problemas foram sujeitas a distúrbios nas cargas de poluentes e mudanças de *set-point*, para avaliação através de índices de desempenho. Quando o índice de desempenho escolhido para a avaliação foi a soma da integral do erro absoluto, foi observado que as implementações operacionais apresentaram um desempenho inferior quando comparadas com as implementações somente com considerações

econômicas, pois as estruturas operacionais não foram otimizadas para serem sujeitas a este tipo de mudança. Quando a soma da integral do valor absoluto da ação de controle e a soma do valor da ação de controle no estado estacionário foram utilizadas para avaliação, as implementações operacionais apresentaram um desempenho superior tanto para distúrbios na carga quanto para mudanças de *set-points*.

Quando as estruturas foram comparadas em relação ao seus "índices de desempenhos ambientais", ou seja, vazão de água de reposição e a carga de poluentes destinadas à unidade de despejo, os desempenhos das implementações operacionais só foram superiores quando o sistema foi sujeito a distúrbios na carga de poluentes. Isto se deve ao fato do problema interno de otimização não considerar mudanças de *set-points*, mas somente aumento nas cargas de poluentes. A Tabela 6.2 apresenta, resumidamente, os resultados referentes às simulações dinâmicas, sendo que os valores marcados com "X" representam os casos onde a estrutura em estudo apresentou melhor desempenho.

Tabela 6.2: Comparação das estruturas através de índices operacionais.

Estrutura	Tipo de variação	Soma da integral do erro absoluto das 4 variáveis	Soma da integral do valor absoluto da ação de controle das 4 variáveis	Soma do módulo da ação de controle em estado estacionário das 4 variáveis	Consumo de Água	Carga de Poluentes
NLP – F _{máx} =1-A	<i>set-point</i>	X			X	X
NLP – F _{máx} =1-B	<i>set-point</i>	X			X	X
Oper 1 – F _{máx} =1	<i>set-point</i>		X	X	X	
Oper 2 – F _{máx} =1	<i>set-point</i>		X	X	X	
Oper 3 – F _{máx} =1	<i>set-point</i>		X	X	X	
NLP – F _{máx} =4	<i>set-point</i>	X			X	X
Oper 2 – F _{máx} =4	<i>set-point</i>		X	X		
Oper 3 – F _{máx} =4	<i>set-point</i>		X	X	X	
NLP – F _{máx} =1-A	distúrbio	X				
NLP – F _{máx} =1-B	distúrbio	X			X	
Oper 1 – F _{máx} =1	distúrbio		X	X		X
Oper 2 – F _{máx} =1	distúrbio		X	X		X
Oper 3 – F _{máx} =1	distúrbio		X	X	X	X
NLP – F _{máx} =4	distúrbio	X				
Oper 2 – F _{máx} =4	distúrbio		X	X	X	X
Oper 3 – F _{máx} =4	distúrbio		X	X	X	X

O uso dos multiplicadores de Lagrange para a seleção das variáveis manipuladas de problemas operacionais apresentou resultados satisfatórios. Porém, através da comparação entre as estruturas "NLP – F_{máx}=1-A" e "Oper 1 – F_{máx}=1", é possível concluir que a seleção das variáveis manipuladas utilizada em uma estrutura com considerações operacionais não deve ser empregada em estruturas sem estas considerações.

Através da análise dos graus de liberdade do sistema, foi possível determinar que a equação de balanço de massa global, presente na modelagem do trabalho original, não era necessária, pois esta é uma combinação linear dos balanços de massa dos processos. Além

disso, a análise dos graus de liberdade foi importante para determinar quais as equações deveriam ser usadas para expressar as variáveis de decisão (Lin_i , $Lout_i$, F_i , W_i , $Xin_{i,j}$, $Xout_{i,j}$ e $SM_{i,j}$) em função das variáveis de decisão $L_{i,j}$ e quais equações deveriam ser usadas como restrições.

Em suma, a resolução de problemas com considerações econômicas resolvida pela implementação NLP reduzida apresentou o melhor resultado em termos de tempo computacional. Na condição onde a vazão máxima de água de reposição é de 4 t/h, a obtenção do mínimo global não foi garantida. Esta situação poderia ser resolvida aumentando o número de estimativas iniciais para aumentar a probabilidade de encontrar o mínimo global. No caso das implementações com considerações econômicas e operacionais, as formulações operacionais 1 e 2 obtiveram resultados, em média, superiores às formulações somente com considerações econômicas.

6.2. Sugestões para Trabalhos Futuros

O problema padrão de projetos de redes de integração abordado foi baseado no trabalho proposto por Fontana (2002), onde um sistema com a presença de múltiplos contaminantes foi formulado. Ao realizar uma análise dos modelos dos processos e regeneradores, observou-se que estes possuem certas limitações em relação à representação de um cenário industrial real. No caso dos processos, como estes operam com vazões de alimentação constantes, o modelo de carga de poluentes pode ser considerado razoável. Porém, para a representação mais realista de processos, seria mais coerente, ao invés de uma restrição de igualdade na vazão total de entrada, a incorporação de um limite superior e inferior nestas vazões. Neste caso, a adição de poluentes seguiria uma equação de eficiência onde a carga de contaminantes é proporcional à vazão de entrada. Este tipo de modelo encontra-se presente em *softwares* de integração mássica como o *AspenWater* (ASPENTECH, 2001) e é mais flexível para a representação de processos como reatores, colunas de destilação, colunas de absorção, etc. Em relação aos tipos de regeneradores, a condição de seletividade dos mesmos é realista, pois em muitos casos tem-se regeneradores que removem somente uma espécie de contaminantes, como por exemplo colunas de troca iônica (para remoção de componentes inorgânicos), filtros (para remoção de sólidos em suspensão), colunas de adsorção (para remoção de substâncias orgânicas), etc. Os modelos utilizados na representação dos regeneradores também poderiam ser substituídos por modelos de eficiência, que representam melhor o fenômeno de troca de massa que ocorre nestes equipamentos.

Na formulação da função objetivo dos problemas com considerações econômicas, foi adicionado um termo relativo aos custos variáveis das correntes entre os processos. Para representar um cenário industrial mais realista, seria necessário adicionar mais alguns termos na função objetivo, como por exemplo, os custos fixos e variáveis relativos às conexões, a minimização do uso da água e do custo da mesma (para os casos onde existam fontes com

pureza e custos diferentes), custos fixos e variáveis relativos aos equipamentos regeneradores e custo de descarga baseado na vazão e concentração.

As formulações propostas foram resolvidas por otimização, expressando a função objetivo da forma multi-objetivo e fornecendo pesos relativos a cada termo da função objetivo. Uma outra sugestão para um futuro trabalho seria avaliar a importância de cada termo da função objetivo no resultado operacional final, através de um estudo de sensibilidade dos índices operacionais, quando realizadas variações nos pesos dos termos operacionais da função objetivo (w_i).

A partir dos modelos dinâmicos linearizados estudados no trabalho, foi observada a presença de estabilidade condicional para distúrbios nas cargas de poluentes. Portanto, a análise de estabilidade para a avaliação da operabilidade das configurações das redes deve ser realizada.

Nas implementações operacionais 1 e 2, os multiplicadores de Lagrange forneceram uma sugestão de seleção das variáveis manipuladas. Em um processo real, os fatores econômicos são determinantes na implementação do projeto. No caso de seleção das variáveis manipuladas para situações mais integradas, o uso das correntes internas dos processos são economicamente mais favoráveis do que o uso de fontes externas de água, pois estas sempre apresentam um custo de tratamento associado. Nesta situação, a implementação de uma penalização para o uso da água de reposição como variável manipulada poderia aproximar o caso em estudo de uma situação mais realista, porém este problema também pode ser contornado conforme as implementações operacionais 1 e 2, onde na função objetivo interna está presente um termo que busca minimizar o uso da água de reposição. Considerando ainda o estudo da influência das variáveis manipuladas no sistema, também seria possível realizar a manipulação do nó de mistura de corrente em lugar do nó de divisão, isto teria influência na modelagem dinâmica e no problema de otimização caso fosse incorporado neste considerações dinâmicas. Nos problemas operacionais 1 e 2, são obtidos multiplicadores de Lagrange relativos às restrições que fixam as vazões em seus limites superiores e inferiores. Também seria interessante, para trabalhos futuros, avaliar qual destes multiplicadores seria mais aconselhados para a rejeição de determinados distúrbios ou conjunto de distúrbios além de avaliar se, a partir dos mesmos, é possível formular heurísticas para a seleção de estruturas de controle para processos integrados.

Uma consideração importante, não incorporada à função objetivo, é a retirada de operação de equipamentos, muito comum em casos industriais, onde a manutenção de certos equipamentos é constante, como reposição de um leito de um regenerador, troca de bombas, limpeza, etc. Neste caso a função objetivo deveria considerar a remoção de equipamentos específicos e avaliar, para uma determinada configuração, como se comportaria o sistema, neste cenário, onde as estruturas mais econômicas e robustas seriam selecionadas.

Na implementação operacional 1, para cada configuração proposta pelo otimizador, foi realizado um distúrbio de mesmo nível na carga de todos os poluentes. Neste caso, a estrutura final selecionada deve apresentar maior robustez para lidar com distúrbio na carga de todos os poluentes. Em um cenário real, os distúrbios não estão todos presentes e, além disso, não

possuem todos a mesma intensidade. A seleção de determinados cenários de distúrbios seria a maneira mais apropriada para a avaliação de um caso mais específico e realista. Outra aplicação da implementação operacional seria o caso de redes de integração mássica para operação em múltiplos cenários industriais, onde a variação da demanda por determinados produtos leva, em determinados períodos, a diminuição ou aumento da carga operacional. Para esta aplicação, a otimização interna seria usada para realizar a perturbação das vazões nas correntes ao invés da carga de poluentes e, através de um ajuste nas restrições internas e função objetivo, obter a rede que melhor se comportaria quando submetida a variações nas vazões entre os processos.

Como mais uma sugestão, tem-se a adição de um controlador na corrente destinada ao descarte, que não foi considerada na modelagem dinâmica. Tal consideração também poderia ser implementada para avaliar o comportamento das composições nas vazões destinadas aos efluentes após distúrbios nas cargas de poluentes dos processos e também se aproxima de um cenário real, visto que, na maioria das indústrias, as legislações ambientais impõem restrições em relação à composição das correntes destinadas aos corpos receptores.

Além da aplicação para o projeto de redes integradas massivamente, a metodologia também pode ser aplicada na síntese de redes de trocadores de calor. Neste caso, o distúrbio da otimização interna poderia ser realizado nas temperaturas ou vazões, resultando em redes com robustez para operar em situações onde múltiplos cenários industriais estão presentes.

Uma outra sugestão para trabalhos futuros, seria a aplicação a um cenário industrial real, a partir de dados de literatura ou através de um estudo de uma processo real, onde restrições econômicas, ambientais e operacionais estão presentes e onde os métodos propostos poderiam ser mais rigorosamente avaliados.

Referências Bibliográficas

- ASPEN TECH. **Aspen Water 11.1.1**. Cambridge, 2001.
- ALMATO, M. et al. Rationalizing the water use in the batch process industry. **Computers & Chemical Engineering**, 21, suppl. 1, p. S971-S976, May. 1997.
- BANSAL, V.; PERKINS, J.D.; PISTIKOPOULOS, E.N. A Case Study in Simultaneous Design and Control Using Rigorous, Mixed-Integer Dynamic Optimization Models. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 41, i. 4, p. 760-778, 2002.
- BRASIL, Agencia Nacional de Águas. **A evolução da gestão dos recursos hídricos no Brasil**. Brasília, 2002a.
- BRASIL, Ministério do Meio Ambiente Secretaria dos Recursos Hídricos. **Avaliação da Águas no Brasil**. Brasília, 2002b.
- BRISTOL, E.H. On a new measure of interactions for multivariable process control. **IEE Trans. Aut. Control**, AC-39, p. 1000-1002, 1966.
- CAPRA, A.; SCICOLONE, B. Emitter and filter tests for wastewater reuse by drip irrigation. **Agricultural Water Management**, v. 68, i. 2, p. 135-149, Aug. 2004.
- DIXON, A.; BUTLER, D.; FEWKES, A. Water saving potential of domestic water reuse systems using greywater and rainwater in combination. **Water Science and Technology**, v. 39, i. 5, p. 25-32, 1999 .
- EL-HALWAGI, M.M.; MANOUSIOUTHAKIS, V. Synthesis of Mass Exchange Networks. **AIChE Journal**, v. 35, i. 8, p. 1233-1244, 1989.
- EL-HALWAGI, M.M.; MANOUSIOUTHAKIS, V. Automatic synthesis of mass-exchange networks with single-component targets. **Chemical Engineering Science**, v. 45, i. 9, p. 2813-2831, 1990a.
- EL-HALWAGI, M.M.; MANOUSIOUTHAKIS, V. Simultaneous Synthesis of Mass-Exchange and Regeneration Networks . **AIChE Journal**, v. 36, i. 8, p. 1209-1219, 1990b.
- EL-HALWAGI, M.M. **Pollution Prevention through Process Integration - Systematic Design Tools**. primeira Edição. Londres: Academic Press, 1997.
- FAO. **Review of World Water Resources by Country**. Roma, 2003.
- FARENZENA, M. et al. XV COBEQ - Congresso Brasileiro de Engenharia Química, Curitiba-PR. **Anais do XV COBEQ - Congresso Brasileiro de Engenharia Química**. Curitiba: 2004. CD-ROM.
- FARINA, L.A. **RPN-Toolbox : Uma Ferramenta para o Desenvolvimento de Estruturas de Controle**. 2000. 112 p. Dissertação. (Mestrado em Pesquisa e Desenvolvimento de Processos). Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2000.

- FEPAM. **Diagnóstico da poluição hídrica industrial na região hidrográfica do Guaíba**. Porto Alegre, 2001.
- FONTANA, D. **Recuperação de águas de processos, desenvolvimento de um problema padrão**. 2002. 110 p. Dissertação (Mestrado em Pesquisa e Desenvolvimento de Processos). Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2002.
- FOO, C.Y. et al. Synthesis of mass exchange network for batch processes--Part I: Utility targeting. **Chemical Engineering Science**, v. 59, i. 5, p.1009-1026, Mar. 2004.
- FRANK, M.J.W.; WESTERINK, J.B.; SCHOKKER, A. Recycling of industrial waste water by using a two-step nanofiltration process for the removal of colour. **Desalination**, v. 145, i. 1-3, p. 69-74, Sep. 2002.
- GALAN, B.; GROSSMANN, I.E. Optimal Design of Distributed Wastewater Treatment Networks. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 37, i. 10, p. 4036-4048, 1998.
- GASS, S. I.; SAATY, T. L. The computational algorithm for the parametric objective function. **Naval Research Logistics Quarterly**, v. 2, i. 39, 1955.
- GOMES, J.F.S. **Procedimento para minimização de Efluentes Aquosos**. 2002. 229 p. Dissertação (Mestrado em Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos), Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2002.
- GOTOR, A.G. et al. Membrane processes for the recovery and reuse of wastewater in agriculture. **Desalination**, v. 137, i. 1-3, p. 187-192, May. 2001.
- GROSDIDLER, P.; MORARI, M.; Closed loop properties from steady-state gain information. **Industrial Engineering Chemistry Fundamentals**, v. 24, i. 2, p. 221-235, 1985.
- GUNDERSEN, T. **A Worldwide Catalogue on Process Integration**. International Energy Agency. Disponível em: <<http://www.iea-pi.org/Catalogue.pdf>>. Acesso em Jan. 2004a.
- GUNDERSEN, T. **Process Integration - Case Studies in Briefing Package**. International Energy Agency. Disponível em: <<http://www.iea-pi.org/brief-cases.html>>. Acesso em Jan. 2004b.
- HALLALE, N.; FRASER, D.M. Capital cost targets for mass exchange networks. A special case: Water minimisation. **Chemical Engineering Science**, v. 53, i. 2, p. 293-313, Jan. 1998.
- HAN, S.P. A Globally Convergent Method for Nonlinear Programming. **Journal of Optimization Theory and Applications**, v. 22, i. 3, p. 297, July 1977.
- HEERES, R.R.; VERMEULEN, W.J.V.; DE WALLE, F.B. Eco-industrial park initiatives in the USA and the Netherlands: first lessons. **Journal of Cleaner Production**, v. 12, i. 8-10, p. 985-995, 2004.

- HOVD, M.; SKOGESTAD, S. Simple Frequency-dependent Tools for Control System Analysis, Structure Selection and Design. **Automatica**, v. 28, i. 5, p. 989-996, 1992.
- HUSSAIN, G.; AL-SAATI, A.J. Wastewater quality and its reuse in agriculture in Saudi Arabia. **Desalination**, v. 123, i. 2-3, p. 241-251, Oct. 1999.
- KEMP, I.C.; DEAKIN, A.W. The Cascade Analysis for Energy and Process Integration for Batch Process. Part 1: Calculation of Energy Targets. **Chemical Engineering Research and Design**, v. 67, p. 495-509, 1989.
- LEEDEN, F van der .; TROISE, F.L.; TODD, K. D. **Water Encyclopedia** Lewis Publishers Inc.: Chelsea, 1990.
- LINNHOFF, B.; HINDMARSH, E. The pinch design method for heat exchanger networks. **Chemical Engineering Science**, v. 38, i. 5, p. 745-763, 1983.
- LINNHOFF, B.; FLOWER, J.F. Synthesis of Heat Exchanger Networks: 1. Systematic Generation of Energy Optimal Networks. **AIChE Journal**, v. 24, i. 4, p. 663-642, 1978.
- LONGHI, L.G.S. **Vazão de Efluentes da REFAP**, Comunicação por e-mail, longhi@petrobras.com.br, Abril 2006.
- LUYBEN, W.L. Dynamics and Control of Recycle Systems: 1. Simple Open-Loop and Closed-Loop Systems. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 32, i. 3, p. 466-475, 1993.
- MANN, J.G.; LIU, Y.A. **Industrial water reuse and wastewater minimization**. Primeira Edição, McGraw-Hill, New York 1999.
- MAPLESOFT. **Maple 9.01**. Waterloo, 2003.
- MARCH, J.G.; GUAL, M.; OROZCO, F. Experiences on greywater re-use for toilet flushing in a hotel (Mallorca Island, Spain). **Desalination**, v. 164, i. 3, p. 241-247, Apr. 2004.
- METCALF&EDDY INC. **Wastewater Engineering - Treatment and Reuse**. Quarta Edição. Nova Yorque: McGraw-Hill, 2003.
- MORUD, J.; SKOGESTAD, S. Dynamic behaviour of integrated plants. **Journal of Process Control**, v. 6, i. 2-3, p. 145-156, 1996.
- NOLDE, E. Greywater reuse systems for toilet flushing in multi-storey buildings - over ten years experience in Berlin. **Urban Water**, v. 1, i. 4, p. 275-284, Dec. 2000.
- OGUNNAIKE, B.A.; RAY, W.R. **Process Dynamics, Modelling & Control**. primeira Edição. New York: Oxford University Press, 1994.
- OLIVEIRA, S.G. **Síntese de redes de trocadores de calor com considerações de controle**. 2002. 188 p. Tese (Doutorado em Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos). Universidade Federal do Rio de Janeiro. Rio de Janeiro. 2002.
- PAPADOURAKIS, A.; DOHERTY, M.F.; DOUGLAS, J. Relative Gain Array for Units in

- Plants with Recycle. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 26, i. 6, p. 1259-1262, 1987.
- PERRY, R.H.; GREEN, D.W. **Perry's Chemical Engineers' Handbook**. Sétima Edição. Nova Yorque: McGraw-Hill, 1999.
- POWELL, M.J.D. A Fast Algorithm for Nonlinearly Constrained Optimization Calculations. **Numerical Analysis**, v. 630, p. 144-157, 1978.
- QUESADA, I.; GROSSMANN, I.E. Global optimization of bilinear process networks with multicomponent flows. **Computers & Chemical Engineering**, v. 19, i. 12, p. 1219-1242, Dec. 1995.
- RAGHAVA RAO, J. et al. Recouping the wastewater: a way forward for cleaner leather processing. **Journal of Cleaner Production**, v. 11, i. 5, p. 591-599, Aug. 2003.
- ROBERTS, B.H. The application of industrial ecology principles and planning guidelines for the development of eco-industrial parks: an Australian case study. **Journal of Cleaner Production**, v. 12, i. 8-10, p. 997-1010, 2004.
- SHIKLOMANOV, I. World fresh water resources. In: GLEICK, P.H. **Water in Crisis: A guide to the world 's fresh water resources**. Nova Yorque: Oxford University Press, 1993. p. 13-24.
- SKJELHAUGEN, O.J. Closed system for local reuse of blackwater and food waste, integrated with agriculture. **Water Science and Technology**, v. 39, i. 5, p. 161-168, 1999.
- SKOGESTAD, S.; POSTLETHWAITE, I.; **Multivariable Feedback Control, Analysis and Design**. Wiley, New York: 1996.
- SMITH, E.M.B.; PANTELIDES, C.C. Global optimisation of nonconvex MINLPs. **Computers & Chemical Engineering**, v. 21, supp. 1, p. S791-S796, 1997.
- THE MATHWORKS. **Matlab 5.3**. Natick, 1999.
- TRIERWEILER, J.O. **A Systematic Approach to Control Structure Design**. 1997. 178 p. Tese (Schriftenreihe des Lehrstuhl für Anlagensteuerungstechnik) Universität Dortmund, Dortmund, Alemanha, 1997.
- UNITED NATIONS, **Kyoto Protocol to the United Nations Framework Convention on Climate Change**, Ney York, 1998
- VINNERAS, B.; JONSSON, H. The performance and potential of faecal separation and urine diversion to recycle plant nutrients in household wastewater. **Bioresource Technology**, v. 84, i. 3, p. 275-282, Sep. 2002.
- WALLER, J.B.; SAGFORS, M.F.; WALLER, K.V. Ill-Conditionedness and Process Directionality - The use of Condition Numbers in Process Control. In: IFAC Symposium ADCHEM, Kyoto, Japan. **Proceedings of IFAC Symposium ADCHEM**. p. 465-470, 1994.

- WANG, Y.P.; SMITH, R. Wastewater minimisation. **Chemical Engineering Science**, v. 49, i. 7, p. 981-1006, Apr. 1994a.
- WANG, Y.P.; SMITH, R. Design of distributed effluent treatment systems. **Chemical Engineering Science**, v. 49, i. 18, p. 3127-3145, Sep. 1994b.
- WESTENBERG, A.W; Process Synthesis: A morphological view. In: **Recent Developments in Chemical Process and Plant Design**. p. 127-145. Wiley, Nova Yorque,1987.
- WITCHER, M.F.;McAvoy, T.J. Interacting Control Systems: Steady State and Dynamic Measurement of Interactions. **ISA Transactions**, v.16, p. 35-41, 1977.

Apêndice A: Análise de Graus de Liberdade do Sistema

A.1. Problema MINLP Completo

Para avaliar a consistência da modelagem proposta, foi realizada a análise de graus de liberdade do sistema. Nesta análise foram contabilizadas as variáveis envolvidas, as equações e especificações do sistema. As variáveis envolvidas e suas descrições são apresentadas na Tabela A.1 enquanto que as especificações das variáveis do problema em estudo são apresentadas na Tabela A.2. As equações utilizadas para representar o problema em estudo são apresentadas na Tabela A.3.

Tabela A.1: Variáveis envolvidas na modelagem do problema de síntese.

Variável	Descrição da Variável	Quantidade
$L_{i,k}$	Vazão da corrente que sai do processo k e alimenta o processo i .	36
$y_{i,k}$	Variável binária representando a conexão entre o processo k e i .	36
Lin_i	Vazão da corrente que deixa o misturador e alimenta o processo i .	6
$Lsup_i$	Vazão de operação do processo i .	4
$Lout_i$	Vazão que deixa o processo i e alimenta o divisor de corrente .	6
F_i	Vazão de água de reposição que alimenta o misturador do processo i .	4
W_i	Vazão de água que deixa o divisor do processo i e é destinada ao despejo.	4
$M_{i,j}$	Vazão do componente j gerada no processo i .	8
$SM_{i,j}$	Vazão do componente j removida no regenerador i .	2
$Xin_{i,j}$	Fração mássica do componente j que alimenta o processo i .	12
$Xout_{i,j}$	Fração mássica do componente j que deixa o processo i .	12
XF_j	Fração mássica do componente j presente na água de reposição.	2
Total		132

Tabela A.2: Variáveis especificadas do problema de síntese.

Variável	Descrição da especificação	Quantidade
$L_{i,k}$	Inexistência de reciclo direto: $L_{i,k}=0$ para $i=k$,	6
$y_{i,k}$	Inexistência de reciclo direto: $y_{i,k}=0$ para $i=k$,	6
$Lsup_i$	Vazão de entrada no processo i constante.	4
$M_{i,j}$	Carga de poluentes em cada processo especificada	8
$Xout_{i,j}$	Fração mássica dos poluentes na saída dos regeneradores específica.	4
$XF_{i,j}$	Fração de poluentes presente na água de alimentação de cada processo especificada.	2
Total		30

Tabela A.3: Equações utilizadas para descrever o problema de síntese de redes .

Descrição	Quantidade
Balanço de massa nos misturadores	6
Balanço de massa nas unidades	6
Balanço de massa nos divisores	6
Balanço por componente nos misturadores	12
Balanço por componentes nas unidades	12
Total	42

Para o cálculo dos graus de liberdade foi utilizada a Equação 3.33

$$GL = nvar - ns - neq \quad (3.33)$$

onde GL é o número de graus de liberdade do sistema, $nvar$ é o número de variáveis do sistema (Tabela A.1), ns é o número de especificações (Tabela A.2) e neq é o número de equações do problema (Tabela A.3). Substituindo na equação acima os respectivos valores, temos que:

$$GL = 132 - 30 - 42 = 60$$

Logo, o problema de otimização possui 60 graus de liberdade, estes são referentes as 30 variáveis y_{ik} e 30 variáveis L_{ik} , ambas presentes na função objetivo.

A.2. Problema MINLP reduzido

No caso do problema MINLP reduzido, também foi avaliada a consistência da modelagem proposta, através da análise de graus de liberdade do sistema. No caso dos problemas reduzidos, foram utilizadas algumas das restrições de igualdade (balanços de massa e componente) e especificações do problema para expressar as demais variáveis em função das variáveis de decisão $L_{i,j}$ e $y_{i,j}$, sendo algumas equações de igualdade e

especificações eliminadas do problema de otimização. As únicas equações que não foram utilizadas neste procedimento foram as Equações 4.15 e 4.16, que foram adicionadas ao problema de otimização para a satisfação do balanço de massa do sistema como um todo. A seqüência de cálculo utilizada para obtenção dos graus de liberdade do problema MINLP reduzido é apresentada na Tabela A.4.

Tabela A.4: Apresentação da seqüência para o cálculo para graus de liberdade do problema MINLP reduzido.

Variável	Equações ou Especificações utilizadas no cálculo	Variáveis Restantes (<i>nvar</i>)	Equações Restantes (<i>neq</i>)	Especificações Restantes (<i>ne</i>)
$Lsup_i (i=1..4)$	Especificação	$132 - 4 = 128$	42	$30 - 4 = 26$
$F_i (i=1..4)$	4.1	$128 - 4 = 124$	$42 - 4 = 38$	26
$Lin_i (i=5..6)_i$	4.2	$124 - 2 = 122$	$38 - 2 = 36$	26
$Lout_i (i=1..4)$	4.3	$122 - 4 = 118$	$36 - 4 = 32$	26
$Xin_{i,j}$ e $Xout_{i,j}$	4.8, 4.9, 4.10, 4.11 e especificações	$118 - 24 = 94$	$32 - 20 = 12$	$26 - 4 = 22$
$Lout_i (i=5..6)$	4.12	$94 - 2 = 92$	$12 - 2 = 10$	22
$SM_{i,j}$	4.13	$92 - 2 = 90$	$10 - 2 = 8$	22
W_i	4.14	$90 - 4 = 86$	$8 - 4 = 4$	22
XF_j	Especificações	$86 - 2 = 84$	4	$22 - 2 = 20$
$M_{i,j}$	Especificações	$84 - 8 = 76$	4	$20 - 8 = 12$
$L_{i,k} (i = k = 1..6)$	Especificações	$76 - 6 = 70$	4	$12 - 6 = 6$
$y_{i,k} (i = k = 1..6)$	Especificações	$70 - 6 = 64$	4	$6 - 6 = 0$
Total		64	4	0

Para o cálculo dos graus de liberdade foi utilizada a Equação 3.33, com *nvar* igual a 64, *ns* igual a 0 e *neq* igual a 4, resultando em:

$$GL = 64 - 0 - 4 = 60$$

Logo, o problema de otimização possui 60 graus de liberdade, estes são referentes as 30 variáveis y_{ik} e 30 variáveis L_{ik} . A principal diferença entre o problema MINLP completo e reduzido é a formulação. No caso MINLP completo, existem 150 variáveis no problema de otimização, destas, somente 60 são livres. Além disso, nesta formulação, devem ser respeitadas as equações de balanço de massa e componentes, que são usadas diretamente como restrições no problema de otimização, tornando-o mais complexo, pois das 42 restrições de igualdade, 24 são não-lineares (relativo ao balanço por componente nos misturadores e unidades, conforme Tabela A.3). Já na formulação MINLP reduzida, existem somente 60 variáveis no problema de otimização, as demais são calculadas através de rotinas internas (a partir das restrições de igualdade) para a avaliação de algumas restrições, reduzindo o número de restrições de igualdade não-lineares para 4.

A.3. Problema NLP completo

No caso do problema NLP completo, também foi avaliada a consistência da modelagem proposta através da análise de graus de liberdade do sistema. As variáveis envolvidas e suas descrições são apresentadas na Tabela A.5.

Tabela A.5: Variáveis envolvidas na modelagem do problema para o caso NLP completo.

Variável	Descrição da Variável	Quantidade
$L_{i,k}$	Vazão da corrente que sai do processo k e alimenta o processo i .	36
Lin_i	Vazão da corrente que deixa o misturador e alimenta o processo i .	6
$Lsup_i$	Vazão de operação do processo i .	4
$Lout_i$	Vazão que deixa o processo i e alimenta o divisor de corrente .	6
F_i	Vazão de água de reposição que alimenta o misturador do processo i .	4
W_i	Vazão de água que deixa o divisor do processo i e é destinada ao despejo.	4
$M_{i,j}$	Vazão do componente j gerada no processo i .	8
$SM_{i,j}$	Vazão do componente j removida no regenerador i .	2
$Xin_{i,j}$	Fração mássica do componente j que alimenta o processo i .	12
$Xout_{i,j}$	Fração mássica do componente j que deixa o processo i .	12
XF_j	Fração mássica do componente j presente na água de reposição.	2
Total		96

As variáveis especificadas do problema em estudo são apresentadas na Tabela A.6.

Tabela A.6: Variáveis especificadas do problema de síntese de redes de integração mássica para o caso NLP completo

Variável	Descrição da especificação	Quantidade
$L_{i,k}$	Inexistência de reciclo direto: $L_{i,k}=0$ para $i=k$,	6
$Lsup_i$	Vazão de entrada no processo i constante.	4
$M_{i,j}$	Carga de poluentes em cada processo especificada.	8
$Xout_{i,j}$	Fração mássica dos poluentes na saída dos regeneradores específica.	4
$XF_{i,j}$	Fração de poluentes presente na água de alimentação de cada processo especificada.	2
Total		24

Tabela A.7: Equações utilizadas para descrever o problema de síntese de redes de integração mássica para o caso NLP completo.

Descrição	Quantidade
Balanço de massa nos misturadores.	6
Balanço de massa nas unidades	6
Balanço de massa nos divisores.	6
Balanço por componente nos misturadores.	12
Balanço por componentes nas unidades.	12
Total	42

Para o cálculo dos graus de liberdade foi utilizada a Equação 3.33, com $nvar$ obtida da Tabela A.5, ns da Tabela A.6 e neq da Tabela A.7, resultando em :

$$GL = 96 - 24 - 42 = 30$$

Logo, o problema de otimização possui 30 graus de liberdade, estes são referentes as 30 variáveis L_{ik} presentes na função objetivo .

A.4. Problema NLP reduzido

No caso do problema NLP reduzido, também foi avaliado a consistência da modelagem proposta, através da análise de graus de liberdade do sistema. As variáveis envolvidas com suas descrições, especificações e as equações envolvidas na modelagem seguem as mesmas do problema NLP completo, sendo apresentadas na Tabela A.5, Tabela A.6 e Tabela A.7, respectivamente. A seqüência de cálculo utilizada para obtenção dos graus de liberdade do problema NLP reduzido é apresentada na Tabela A.8.

Tabela A.8: Apresentação da seqüência para o cálculo para graus de liberdade do problema NLP reduzido.

Variável	Equações ou Especificações utilizadas no cálculo	Variáveis Restantes (<i>nvar</i>)	Equações Restantes (<i>neq</i>)	Especificações Restantes (<i>ne</i>)
$Lsup_i (i=1..4)$	Especificação	$96 - 4 = 92$	42	$30 - 4 = 26$
$F_i (i=1..4)$	4.1 e	$92 - 4 = 88$	$42 - 4 = 38$	26
$Lin_i (i=5..6)_i$	4.2	$88 - 2 = 86$	$38 - 2 = 36$	26
$Lout_i (i=1..4)$	4.3	$86 - 4 = 82$	$36 - 4 = 32$	26
$Xin_{i,j}$ e $Xout_{i,j}$	4.8, 4.9, 4.10, 4.11 e especificações	$82 - 24 = 58$	$32 - 20 = 12$	$26 - 4 = 22$
$Lout_i (i=5..6)$	4.12	$58 - 2 = 56$	$12 - 2 = 10$	22
$SM_{i,j}$	4.13	$56 - 2 = 54$	$10 - 2 = 8$	22
W_i	4.14	$54 - 4 = 50$	$8 - 4 = 4$	22
XF_j	Especificações	$50 - 2 = 48$	4	$22 - 2 = 20$
$M_{i,j}$	Especificações	$48 - 8 = 40$	4	$20 - 8 = 12$
$L_{i,k} (i = k = 1..6)$	Especificações	$40 - 6 = 34$	4	$12 - 6 = 6$
Total		34	4	0

Para o cálculo dos graus de liberdade foi utilizada a Equação 3.33, com *nvar*, *ns* e *neq* obtidos da Tabela A.8, resultando em:

$$GL = 34 - 0 - 4 = 30$$

Logo, o problema de otimização possui 30 graus de liberdade, estes são referentes as 30 variáveis L_{ik} presentes na função objetivo. A diferença entre o problema MINLP e NLP são as variáveis inteiras, que na formulação NLP não estão presentes enquanto que a diferença entre o problema NLP completo e reduzido é a mesma que o problema MINLP completo MINLP e reduzido.

A.5. Problema NLP reduzido para geração de estimativas iniciais

O problema de geração de estimativas iniciais, é baseado no problema NLP reduzido, sendo a principal diferença a função objetivo utilizada. Para o cálculo dos graus de liberdade foi utilizada a Equação 3.33, com $nvar$, ns e neq obtidos da Tabela A.8, resultando em:

$$GL = 34 - 0 - 4 = 30$$

Logo, o problema de otimização possui 30 graus de liberdade, estes são referentes as 30 variáveis L_{ik} .

Apêndice B: Linearização do Modelo Dinâmico

Para a utilização de ferramentas de análises operacionais disponíveis na literatura, é necessário realizar a linearização do sistema dinâmico não-linear apresentado nas seções anteriores. Sendo conhecido o modelo do sistema é possível linearizá-lo expandindo as funções não lineares em série de *Taylor* truncado-as no termo linear. O mesmo pode ser feito para as funções que representam as saídas do sistema, gerando assim a representação na forma de espaço de estados. Esta representação é definida da seguinte forma:

$$\begin{aligned}\dot{\Delta x} &= A \cdot \Delta x + B \cdot \Delta u \\ \Delta y &= C \cdot \Delta x + D I \cdot \Delta u\end{aligned}\tag{B.1}$$

onde:

x = estados, ou seja, variáveis que caracterizam o sistema;
 Δx = variação nos estados em relação ao estacionário;
 Δu = variação nas entradas em relação ao estacionário;
 Δy = variação nas saídas em relação ao estacionário;
 $A, B, C, D I$ = matrizes resultantes das linearizações.

B.1. Modelagem dos processos

A versão dinâmica do balanço de massa global dos processos é dada por:

$$\frac{dM_{a_i}}{dt} = Lin_i - Lout_{bias_i} + Kp_i \cdot (M_{aset_i} - M_{a_i}) + \sum_{j=1}^2 M_{i,j} \cdot 10^{-6}, \text{ para } i=1, \dots, 4\tag{B.2}$$

Enquanto que a versão dinâmica do balanço por componente é dado por:

$$Ma_i \frac{dx_{i,j}}{dt} = Lin_{i,j} - Lin_i \cdot x_{i,j} + M_{i,j} - x_{i,j} \cdot \sum_{j=1}^2 M_{i,j} \cdot 10^{-6}, \text{ para } i=1,\dots,4 \text{ e } j=1,\dots,3. \quad (\text{B.3})$$

Sendo assim cada um dos 4 processos possui 4 equações: sendo um balanço de massa global e três equações correspondente ao balanço por componente de cada unidade.

Conhecendo-se o vetor dos estados (x), o vetor das entradas (u) e o vetor das saídas (y) é possível obter as matrizes na forma de espaço de estados que representam os processos.

$$xe = \begin{bmatrix} \Delta Ma_i \\ \Delta x_{i,1} \\ \Delta x_{i,2} \\ \Delta x_{i,3} \end{bmatrix}, \quad u = \begin{bmatrix} \Delta Lin_{i,1} \\ \Delta Lin_{i,2} \\ \Delta Lin_{i,3} \\ \Delta M_{i,1} \\ \Delta M_{i,2} \\ \Delta M_{i,3} \end{bmatrix}, \quad ys = \begin{bmatrix} \Delta Lout_{i,1} \\ \Delta Lout_{i,2} \\ \Delta Lout_{i,3} \\ \Delta x_{i,1} \\ \Delta x_{i,2} \\ \Delta x_{i,3} \end{bmatrix}, \quad (\text{B.4})$$

A linearização dos processos foi realizada através do software Maple (MAPLESOFT, 2003).

$$A = \begin{bmatrix} -Kp_i, & 0, & 0, & 0 \\ \frac{Lin_{i,1} - Lin_i \cdot x_{i,1,0} + M_{i,1} - 0.1 \cdot 10^{-5} \cdot x_{i,1,0} \left(\sum_{j=1}^3 M_{i,j} \right)}{Ma_{i,0}^2}, & \frac{-Lin_{i,0} - \frac{1}{1000000} \left(\sum_{j=1}^3 M_{i,j} \right)}{Ma_{i,0}}, & 0, & 0 \\ \frac{Lin_{i,2} - Lin_i \cdot x_{i,2,0} + M_{i,2} - \frac{1}{1000000} \cdot x_{i,2,0} \left(\sum_{j=1}^3 M_{i,j} \right)}{Ma_{i,0}^2}, & \frac{-Lin_{i,0} - \frac{1}{1000000} \left(\sum_{j=1}^3 M_{i,j} \right)}{Ma_{i,0}}, & 0, & 0 \\ \frac{Lin_{i,3} - Lin_i \cdot x_{i,3,0} + M_{i,3} - \frac{1}{1000000} \cdot x_{i,3,0} \left(\sum_{j=1}^3 M_{i,j} \right)}{Ma_{i,0}^2}, & \frac{-Lin_{i,0} - \frac{1}{1000000} \left(\sum_{j=1}^3 M_{i,j} \right)}{Ma_{i,0}}, & 0, & 0 \end{bmatrix}$$

B.1.1. Resposta dos Processos Linearizados

Após a linearização, os processos foram sujeitos a perturbações nas variáveis de entrada para fins de validação. O comportamento dos processos são apresentados da Figura B.1 a Figura B.4.

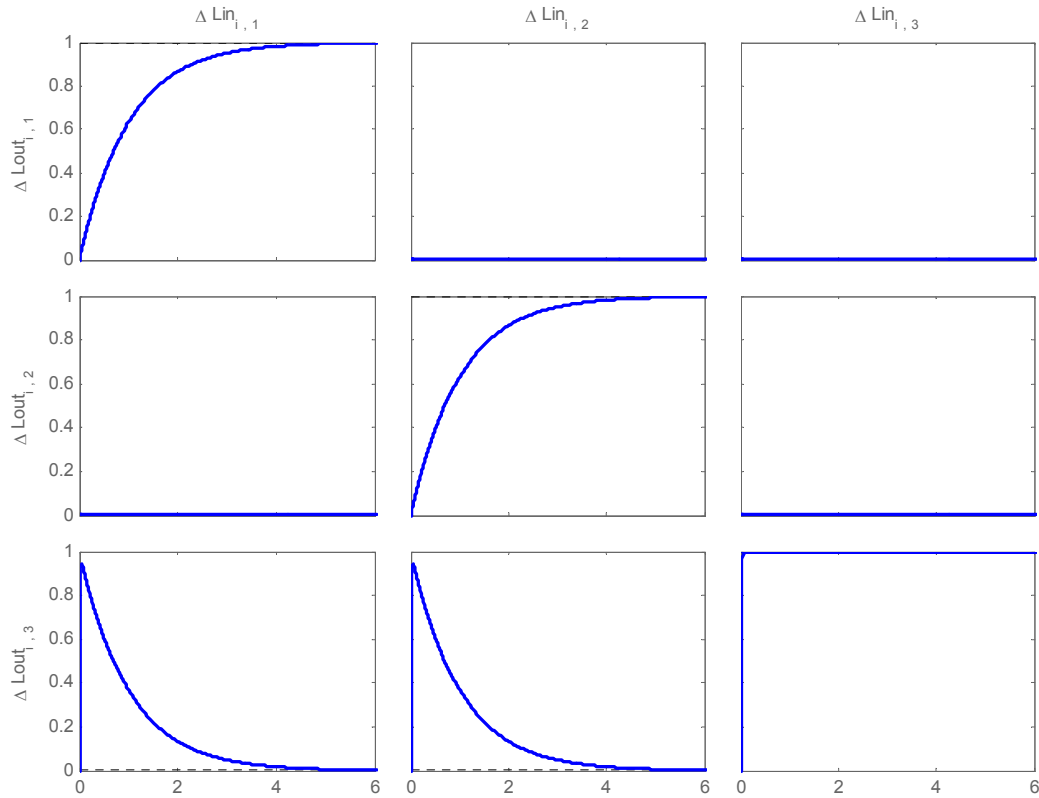


Figura B.1: Resposta das vazões de cada componente na saída dos processos ($Lout_{i,1}$, $Lout_{i,2}$ e $Lout_{i,3}$) para perturbações tipo degrau nas vazões de alimentação de cada componente: $Lin_{i,1}$, $Lin_{i,2}$ e $Lin_{i,3}$.

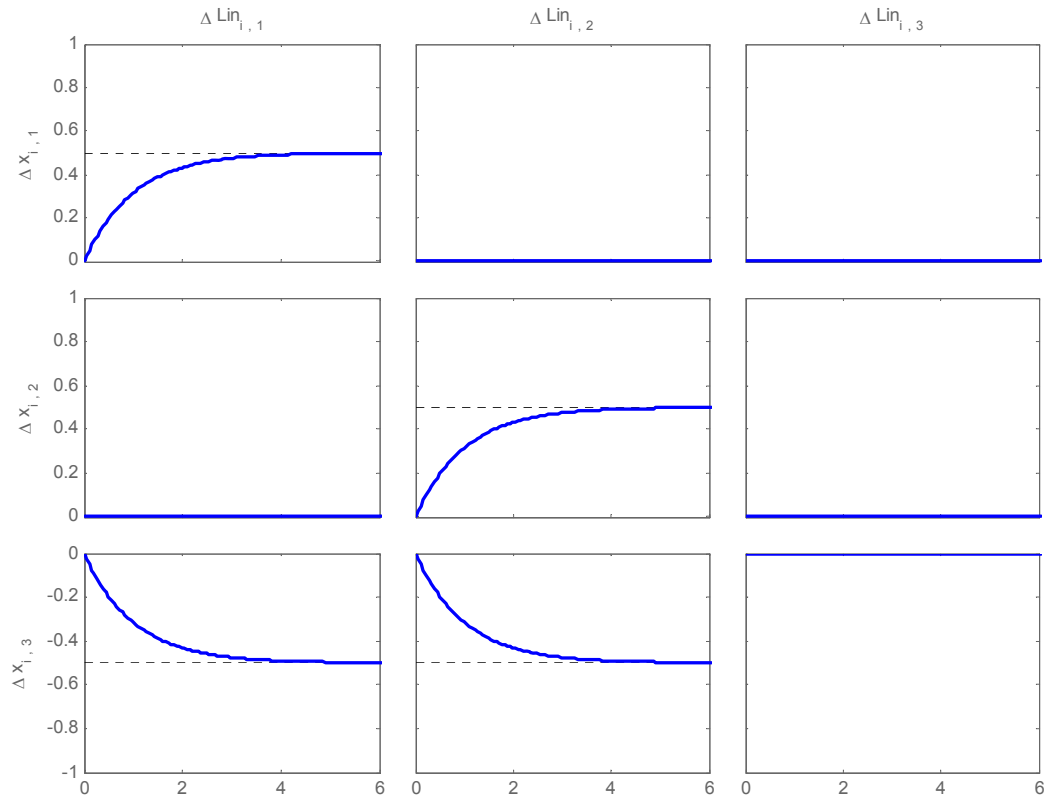


Figura B.2: Resposta das composições de cada componente na saída dos processos ($x_{i,1}$, $x_{i,2}$ e $x_{i,3}$) para perturbações tipo degrau nas vazões de alimentação de cada componente: $Lin_{i,1}$, $Lin_{i,2}$ e $Lin_{i,3}$.

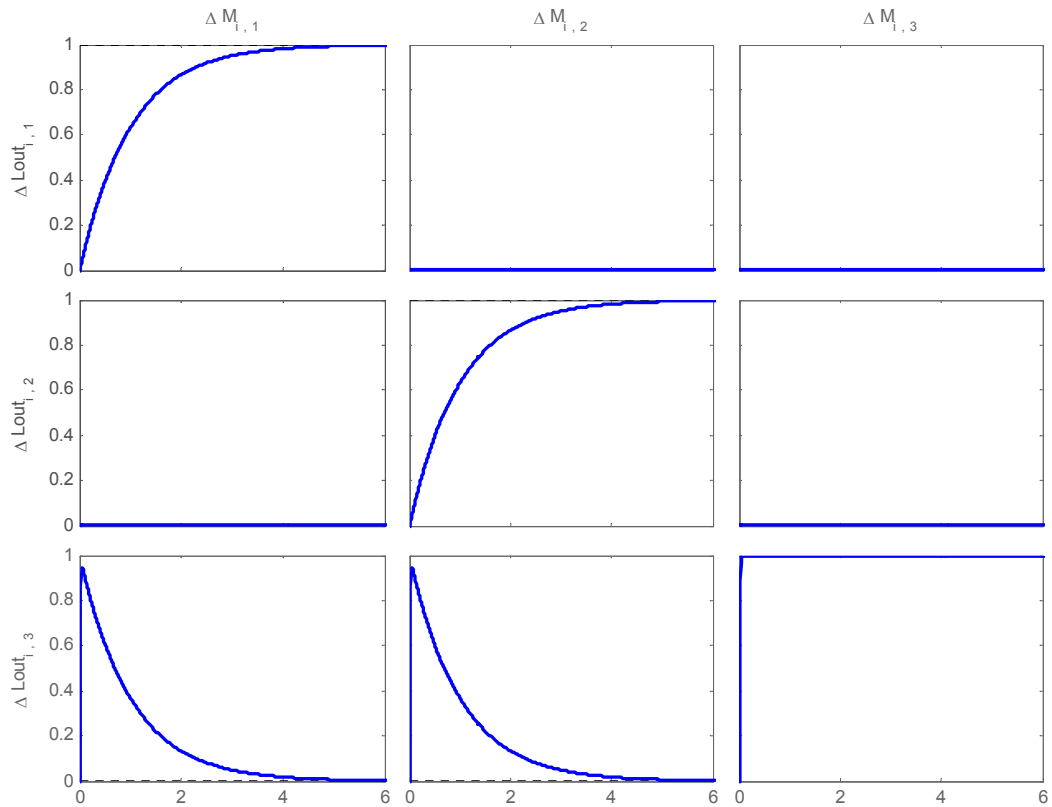


Figura B.3: Resposta das vazões de cada componente na saída dos processos ($Lout_{i,1}$, $Lout_{i,2}$ e $Lout_{i,3}$) para perturbações tipo degrau nas cargas de poluentes de cada componente: $M_{i,1}$, $M_{i,2}$ e $M_{i,3}$.

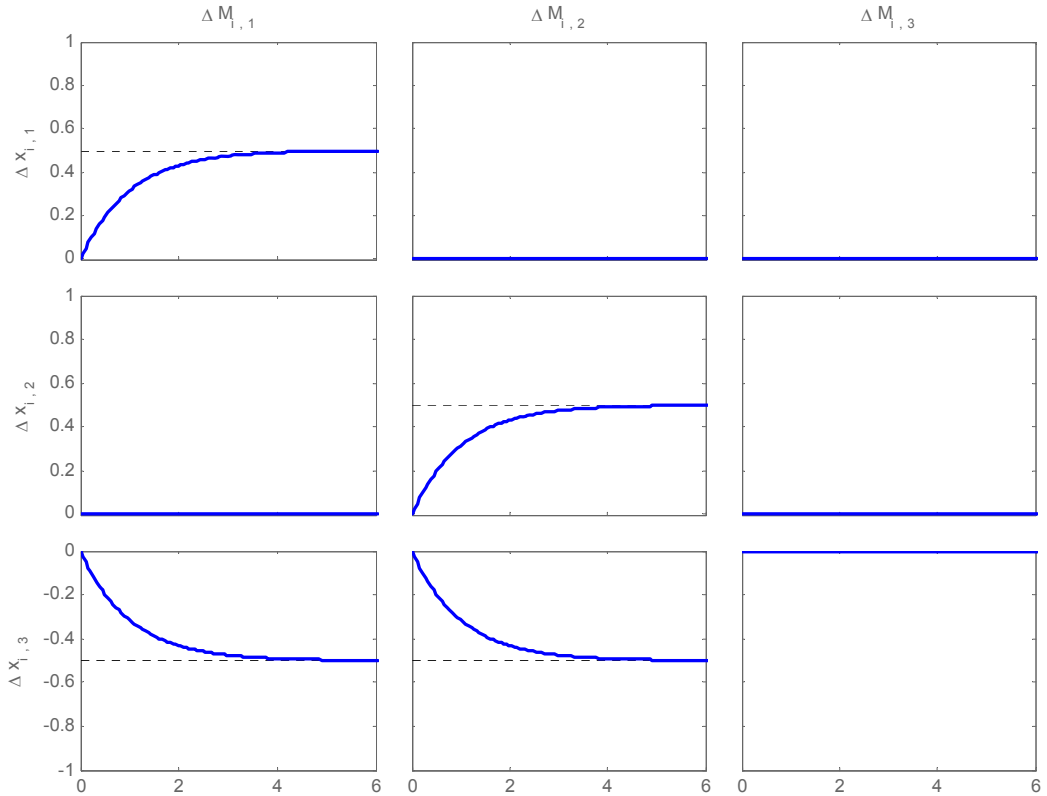


Figura B.4: Resposta das composições de cada componente na saída dos processos ($x_{i,1}$, $x_{i,2}$ e $x_{i,3}$) para perturbações tipo degrau nas cargas de poluentes de cada componente: $M_{i,1}$, $M_{i,2}$ e $M_{i,3}$.

B.2. Modelagem dos regeneradores

Visando simplificar a modelagem, a dinâmica dos regeneradores foi considerada pela inclusão de um vaso pulmão acoplado a um separador perfeito. O acúmulo do vaso pulmão é dado por:

$$\frac{dMa_i}{dt} = Lin_i - Lmid_{bias_i} + Kp_i \cdot (Maset_i - Ma_i), \text{ para } i=5,6 \quad (\text{B.5})$$

onde:

$Lout_{bias_i}$ = valor do *bias* da vazão mássica de saída do regenerador i ;
 $Maset_i$ = valor do *setpoint* para o acúmulo de massa do regenerador i ;
 Kp_i = ganho do controlador do regenerador i .

O separador perfeito, usado na modelagem dinâmica dos regeneradores, é descrito pela Equação B.6.

$$Lout_i = Lmid_i - \sum_{j=1}^2 SM_{i,j} \cdot 10^{-6}, \text{ para } i=5,6 \quad (\text{B.6})$$

Sendo cada regenerador restrito quanto à seletividade dos poluentes, tem-se:

$$SM_{5,2} = 0 \text{ e } SM_{6,1} = 0$$

O balanço de massa por componentes no vaso pulmão é dado por:

$$Ma_i \cdot \frac{dxmid_{i,j}}{dt} = Lin_{i,j} - Lin_i \cdot xmid_{i,j}, \text{ para } i=5,6 \text{ e } j=1,\dots,3 \quad (\text{B.7})$$

e no separador perfeito por:

$$Lout_i \cdot x_{i,j} = Lmid_i \cdot xmid_{i,j} - SM_{i,j}, \text{ para } i=5,6 \text{ e } j=1,\dots,3 \quad (\text{B.8})$$

Manipulando a Expressão B.7 e B.8 tem-se:

$$Lout_{5,1} = \frac{Lmid_5 \cdot Xout_{5,1} \cdot (xmid_{5,1} - 10^6)}{Xout_{5,1} - 10^6} \quad (\text{B.9})$$

Como o regenerador 1 remove somente o poluente 1, tem-se que:

$$Lout_{5,2} = Lmid_5 \cdot xmid_{5,2} \quad (\text{B.10})$$

$$Lout_{5,3} = Lmid_5 \cdot xmid_{5,3} \quad (\text{B.11})$$

$$SM_{5,1} = \frac{10^6 Lmid_5 \cdot (Xout_{5,1} - xmid_{5,1})}{Xout_{5,1} - 10^6} \quad (\text{B.12})$$

$$SM_{5,2} = 0 \quad (\text{B.13})$$

$$SM_{5,3} = 0 \quad (\text{B.14})$$

Analogamente para o regenerador 2 que remove somente o poluente 2, tem-se que:

$$Lout_{6,1} = Lmid_5 \cdot xmid_{6,1} \quad (B.15)$$

$$Lout_{6,2} = \frac{Lmid_6 \cdot Xout_{6,2} \cdot (xmid_{6,2} - 10^6)}{Xout_{6,2} - 10^6} \quad (B.16)$$

$$Lout_{6,3} = Lmid_5 \cdot xmid_{6,3} \quad (B.17)$$

$$SM_{6,1} = 0 \quad (B.18)$$

$$SM_{6,2} = \frac{10^6 Lmid_6 \cdot (Xout_{6,2} - xmid_{6,2})}{Xout_{6,2} - 10^6} \quad (B.19)$$

$$SM_{6,3} = 0 \quad (B.20)$$

Conhecendo-se o vetor dos estados (xe), o vetor das entradas (u) e o vetor das saídas (ys) é possível obter as matrizes na forma de espaço de estados que representam os processos.

$$xe = \begin{bmatrix} \Delta Ma_i \\ \Delta x_{i,1} \\ \Delta x_{i,2} \\ \Delta x_{i,3} \end{bmatrix}, \quad u = \begin{bmatrix} \Delta Lin_{i,1} \\ \Delta Lin_{i,2} \\ \Delta Lin_{i,3} \end{bmatrix}, \quad ys = \begin{bmatrix} \Delta Lout_{i,1} \\ \Delta Lout_{i,2} \\ \Delta Lout_{i,3} \\ SM_{i,j} \end{bmatrix}, \quad (B.21)$$

A linearização dos regeneradores foi realizada através do software Maple (MAPLESOFT, 2003).

$$A = \begin{bmatrix} -Kp_i & 0 & 0 & 0 \\ \frac{Lin_{i,1} - Lin_{i_0} xmid_{i,1_0}}{Ma_{i_0}^2} & -\frac{Lin_{i_0}}{Ma_{i_0}} & 0 & 0 \\ \frac{Lin_{i,2} - Lin_{i_0} xmid_{i,2_0}}{Ma_{i_0}^2} & 0 & -\frac{Lin_{i_0}}{Ma_{i_0}} & 0 \\ \frac{Lin_{i,3} - Lin_{i_0} xmid_{i,3_0}}{Ma_{i_0}^2} & 0 & 0 & -\frac{Lin_{i_0}}{Ma_{i_0}} \end{bmatrix}$$

$$B = \begin{bmatrix} \frac{1}{1000000}, & \frac{1}{1000000}, & \frac{1}{1000000} \\ \frac{1}{1000000} \frac{xmid_{i,1_0} - 1000000}{Ma_{i_0}}, & \frac{1}{1000000} \frac{xmid_{i,1_0}}{Ma_{i_0}}, & \frac{1}{1000000} \frac{xmid_{i,1_0}}{Ma_{i_0}} \\ \frac{1}{1000000} \frac{xmid_{i,2_0}}{Ma_{i_0}}, & \frac{1}{1000000} \frac{-1000000 + xmid_{i,2_0}}{Ma_{i_0}}, & \frac{1}{1000000} \frac{xmid_{i,2_0}}{Ma_{i_0}} \\ \frac{1}{1000000} \frac{xmid_{i,3_0}}{Ma_{i_0}}, & \frac{1}{1000000} \frac{xmid_{i,3_0}}{Ma_{i_0}}, & \frac{1}{1000000} \frac{-1000000 + xmid_{i,3_0}}{Ma_{i_0}} \end{bmatrix}$$

$$Dl = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Como os regeneradores são seletivos a poluentes diferentes, as matrizes C são distintas para cada um deles, onde C1 representa a matriz C para o regenerador 1 (unidade 5) e a matriz C2 para o regenerador 2 (unidade 6).

$$C1 = \begin{bmatrix} \frac{Kp_5 Xout_{5,1} (xmid_{5,1_0} - 1000000)}{Xout_{5,1} - 1000000} & \frac{(Lmid_{bias_5} - Kp_5 (Maset_5 - Ma_{5_0})) Xout_{5,1}}{Xout_{5,1} - 1000000} & 0 & 0 \\ Kp_5 Xout_{5,2} & 0 & 0 & 0 \\ Kp_5 Xout_{5,3} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1000000 Kp_5 (Xout_{5,1} - xmid_{5,1_0})}{Xout_{5,1} - 1000000} & - \frac{1000000 (Lmid_{bias_5} - Kp_5 (Maset_5 - Ma_{5_0}))}{Xout_{5,1} - 1000000} & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$C2 = \begin{bmatrix} \frac{Kp_6 Xout_{6,1} (xmid_{6,1_0} - 1000000)}{Xout_{6,1} - 1000000} & \frac{(Lmid_{bias_6} - Kp_6 (Maset_6 - Ma_{6_0})) Xout_{6,1}}{Xout_{6,1} - 1000000} & 0 & 0 \\ Kp_6 Xout_{6,2} & 0 & 0 & 0 \\ Kp_6 Xout_{6,3} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1000000 Kp_6 (Xout_{6,1} - xmid_{6,1_0})}{Xout_{6,1} - 1000000} & - \frac{1000000 (Lmid_{bias_6} - Kp_6 (Maset_6 - Ma_{6_0}))}{Xout_{6,1} - 1000000} & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

B.2.1. Resposta dos Regeneradores Linearizados

Após a linearização, os regeneradores foram sujeitos a perturbações nas variáveis de entrada para fins de validação, sendo que o comportamento dos mesmos são apresentados na Figura B.5 e Figura B.6.

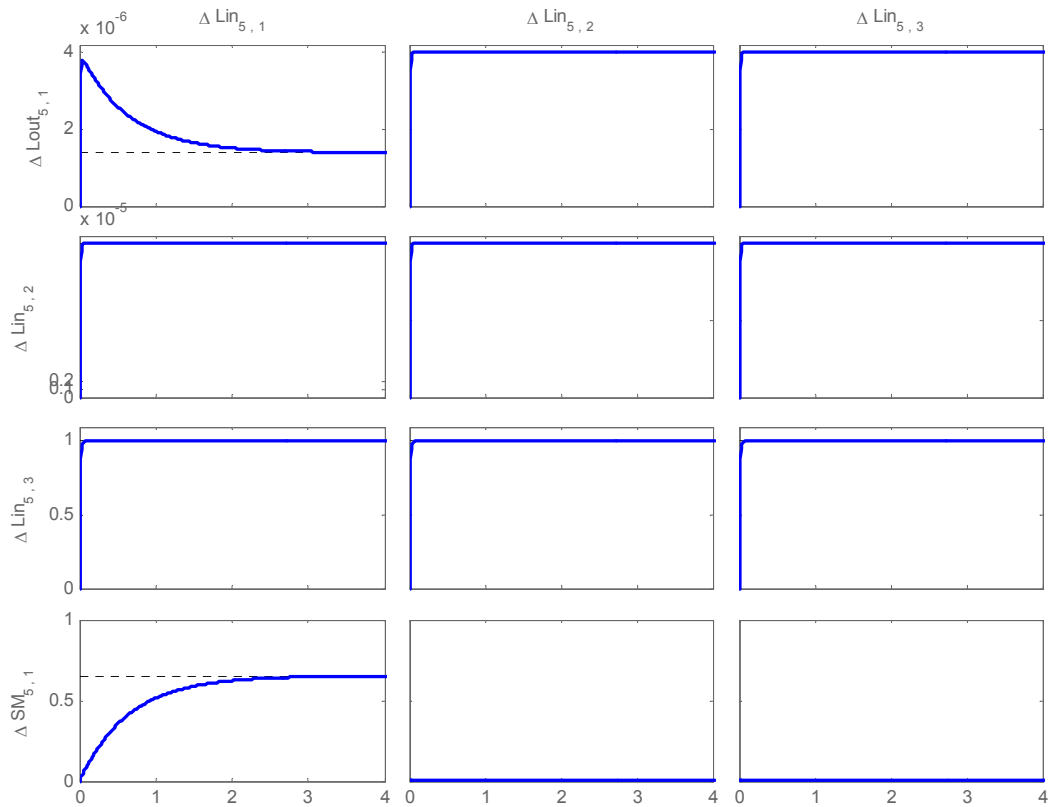


Figura B.5: Resposta das vazões de cada componente na saída do Regenerador 1 ($Lout_{5,1}$, $Lout_{5,2}$ e $Lout_{5,3}$, $SM_{5,1}$) para perturbações tipo degrau nas vazões de alimentação de cada componente: $Lin_{5,1}$, $Lin_{5,2}$ e $Lin_{5,3}$.

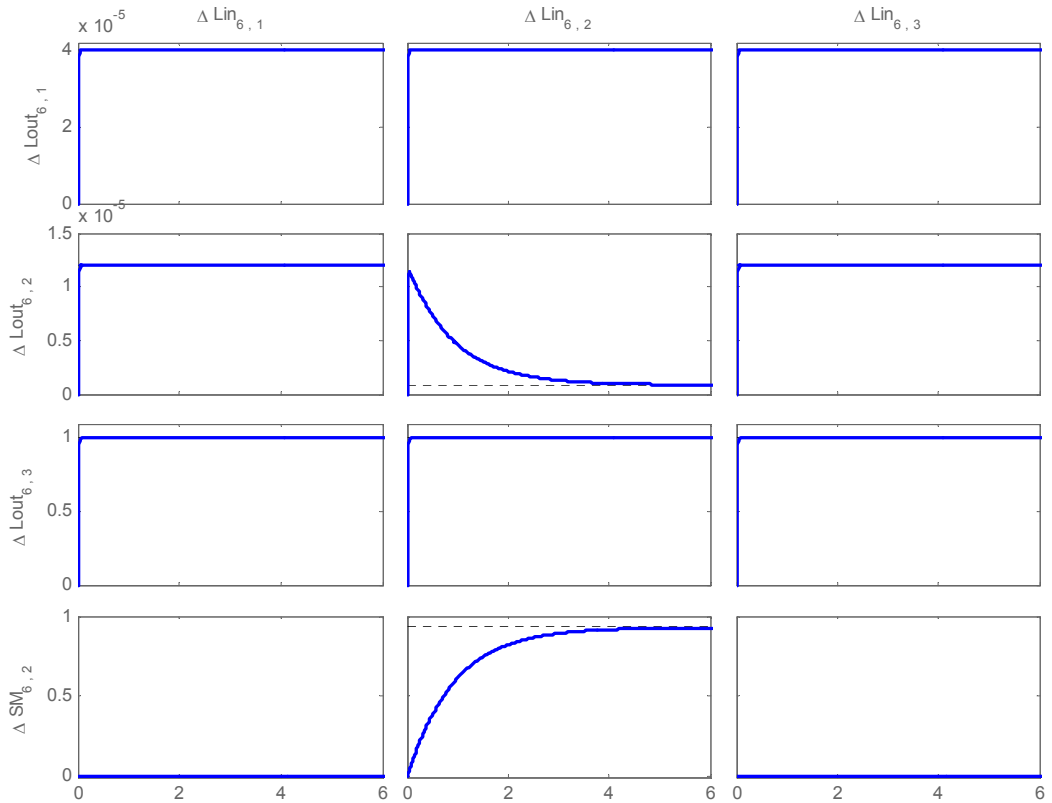


Figura B.6: Resposta das vazões de cada componente na saída do Regenerador 2 ($Lout_{6,1}$, $Lout_{6,2}$ e $Lout_{6,3}$, $SM_{6,2}$) para perturbações tipo degrau nas vazões de alimentação de cada componente: $Lin_{6,1}$, $Lin_{6,2}$ e $Lin_{6,3}$.

B.3. Correntes de Processo.

Na implementação do modelo dinâmico da superestrutura, as conexões entre as unidades, vazões da água fresca de *makeup* e do efluente líquido que saem do sistema foram incluídas na forma matricial, através da matriz de *splits*. Previamente a matriz de *splits* é necessário definir a matriz de ciclos/reusos, L , que apresenta a seguinte forma:

$$L_A = \begin{bmatrix} L_{1,1} & \cdots & L_{1,6} & F_1 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ L_{6,1} & \cdots & L_{6,6} & F_6 \\ W_1 & \cdots & W_6 & 0 \end{bmatrix} \quad (B.22)$$

onde:

- $L_{i,k}$ = vazão mássica que sai da unidade k e entra na unidade i ;
- F_i = vazão de água fresca de *makeup* que entra na unidade i ;
- W_i = vazão mássica de efluente líquido que sai unidade i .

É importante salientar que as seis primeiras colunas da matriz L representam as correntes de saída de cada unidade, enquanto que as seis primeiras linhas representam as correntes de entrada de cada uma das unidades. Todos os elementos que compõem a matriz L são provenientes do resultado da otimização da superestrutura. A partir da matriz de reciclos/reusos, define-se a matriz de *splits*, s , como sendo:

$$s = L_A \cdot [diag(Ls)]^{-1}, \quad (\text{B.23})$$

onde:

L_A = matriz de reciclos/reusos entre as unidades;

$diag$ = operação que transforma um vetor em matriz diagonal;

Ls = vetor que contém o somatório ao longo das colunas de L_A .

Cada elemento $s_{i,k}$ da matriz de *splits* representa a parcela da vazão que sai da unidade k e entra na unidade i . Por exemplo, o elemento $s_{2,3}$, representa a vazão de reciclo/reuso que sai do processo 3 e entra no processo 2, ou seja,

$$s_{2,3} = \frac{L_{2,3}}{Ls_3} = \frac{L_{2,3}}{W_3 + \sum_{i=1}^6 L_{i,3}} \quad (\text{B.24})$$

As equações que definem a vazão e concentração de cada uma das espécies envolvidas no efluente líquido que sai do sistema são mostradas a seguir:

$$Lout_7 = \sum_{i=1}^6 W_i \quad (\text{B.25})$$

$$x_{7,j} = \frac{\sum_{i=1}^6 W_i \cdot x_{i,j}}{Lout_7}, \text{ para } j=1, \dots, 3 \quad (\text{B.26})$$

Como resultados da solução do modelo dinâmico da superestrutura, é possível obter, para cada uma das configurações analisadas, a vazão de saída de cada uma das unidades ($Lout_i$, $i=1, \dots, 6$), a vazão do efluente líquido que sai do sistema ($Lout_7$) e a concentração de saída das espécies envolvidas (poluente A, poluente B e água) de cada uma das unidades e do efluente líquido que sai do sistema ($x_{i,j}$, $i=1, \dots, 7$, e $j=1, \dots, 3$).

B.4. Linearização das Correntes

A linearização das conexões entre as unidades da rede de integração mássica, obtida no modelo dinâmico através do produto entre as matrizes s e L , foi feita da seguinte forma:

$$s \cdot L = s \cdot \Delta L + \Delta s \cdot L \quad (\text{B.27})$$

O primeiro termo do lado direito da igualdade, $s \cdot \Delta L$, foi inserido na linearização da rede de integração mássica no subsistema. A matriz que representa este subsistema deriva da matriz de *splits* usada no modelo dinâmico, sendo a matriz de *splits* estendida para todas as vazões das espécies envolvidas no sistema, sem a coluna equivalente à água fresca de *makeup*. A matriz que representa este subsistema apresenta a seguinte forma:

$$S_L = \begin{bmatrix} I \cdot s_{1,1} & \cdots & I \cdot s_{1,6} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ I \cdot s_{7,1} & \cdots & I \cdot s_{7,6} \end{bmatrix}, \quad (\text{B.28})$$

onde:

$$I = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (\text{B.29})$$

É importante salientar que somente as saídas correspondentes as vazões no subsistema *Planta* foram selecionadas como entradas para o subsistema Ss .

O segundo termo, $\Delta s \cdot L$, foi inserido na linearização da rede de integração mássica no subsistema Ss . A matriz que representa este subsistema deriva das matrizes de reciclo/reuso e de *splits*. Com o intuito de facilitar a descrição da obtenção da matriz que representa este subsistema foi considerado um sistema menor: 3x3. Partindo da matriz de *splits* do sistema considerado, sem a coluna equivalente à água fresca:

$$s = \begin{bmatrix} s_{1,1} & s_{1,2} & s_{1,3} \\ s_{2,1} & s_{2,2} & s_{2,3} \\ s_{3,1} & s_{3,2} & s_{3,3} \end{bmatrix} \quad (\text{B.30})$$

cuja a soma de seus elementos, ao longo das colunas, apresenta valor unitário. Uma variação de $\Delta s_{1,1}$ em $s_{1,1}$ deve ser distribuída igualmente e negativamente nos outros *splits* que saem da mesma unidade, da seguinte forma:

$$s^* = \begin{bmatrix} s_{1,1} + \Delta s_{1,1} & s_{1,2} & s_{1,3} \\ s_{2,1} - \frac{\Delta s_{1,1}}{2} & s_{2,2} & s_{2,3} \\ s_{3,1} - \frac{\Delta s_{1,1}}{2} & s_{3,2} & s_{3,3} \end{bmatrix} \quad (\text{B.31})$$

Cabe salientar que o procedimento descrito anteriormente somente é válido para os *splits* que podem ser manipulados, segundo o critério apresentado no capítulo 5. As alterações nas vazões devido às variações feitas nos *splits* são apresentados na Equação B.32.

$$S_S = \begin{bmatrix} L_1^* \cdot \frac{s_{2,1} + s_{3,1}}{s_{2,1} + s_{3,1}} & 0 & 0 \\ -L_1^* \cdot \frac{s_{2,1}}{s_{2,1} + s_{3,1}} & 0 & 0 \\ -L_1^* \cdot \frac{s_{3,1}}{s_{2,1} + s_{3,1}} & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad (\text{B.32})$$

onde:

$$L_1^* = \begin{bmatrix} L_1 \cdot X_{out_{1,1}} \\ L_1 \cdot X_{out_{1,2}} \\ L_1 \cdot (10^6 - (X_{out_{1,1}} + X_{out_{1,2}})) \end{bmatrix} \quad (\text{B.33})$$

onde L_1^* é a vazão mássica total que sai da unidade 1. O fator 10^6 está presente na expressão para conversão de unidades.

B.5. Subsistema Divisor de Correntes

Na linearização da rede de integração para o subsistema *Divisor de Correntes*, a matriz que representa este subsistema apresenta a forma de uma matriz identidade com dimensão 21, ou seja: uma linha para cada um dos três componentes (poluente A, poluente B e água) das 6 unidades e da corrente de efluente líquido e uma coluna para cada um dos três componentes das 6 unidades e da corrente de *makeup*.

B.6. Subsistema Água Fresca

Na linearização da rede de integração para o subsistema *Água Fresca*, a matriz que representa este subsistema apresenta 4 colunas, que representam os 4 processos que podem receber água fresca de *makeup* e 18 linhas, representando a concentração de poluente A, de poluente B e de água, respectivamente, nas 6 unidades. A matriz que representa o subsistema *Água Fresca* apresenta a seguinte forma:

$$\text{Água Fresca} = \begin{bmatrix} XFini & 0^* & 0^* & 0^* \\ 0^* & XFini & 0^* & 0^* \\ 0^* & 0^* & XFini & 0^* \\ 0^* & 0^* & 0^* & XFini \\ 0^* & 0^* & 0^* & 0^* \\ 0^* & 0^* & 0^* & 0^* \end{bmatrix}, \quad (\text{B.34})$$

onde:

$$\mathbf{XFini} = \begin{bmatrix} XF_1 \\ XF_2 \\ 10^6 - (XF_1 + XF_2) \end{bmatrix} \text{ e } 0^* = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (\text{B.35})$$

B.7. Subsistema Efluente Líquido

O subsistema *Efluente Líquido* foi criado para obter como saída do sistema: as vazões de poluente A, de poluente B e de água no efluente líquido e suas respectivas concentrações. A matriz da linearização que representa o subsistema *Efluente Líquido* apresenta a seguinte forma:

$$\text{Efluente Líquido} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ \frac{1 - x_{7,1_0} \cdot 10^{-6}}{Lout_{7_0}} & \frac{-x_{7,1_0} \cdot 10^{-6}}{Lout_{7_0}} & \frac{-x_{7,1_0} \cdot 10^{-6}}{Lout_{7_0}} \\ \frac{-x_{7,2_0} \cdot 10^{-6}}{Lout_{7_0}} & \frac{1 - x_{7,2_0} \cdot 10^{-6}}{Lout_{7_0}} & \frac{-x_{7,2_0} \cdot 10^{-6}}{Lout_{7_0}} \\ \frac{-x_{7,3_0} \cdot 10^{-6}}{Lout_{7_0}} & \frac{-x_{7,3_0} \cdot 10^{-6}}{Lout_{7_0}} & \frac{1 - x_{7,3_0} \cdot 10^{-6}}{Lout_{7_0}} \end{bmatrix} \quad (\text{B.36})$$

Apêndice C: Resultados dinâmicos

C.1. Resultados

No presente apêndice são apresentados os resultados dos testes dinâmicos relativos aos índices operacionais definidos pelas Equações 5.18 a 5.22 na seção 5.3.7 do Capítulo 5. A Tabela C.2 apresenta os parâmetros utilizados nos projetos dos controladores. A Tabela C.3 apresenta os índices individuais de cada variável controlada e manipulada para mudanças de *set-points* enquanto que a Tabela C.4 apresenta os índices individuais de cada variável controlada e manipulada para distúrbios nas cargas de poluentes. A simbologia utilizada nas Tabelas C.2, C.3 e C.4 são apresentadas na Tabela C.1.

Tabela C.1: A simbologia utilizada nas Tabela C.2, C.3 e C.4.

Símbolo	Descrição
Mudança SP	Variável manipulada que sofreu a mudança de <i>set-point</i> (obtida através da Tabela 5.4 do Capítulo 5).
TS _i	Tempo de subida da variável controlada <i>i</i> utilizado no projeto do controlador.
OS _i	Máxima sobre-elevação da variável controlada <i>i</i> utilizado no projeto do controlador.
ITAE _i	Integral do erro absoluto considerando o erro na variável controlada <i>i</i> (definida pela Equação 5.18) para uma determinada perturbação ou mudança de <i>set-point</i> .
SITAE	Soma da integral do erro absoluto considerando de todos os ITAE _i para uma determinada perturbação ou mudança de <i>set-point</i> .
ITAAC _i	Integral absoluta da ação de controle da variável manipulada <i>i</i> , (definida pela Equação 5.19) para uma determinada perturbação ou mudança de <i>set-point</i> .
ITAAC	Soma da integral absoluta da ação de controle considerando de todos os ITAAC _i para uma determinada perturbação ou mudança de <i>set-point</i> .
AC _i	Ação de controle no estado estacionário (definida pela Equação 5.20) para a variável <i>i</i> para uma determinada perturbação ou mudança de <i>set-point</i> .
Soma(ABS)	Soma do valor absoluto da ação de controle considerando de todos os AC _i para uma determinada perturbação ou mudança de <i>set-point</i> .
Soma(WiXi)	Somatório das cargas de poluentes adicionadas ao despejo devido à perturbação ou distúrbio.
Soma(Fi)	Somatório das vazões de água de reposição adicionada ao sistema devido à perturbação ou distúrbio.
P2F1_A	Estrutura NLP – F _{máx} =1-A
P2F1_B	Estrutura NLP – F _{máx} =1-B
P5F1	Estrutura Oper 1 – F _{máx} =1
P6F1	Estrutura Oper 2 – F _{máx} =1
P7F1	Estrutura Oper 3 – F _{máx} =1
P2F4	Estrutura NLP – F _{máx} =4
P6F4	Estrutura Oper 2 – F _{máx} =4
P7F4	Estrutura Oper 3 – F _{máx} =4

Tabela C.3: Índices Operacionais para Mudanças em set-points (continua).

Estrutura	Mudança de SP	ITAE Var. 1	ITAE Var. 2	ITAE Var. 3	ITAE Var. 4	Soma ITAE	ITAAC Var. 1	ITAAC Var. 2	ITAAC Var. 3	ITAAC Var. 4	Soma ITAAC	AC 1	AC 2	AC 3	AC 4	Soma ABS	Soma WiXi	Soma Fi
P2F1_A	1	0,33	0,15	0,14	0,13	0,75	8,84	1,275	8,478	1,29	19,88	0,8196	-2E-05	0,776	0,0095	1,6051	0,5922	0
P2F1_A	2	0,01	0,11	0,07	0,02	0,2	2,89	3,106	3,061	2,99	12,05	-0,2027	-0,2375	-0,2143	-0,2281	0,8827	-3,4367	0
P2F1_A	3	0	0,03	0,04	0,01	0,08	14,1	12,01	15,02	11,6	52,82	-1,5239	-1,2951	-1,6172	-1,2551	5,6914	-17,298	0
P2F1_A	4	0	0,01	0,01	0,05	0,07	0,6	0,528	0,634	0,66	2,418	4E-06	3,7E-06	4,5E-06	-0,0225	0,0225	-0,23	0
P2F1_A	1,2,3,4	0,33	0,12	0,12	0,13	0,7	8,86	14,75	10,21	14,4	48,22	-0,907	-1,5326	-1,0555	-1,4962	4,9914	-20,37	0
P2F1_B	1	0,45	0,57	0,3	0,21	1,53	0,57	0,364	0,498	0,49	1,921	-0,0585	0,03494	0,05117	0,04914	0,1938	-97,848	-0,5680
P2F1_B	2	0,01	0,22	0,04	0,03	0,31	0,01	0,557	0,018	0,52	1,103	-0,0004	-0,061	-0,0009	-0,0571	0,1194	0,8616	-0,0079
P2F1_B	3	0,01	0,15	0,08	0,03	0,27	0,07	0,801	0,04	0,78	1,69	-0,0068	0,08304	-0,0037	0,08114	0,1747	-0,5389	-0,0660
P2F1_B	4	0,01	0,06	0,04	0,42	0,53	0	0,008	0,003	0,21	0,229	-9E-08	1,9E-08	4,5E-08	-0,0225	0,0225	0,2054	-0,0007
P2F1_B	1,2,3,4	0,45	0,75	0,35	0,48	2,02	0,64	0,583	0,45	0,51	2,188	-0,0657	0,05698	0,04657	0,05074	0,2200	-97,320	-0,6426
P5F1	1	1,65	0,17	0,24	0,36	2,43	0,79	0,074	0,05	0,54	1,45	0,0892	-0,0098	0,00526	0,06064	0,1649	-4,5346	0
P5F1	2	0,01	0,15	0,04	0,02	0,22	0,01	0,02	0,013	0,06	0,105	6E-05	-0,002	-0,0001	0,00612	0,0083	1,4702	0
P5F1	3	0,01	0,02	0,41	0,01	0,45	0,1	5E-04	0,102	0	0,203	0,0105	-9E-07	-0,0108	-0,0002	0,0214	9,3448	0
P5F1	4	0	0,01	0,01	1,56	1,58	0	0,193	0,002	0	0,2	4E-06	0,02274	-3E-06	0,00037	0,0231	0,3771	0
P5F1	1,2,3,4	1,65	0,28	0,55	1,6	4,09	0,9	0,109	0,062	0,6	1,667	0,0997	0,01094	-0,0056	0,06697	0,1833	6,6574	0
P6F1	1	0,89	0,34	0,45	0,11	1,8	0,81	0,079	0,05	0,56	1,5	0,0862	-0,0098	0,00475	0,05941	0,1601	-14,551	0
P6F1	2	0,01	0,39	0,05	0,03	0,48	0,01	0,02	0,014	0,06	0,101	0,0003	-0,0021	-0,0007	0,00595	0,0091	1,2688	0
P6F1	3	0	0,04	0,41	0,01	0,47	0,09	7E-04	0,092	0	0,189	0,0099	-1E-07	-0,0097	-0,0004	0,0200	9,1431	0
P6F1	4	0,01	0,08	0,06	0,51	0,66	0	0,216	0,005	0,01	0,238	3E-07	0,02302	-2E-07	0,00131	0,0243	0,3198	0
P6F1	1,2,3,4	0,89	0,59	0,85	0,53	2,87	0,92	0,121	0,057	0,63	1,721	0,0964	0,0112	-0,0057	0,06632	0,1796	-3,8190	0

Tabela C.3: Índices Operacionais para Mudanças em set-points (conclusão).

Estrutura	Mudança de SP	ITAE Var. 1	ITAE Var. 2	ITAE Var. 3	ITAE Var. 4	Soma ITAE	ITAAC Var. 1	ITAAC Var. 2	ITAAC Var. 3	ITAAC Var. 4	Soma ITAAC	AC 1	AC 2	AC 3	AC 4	Soma ABS	Soma WiXi	Soma Fi
P7F1	1	1,78	0,49	0,24	0,96	3,47	8,02	8,261	0,822	0,05	17,16	-0,9004	-0,9307	0,09278	0,00565	1,9296	-4,9712	0,0549
P7F1	2	0	1,14	0,06	0,03	1,23	0,51	0,546	0,016	0,02	1,095	-0,0656	-0,0694	-0,0013	-0,0011	0,1374	-1,1883	-0,0181
P7F1	3	0,01	0,16	0,46	0,08	0,7	1,75	1,777	0,069	0,11	3,706	0,1832	0,18637	-0,0072	-0,0117	0,3885	-7,2898	-0,1121
P7F1	4	0	0,08	0,01	0,87	0,97	0,21	0,045	0,004	0	0,265	-0,0225	1,5E-06	-2E-07	2,5E-08	0,0225	0,0183	-0,0021
P7F1	1,2,3,4	1,77	1,02	0,66	1,7	5,15	7,08	7,122	0,739	0,08	15,01	-0,8054	-0,8137	0,08433	-0,0072	1,7106	-13,43	-0,0774
P2F4	1	0,76	0,01	0,03	0,08	0,88	0,88	0,019	0,014	0,89	1,799	-0,0931	-0,0022	-0,0002	0,09877	0,1943	-21,496	-0,8969
P2F4	2	0	0,02	0	0	0,02	0	0,183	1E-06	0	0,183	-4E-08	-0,0183	8,3E-08	4,1E-05	0,0183	-3,8256	-0,1826
P2F4	3	0,05	0,01	0,03	0,06	0,15	0,51	0,006	0,864	0,66	2,039	-0,0509	5E-05	-0,083	0,06474	0,1986	-46,955	-1,2960
P2F4	4	0	0	0	0,2	0,2	0	0,032	0,004	0,77	0,806	-0,0002	0,00331	0,00038	-0,0805	0,0844	-2,7584	0,0333
P2F4	1,2,3,4	0,77	0,03	0,05	0,21	1,05	1,38	0,17	0,856	0,81	3,214	-0,1441	-0,0171	-0,0828	0,08304	0,3271	-75,035	-2,3422
P6F4	1	0,43	0,05	0,03	0,01	0,53	1,04	0,085	0,109	0,21	1,441	-0,1068	-0,0095	0,01155	0,02276	0,1506	-24,491	-1,1201
P6F4	2	0	0,25	0	0	0,25	0	0,174	9E-04	0	0,176	-0,0001	-0,0175	9,6E-05	3,8E-05	0,0178	-3,80	-0,1748
P6F4	3	0,04	0,17	0,16	0,02	0,4	0,19	0,06	0,433	0,03	0,707	0,0193	0,0062	-0,0452	-0,0027	0,0734	6,9268	0,2454
P6F4	4	0,01	0,13	0,02	0,22	0,38	0,24	0,71	0,144	0,89	1,986	0,0257	0,07463	-0,0152	-0,093	0,2084	28,78	0,9544
P6F4	1,2,3,4	0,44	0,47	0,18	0,23	1,33	0,61	0,511	0,468	0,7	2,29	-0,062	0,05375	-0,0487	-0,0729	0,2373	7,4180	-0,0952
P7F4	1	0,45	0,18	0,07	0,11	0,82	0,14	0,405	0,312	0,16	1,02	0,0123	0,04119	-0,0363	0,01278	0,1026	-6,5755	0
P7F4	2	0	0,03	0	0	0,03	0	0,004	2E-05	0,06	0,068	-2E-09	-0,0004	2,4E-09	-0,0064	0,0068	2,1409	0
P7F4	3	0,03	0,15	0,82	0,11	1,11	1,96	0,04	3,872	0,46	6,338	-0,2129	0,00431	0,42536	0,04904	0,6916	4,1882	0
P7F4	4	0,01	0,01	0,01	0,41	0,44	0,78	0,042	0,004	0,55	1,375	-0,0829	0,00435	-0,0003	0,05858	0,1461	-30,565	0
P7F4	1,2,3,4	0,44	0,2	0,89	0,61	2,15	2,7	0,484	3,612	1,11	7,91	-0,2835	0,04947	0,38878	0,11402	0,8358	-30,81	0

Tabela C.4: Índices operacionais para distúrbios nas cargas de poluentes (continua)

Estrutura	Variável Perturbada	ITAE Var. 1	ITAE Var. 2	ITAE Var. 3	ITAE Var. 4	Soma ITAE	ITAAC Var. 1	ITAAC Var. 2	ITAAC Var. 3	ITAAC Var. 4	Soma ITAAC	AC 1	AC 2	AC 3	AC 4	Soma ABS	Soma WiXi	Soma Fi
P2F1_A	1	0,11	0,028	0,032	0,025	0,195	3,8657	0,2430	3,6905	0,2331	8,0323	-0,4099	-0,0001	-0,3882	0,0026	0,8008	-0,2220	0
P2F1_A	2	0	0,021	0,007	0,005	0,033	4,9059	4,4572	5,2034	4,3104	18,8769	0,5689	0,5161	0,6033	0,4992	2,1875	5,9196	0
P2F1_A	3	0	0,004	0,01	0,002	0,016	4,3761	3,7148	4,6447	3,6000	16,3356	0,5078	0,4316	0,5389	0,4182	1,8965	5,3255	0
P2F1_A	4	0	0,004	8E-04	0,008	0,013	0,0994	0,0866	0,1050	0,1489	0,4399	-0,0001	-0,0001	-0,0002	0,0074	0,0078	0,0740	0
P2F1_A	1,2,3,4	0,11	0,028	0,037	0,023	0,197	5,5157	8,0272	6,2634	7,8629	27,669	0,6666	0,9474	0,7539	0,9274	3,2953	11,0970	0
P2F1_B	1	0,15	0,113	0,079	0,072	0,412	0,2549	0,1533	0,2232	0,1495	0,7810	0,0293	-0,0175	-0,0256	-0,0171	0,0894	43,8289	0,255
P2F1_B	2	0	0,026	0,014	0,009	0,053	0,0206	0,0443	0,0144	0,0317	0,1110	0,0023	0,0050	0,0016	0,0036	0,0125	-0,2012	0,021
P2F1_B	3	0	0,012	0,013	0,005	0,032	0,0205	0,2486	0,0112	0,2430	0,5233	0,0023	-0,0277	0,0012	-0,0270	0,0582	0,1757	0,020
P2F1_B	4	0	0,011	0,009	0,103	0,126	0,0006	0,0011	0,0005	0,0655	0,0676	0,0000	0,0000	0,0000	0,0075	0,0075	-0,0680	0,000
P2F1_B	1,2,3,4	0,14	0,139	0,086	0,182	0,548	0,2962	0,3557	0,1973	0,2931	1,1423	0,0338	-0,0401	-0,0228	-0,0330	0,1297	43,7355	0,296
P5F1	1	0,71	0,065	0,087	0,438	1,301	0,3506	0,0235	0,0218	0,2391	0,6349	-0,0444	-0,0027	-0,0026	-0,0303	0,0800	1,9186	0
P5F1	2	0	0,044	0,094	0,006	0,146	0,0308	0,0092	0,0320	0,0270	0,0990	-0,0035	0,0010	0,0036	-0,0030	0,0111	-3,1911	0
P5F1	3	0	0,005	0,094	0,002	0,103	0,0305	0,0001	0,0316	0,0005	0,0627	-0,0035	0,0000	0,0036	0,0001	0,0071	-2,8853	0
P5F1	4	0	0,002	0,001	0,478	0,483	0,0004	0,0591	0,0007	0,0012	0,0615	0,0000	-0,0076	0,0000	-0,0001	0,0077	-0,1236	0
P5F1	1,2,3,4	0,71	0,079	0,234	0,891	1,914	0,4121	0,0737	0,0424	0,2668	0,7950	-0,0514	-0,0092	0,0046	-0,0334	0,0985	-4,2814	0
P6F1	1	0,33	0,095	0,145	0,086	0,656	0,3629	0,0267	0,0219	0,2539	0,6653	-0,0431	-0,0028	-0,0024	-0,0302	0,0784	6,4033	0
P6F1	2	0	0,141	0,087	0,007	0,238	0,0292	0,0091	0,0303	0,0251	0,0937	-0,0033	0,0010	0,0034	-0,0029	0,0107	-2,9451	0
P6F1	3	0	0,007	0,096	0,002	0,107	0,0290	0,0001	0,0284	0,0010	0,0585	-0,0033	0,0000	0,0032	0,0001	0,0067	-2,8238	0
P6F1	4	0	0,015	0,012	0,11	0,138	0,0006	0,0670	0,0010	0,0040	0,0726	0,0000	-0,0077	0,0000	-0,0004	0,0081	-0,1058	0
P6F1	1,2,3,4	0,33	0,185	0,274	0,184	0,972	0,4213	0,0845	0,0374	0,2820	0,8253	-0,0497	-0,0094	0,0043	-0,0333	0,0968	0,5286	0

Tabela C.4: Índices operacionais para distúrbios nas cargas de poluentes (conclusão).

Estrutura	Variável Perturbada	ITAE Var. 1	ITAE Var. 2	ITAE Var. 3	ITAE Var. 4	Soma ITAE	ITAAC Var. 1	ITAAC Var. 2	ITAAC Var. 3	ITAAC Var. 4	Soma ITAAC	AC 1	AC 2	AC 3	AC 4	Soma ABS	Soma WiXi	Soma Fi
P7F1	1	0,78	0,225	0,104	0,376	1,484	3,6101	3,6588	0,3638	0,0240	7,6566	0,4563	0,4641	-0,0463	-0,0028	0,9694	2,1503	-0,024
P7F1	2	0	0,487	0,08	0,013	0,583	0,2443	0,2376	0,0254	0,0375	0,5449	-0,0246	-0,0238	0,0029	0,0042	0,0555	2,4988	0,038
P7F1	3	0	0,036	0,094	0,017	0,149	0,5417	0,5509	0,0214	0,0347	1,1487	-0,0610	-0,0621	0,0024	0,0039	0,1294	2,2704	0,035
P7F1	4	0	0,018	0,002	0,236	0,257	0,0623	0,0113	0,0010	0,0010	0,0757	0,0075	0,0000	0,0000	0,0000	0,0076	-0,0066	0,001
P7F1	1,2,3,4	0,77	0,393	0,199	0,61	1,976	2,9134	2,8994	0,3170	0,0490	6,1788	0,3781	0,3782	-0,0410	0,0053	0,8027	6,9130	0,049
P2F4	1	0,29	0,001	0,008	0,046	0,347	0,3923	0,0005	0,0009	0,1817	0,5754	0,0466	0,0000	0,0000	-0,0229	0,0695	10,4896	0,392
P2F4	2	0	0,007	2E-08	2E-06	0,007	0,0000	0,0821	0,0000	0,0002	0,0823	0,0000	0,0091	0,0000	0,0000	0,0092	1,8385	0,082
P2F4	3	0,01	4E-04	0,002	0,004	0,013	0,1526	0,0002	0,2498	0,1935	0,5961	0,0170	0,0000	0,0277	-0,0216	0,0662	14,5746	0,402
P2F4	4	0	9E-04	4E-05	0,047	0,048	0,0005	0,0098	0,0011	0,2383	0,2497	0,0001	-0,0011	-0,0001	0,0268	0,0281	0,8812	-0,010
P2F4	1,2,3,4	0,29	0,007	0,01	0,092	0,399	0,5454	0,0717	0,2486	0,1393	1,0051	0,0636	0,0080	0,0275	-0,0177	0,1169	27,7839	0,866
P6F4	1	0,13	0,011	0,009	0,01	0,162	0,4532	0,0020	0,0413	0,0495	0,5460	0,0519	0,0002	-0,0049	-0,0057	0,0627	9,6431	0,455
P6F4	2	0	0,052	4E-04	4E-05	0,053	0,0001	0,0779	0,0007	0,0001	0,0788	0,0000	0,0088	0,0001	0,0000	0,0089	1,8084	0,078
P6F4	3	0,01	0,029	0,046	0,003	0,085	0,0580	0,0182	0,1343	0,0083	0,2188	-0,0064	-0,0021	0,0151	0,0009	0,0245	-2,1582	-0,076
P6F4	4	0	0,016	0,004	0,059	0,08	0,0742	0,2199	0,0446	0,2750	0,6137	-0,0084	-0,0249	0,0050	0,0310	0,0692	-8,8812	-0,294
P6F4	1,2,3,4	0,13	0,073	0,045	0,069	0,317	0,3211	0,1588	0,1383	0,2337	0,8519	0,0371	-0,0180	0,0153	0,0261	0,0965	0,4121	0,162
P7F4	1	0,13	0,076	0,022	0,024	0,249	0,0706	0,187	0,1257	0,133	0,516	0,00533	-0,0213	0,01827	-0,0146	0,0595	6,4155	0
P7F4	2	0	0,015	8E-06	8E-05	0,015	8E-06	0,002	4E-06	0,029	0,03	-1E-10	0,00019	-2,5E-10	0,0032	0,0034	-0,8453	0
P7F4	3	0,01	0,036	0,223	0,028	0,292	0,6087	0,013	1,1993	0,144	1,964	0,07124	-0,0014	-0,14233	-0,0164	0,2314	-1,2759	0
P7F4	4	0	0,002	0,001	0,098	0,104	0,2421	0,015	0,0023	0,172	0,432	0,0277	-0,0017	0,00033	-0,0197	0,0495	9,5563	0
P7F4	1,2,3,4	0,13	0,07	0,243	0,148	0,586	0,9215	0,213	1,0863	0,42	2,641	0,10426	-0,0243	-0,12373	-0,0475	0,2998	13,8506	0

Apêndice D: Resultados dos Problemas de Otimização

D.1. Resultados

Para obtenção dos resultados inicialmente foi necessário a geração de estimativas iniciais para os problemas de otimização. As estimativas iniciais foram obtidas a partir da resolução de um problema NLP conforme descrito no Capítulo 4 seção 4.1.4. Os resultados dos problemas quando a vazão máxima de água fresca é de 1 t/h apresentam-se na Tabela D.2, enquanto que para os problemas onde a vazão máxima de água de reposição é 4 t/h os resultados são apresentados na Tabela D.3. A simbologia utilizada é apresentada na Tabela D.1. Para avaliar a eficiência entre as implementações, os tempos computacionais de cada problema, com exceção da geração de estimativas iniciais, foram registrados. A Tabela D.4 apresenta uma comparação entre os tempos de resolução de cada problema, sendo que em alguns, houve falha no algoritmo de otimização e o tempo não foi apresentado.

Os resultados referentes à implementação MINLP original (ou completa), cuja formulação é apresentada na seção 3.2.1 do Capítulo 3, é apresentada na Tabela D.5.

Na Tabela D.6 são apresentados os resultados referentes à implementação MINLP reduzida, cuja formulação apresenta-se na seção 4.1.1 do Capítulo 4.

Os resultados referentes à implementação NLP original (ou completa), cuja formulação é apresentada na seção 4.1.2 do Capítulo 4, é apresentada na Tabela D.7.

Na Tabela D.8 são apresentados os resultados referentes à implementação NLP reduzida, cuja formulação apresenta-se na seção 4.1.3 do Capítulo 4.

Os resultados referentes às implementações operacionais 1, 2 e 3 , são apresentados na Tabela D.9, D.10 e D.11 respectivamente.

Para fins de comparação, as estimativas iniciais com o resultado de cada problema foram agrupadas sendo apresentadas na Tabela D.12.

O melhor resultado do problema resolvido pelo método NLP, MINLP e das implementações operacionais 1, 2 e 3 são apresentados na Tabela D.13 para fins de comparação.

Os pesos w_i utilizados nas otimizações, tanto externa (para os problemas com considerações econômicas e operacionais) quanto interna (para os problemas com considerações operacionais) são apresentados na Tabela D.14.

Tabela D.1: Simbologia utilizada nas tabelas de resultados.

Variável	Descrição da Variável
xo_i	Estimativa inicial viável i obtida a partir do problema de otimização.
Xf_i	Resultado da otimização utilizando a estimativa inicial xo_i .
L_i	Vazão da corrente que sai do processo i .
$Fval$	Valor da função objetivo no ponto ótimo.
Lin_i	Vazão da corrente que deixa o misturador e alimenta o processo i .
$Lout_i$	Vazão que deixa o processo i e alimenta o divisor de corrente .
F_i	Vazão de água de reposição que alimenta o misturador do processo i .
W_i	Vazão de água que deixa o divisor do processo i e é destinada ao despejo.
SM_1	Vazão do componente 1 removida no regenerador 5.
SM_2	Vazão do componente 2 removida no regenerador 6.
$Xin_{i,j}$	Fração mássica do componente j que alimenta a unidade i .
$Xout_{i,j}$	Fração mássica do componente j que deixa o unidade i .
$Folga$	$Xin_{i,j} - Xin_{i,j}^{\max}$
$Xin_{i,j}$	

Tabela D.2: Estimativas iniciais para a vazão máxima de água de reposição de 1 t/h.

Processo	Li,K	L ₁	L ₂	L ₃	L ₄	L ₅	L ₆	Lout _i	Lin _i	F _i	W _i	SM ₁	SM ₂	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}	Xout _{i,1}	Xout _{i,2}	Folga Xin _{i,1}	Folga Xin _{i,2}	
Estim. inicial	xo1																			
	1	0	0	0	0	0	1	2	2	1	0	0	0	21,999	7,9999	29,499	12,5	0	0,00014	
	2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	0,759	0	0	3,9999	20	24,997	128,98	0	0	
	3	0	1,123	0	1,383	0,109	0,385	3	3	0	0,004	0	0	29,998	59,765	39,997	69,764	0	9,8E-05	
	4	2	0	0	0	1	0	3	3	0	0,237	0	0	20,999	15	33,332	19,999			
	5	0	0,118	0	1,38	0	1,611	3,11	3,109	0	0	100,97	0	36,469	19,999	3,9999	20			
	6	0	0	2,996	0	0	0	3	2,996	0	0	0	173,068	39,997	69,764	39,999	12			
Estim. inicial	xo2																			
	1	0	0	0	0	0	1	2	2	1	0	0	0	21,999	7,9999	29,499	12,5	5,2E-19	0,00014	
	2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	1	0	0	3,9999	20	24,997	128,98	2,4E-05	0,00012	
	3	0	0,912	0	1,28	0,216	0,592	3	3	0	0	0	0	29,999	51,567	39,998	61,566	2,3E-19	0	
	4	2	0	0	0	1	0	3	3	0	0	0	0	20,999	15	33,332	19,999	9,4E-21	9,8E-05	
	5	0	0,087	0,035	1,72	0	1,373	3,22	3,216	0	0	103	0	36,025	19,999	3,9999	20			
	6	0	2E-04	2,965	0	0	0	2,97	2,965	0	0	0	146,998	39,997	61,571	39,999	12			
Estim. inicial	xo3																			
	1	0	0	0	0	0	1	2	2	1	0	0	0	21,999	7,9999	29,499	12,5	0	0,00014	
	2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	0,023	0	0	3,9999	20	24,997	128,98	2,4E-05	0,00012	
	3	0	1,919	0	0,002	0,033	1,046	3	3	0	0,049	0	0	29,997	86,925	39,996	96,923	0	0	
	4	2	0	0	0	1	0	3	3	0	0,929	0	0	20,999	15	33,332	19,999	5,1E-23	9,8E-05	
	5	0	0,059	0,01	2,07	0	0,895	3,03	3,034	0	0	94,531	0	35,161	19,999	3,9999	20			
	6	0	0	2,941	0	0	0	2,94	2,941	0	0	0	249,799	39,996	96,923	39,999	12			
Estim. inicial	xo4																			
	1	0	0	0	0	0	1	2	2	1	0	0	0	21,999	7,9999	29,499	12,5	0	0,00014	
	2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	1	0	0	3,9999	20	24,997	128,98	2,4E-05	0,00012	
	3	0	0,963	0	0,135	0,407	1,495	3	3	0	4E-04	0	0	29,999	51,007	39,998	61,006	0	0	
	4	2	0	0	0	1	0	3	3	0	0	0	0	20,999	15	33,332	19,999	0	9,8E-05	
	5	0	0,037	0	2,865	0	0,505	3,41	3,407	0	0	102,99	0	34,23	19,999	3,9999	20			
	6	0	2E-04	3	0	0	0	3	3	0	0	0	147,029	39,997	61,011	39,999	12			

Tabela D.2: Estimativas iniciais para a vazão máxima de água de reposição de 1 t/h.

Processo	Li,K	L ₁	L ₂	L ₃	L ₄	L ₅	L ₆	Lout _i	Lin _i	F _i	W _i	SM ₁	SM ₂	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}	Xout _{i,1}	Xout _{i,2}	Folga Xin _{i,1}	Folga Xin _{i,2}	
Estim. inicial	xo5																			
	1	0	0	0	0	0	1	2	2	1	0	0	0	21,999	7,9999	29,499	12,5	0	0,00014	
	2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	0,887	0	0	3,9999	20	24,997	128,98	2,4E-05	0,00012	
	3	0	1,007	0	1,276	0,177	0,539	3	3	0	0	0	0	29,998	55,144	39,997	65,142	3,3E-19	0	
	4	2	0	0	0	1	0	3	3	0	0,113	0	0	20,999	15	33,332	19,999	0	9,8E-05	
	5	0	0,107	0,001	1,61	0	1,459	3,18	3,177	0	0	102,05	0	36,118	19,999	3,9999	20			
	6	0	0	2,999	0	0	0	3	2,999	0	0	0	159,362	39,997	65,142	39,999	12			
Estim. inicial	xo6																			
	1	0	0	0	0	0	1	2	2	1	0	0	0	21,999	7,9999	29,499	12,5	0	0,00014	
	2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	0,992	0	0	3,9999	20	24,997	128,98	2,4E-05	0,00012	
	3	0	1,004	0	1E-04	0,415	1,581	3	3	0	0,007	0	0	29,999	52,244	39,998	62,243	0	0	
	4	2	0	0	0	1	0	3	3	0	8E-04	0	0	20,999	15	33,332	19,999	1,2E-21	9,8E-05	
	5	0	0,005	0,055	2,999	0	0,356	3,42	3,415	0	0	102,88	0	34,124	19,999	3,9999	20			
	6	0	0	2,937	0	1E-04	0	2,94	2,937	0	0	0	147,586	39,997	62,241	39,999	12			
Estim. inicial	xo7																			
	1	0	0	0	0	0	1	2	2	1	0	0	0	21,999	7,9999	29,499	12,5	0	0,00014	
	2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	1	0	0	3,9999	20	24,997	128,98	2,4E-05	0,00012	
	3	0	0,933	0	0,803	0,296	0,968	3	3	0	0	0	0	29,999	51,321	39,998	61,32	-5E-19	0	
	4	2	0	0	0	1	0	3	3	0	0	0	0	20,999	15	33,332	19,999	0	9,8E-05	
	5	0	0,067	0,02	2,197	0	1,012	3,3	3,296	0	0	103	0	35,252	19,999	3,9999	20			
	6	0	2E-04	2,98	0	0	0	2,98	2,98	0	0	0	146,998	39,997	61,325	39,999	12			
Estim. inicial	xo8																			
	1	0	0	0	0	0	1	2	2	1	0	0	0	21,999	7,9999	29,499	12,5	-3E-24	0,00014	
	2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	0,786	0	0	3,9999	20	24,997	128,98	2,4E-05	0,00012	
	3	0	1,2	0	1,8	0	0	3	3	0	0	0	0	29,999	63,583	39,998	73,582	0	0	
	4	2	0	0	0	1	0	3	3	0	0,215	0	0	20,999	15	33,332	19,999	1,8E-23	9,8E-05	
	5	0	0,015	0,233	0,985	0	1,767	3	3	0	0	101,21	0	37,736	19,999	3,9999	20			
	6	0	0	2,767	5E-04	0	0	2,77	2,767	0	0	0	170,381	39,997	73,571	39,999	12			

Tabela D.2: Estimativas iniciais para a vazão máxima de água de reposição de 1 t/h.

Processo	Li,K	L ₁	L ₂	L ₃	L ₄	L ₅	L ₆	Lout _i	Lin _i	F _i	W _i	SM ₁	SM ₂	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}	Xout _{i,1}	Xout _{i,2}	Folga Xin _{i,1}	Folga Xin _{i,2}
Estim. inicial	xo9																		
	1	0	0	0	0	0	1	2	2	1	0	0	0	21,999	7,9999	29,499	12,5	-7E-22	0,00014
	2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	1	0	0	3,9999	20	24,997	128,98	2,4E-05	0,00012
	3	0,2375	1	0	1,754	0,009	0	3	3	0	0	0	0	29,999	55,849	39,998	65,848	1,1E-20	0
	4	1,7625	0	0	0	1,092	0,145	3	3	0	0	0	0	20,721	15,207	33,053	20,206	-3E-17	0,20713
	5	0	0	0,271	1,246	0	1,584	3,1	3,102	0	0	103	0	37,208	19,999	3,9999	20		
	6	0	3E-04	2,729	0	0	0	2,73	2,729	0	0	0	146,998	39,997	65,854	39,999	12		
Estim. inicial	xo10																		
	1	0	0	0	0	0	1	2	2	1	0	0	0	21,999	7,9999	29,499	12,5	0	0,00014
	2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	0,996	0	0	3,9999	20	24,997	128,98	2,4E-05	0,00012
	3	0	0,982	0	0	0,424	1,594	3	3	0	2E-04	0	0	29,998	51,426	39,997	61,424	-2E-18	0
	4	2	0	0	0	1	0	3	3	0	0,004	0	0	20,999	15	33,332	19,999	0	9,8E-05
	5	0	0,022	0,018	2,997	0	0,388	3,42	3,424	0	0	102,97	0	34,069	19,999	3,9999	20		
	6	0	0	2,982	0	0	0	2,98	2,982	0	0	0	147,399	39,997	61,424	39,999	12		
Estim. inicial	xo11																		
	1	0	0	0	0	0	1	2	2	1	0	0	0	21,999	7,9999	29,499	12,5	0	0,00014
	2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	1	0	0	3,9999	20	24,997	128,98	2,4E-05	0,00012
	3	0	0,857	0	2,045	0,097	0	3	3	0	0	0	0	29,999	51,15	39,998	61,149	0	0
	4	2	0	0	0	1	0	3	3	0	0	0	0	20,999	15	33,332	19,999	0	9,8E-05
	5	0	0,143	0,009	0,954	0	1,991	3,1	3,097	0	0	103	0	37,254	19,999	3,9999	20		
	6	0	0	2,991	5E-04	0	0	2,99	2,991	0	0	0	146,998	39,997	61,141	39,999	12		

Tabela D.3: Estimativas iniciais para a vazão máxima de água de reposição de 4 t/h.

Processo	Li,K	L ₁	L ₂	L ₃	L ₄	L ₅	L ₆	Lout _i	Lin _i	F _i	W _i	SM ₁	SM ₂	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}	Xout _{i,1}	Xout _{i,2}	Folga Xin _{i,1}	Folga Xin _{i,2}	
Estim. inicial	xo1																			
	1	0	0	0	0,104	0,395	0	2	2	1,5	0	0	0	4,7784	7,9991	12,278	12,499	5,1E-20	-3E-20	
	2	0	0	0	0	1,683	0	2	2	0,32	1,922	0	0	3,9999	17,46	24,997	126,44	3,9E-05	0	
	3	0,3717	0,051	0	1,033	0,377	0	3	3	1,17	0,736	0	0	10,512	14,648	20,512	24,648	-3E-19	3E-19	
	4	0,3753	0,027	0,243	0	1,339	0	3	3	1,01	1,342	0	0	6,5674	15	18,9	19,999	-2E-19	-8E-19	
	5	1,253	0	2,02	0,52	0	0	3,79	3,794	0	0	51,49	0	17,571	19,998	3,9999	20			
	6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0			
Estim. inicial	xo2																			
	1	0	2E-04	3E-04	1E-03	0	0,993	2	2	1,01	0	0	0	21,903	7,9998	29,403	12,5	0	3E-19	
	2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	1,707	0	0	3,9999	19,999	24,997	128,98	2,4E-05	-5E-19	
	3	2	0,116	0	0,16	0,001	0,56	3	3	0,16	0,12	0	0	29,998	16,828	39,998	26,827	4,8E-20	0	
	4	0	0,178	0	0	0	1,258	3	3	1,56	0,906	0	0	20,333	14,749	32,666	19,749	0	0	
	5	0	1E-04	0,068	1,933	0	0	2	2,001	0	0	57,871	0	32,916	19,999	3,9999	20			
	6	0	0	2,811	0	0	0	2,81	2,811	0	0	0	41,6853	39,997	26,827	39,999	12			
Estim. inicial	xo3																			
	1	0	0	0	0	0	0,928	2	2	1,07	0,122	0	0	20,695	7,7099	28,194	12,21	0	0	
	2	0	0	0	0	1,269	0	2	2	0,73	0,467	0	0	3,9999	14,148	24,997	123,13	5,9E-05	0	
	3	0,5297	1,288	0	0,483	0,029	0,667	3	3	0	0	0	0	29,997	61,02	39,997	71,018	0	0	
	4	0,3936	0,147	0,004	0	0,123	1,055	3	3	1,28	2,497	0	0	20,912	14,456	33,244	19,456	0	0	
	5	0,9549	0,099	0	0,019	0	0,347	1,42	1,42	0	0	38,245	0	30,925	19,997	3,9999	20			
	6	0	0	2,996	7E-04	0	0	3	2,997	0	0	0	176,834	39,995	71,006	39,999	12			
Estim. inicial	xo4																			
	1	0	0	0	0,518	0	0,051	2	2	1,43	0,007	0	0	11,641	7,8661	19,141	12,366	0	0	
	2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	1,339	0	0	3,9999	19,999	24,997	128,98	2,4E-05	0	
	3	0,0557	0,508	0	2,118	0	0,318	3	3	0	0	0	0	29,996	36,152	39,995	46,151	0	0	
	4	1,9299	0	0	0	0,543	0,325	3	3	0,2	0,287	0	0	17,645	13,146	29,978	18,145	0	0	
	5	0,0073	0,153	0,056	0,077	0	2,249	2,54	2,543	0	0	88,328	0	38,732	19,999	3,9999	20			
	6	0	0	2,944	0	0	0	2,94	2,943	0	0	0	100,533	39,995	46,151	39,999	12			

Tabela D.3: Estimativas iniciais para a vazão máxima de água de reposição de 4 t/h.

Processo	Li,K	L ₁	L ₂	L ₃	L ₄	L ₅	L ₆	Lout _i	Lin _i	F _i	W _i	SM ₁	SM ₂	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}	Xout _{i,1}	Xout _{i,2}	Folga Xin _{i,1}	Folga Xin _{i,2}	
Estim. inicial	xo5																			
	1	0	0	0	0,002	0	0,993	2	2	1,01	0,832	0	0	21,9	7,9863	29,4	12,486	0	8,4E-18	
	2	0	0	0	0	1,016	0	2	2	0,98	1,314	0	0	4	12,129	24,997	121,11	7,1E-05	0	
	3	0,3723	0,473	0	1,648	0,207	0,292	3	3	0,01	0	0	0	29,999	34,159	39,998	44,158	5,1E-17	0	
	4	0,2315	0,127	0	0	0,411	1,166	3	3	1,06	0,915	0	0	20,842	14,927	33,175	19,926	0	3,1E-18	
	5	0,564	0,085	6E-04	0,435	0	0,548	1,63	1,634	0	0	48,584	0	33,737	19,999	3,9999	20			
	6	0,0002	0	2,999	0	0	0	3	3	0	0	0	96,4594	39,998	44,156	39,999	12			
Estim. inicial	xo6																			
	1	0	0	0	0,194	0	0,612	2	2	1,19	0,428	0	0	17,814	7,9533	25,314	12,453	0	1,4E-18	
	2	0	0	0	0	1,502	0	2	2	0,5	0,538	0	0	3,9999	16,017	24,997	125	4,8E-05	-9E-17	
	3	0,2623	1,316	0	0,714	0,036	0,672	3	3	0	0	0	0	29,999	63,493	39,998	73,491	0	0	
	4	0,6833	0,039	0	0	0,843	0,948	3	3	0,49	1,213	0	0	20,497	14,509	32,83	19,509	0	-2E-18	
	5	0,6264	0,108	0	0,878	0	0,769	2,38	2,381	0	0	68,616	0	32,813	19,998	3,9999	20			
	6	0	0	3	7E-04	0	0	3	3,001	0	0	0	184,486	39,996	73,479	39,999	12			
Estim. inicial	xo7																			
	1	0	7E-04	0	0,025	6E-04	0,942	2	2	1,03	0,049	0	0	21,332	7,9996	28,831	12,499	-1E-19	0	
	2	0	0	0	0	1,316	0	2	2	0,68	0,755	0	0	3,9999	14,529	24,997	123,51	5,8E-22	-4E-18	
	3	0,3157	1,069	0	1,372	0,006	0,238	3	3	0	0	0	0	29,998	54,825	39,997	64,824	1,9E-19	0	
	4	1,4623	0,047	6E-04	0	0,524	0,314	3	3	0,65	1,564	0	0	20,205	13,645	32,537	18,644	-2E-18	-1E-16	
	5	0,1733	0,129	0	0,039	0	1,505	1,85	1,846	0	0	62,303	0	37,743	19,999	3,9999	20			
	6	0	0	2,999	0	0	0	3	2,999	0	0	0	158,443	39,997	64,824	39,999	12			
Estim. inicial	xo8																			
	1	0	0,003	0	0,122	0,017	0,675	2	2	1,18	0,749	0	0	17,979	7,9998	25,479	12,5	0	0	
	2	0	0	0	0	0,485	0	2	2	1,52	0,808	0	0	4	7,8799	24,997	116,86	-9E-21	0	
	3	0,2769	1,098	0	0,705	0,134	0,787	3	3	0	0,04	0	0	29,999	52,665	39,998	62,664	-1E-21	0	
	4	0,7384	0,028	0	0	0,994	0,96	3	3	0,28	1,38	0	0	21	14,999	33,333	19,998	0	0	
	5	0,2359	0,063	0	0,793	0	0,538	1,63	1,63	0	0	49,024	0	34,077	19,999	3,9999	20			
	6	0	0	2,96	0	0	0	2,96	2,96	0	0	0	149,984	39,998	62,664	39,999	12			

Tabela D.3: Estimativas iniciais para a vazão máxima de água de reposição de 4 t/h.

Processo	Li,K	L ₁	L ₂	L ₃	L ₄	L ₅	L ₆	Lout _i	Lin _i	F _i	W _i	SM ₁	SM ₂	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}	Xout _{i,1}	Xout _{i,2}	Folga Xin _{i,1}	Folga Xin _{i,2}
Estim. inicial	xo9																		
	1	0	0	0	0,54	0	0	2	2	1,46	0,01	0	0	10,802	7,9996	18,302	12,499	0	1,1E-20
	2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	1,955	0	0	3,9999	19,999	24,997	128,98	-4E-21	-2E-19
	3	0,0382	0,003	0	0,031	0,419	0	3	3	2,51	1,155	0	0	4,4602	6,6149	14,46	16,615	0	0
	4	1,9512	0	1,018	0	0	0	3	3	0,03	0,88	0	0	16,851	13,808	29,184	18,807	0	0
	5	0,0002	0,043	0,827	1,549	0	0	2,42	2,419	0	0	48,558	0	24,073	19,999	3,9999	20		
	6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0		
Estim. inicial	xo10																		
	1	0	1E-03	6E-04	1,557	0	0	2	2	0,44	0,015	0	0	13,619	7,9994	21,119	12,499	0	0
	2	0	0	0	0	1,565	0	2	2	0,44	1,839	0	0	3,9999	16,517	24,997	125,5	4,5E-05	0
	3	1,6944	0,148	0	1,013	0,013	0	3	3	0,13	2,145	0	0	18,871	16,581	28,87	26,58	0	0
	4	0	0	0	0	0,01	0	3	3	2,99	0	0	0	4,0001	4,052	16,333	9,0519	0	0
	5	0,2908	0,012	0,855	0,43	0	0	1,59	1,588	0	0	31,786	0	24,025	20,004	3,9999	20		
	6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0		
Estim. inicial	xo11																		
	1	0	0	0	0,001	0	0,997	2	2	1	0,007	0	0	21,963	7,9984	29,463	12,498	0	-1E-20
	2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	0,919	0	0	3,9999	19,999	24,997	128,98	2,4E-05	2,4E-21
	3	1,2689	1,059	0	0,004	0,006	0,648	3	3	0,01	0,31	0	0	29,999	53,508	39,998	63,507	2,7E-22	0
	4	0,4976	0,006	0	0	1,23	1,046	3	3	0,22	0	0	0	20,811	15	33,143	19,999	0	-1E-17
	5	0,2262	0,016	0	2,994	0	0	3,24	3,236	0	0	93,357	0	32,847	19,999	3,9999	20		
	6	0	2E-04	2,69	0	0	0	2,69	2,69	0	0	0	138,596	39,997	63,513	39,999	12		

Tabela D.4: Tempos computacionais para a resolução dos problemas

Estim. Inicial	Fmax=1							Fmax=4						
	MINLP Original	MINLP Reduzido	NLP Original	NLP Reduzido	Implem. Operac. 1	Implem. Operac. 2	Implem. Operac. 3	MINLP Original	MINLP Reduzido	NLP Original	NLP Reduzido	Implem. Operac. 1	Implem. Operac. 2	Implem. Operac. 3
xO ₁	290,28	151,37	17,08	1,82	289,57	47,93	-	271,35	242,61	16,96	4,92	517,50	480,77	4813,40
xO ₂	266,98	98,81	3,23	1,33	569,92	37,54	884,42	593,24	127,05	26,68	9,16	-	-	-
xO ₃	333,01	92,21	10,09	1,83	937,12	-	-	799,78	385,55	34,41	6,67	6295,77	5567,99	-
xO ₄	581,18	117,75	2,21	4,28	1162,31	-	1644,80	925,39	145,97	30,90	7,58	1458,66	6225,42	-
xO ₅	269,34	106,12	4,65	1,28	1635,26	122,67	-	841,33	115,44	37,31	5,54	0,04	739,73	-
xO ₆	603,16	111,16	1,90	1,65	-	-	-	828,01	158,14	38,44	7,67	2954,55	313,66	-
xO ₇	763,15	133,89	2,18	1,47	1995,90	103,67	-	637,66	249,27	24,09	9,34	3909,80	878,59	4186,10
xO ₈	548,90	130,83	6,11	3,24	-	238,54	1049,10	633,54	149,54	8,24	3,36	4886,78	1854,59	-
xO ₉	1054,18	89,54	8,89	1,97	2606,14	422,74	-	218,69	60,38	10,82	2,43	-	-	-
xO ₁₀	554,63	99,93	1,65	1,40	2743,01	-	1049,10	349,96	275,69	15,73	3,69	-	2752,39	-
xO ₁₁	559,76	96,35	17,23	1,49	3179,36	101,17	499,50	630,86	120,11	42,49	6,37	3941,39	3369,92	2030,30
Total	5824,55	1227,97	75,22	21,77	15118,59	1074,25	5126,92	6729,81	2029,73	286,05	66,73	23964,48	22183,05	11029,80
Média	529,50	111,63	6,84	1,98	1679,84	153,46	1025,38	611,80	184,52	26,00	6,07	2995,56	2464,78	3676,60

Tabela D.5: Resultado do problema MINLP original (ou completo) para a vazão máxima de água de reposição de 1 t/h.

Processo																		Folga	Folga		
Li,K	L ₁	L ₂	L ₃	L ₄	L ₅	L ₆	Lout _i	Lin _i	F _i	W _i	SM ₁	SM ₂	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}	Xout _{i,1}	Xout _{i,2}	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}			
Resultado	Xf1	Fval	475,5																		
1	0	0	0	0	0	1	2	2	1	0	0	0	22,002	8,0003	29,501	12,5	0,00223	0,00055			
2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	0	0	0	3,9999	20	24,997	128,98	2,4E-05	0,00012			
3	0	2	0	0	0	1	3	3	0	1	0	0	29,996	89,997	39,996	99,995	0	0			
4	2	0	0	0	1	0	3	3	0	1E-04	0	0	21,001	14,999	33,334	19,999	0,00161	0			
5	0	0	0	3	0	0	3	3	0	0	88	0	33,334	19,999	3,9999	20					
6	0	0	2	0	0	0	2	2	0	0	0	175,999	39,996	99,995	39,999	12					
Resultado	Xf2	Fval	475,5																		
1	0	0	0	0	0	1	2	2	1	0	0	0	22,002	8,0003	29,501	12,5	0,00223	0,00055			
2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	0	0	0	3,9999	20	24,997	128,98	2,4E-05	0,00012			
3	0	2	0	0	0	1	3	3	0	1	0	0	29,996	89,997	39,996	99,995	0	0			
4	2	0	0	0	1	0	3	3	0	1E-04	0	0	21,001	14,999	33,334	19,999	0,00161	0			
5	0	0	0	3	0	0	3	3	0	0	88	0	33,334	19,999	3,9999	20					
6	0	0	2	0	0	0	2	2	0	0	0	175,999	39,996	99,995	39,999	12					
Resultado	Xf3	Fval	475,5																		
1	0	0	0	0	0	1	2	2	1	0	0	0	22,002	8,0003	29,501	12,5	0,00223	0,00055			
2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	0	0	0	3,9999	20	24,997	128,98	2,4E-05	0,00012			
3	0	2	0	0	0	1	3	3	0	1	0	0	29,996	89,997	39,996	99,995	0	0			
4	2	0	0	0	1	0	3	3	0	1E-04	0	0	21,001	14,999	33,334	19,999	0,00161	0			
5	0	0	0	3	0	0	3	3	0	0	88	0	33,334	19,999	3,9999	20					
6	0	0	2	0	0	0	2	2	0	0	0	175,999	39,996	99,995	39,999	12					
Resultado	Xf4	Fval	475,5																		
1	0	0	0	0	0	1	2	2	1	0	0	0	22,002	8,0003	29,501	12,5	0,00223	0,00055			
2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	0	0	0	3,9999	20	24,997	128,98	2,4E-05	0,00012			
3	0	2	0	0	0	1	3	3	0	1	0	0	29,996	89,997	39,996	99,995	0	0			
4	2	0	0	0	1	0	3	3	0	1E-04	0	0	21,001	14,999	33,334	19,999	0,00161	0			
5	0	0	0	3	0	0	3	3	0	0	88	0	33,334	19,999	3,9999	20					
6	0	0	2	0	0	0	2	2	0	0	0	175,999	39,996	99,995	39,999	12					

Tabela D.5: Resultado do problema MINLP original (ou completo) para a vazão máxima de água de reposição de 1 t/h.

Processo																		Folga	Folga		
Li,K	L ₁	L ₂	L ₃	L ₄	L ₅	L ₆	Lout _i	Lin _i	F _i	W _i	SM ₁	SM ₂	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}	Xout _{i,1}	Xout _{i,2}	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}			
Resultado	Xf5	Fval	475,5																		
1	0	0	0	0	0	1	2	2	1	0	0	0	22,002	8,0003	29,501	12,5	0,00223	0,00055			
2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	0	0	0	3,9999	20	24,997	128,98	2,4E-05	0,00012			
3	0	2	0	0	0	1	3	3	0	1	0	0	29,996	89,997	39,996	99,995	0	0			
4	2	0	0	0	1	0	3	3	0	1E-04	0	0	21,001	14,999	33,334	19,999	0,00161	0			
5	0	0	0	3	0	0	3	3	0	0	88	0	33,334	19,999	3,9999	20					
6	0	0	2	0	0	0	2	2	0	0	0	175,999	39,996	99,995	39,999	12					
Resultado	Xf6	Fval	475,5																		
1	0	0	0	0	0	1	2	2	1	0	0	0	22,002	8,0003	29,501	12,5	0,00223	0,00055			
2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	0	0	0	3,9999	20	24,997	128,98	2,4E-05	0,00012			
3	0	2	0	0	0	1	3	3	0	1	0	0	29,996	89,997	39,996	99,995	0	0			
4	2	0	0	0	1	0	3	3	0	1E-04	0	0	21,001	14,999	33,334	19,999	0,00161	0			
5	0	0	0	3	0	0	3	3	0	0	88	0	33,334	19,999	3,9999	20					
6	0	0	2	0	0	0	2	2	0	0	0	175,999	39,996	99,995	39,999	12					
Resultado	Xf7	Fval	475,5																		
1	0	0	0	0	0	1	2	2	1	0	0	0	22,002	8,0003	29,501	12,5	0,00223	0,00055			
2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	0	0	0	3,9999	20	24,997	128,98	2,4E-05	0,00012			
3	0	2	0	0	0	1	3	3	0	1	0	0	29,996	89,997	39,996	99,995	0	0			
4	2	0	0	0	1	0	3	3	0	1E-04	0	0	21,001	14,999	33,334	19,999	0,00161	0			
5	0	0	0	3	0	0	3	3	0	0	88	0	33,334	19,999	3,9999	20					
6	0	0	2	0	0	0	2	2	0	0	0	175,999	39,996	99,995	39,999	12					
Resultado	Xf8	Fval	475,5																		
1	0	0	0	0	0	1	2	2	1	0	0	0	22,002	8,0003	29,501	12,5	0,00223	0,00055			
2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	0	0	0	3,9999	20	24,997	128,98	2,4E-05	0,00012			
3	0	2	0	0	0	1	3	3	0	1	0	0	29,996	89,997	39,996	99,995	0	0			
4	2	0	0	0	1	0	3	3	0	1E-04	0	0	21,001	14,999	33,334	19,999	0,00161	0			
5	0	0	0	3	0	0	3	3	0	0	88	0	33,334	19,999	3,9999	20					
6	0	0	2	0	0	0	2	2	0	0	0	175,999	39,996	99,995	39,999	12					

Tabela D.5: Resultado do problema MINLP original (ou completo) para a vazão máxima de água de reposição de 1 t/h.

Processo																		Folga	Folga		
Li,K	L ₁	L ₂	L ₃	L ₄	L ₅	L ₆	Lout _i	Lin _i	F _i	W _i	SM ₁	SM ₂	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}	Xout _{i,1}	Xout _{i,2}	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}			
Resultado	Xf9	Fval	475,5																		
1	0	0	0	0	0	1	2	2	1	0	0	0	22,002	8,0003	29,501	12,5	0,00223	0,00055			
2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	0	0	0	3,9999	20	24,997	128,98	2,4E-05	0,00012			
3	0	2	0	0	0	1	3	3	0	1	0	0	29,996	89,997	39,996	99,995	0	0			
4	2	0	0	0	1	0	3	3	0	1E-04	0	0	21,001	14,999	33,334	19,999	0,00161	0			
5	0	0	0	3	0	0	3	3	0	0	88	0	33,334	19,999	3,9999	20					
6	0	0	2	0	0	0	2	2	0	0	0	175,999	39,996	99,995	39,999	12					
Resultado	Xf10	Fval	475,5																		
1	0	0	0	0	0	1	2	2	1	0	0	0	22,002	8,0003	29,501	12,5	0,00223	0,00055			
2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	0	0	0	3,9999	20	24,997	128,98	2,4E-05	0,00012			
3	0	2	0	0	0	1	3	3	0	1	0	0	29,996	89,997	39,996	99,995	0	0			
4	2	0	0	0	1	0	3	3	0	1E-04	0	0	21,001	14,999	33,334	19,999	0,00161	0			
5	0	0	0	3	0	0	3	3	0	0	88	0	33,334	19,999	3,9999	20					
6	0	0	2	0	0	0	2	2	0	0	0	175,999	39,996	99,995	39,999	12					
Resultado	Xf11	Fval	475,5																		
1	0	0	0	0	0	1	2	2	1	0	0	0	22,002	8,0003	29,501	12,5	0,00223	0,00055			
2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	0	0	0	3,9999	20	24,997	128,98	2,4E-05	0,00012			
3	0	2	0	0	0	1	3	3	0	1	0	0	29,996	89,997	39,996	99,995	0	0			
4	2	0	0	0	1	0	3	3	0	1E-04	0	0	21,001	14,999	33,334	19,999	0,00161	0			
5	0	0	0	3	0	0	3	3	0	0	88	0	33,334	19,999	3,9999	20					
6	0	0	2	0	0	0	2	2	0	0	0	175,999	39,996	99,995	39,999	12					

Tabela D.5: Resultado do problema MINLP original (ou completo) para a vazão máxima de água de reposição de 4 t/h.

Processo																	Folga	Folga
Li,K	L ₁	L ₂	L ₃	L ₄	L ₅	L ₆	Lout _i	Lin _i	F _i	W _i	SM ₁	SM ₂	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}	Xout _{i,1}	Xout _{i,2}	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}
Resultado	Xf1	Fval	204,1															
1	0	0	0	0	0	0	2	2	2	0,795	0	0	4	4	11,5	8,4999	0	0
2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	2	0	0	3,9999	19,999	24,997	128,98	2,4E-05	8,6E-05
3	1,2054	0	0	0	0	0	3	3	1,79	0,205	0	0	7,0134	5,808	17,013	15,808	0	0
4	0	0	2,795	0	0	0	3	3	0,21	1	0	0	16,122	14,999	28,455	19,999	0	0
5	0	0	0	2	0	0	2	2	0	0	48,912	0	28,455	19,999	3,9999	20		
6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	6E-05	0,0948	39,999	12		
Resultado	Xf2	Fval	260,3															
1	0	0	0	0	0	0	2	2	2	5E-04	0	0	4	4	11,5	8,4999	0	0
2	0	0	0	0	0,833	0	2	2	1,17	1,974	0	0	4	10,666	24,997	119,65	8E-05	0
3	0	0	0	0	0	2,167	3	3	0,83	0	0	0	30	9,7776	39,999	19,777	0,00043	0
4	1,9995	0	0,833	0	0,167	0	3	3	0	2,026	0	0	18,999	12,273	31,332	17,273	0	0
5	0	0,027	0	0,974	0	0	1	1	0	0	27,175	0	31,163	19,999	3,9999	20		
6	0	0	2,167	0	0	0	2,17	2,167	0	0	0	16,8518	39,999	19,777	39,999	12		
Resultado	Xf3	Fval	225,1															
1	0	0	0	0	0	0	2	2	2	0,712	0	0	4	4	11,5	8,4999	0	0
2	0	0	0	0	0,833	0	2	2	1,17	2	0	0	4	10,666	24,997	119,65	8E-05	0
3	0	0	0	0	0	2,167	3	3	0,83	0	0	0	30	9,7776	39,999	19,777	0,00043	0
4	1,2883	0	0,833	0	0,878	0	3	3	0	1,288	0	0	17,221	14,999	29,553	19,999	0	0
5	0	0	0	1,712	0	0	1,71	1,712	0	0	43,74	0	29,553	19,999	3,9999	20		
6	0	0	2,167	0	0	0	2,17	2,167	0	0	0	16,8518	39,999	19,777	39,999	12		
Resultado	Xf4	Fval	260,2															
1	0	0	0	0	0	0	2	2	2	0,445	0	0	4	4	11,5	8,4999	0	0
2	0	0	0	0	0,833	0	2	2	1,17	1,986	0	0	4	10,666	24,997	119,65	8E-05	0
3	0	0	0	0	0	2,167	3	3	0,83	0	0	0	30	9,7776	39,999	19,777	0,00043	0
4	1,5553	0	0,833	0	0,611	0	3	3	0	1,57	0	0	17,888	13,976	30,221	18,976	0	0
5	0	0,015	0	1,43	0	0	1,44	1,445	0	0	37,806	0	30,168	19,999	3,9999	20		
6	0	0	2,167	0	0	0	2,17	2,167	0	0	0	16,8518	39,999	19,777	39,999	12		

Tabela D.5: Resultado do problema MINLP original (ou completo) para a vazão máxima de água de reposição de 4 t/h.

Processo																	Folga	Folga
Li,K	L ₁	L ₂	L ₃	L ₄	L ₅	L ₆	Lout _i	Lin _i	F _i	W _i	SM ₁	SM ₂	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}	Xout _{i,1}	Xout _{i,2}	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}
Resultado	Xf5	Fval	260,3															
1	0	0	0	0	0	0	2	2	2	5E-04	0	0	4	4	11,5	8,4999	0	0
2	0	0	0	0	0,833	0	2	2	1,17	1,974	0	0	4	10,666	24,997	119,65	8E-05	0
3	0	0	0	0	0	2,167	3	3	0,83	0	0	0	30	9,7776	39,999	19,777	0,00043	0
4	1,9995	0	0,833	0	0,167	0	3	3	0	2,026	0	0	18,999	12,273	31,331	17,273	0	0
5	0	0,027	0	0,974	0	0	1	1	0	0	27,176	0	31,163	19,999	3,9999	20		
6	0	0	2,167	0	0	0	2,17	2,167	0	0	0	16,8518	39,999	19,777	39,999	12		
Resultado	Xf6	Fval	260,2															
1	0	0	0	0	0	0	2	2	2	0,422	0	0	4	4	11,5	8,4999	0	0
2	0	0	0	0	0,833	0	2	2	1,17	1,985	0	0	4	10,666	24,997	119,65	8E-05	0
3	0	0	0	0	0	2,167	3	3	0,83	0	0	0	30	9,7776	39,999	19,777	0,00043	0
4	1,5779	0	0,833	0	0,589	0	3	3	0	1,594	0	0	17,945	13,889	30,277	18,889	0	0
5	0	0,016	0	1,406	0	0	1,42	1,422	0	0	37,287	0	30,219	19,999	3,9999	20		
6	0	0	2,167	0	0	0	2,17	2,167	0	0	0	16,8518	39,999	19,777	39,999	12		
Resultado	Xf7	Fval	260,3															
1	0	0	0	0	0	0	2	2	2	5E-04	0	0	4	4	11,5	8,4999	0	0
2	0	0	0	0	0,833	0	2	2	1,17	1,974	0	0	4	10,666	24,997	119,65	8E-05	0
3	0	0	0	0	0	2,167	3	3	0,83	0	0	0	30	9,7776	39,999	19,777	0,00043	0
4	1,9995	0	0,833	0	0,167	0	3	3	0	2,026	0	0	18,999	12,273	31,331	17,273	0	0
5	0	0,027	0	0,974	0	0	1	1	0	0	27,176	0	31,163	19,999	3,9999	20		
6	0	0	2,167	0	0	0	2,17	2,167	0	0	0	16,8518	39,999	19,777	39,999	12		
Resultado	Xf8	Fval	260,3															
1	0	0	0	0	0	0	2	2	2	5E-04	0	0	4	4	11,5	8,4999	0	0
2	0	0	0	0	0,833	0	2	2	1,17	1,974	0	0	4	10,666	24,997	119,65	8E-05	0
3	0	0	0	0	0	2,167	3	3	0,83	0	0	0	30	9,7776	39,999	19,777	0,00043	0
4	1,9995	0	0,833	0	0,167	0	3	3	0	2,026	0	0	18,999	12,273	31,331	17,273	0	0
5	0	0,027	0	0,974	0	0	1	1	0	0	27,175	0	31,163	19,999	3,9999	20		
6	0	0	2,167	0	0	0	2,17	2,167	0	0	0	16,8518	39,999	19,777	39,999	12		

Tabela D.5: Resultado do problema MINLP original (ou completo) para a vazão máxima de água de reposição de 4 t/h.

Processo																		Folga	Folga
Li,K	L ₁	L ₂	L ₃	L ₄	L ₅	L ₆	Lout _i	Lin _i	F _i	W _i	SM ₁	SM ₂	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}	Xout _{i,1}	Xout _{i,2}	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}	
Resultado	Xf9	Fval	232,1																
1	0	0	0	0	0	0	2	2	2	0,786	0	0	4	4	11,5	8,4999	0	0	
2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	2	0	0	3,9999	19,999	24,997	128,98	2,4E-05	0	
3	1	0	0	0	0	0	3	3	2	0,214	0	0	6,5	5,5	16,5	15,5	0	0	
4	0,2144	0	2,786	0	0	0	3	3	0	1	0	0	16,142	14,999	28,475	19,999	0	0	
5	0	0	0	2	0	0	2	2	0	0	48,952	0	28,475	19,999	3,9999	20			
6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0,1021	0,1235	39,999	12			
Resultado	Xf10	Fval	232,1																
1	0	0	0	0	0	0	2	2	2	0,786	0	0	4	4	11,5	8,4999	0	0	
2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	2	0	0	3,9999	19,999	24,997	128,98	2,4E-05	0	
3	1	0	0	0	0	0	3	3	2	0,214	0	0	6,5	5,5	16,5	15,5	0	0	
4	0,2144	0	2,786	0	0	0	3	3	0	1	0	0	16,142	14,999	28,475	19,999	0	0	
5	0	0	0	2	0	0	2	2	0	0	48,952	0	28,475	19,999	3,9999	20			
6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	3E-08	2E-09	39,999	12			
Resultado	Xf11	Fval	260,2																
1	0	0	0	0	0	0	2	2	2	0,462	0	0	4	4	11,5	8,4999	0	0	
2	0	0	0	0	0,833	0	2	2	1,17	1,986	0	0	4	10,666	24,997	119,65	8E-05	0	
3	0	0	0	0	0	2,167	3	3	0,83	0	0	0	30	9,7776	39,999	19,777	0,00043	0	
4	1,5377	0	0,833	0	0,629	0	3	3	0	1,552	0	0	17,844	14,043	30,177	19,043	0	0	
5	0	0,014	0	1,448	0	0	1,46	1,462	0	0	38,207	0	30,128	19,999	3,9999	20			
6	0	0	2,167	0	0	0	2,17	2,167	0	0	0	16,8518	39,999	19,777	39,999	12			

Tabela D.6: Resultado do problema MINLP reduzido para a vazão máxima de água de reposição de 1 t/h.

Processo																		Folga	Folga	
Li,K	L ₁	L ₂	L ₃	L ₄	L ₅	L ₆	Lout _i	Lin _i	F _i	W _i	SM ₁	SM ₂	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}	Xout _{i,1}	Xout _{i,2}	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}		
Resultado	Xf1	Fval	475,5																	
1	0	0	0	0	0	1	2	2	1	0	0	0	22,002	8,0003	29,501	12,5	0,00223	0,00055		
2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	0	0	0	3,9999	20	24,997	128,98	2,4E-05	0,00012		
3	0	2	0	0	0	1	3	3	0	1	0	0	29,996	89,997	39,996	99,995	0	0		
4	2	0	0	0	1	0	3	3	0	1E-04	0	0	21,001	14,999	33,334	19,999	0,00161	0		
5	0	0	0	3	0	0	3	3	0	0	88	0	33,334	19,999	3,9999	20				
6	0	0	2	0	0	0	2	2	0	0	0	175,999	39,996	99,995	39,999	12				
Resultado	Xf2	Fval	475,5																0,00223	0,00055
1	0	0	0	0	0	1	2	2	1	0	0	0	22,002	8,0003	29,501	12,5	2,4E-05	0,00012		
2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	0	0	0	3,9999	20	24,997	128,98	0	0		
3	0	2	0	0	0	1	3	3	0	1	0	0	29,996	89,997	39,996	99,995	0,00161	0		
4	2	0	0	0	1	0	3	3	0	1E-04	0	0	21,001	14,999	33,334	19,999				
5	0	0	0	3	0	0	3	3	0	0	88	0	33,334	19,999	3,9999	20				
6	0	0	2	0	0	0	2	2	0	0	0	175,999	39,996	99,995	39,999	12	0,00223	0,00055		
Resultado	Xf3	Fval	475,5																2,4E-05	0,00012
1	0	0	0	0	0	1	2	2	1	0	0	0	22,002	8,0003	29,501	12,5	0	0		
2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	0	0	0	3,9999	20	24,997	128,98	0,00161	0		
3	0	2	0	0	0	1	3	3	0	1	0	0	29,996	89,997	39,996	99,995				
4	2	0	0	0	1	0	3	3	0	1E-04	0	0	21,001	14,999	33,334	19,999				
5	0	0	0	3	0	0	3	3	0	0	88	0	33,334	19,999	3,9999	20	0,00223	0,00055		
6	0	0	2	0	0	0	2	2	0	0	0	175,999	39,996	99,995	39,999	12	2,4E-05	0,00012		
Resultado	Xf4	Fval	475,5																0	0
1	0	0	0	0	0	1	2	2	1	0	0	0	22,002	8,0003	29,501	12,5	0,00161	0		
2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	0	0	0	3,9999	20	24,997	128,98				
3	0	2	0	0	0	1	3	3	0	1	0	0	29,996	89,997	39,996	99,995				
4	2	0	0	0	1	0	3	3	0	1E-04	0	0	21,001	14,999	33,334	19,999	0,00223	0,00055		
5	0	0	0	3	0	0	3	3	0	0	88	0	33,334	19,999	3,9999	20	2,4E-05	0,00012		
6	0	0	2	0	0	0	2	2	0	0	0	175,999	39,996	99,995	39,999	12	2,4E-23	8,8E-24		

Tabela D.6: Resultado do problema MINLP reduzido para a vazão máxima de água de reposição de 1 t/h.

Processo																	Folga	Folga
Li,K	L ₁	L ₂	L ₃	L ₄	L ₅	L ₆	Lout _i	Lin _i	F _i	W _i	SM ₁	SM ₂	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}	Xout _{i,1}	Xout _{i,2}	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}
Resultado	Xf5	Fval	475,5														0,00161	5,4E-25
1	0	0	0	0	0	1	2	2	1	0	0	0	22,002	8,0003	29,501	12,5		
2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	0	0	0	3,9999	20	24,997	128,98		
3	0	2	0	0	0	1	3	3	0	1	0	0	29,996	89,997	39,996	99,995	0,00223	0,00055
4	2	0	0	0	1	0	3	3	0	1E-04	0	0	21,001	14,999	33,334	19,999	2,4E-05	0,00012
5	0	0	0	3	0	0	3	3	0	0	88	0	33,334	19,999	3,9999	20	0	0
6	0	0	2	0	0	0	2	2	0	0	0	175,999	39,996	99,995	39,999	12	0,00161	0
Resultado	Xf6	Fval	475,5															
1	0	0	0	0	0	1	2	2	1	0	0	0	22,002	8,0003	29,501	12,5		
2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	0	0	0	3,9999	20	24,997	128,98	0,00223	0,00055
3	0	2	0	0	0	1	3	3	0	1	0	0	29,996	89,997	39,996	99,995	2,4E-05	0,00012
4	2	0	0	0	1	0	3	3	0	1E-04	0	0	21,001	14,999	33,334	19,999	2,2E-24	3,5E-24
5	0	0	0	3	0	0	3	3	0	0	88	0	33,334	19,999	3,9999	20	0,00161	-3E-23
6	0	0	2	0	0	0	2	2	0	0	0	175,999	39,996	99,995	39,999	12		
Resultado	Xf7	Fval	475,5															
1	0	0	0	0	0	1	2	2	1	0	0	0	22,002	8,0003	29,501	12,5	0,00223	0,00055
2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	0	0	0	3,9999	20	24,997	128,98	2,4E-05	0,00012
3	0	2	0	0	0	1	3	3	0	1	0	0	29,996	89,997	39,996	99,995	0	0
4	2	0	0	0	1	0	3	3	0	1E-04	0	0	21,001	14,999	33,334	19,999	0,00161	0
5	0	0	0	3	0	0	3	3	0	0	88	0	33,334	19,999	3,9999	20		
6	0	0	2	0	0	0	2	2	0	0	0	175,999	39,996	99,995	39,999	12		
Resultado	Xf8	Fval	475,5														0,00223	0,00055
1	0	0	0	0	0	1	2	2	1	0	0	0	22,002	8,0003	29,501	12,5	2,4E-05	0,00012
2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	0	0	0	3,9999	20	24,997	128,98	0	-9E-15
3	0	2	0	0	0	1	3	3	0	1	0	0	29,996	89,997	39,996	99,995	0,00161	0
4	2	0	0	0	1	0	3	3	0	1E-04	0	0	21,001	14,999	33,334	19,999		
5	0	0	0	3	0	0	3	3	0	0	88	0	33,334	19,999	3,9999	20		
6	0	0	2	0	0	0	2	2	0	0	0	175,999	39,996	99,995	39,999	12	0,00223	0,00055

Tabela D.6: Resultado do problema MINLP reduzido para a vazão máxima de água de reposição de 1 t/h.

Processo																	Folga	Folga
Li,K	L ₁	L ₂	L ₃	L ₄	L ₅	L ₆	Lout _i	Lin _i	F _i	W _i	SM ₁	SM ₂	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}	Xout _{i,1}	Xout _{i,2}	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}
Resultado	Xf9	Fval	475,5														2,4E-05	0,00012
1	0	0	0	0	0	1	2	2	1	0	0	0	22,002	8,0003	29,501	12,5	-2E-23	-2E-24
2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	0	0	0	3,9999	20	24,997	128,98	0,00161	-1E-23
3	0	2	0	0	0	1	3	3	0	1	0	0	29,996	89,997	39,996	99,995		
4	2	0	0	0	1	0	3	3	0	1E-04	0	0	21,001	14,999	33,334	19,999		
5	0	0	0	3	0	0	3	3	0	0	88	0	33,334	19,999	3,9999	20	0,00223	0,00055
6	0	0	2	0	0	0	2	2	0	0	0	175,999	39,996	99,995	39,999	12	2,4E-05	0,00012
Resultado	Xf10	Fval	475,5														0	0
1	0	0	0	0	0	1	2	2	1	0	0	0	22,002	8,0003	29,501	12,5	0,00161	0
2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	0	0	0	3,9999	20	24,997	128,98		
3	0	2	0	0	0	1	3	3	0	1	0	0	29,996	89,997	39,996	99,995		
4	2	0	0	0	1	0	3	3	0	1E-04	0	0	21,001	14,999	33,334	19,999		
5	0	0	0	3	0	0	3	3	0	0	88	0	33,334	19,999	3,9999	20		
6	0	0	2	0	0	0	2	2	0	0	0	175,999	39,996	99,995	39,999	12		
Resultado	Xf11	Fval	475,5															
1	0	0	0	0	0	1	2	2	1	0	0	0	22,002	8,0003	29,501	12,5		
2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	0	0	0	3,9999	20	24,997	128,98		
3	0	2	0	0	0	1	3	3	0	1	0	0	29,996	89,997	39,996	99,995		
4	2	0	0	0	1	0	3	3	0	1E-04	0	0	21,001	14,999	33,334	19,999		
5	0	0	0	3	0	0	3	3	0	0	88	0	33,334	19,999	3,9999	20		
6	0	0	2	0	0	0	2	2	0	0	0	175,999	39,996	99,995	39,999	12		

Tabela D.6: Resultado do problema MINLP reduzido para a vazão máxima de água de reposição de 4 t/h.

Processo																		Folga	Folga	
Li,K	L ₁	L ₂	L ₃	L ₄	L ₅	L ₆	Lout _i	Lin _i	F _i	W _i	SM ₁	SM ₂	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}	Xout _{i,1}	Xout _{i,2}	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}		
Resultado	Xf1	Fval	232,1																	
1	0	0	0	0	0	0	2	2	2	0,786	0	0	4	4	11,5	8,4999	-3E-22	0		
2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	2	0	0	3,9999	19,999	24,997	128,98	2,4E-05	-8E-17		
3	1	0	0	0	0	0	3	3	2	0,214	0	0	6,5	5,5	16,5	15,5	0	-2E-21		
4	0,2144	0	2,786	0	0	0	3	3	0	1	0	0	16,142	14,999	28,475	19,999	0	0		
5	0	0	0	2	0	0	2	2	0	0	48,952	0	28,475	19,999	3,9999	20				
6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0				
Resultado	Xf2	Fval	225,1																	
1	0	0	0	0	0	0	2	2	2	0,712	0	0	4	4	11,5	8,4999	0	0		
2	0	0	0	0	0,833	0	2	2	1,17	2	0	0	4	10,666	24,997	119,65	7,9E-05	0		
3	0	0	0	0	0	2,167	3	3	0,83	0	0	0	30	9,7776	39,999	19,777	0,00043	0		
4	1,2883	0	0,833	0	0,878	0	3	3	0	1,288	0	0	17,221	14,999	29,553	19,999	0	-2E-15		
5	0	0	0	1,712	0	0	1,71	1,712	0	0	43,74	0	29,553	19,999	3,9999	20				
6	0	0	2,167	0	0	0	2,17	2,167	0	0	0	16,8518	39,999	19,777	39,999	12				
Resultado	Xf3	Fval	225,1																	
1	1E-29	-1E-16	0	-0	-3E-14	-1E-44	2	2	2	0,712	0	0	4	4	11,5	8,4999	0	0		
2	0	0	0	0	0,833	0	2	2	1,17	2	0	0	4	10,666	24,997	119,65	8E-05	0		
3	0	0	0	0	0	2,167	3	3	0,83	0	0	0	30	9,7776	39,999	19,777	0,00043	0		
4	1,2883	0	0,833	0	0,878	0	3	3	0	1,288	0	0	17,221	14,999	29,553	19,999	0	0		
5	0	0	0	1,712	0	0	1,71	1,712	0	0	43,74	0	29,553	19,999	3,9999	20				
6	0	0	2,167	0	0	0	2,17	2,167	0	0	0	16,8518	39,999	19,777	39,999	12				
Resultado	Xf4	Fval	225,1																	
1	0	0	0	0	0	0	2	2	2	0,712	0	0	4	4	11,5	8,4999	0	0		
2	0	0	0	0	0,833	0	2	2	1,17	2	0	0	4	10,666	24,997	119,65	8E-05	0		
3	0	0	0	0	0	2,167	3	3	0,83	0	0	0	30	9,7776	39,999	19,777	0,00043	0		
4	1,2883	0	0,833	0	0,878	0	3	3	0	1,288	0	0	17,221	14,999	29,553	19,999	0	0		
5	0	0	0	1,712	0	0	1,71	1,712	0	0	43,74	0	29,553	19,999	3,9999	20				
6	0	0	2,167	0	0	0	2,17	2,167	0	0	0	16,8518	39,999	19,777	39,999	12				

Tabela D.6: Resultado do problema MINLP reduzido para a vazão máxima de água de reposição de 4 t/h.

Processo																	Folga	Folga	
Li,K	L ₁	L ₂	L ₃	L ₄	L ₅	L ₆	Lout _i	Lin _i	F _i	W _i	SM ₁	SM ₂	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}	Xout _{i,1}	Xout _{i,2}	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}	
Resultado	Xf5	Fval	225,1																
1	0	0	0	0	0	0	2	2	2	0,712	0	0	4	4	11,5	8,4999	0	0	
2	0	0	0	0	0,833	0	2	2	1,17	2	0	0	4	10,666	24,997	119,65	8E-05	0	
3	0	0	0	0	0	2,167	3	3	0,83	0	0	0	30	9,7776	39,999	19,777	0,00043	0	
4	1,2883	0	0,833	0	0,878	0	3	3	0	1,288	0	0	17,221	14,999	29,553	19,999	0	-5E-17	
5	0	0	0	1,712	0	0	1,71	1,712	0	0	43,74	0	29,553	19,999	3,9999	20			
6	0	0	2,167	0	0	0	2,17	2,167	0	0	0	16,8518	39,999	19,777	39,999	12			
Resultado	Xf6	Fval	260,1																
1	0	0	0	0	0	0	2	2	2	0,712	0	0	4	4	11,5	8,4999	-2E-19	-4E-17	
2	0	0	0	0	0,833	0	2	2	1,17	2	0	0	4	10,666	24,997	119,65	8E-05	-8E-20	
3	0	0	0	0	0	2,167	3	3	0,83	0	0	0	30	9,7776	39,999	19,777	0,00043	0	
4	1,2883	0	0,833	0	0,878	0	3	3	0	1,288	0	0	17,221	14,999	29,553	19,999	0	-2E-17	
5	0	0	0	1,712	0	0	1,71	1,712	0	0	43,74	0	29,553	19,999	3,9999	20			
6	0	0	2,167	0	0	0	2,17	2,167	0	0	0	16,8518	39,999	19,777	39,999	12			
Resultado	Xf7	Fval	225,1																
1	0	0	0	0	0	0	2	2	2	0,712	0	0	4	4	11,5	8,4999	1,4E-20	0	
2	0	0	0	0	0,833	0	2	2	1,17	2	0	0	4	10,666	24,997	119,65	8E-05	0	
3	0	0	0	0	0	2,167	3	3	0,83	0	0	0	30	9,7776	39,999	19,777	0,00043	0	
4	1,2883	0	0,833	0	0,878	0	3	3	0	1,288	0	0	17,221	14,999	29,553	19,999	0	-5E-17	
5	0	0	0	1,712	0	0	1,71	1,712	0	0	43,74	0	29,553	19,999	3,9999	20			
6	0	0	2,167	0	0	0	2,17	2,167	0	0	0	16,8518	39,999	19,777	39,999	12			
Resultado	Xf8	Fval	225,1																
1	0	0	0	0	0	0	2	2	2	0,712	0	0	4	4	11,5	8,4999	0	0	
2	0	0	0	0	0,833	0	2	2	1,17	2	0	0	4	10,666	24,997	119,65	8E-05	0	
3	0	0	0	0	0	2,167	3	3	0,83	0	0	0	30	9,7776	39,999	19,777	0,00043	0	
4	1,2883	0	0,833	0	0,878	0	3	3	0	1,288	0	0	17,221	14,999	29,553	19,999	0	-5E-17	
5	0	0	0	1,712	0	0	1,71	1,712	0	0	43,74	0	29,553	19,999	3,9999	20			
6	0	0	2,167	0	0	0	2,17	2,167	0	0	0	16,8518	39,999	19,777	39,999	12			

Tabela D.6: Resultado do problema MINLP reduzido para a vazão máxima de água de reposição de 4 t/h.

Processo																		Folga	Folga
Li,K	L ₁	L ₂	L ₃	L ₄	L ₅	L ₆	Lout _i	Lin _i	F _i	W _i	SM ₁	SM ₂	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}	Xout _{i,1}	Xout _{i,2}	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}	
Resultado	Xf9	Fval	282,8																
1	0	0	0,267	0	0	0	2	2	1,73	0,995	0	0	5,6356	5,5336	13,135	10,034	0	0	
2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	2	0	0	3,9999	20	24,997	128,98	2,4E-05	0,00012	
3	0,7383	0	0	0	0	0	3	3	2,26	0	0	0	6,2482	5,4848	16,248	15,485	0	0	
4	0,267	0	2,733	0	0	0	3	3	0	1	0	0	15,971	14,999	28,304	19,999	0	0	
5	0	0	0	2	0	0	2	2	0	0	48,609	0	28,304	19,999	3,9999	20			
6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0			
Resultado	Xf10	Fval	204,3																
1	0	0	0	0	0	0	2	2	2	0,789	0	0	4	4	11,5	8,4999	0,0001	0	
2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	2	0	0	3,9999	20	24,997	128,98	2,4E-05	0,00012	
3	1,2115	0	0	0	0	0	3	3	1,79	0,208	0	0	7,0287	5,8172	17,028	15,817	0	0,0001	
4	0	0	2,792	0	0	0	3	3	0,21	1	0	0	16,127	14,999	28,46	19,999	0,0001	0	
5	0	0	0	2	0	0	2	2	0	0	48,921	0	28,46	19,999	3,9999	20			
6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0			
Resultado	Xf11	Fval	225,1																
1	0	0	0	0	0	0	2	2	2	0,712	0	0	4	4	11,5	8,4999	0	-1E-20	
2	0	0	0	0	0,833	0	2	2	1,17	2	0	0	4	10,666	24,997	119,65	8E-05	-3E-20	
3	0	0	0	0	0	2,167	3	3	0,83	0	0	0	30	9,7776	39,999	19,777	0,00043	-5E-20	
4	1,2883	0	0,833	0	0,878	0	3	3	0	1,288	0	0	17,221	14,999	29,553	19,999	0	-5E-17	
5	0	0	0	1,712	0	0	1,71	1,712	0	0	43,74	0	29,553	19,999	3,9999	20			
6	0	0	2,167	0	0	0	2,17	2,167	0	0	0	16,8518	39,999	19,777	39,999	12			

Tabela D.7: Resultado do problema NLP original (ou completo) para a vazão máxima de água de reposição de 1 t/h.

Processo																	Folga	Folga
Li,K	L ₁	L ₂	L ₃	L ₄	L ₅	L ₆	Lout _i	Lin _i	F _i	W _i	SM ₁	SM ₂	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}	Xout _{i,1}	Xout _{i,2}	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}
Resultado	Xf1	Fval	474,1															
1	0	0	0	0	0	1	2	2	1	0	0	0	21,999	7,9999	29,499	12,5	-2E-17	0,00014
2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	0,122	0	0	3,9999	20	24,997	128,98	2,4E-05	0,00012
3	0	1,876	0	0	0,052	1,073	3	3	0	0,879	0	0	29,999	85,279	39,998	95,277	0	0
4	2	0	0	0	1	0	3	3	0	0	0	0	20,999	15	33,332	19,999	-1E-17	9,8E-05
5	0	0,003	7E-04	3	0	0,048	3,05	3,052	0	0	89,819	0	33,43	19,999	3,9999	20		
6	0	0	2,121	0	2E-04	0	2,12	2,121	0	0	0	176,615	39,996	95,271	39,999	12		
Resultado	Xf2	Fval	592															
1	0	0	0	0	0	1	2	2	1	0	0	0	21,999	7,9999	29,499	12,5	0	0,00014
2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	1	0	0	3,9999	20	24,997	128,98	2,4E-05	0,00012
3	0	0,995	0	0	0,419	1,586	3	3	0	0	0	0	29,999	51,919	39,998	61,917	-7E-19	0
4	2	0	0	0	1	0	3	3	0	0	0	0	20,999	15	33,332	19,999	1,3E-18	9,8E-05
5	0	0,005	0,055	3	0	0,358	3,42	3,419	0	0	103	0	34,127	20	3,9999	20		
6	0	0	2,945	0	1E-04	0	2,94	2,945	0	0	0	146,996	39,997	61,916	39,999	12		
Resultado	Xf3	Fval	473,9															
1	0	0	0	0	0	1	2	2	1	0	0	0	21,999	7,9999	29,499	12,5	0	0,00014
2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	0,154	0	0	3,9999	20	24,997	128,98	2,4E-05	0,00012
3	0	1,842	0	0	0,066	1,092	3	3	0	0,846	0	0	29,999	84,006	39,998	94,004	0	0
4	2	0	0	0	1	0	3	3	0	0	0	0	20,999	15	33,332	19,999	0	9,8E-05
5	0	0,004	0	3	0	0,061	3,07	3,066	0	0	90,302	0	33,453	19,999	3,9999	20		
6	0	0	2,154	0	2E-04	0	2,15	2,154	0	0	0	176,609	39,996	93,999	39,999	12		
Resultado	Xf4	Fval	592															
1	0	0	0	0	0	1	2	2	1	0	0	0	21,999	7,9999	29,499	12,5	0	0,00014
2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	1	0	0	3,9999	20	24,997	128,98	2,4E-05	0,00012
3	0	0,972	0	0	0,428	1,6	3	3	0	0	0	0	29,999	51,058	39,998	61,056	0	0
4	2	0	0	0	1	0	3	3	0	0	0	0	20,999	15	33,332	19,999	1,4E-18	9,8E-05
5	0	0,028	0,004	3	0	0,397	3,43	3,428	0	0	103	0	34,043	19,999	3,9999	20		
6	0	0	2,996	0	1E-04	0	3	2,996	0	0	0	146,998	39,997	61,055	39,999	12		

Tabela D.7: Resultado do problema NLP original (ou completo) para a vazão máxima de água de reposição de 1 t/h.

Processo																	Folga	Folga
Li,K	L ₁	L ₂	L ₃	L ₄	L ₅	L ₆	Lout _i	Lin _i	F _i	W _i	SM ₁	SM ₂	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}	Xout _{i,1}	Xout _{i,2}	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}
Resultado	Xf5	Fval	593,2															
1	0	0	0	0	0	1	2	2	1	0	0	0	21,999	7,9999	29,499	12,5	0	0,00014
2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	0,859	0	0	3,9999	20	24,997	128,98	2,4E-05	0,00012
3	0	1,128	0	0	0,363	1,509	3	3	0	0,141	0	0	29,999	56,939	39,998	66,938	0	0
4	2	0	0	0	1	0	3	3	0	0	0	0	20,999	15	33,332	19,999	0	9,8E-05
5	0	0,014	0,023	3	0	0,326	3,36	3,364	0	0	100,88	0	33,991	19,999	3,9999	20		
6	0	0	2,835	0	1E-04	0	2,84	2,835	0	0	0	155,772	39,997	66,936	39,999	12		
Resultado	Xf6	Fval	592															
1	0	0	0	0	0	1	2	2	1	0	0	0	21,999	7,9999	29,499	12,5	0	0,00013
2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	0,993	0	0	3,9999	20	24,997	128,98	2,4E-05	0,00012
3	0	1,003	0	0	0,415	1,582	3	3	0	0,007	0	0	29,999	52,224	39,998	62,222	0	0
4	2	0	0	0	1	0	3	3	0	0	0	0	20,999	15	33,332	19,999	-8E-19	9,7E-05
5	0	0,004	0,056	3	0	0,355	3,42	3,415	0	0	102,89	0	34,124	19,999	3,9999	20		
6	0	0	2,937	0	1E-04	0	2,94	2,937	0	0	0	147,489	39,997	62,221	39,999	12		
Resultado	Xf7	Fval	592															
1	0	0	0	0	0	1	2	2	1	0	0	0	21,999	7,9999	29,499	12,5	0	0,00014
2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	1	0	0	3,9999	20	24,997	128,98	2,4E-05	0,00012
3	0	0,983	0	0	0,424	1,593	3	3	0	0	0	0	29,999	51,468	39,998	61,467	-6E-18	0
4	2	0	0	0	1	0	3	3	0	0	0	0	20,999	15	33,332	19,999	-4E-18	9,8E-05
5	0	0,017	0,028	3	0	0,378	3,42	3,424	0	0	103	0	34,083	19,999	3,9999	20		
6	0	0	2,972	0	1E-04	0	2,97	2,972	0	0	0	146,998	39,997	61,465	39,999	12		
Resultado	Xf8	Fval	594,8															
1	0	0	0	0	0	1	2	2	1	0	0	0	21,999	7,9999	29,499	12,5	-9E-20	0,00014
2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	0,663	0	0	3,9999	20	24,997	128,98	2,4E-05	0,00012
3	0	1,322	0	0	0,283	1,396	3	3	0	0,337	0	0	29,999	64,29	39,998	74,288	0	0
4	2	0	0	0	1	0	3	3	0	0	0	0	20,999	15	33,332	19,999	0	0,00023
5	0	0,016	0,007	3	0	0,26	3,28	3,283	0	0	97,942	0	33,834	19,999	3,9999	20		
6	0	0	2,656	0	1E-04	0	2,66	2,656	0	0	0	165,441	39,997	74,286	39,999	12		

Tabela D.7: Resultado do problema NLP original (ou completo) para a vazão máxima de água de reposição de 1 t/h.

Processo																	Folga	Folga
Li,K	L ₁	L ₂	L ₃	L ₄	L ₅	L ₆	Lout _i	Lin _i	F _i	W _i	SM ₁	SM ₂	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}	Xout _{i,1}	Xout _{i,2}	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}
Resultado	Xf9	Fval	592,4															
1	0	0	0	0	0	1	2	2	1	0	0	0	21,999	7,9999	29,499	12,5	-2E-19	0,00014
2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	0,953	0	0	3,9999	20	24,997	128,98	2,4E-05	0,00012
3	0	1,047	0	0	0,397	1,556	3	3	0	0,047	0	0	29,999	53,875	39,998	63,873	-6E-36	0
4	2	0	0	0	1	0	3	3	0	0	0	0	20,999	15	33,332	19,999	0	9,8E-05
5	0	7E-04	0,06	3	0	0,337	3,4	3,397	0	0	102,29	0	34,109	19,999	3,9999	20		
6	0	0	2,893	0	1E-04	0	2,89	2,893	0	0	0	150,079	39,997	63,872	39,999	12		
Resultado	Xf10	Fval	592															
1	0	0	0	0	0	1	2	2	1	0	0	0	21,999	7,9999	29,499	12,5	-4E-20	0,00014
2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	0,997	0	0	3,9999	20	24,997	128,98	2,4E-05	0,00012
3	0	0,983	0	0	0,424	1,594	3	3	0	0,004	0	0	29,999	51,443	39,998	61,441	0	0
4	2	0	0	0	1	0	3	3	0	0	0	0	20,999	15	33,332	19,999	2,2E-18	9,8E-05
5	0	0,021	0,019	3	0	0,384	3,42	3,424	0	0	102,95	0	34,065	19,999	3,9999	20		
6	0	0	2,978	0	1E-04	0	2,98	2,978	0	0	0	147,239	39,997	61,44	39,999	12		
Resultado	Xf11	Fval	602,4															
1	0	0	0	0	0	1	2	2	1	0	0	0	21,999	7,9999	29,499	12,5	0	0,00014
2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	0,677	0	0	3,9999	20	24,997	128,98	2,4E-05	0,00012
3	0	1,323	0	0	0,282	1,395	3	3	0	0,092	0	0	29,999	64,344	39,998	74,343	0	0
4	2	0	0	0	1	0	3	3	0	0,231	0	0	20,999	15	33,332	19,999	0	9,8E-05
5	0	0	0,066	2,769	0	0,448	3,28	3,282	0	0	99,698	0	34,375	19,999	3,9999	20		
6	0	0	2,843	0	1E-04	0	2,84	2,843	0	0	0	177,222	39,997	74,34	39,999	12		

Tabela D.7: Resultado do problema NLP original (ou completo) para a vazão máxima de água de reposição de 4 t/h.

Processo																	Folga	Folga		
Li,K	L ₁	L ₂	L ₃	L ₄	L ₅	L ₆	Lout _i	Lin _i	F _i	W _i	SM ₁	SM ₂	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}	Xout _{i,1}	Xout _{i,2}	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}		
Resultado	Xf1	Fval	256,7																	
1	0	0	0,264	0,067	0	0	2	2	1,67	1,067	0	0	6,5477	6,1291	14,048	10,629	0	0		
2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	2	0	0	3,9999	19,999	24,997	128,98	2,4E-05	3,5E-21		
3	0,9309	0	0	0	0	0	3	3	2,07	0	0	0	7,1178	6,057	17,117	16,057	0	0		
4	0,002	0	2,736	0	0	0	3	3	0,26	0,933	0	0	15,969	15	28,302	19,999	0	0		
5	0	0	0	2	0	0	2	2	0	0	48,605	0	28,302	19,999	3,9999	20				
6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0,1423	39,999	12				
Resultado	Xf2	Fval	226,7																	
1	0	0,012	0	0	0	0	2	2	1,99	0,137	0	0	4,1228	4,6706	11,623	9,1705	0	0		
2	0	0	0	0	0,703	0	2	2	1,3	1,936	0	0	4	9,6274	24,997	118,61	8,6E-05	-3E-21		
3	0,0585	0,041	0	0	0,055	2,131	3	3	0,72	0	0	0	29,999	11,634	39,999	21,634	0,00035	-2E-22		
4	1,8047	0	0,87	0	0,326	0	3	3	0	1,927	0	0	19,02	13,959	31,353	18,959	-3E-21	-5E-19		
5	0	0,011	0	1,073	0	0	1,08	1,084	0	0	29,586	0	31,286	19,999	3,9999	20				
6	0	0	2,131	0	0	0	2,13	2,131	0	0	0	20,5264	39,999	21,634	39,999	12				
Resultado	Xf3	Fval	252,6																	
1	0	0	0,037	0	0	0,593	2	2	1,37	0	0	0	15,344	6,6658	22,843	11,166	0	0		
2	0	0	0	0	1,067	0	2	2	0,93	1,942	0	0	3,9999	12,537	24,997	121,52	6,9E-05	0		
3	0	0	0	0	0	2,167	3	3	0,83	0,129	0	0	30	9,7776	39,999	19,777	0,00043	0		
4	2	0	0,052	0	0,062	0,022	3	3	0,86	1,93	0	0	17,449	9,4391	29,782	14,439	0	0		
5	0	0,059	0	1,071	0	0	1,13	1,129	0	0	28,833	0	29,534	19,999	3,9999	20				
6	0	0	2,782	0	0	0	2,78	2,782	0	0	0	21,6365	39,999	19,777	39,999	12				
Resultado	Xf4	Fval	211,8																	
1	0	0	0	0	0	0	2	2	2	0	0	0	4	4	11,5	8,4999	-5E-21	-2E-19		
2	0	0	0	0	0,963	0	2	2	1,04	1,96	0	0	4	11,7	24,997	120,68	7,4E-05	-1E-38		
3	0	0	0	6E-04	0	2,166	3	3	0,83	0	0	0	30	9,779	39,999	19,779	0,00043	-2E-20		
4	2	0,012	0,834	0	0,025	0	3	3	0,13	2,041	0	0	19,088	11,977	31,421	16,976	-1E-16	0		
5	0	0,029	0	0,959	0	0	0,99	0,988	0	0	26,895	0	31,233	19,999	3,9999	20				
6	0	0	2,166	0	0	0	2,17	2,166	0	0	0	16,8511	39,999	19,779	39,999	12				

Tabela D.7: Resultado do problema NLP original (ou completo) para a vazão máxima de água de reposição de 4 t/h.

Processo																	Folga	Folga
Li,K	L ₁	L ₂	L ₃	L ₄	L ₅	L ₆	Lout _i	Lin _i	F _i	W _i	SM ₁	SM ₂	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}	Xout _{i,1}	Xout _{i,2}	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}
Resultado	Xf5	Fval	223															
1	0	0,015	0,032	0	0	0,736	2	2	1,22	0,002	0	0	17,975	7,9998	25,475	12,5	0	1,8E-17
2	0	0	0	0	0,051	0	2	2	1,95	1,986	0	0	4,0007	4,4061	24,997	113,39	0,00085	0
3	0	0	0	0	0	2,167	3	3	0,83	0	0	0	30	9,7776	39,999	19,777	0,00043	0
4	1,9982	0	0,066	0	0,936	0	3	3	0	2,013	0	0	19,09	14,999	31,422	19,999	0	3,5E-17
5	0	0	0	0,987	0	0	0,99	0,987	0	0	27,067	0	31,422	19,999	3,9999	20		
6	0	0	2,903	0	0	0	2,9	2,903	0	0	0	22,5772	39,999	19,777	39,999	12		
Resultado	Xf6	Fval	222,9															
1	0	0	0,047	0	0	0,729	2	2	1,22	0,03	0	0	17,964	7,2857	25,464	11,786	0	0
2	0	0	0	0	0,049	0	2	2	1,95	1,996	0	0	4	4,3921	24,997	113,38	0,00012	0
3	0	0	0	0	0,009	2,167	3	3	0,82	0	0	0	30	9,823	39,999	19,823	0,00043	0
4	1,9702	0	0,058	0	0,972	0	3	3	0	1,975	0	0	18,786	14,602	31,119	19,601	0	0
5	0	0,004	0	1,025	0	0	1,03	1,03	0	0	27,902	0	31,093	19,999	3,9999	20		
6	0	0	2,896	0	0	0	2,9	2,896	0	0	0	22,6539	39,999	19,823	39,999	12		
Resultado	Xf7	Fval	222,8															
1	0	0	0	0	0	0,768	2	2	1,23	0,222	0	0	17,818	7,0706	25,318	11,57	-7E-17	-4E-37
2	0	0	0	0	0,066	0	2	2	1,93	2	0	0	4	4,525	24,997	113,51	0,00012	0
3	0	0	0	0	0	2,167	3	3	0,83	0,004	0	0	30	9,7776	39,999	19,777	0,00043	0
4	1,778	0	0,062	0	1,16	0	3	3	0	1,774	0	0	17,374	14,999	29,707	19,999	-1E-18	0
5	0	0	0	1,226	0	0	1,23	1,226	0	0	31,517	0	29,707	19,999	3,9999	20		
6	0	0	2,934	0	0	0	2,93	2,934	0	0	0	22,8226	39,999	19,777	39,999	12		
Resultado	Xf8	Fval	351,7															
1	0	0	0	0	0	0,95	2	2	1,05	0,835	0	0	21,106	7,8014	28,606	12,301	-1E-21	0
2	0	0	0	0	0	0	2	2	2	0,734	0	0	4	4	24,997	112,99	0,00012	0
3	0	1,231	0	0	0	1,449	3	3	0,32	0,588	0	0	29,998	52,578	39,997	62,577	-4E-22	-5E-21
4	1,1646	0,034	0,013	0	1,158	0	3	3	0,63	1,843	0	0	13,947	14,889	26,279	19,889	-6E-20	-1E-19
5	0	0,001	0	1,157	0	0	1,16	1,158	0	0	25,81	0	26,278	19,999	3,9999	20		
6	0	0	2,399	0	0	0	2,4	2,399	0	0	0	121,344	39,997	62,577	39,999	12		

Tabela D.7: Resultado do problema NLP original (ou completo) para a vazão máxima de água de reposição de 4 t/h.

Processo																		Folga	Folga		
Li,K	L ₁	L ₂	L ₃	L ₄	L ₅	L ₆	Lout _i	Lin _i	F _i	W _i	SM ₁	SM ₂	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}	Xout _{i,1}	Xout _{i,2}	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}			
Resultado	Xf9	Fval	282,6																		
1	0	0	0,262	0	0	0	2	2	1,74	1	0	0	5,601	5,5012	13,101	10,001	0	0			
2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	2	0	0	3,9999	19,999	24,997	128,98	2,4E-05	0			
3	0,7384	0	0	0	0	0	3	3	2,26	0	0	0	6,24	5,4771	16,24	15,477	0	0			
4	0,2616	0	2,738	0	0	0	3	3	0	1	0	0	15,966	14,999	28,299	19,999	0	0			
5	0	0	0	2	0	0	2	2	0	0	48,599	0	28,299	19,999	3,9999	20					
6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0,0128	0,1817	39,999	12					
Resultado	Xf10	Fval	204,9																		
1	0	0	8E-04	0	0	0	2	2	2	0,768	0	0	4,0051	4,0046	11,505	8,5045	0	-4E-21			
2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	2	0	0	3,9999	19,999	24,997	128,98	2,4E-05	0			
3	1,2129	0	0	0	0	0	3	3	1,79	0,279	0	0	7,0343	5,8212	17,034	15,821	0	0			
4	0,0187	0	2,72	0	0,047	0	3	3	0,21	0,953	0	0	15,865	15	28,198	19,999	0	-5E-20			
5	0	0	0	2,047	0	0	2,05	2,047	0	0	49,546	0	28,198	19,999	3,9999	20					
6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1E-10	39,999	12					
Resultado	Xf11	Fval	226,3																		
1	0	0	0,037	0	0	0	2	2	1,96	0,594	0	0	4,6712	4,3002	12,171	8,8001	0	0			
2	0	0	0	0	0,726	0	2	2	1,27	2	0	0	4	9,8117	24,997	118,8	8,5E-05	0			
3	0,0585	0	0	0,069	0,006	2,103	3	3	0,76	0	0	0	30	10,1	39,999	20,1	0,00042	0			
4	1,3471	0	0,86	0	0,793	0	3	3	0	1,406	0	0	17,985	14,999	30,318	19,999	0	-5E-19			
5	0	0	0	1,526	0	0	1,53	1,526	0	0	40,15	0	30,318	19,999	3,9999	20					
6	0	0	2,103	0	0	0	2,1	2,103	0	0	0	17,0346	39,999	20,1	39,999	12					

Tabela D.8: Resultado do problema NLP reduzido para a vazão máxima de água de reposição de 1 t/h.

Processo	Li,K	L ₁	L ₂	L ₃	L ₄	L ₅	L ₆	Lout _i	Lin _i	F _i	W _i	SM ₁	SM ₂	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}	Xout _{i,1}	Xout _{i,2}	Folga Xin _{i,1}	Folga Xin _{i,2}	
Resultado	Xf1	Fval	473,9																	
	1	0	0	0	0	0	1	2	2	1	0	0	0	21,999	7,9999	29,499	12,5	9E-17	0,00014	
	2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	0,152	0	0	3,9999	20	24,997	128,98	2,4E-05	0,00012	
	3	0	1,844	0	0	0,065	1,091	3	3	0	0,848	0	0	29,999	84,062	39,998	94,06	-6E-17	3E-17	
	4	2	0	0	0	1	0	3	3	0	0	0	0	20,999	15	33,332	19,999	-3E-17	9,8E-05	
	5	0	0,004	0	3	0	0,061	3,07	3,065	0	0	90,281	0	33,452	19,999	3,9999	20			
	6	0	0	2,152	0	2E-04	0	2,15	2,152	0	0	0	176,611	39,996	94,055	39,999	12			
Resultado	Xf2	NLP		1	Fval		592													
	1	0	0	0	0	0	1	2	2	1	0	0	0	21,999	7,9999	29,499	12,5	0	0,00014	
	2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	1	0	0	3,9999	20	24,997	128,98	2,4E-05	0,00012	
	3	0	0,995	0	0	0,419	1,586	3	3	0	0	0	0	29,999	51,919	39,998	61,917	-7E-19	0	
	4	2	0	0	0	1	0	3	3	0	0	0	0	20,999	15	33,332	19,999	1,3E-18	9,8E-05	
	5	0	0,005	0,055	3	0	0,358	3,42	3,419	0	0	103	0	34,127	20	3,9999	20			
	6	0	0	2,945	0	1E-04	0	2,94	2,945	0	0	0	146,996	39,997	61,916	39,999	12			
Resultado	Xf3	1		Fval		592														
	1	0	0	0	0	0	1	2	2	1	0	0	0	21,999	7,9999	29,499	12,5	-6E-22	0,00014	
	2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	1	0	0	3,9999	20	24,997	128,98	2,4E-05	0,00012	
	3	0	0,971	0	0	0,429	1,6	3	3	0	0	0	0	29,999	51,009	39,998	61,007	6,1E-20	-9E-21	
	4	2	0	0	0	1	0	3	3	0	0	0	0	20,999	15	33,332	19,999	3,1E-21	9,8E-05	
	5	0	0,029	6E-04	3	0	0,399	3,43	3,429	0	0	103	0	34,039	19,999	3,9999	20			
	6	0	0	2,999	0	1E-04	0	3	2,999	0	0	0	146,998	39,997	61,006	39,999	12			
Resultado	Xf4	Fval		592																
	1	0	0	0	0	0	1	2	2	1	0	0	0	21,999	7,9999	29,499	12,5	0	0,00014	
	2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	1	0	0	3,9999	20	24,997	128,98	2,4E-05	0,00012	
	3	0	0,977	0	0	0,426	1,597	3	3	0	0	0	0	29,999	51,247	39,998	61,246	2,1E-18	0	
	4	2	0	0	0	1	0	3	3	0	0	0	0	20,999	15	33,332	19,999	1,2E-18	9,8E-05	
	5	0	0,023	0,015	3	0	0,388	3,43	3,426	0	0	103	0	34,062	20	3,9999	20			
	6	0	0	2,985	0	1E-04	0	2,98	2,985	0	0	0	146,994	39,997	61,245	39,999	12			

Tabela D.8: Resultado do problema NLP reduzido para a vazão máxima de água de reposição de 1 t/h.

Processo																	Folga	Folga
Li,K	L ₁	L ₂	L ₃	L ₄	L ₅	L ₆	Lout _i	Lin _i	F _i	W _i	SM ₁	SM ₂	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}	Xout _{i,1}	Xout _{i,2}	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}
Resultado	Xf5	Fval	592															
1	0	0	0	0	0	1	2	2	1	0	0	0	21,999	7,9999	29,499	12,5	1,3E-20	0,00014
2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	1	0	0	3,9999	20	24,997	128,98	2,4E-05	0,00012
3	0	0,999	0	0	0,417	1,584	3	3	0	0	0	0	29,999	52,066	39,998	62,064	1,4E-19	0
4	2	0	0	0	1	0	3	3	0	0	0	0	20,999	15	33,332	19,999	2,2E-21	9,8E-05
5	0	0,001	0,064	3	0	0,352	3,42	3,417	0	0	103	0	34,141	19,999	3,9999	20		
6	0	0	2,936	0	1E-04	0	2,94	2,936	0	0	0	146,998	39,997	62,063	39,999	12		
Resultado	Xf6	Fval	592															
1	0	0	0	0	0	1	2	2	1	0	0	0	21,999	7,9999	29,499	12,5	2,4E-22	0,00014
2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	1	0	0	3,9999	20	24,997	128,98	2,4E-05	0,00012
3	0	0,989	0	0	0,421	1,59	3	3	0	0	0	0	29,999	51,705	39,998	61,703	5,9E-19	0
4	2	0	0	0	1	0	3	3	0	0	0	0	20,999	15	33,332	19,999	1,1E-19	9,8E-05
5	0	0,011	0,043	3	0	0,368	3,42	3,421	0	0	103	0	34,106	19,999	3,9999	20		
6	0	0	2,957	0	1E-04	0	2,96	2,957	0	0	0	146,998	39,997	61,702	39,999	12		
Resultado	Xf7	Fval	592															
1	0	0	0	0	0	1	2	2	1	0	0	0	21,999	7,9999	29,499	12,5	2,7E-19	0,00014
2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	1	0	0	3,9999	20	24,997	128,98	2,4E-05	0,00012
3	0	0,987	0	0	0,422	1,591	3	3	0	0	0	0	29,999	51,611	39,998	61,609	-9E-19	0
4	2	0	0	0	1	0	3	3	0	0	0	0	20,999	15	33,332	19,999	-7E-17	9,8E-05
5	0	0,013	0,037	3	0	0,372	3,42	3,422	0	0	103	0	34,097	19,999	3,9999	20		
6	0	0	2,963	0	1E-04	0	2,96	2,963	0	0	0	146,998	39,997	61,608	39,999	12		
Resultado	Xf8	Fval	592															
1	0	0	0	0	0	1	2	2	1	0	0	0	21,999	7,9999	29,499	12,5	2E-19	0,00014
2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	1	0	0	3,9999	20	24,997	128,98	2,4E-05	0,00012
3	0	0,997	0	0	0,418	1,585	3	3	0	0	0	0	29,999	51,99	39,998	61,989	2E-19	0
4	2	0	0	0	1	0	3	3	0	0	0	0	20,999	15	33,332	19,999	-4E-19	9,8E-05
5	0	0,003	0,06	3	0	0,355	3,42	3,418	0	0	103	0	34,134	20	3,9999	20		
6	0	0	2,94	0	1E-04	0	2,94	2,94	0	0	0	146,994	39,997	61,987	39,999	12		

Tabela D.8: Resultado do problema NLP reduzido para a vazão máxima de água de reposição de 1 t/h.

Processo																	Folga	Folga
Li,K	L ₁	L ₂	L ₃	L ₄	L ₅	L ₆	Lout _i	Lin _i	F _i	W _i	SM ₁	SM ₂	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}	Xout _{i,1}	Xout _{i,2}	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}
Resultado	Xf9	Fval	592															
1	0	0	0	0	0	1	2	2	1	0	0	0	21,999	7,9999	29,499	12,5	-1E-21	0,00014
2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	1	0	0	3,9999	20	24,997	128,98	2,4E-05	0,00012
3	0	0,993	0	0	0,419	1,587	3	3	0	0	0	0	29,999	51,843	39,998	61,842	-9E-20	0
4	2	0	0	0	1	0	3	3	0	0	0	0	20,999	15	33,332	19,999	4,1E-22	9,8E-05
5	0	0,007	0,051	3	0	0,362	3,42	3,42	0	0	103	0	34,119	19,999	3,9999	20		
6	0	0	2,949	0	1E-04	0	2,95	2,949	0	0	0	146,998	39,997	61,84	39,999	12		
Resultado	Xf10	Fval	592															
1	0	0	0	0	0	1	2	2	1	0	0	0	21,999	7,9999	29,499	12,5	-3E-19	0,00014
2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	1	0	0	3,9999	20	24,997	128,98	2,4E-05	0,00012
3	0	0,987	0	0	0,422	1,591	3	3	0	0	0	0	29,999	51,613	39,998	61,611	1,8E-18	0
4	2	0	0	0	1	0	3	3	0	0	0	0	20,999	15	33,332	19,999	-1E-17	9,8E-05
5	0	0,013	0,037	3	0	0,372	3,42	3,422	0	0	103	0	34,097	19,999	3,9999	20		
6	0	0	2,963	0	1E-04	0	2,96	2,963	0	0	0	146,998	39,997	61,61	39,999	12		
Resultado	Xf11	Fval	474,1															
1	0	0	0	0	0	1	2	2	1	0	0	0	21,999	7,9999	29,499	12,5	0	0,00014
2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	0,116	0	0	3,9999	20	24,997	128,98	2,4E-05	0,00012
3	0	1,882	0	0	0,049	1,069	3	3	0	0,884	0	0	29,999	85,537	39,998	95,535	0	0
4	2	0	0	0	1	0	3	3	0	0	0	0	20,999	15	33,332	19,999	0	9,8E-05
5	0	0,001	0,003	3	0	0,045	3,05	3,049	0	0	89,743	0	33,433	19,999	3,9999	20		
6	0	0	2,114	0	2E-04	0	2,11	2,114	0	0	0	176,559	39,996	95,529	39,999	12		

Tabela D.8: Resultado do problema NLP reduzido para a vazão máxima de água de reposição de 4 t/h.

Processo																	Folga	Folga		
Li,K	L ₁	L ₂	L ₃	L ₄	L ₅	L ₆	Lout _i	Lin _i	F _i	W _i	SM ₁	SM ₂	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}	Xout _{i,1}	Xout _{i,2}	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}		
Resultado	Xf1	Fval	473,9																	
1	0	0	0,027	0	0	0	2	2	1,97	0,804	0	0	4,171	4,1603	11,671	8,6602	0	0		
2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	2	0	0	3,9999	19,999	24,997	128,98	2,4E-05	0		
3	0,9727	0	0	0	0	0	3	3	2,03	0,197	0	0	6,487	5,5109	16,487	15,511	0	0		
4	0,2238	0	2,776	0	0	0	3	3	0	1	0	0	16,127	15	28,46	19,999	0	0		
5	0	0	0	2	0	0	2	2	0	0	48,921	0	28,46	19,999	3,9999	20				
6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0				
Resultado	Xf2	Fval	267,2																	
1	0	0	0	0	0	0	2	2	2	0	0	0	4	4	11,5	8,4999	0	0		
2	0	0	0	0	0,913	0	2	2	1,09	1,93	0	0	4	11,3	24,997	120,28	7,6E-05	0		
3	0,6661	0	0	0,029	0	2,006	3	3	0,3	0	0	0	30	10,488	39,999	20,487	0,0004	0		
4	1,334	0,059	0,994	0	0	0	3	3	0,61	2,07	0	0	19,678	13,744	32,011	18,744	0	0		
5	0	0,011	0	0,901	0	0	0,91	0,913	0	0	25,484	0	31,924	19,999	3,9999	20				
6	0	0	2,006	0	0	0	2,01	2,006	0	0	0	17,024	39,999	20,487	39,999	12				
Resultado	Xf3	Fval	368																	
1	0	0,026	0	0	0	0	2	2	1,97	0	0	0	4,2779	5,5086	11,778	10,009	0	0		
2	0	0	0	0	0,624	0	2	2	1,38	1,913	0	0	4	8,9895	24,997	117,97	9E-05	0		
3	0,0368	0	0	0,833	0	1,48	3	3	0,65	0	0	0	29,999	12,464	39,998	22,463	0,00032	0		
4	1,9633	0,022	0,979	0	0,035	0	3	3	0	2,087	0	0	21	15	33,332	20	-1E-18	-2E-20		
5	0	0,038	0,058	0,08	0	0,483	0,66	0,659	0	0	22,608	0	38,328	19,999	3,9999	20				
6	0	0	1,963	0	0	0	1,96	1,963	0	0	0	20,5373	39,998	22,463	39,999	12				
Resultado	Xf4	Fval	388,9																	
1	0	0,019	0	0	0	0,53	2	2	1,45	0	0	0	13,727	7,1347	21,226	11,635	-3E-14	0		
2	0	0	0	0	0,067	0	2	2	1,93	1,942	0	0	4	4,5397	24,997	113,52	0,00012	-5E-14		
3	0,0482	0	0	0,867	0,032	1,437	3	3	0,62	0	0	0	30	12,749	39,999	22,748	0,00031	-3E-33		
4	1,9518	0	0,483	0	0,566	0	3	3	0	2,058	0	0	20,999	15	33,332	19,999	-2E-17	7,7E-34		
5	0	0,04	0,063	0,075	0	0,487	0,67	0,665	0	0	22,846	0	38,35	19,999	3,9999	20				
6	0	0	2,454	0	0	0	2,45	2,454	0	0	0	26,3787	39,999	22,748	39,999	12				

Tabela D.8: Resultado do problema NLP reduzido para a vazão máxima de água de reposição de 4 t/h.

Processo																	Folga	Folga
Li,K	L ₁	L ₂	L ₃	L ₄	L ₅	L ₆	Lout _i	Lin _i	F _i	W _i	SM ₁	SM ₂	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}	Xout _{i,1}	Xout _{i,2}	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}
Resultado	Xf5	Fval	212															
1	0	0	0	0	0	0	2	2	2	0,012	0	0	4	4	11,5	8,4999	0	0
2	0	0	0	0	0,947	0	2	2	1,05	1,926	0	0	4	11,576	24,997	120,56	7,5E-05	0
3	0	0	0	0	0	2,167	3	3	0,83	0	0	0	30	9,7776	39,999	19,777	0,00043	0
4	1,9877	0,063	0,833	0	0,002	0	3	3	0,11	2,062	0	0	19,413	13,836	31,745	18,835	0	0
5	0	0,011	0	0,938	0	0	0,95	0,949	0	0	26,254	0	31,668	19,999	3,9999	20		
6	0	0	2,167	0	0	0	2,17	2,167	0	0	0	16,8518	39,999	19,777	39,999	12		
Resultado	Xf6	Fval	223,5															
1	0	0	0	0	0	0,032	2	2	1,97	0,672	0	0	4,575	4,1278	12,075	8,6277	0	0
2	0	0	0	0	0,784	0	2	2	1,22	2	0	0	4	10,268	24,997	119,25	8,2E-05	0
3	0,009	0	0	0,019	0	2,156	3	3	0,82	0,798	0	0	30	9,8667	39,999	19,866	0,00043	0
4	1,3188	0	0,014	0	1,668	0	3	3	0	0,529	0	0	7,7131	15	20,046	19,999	0	0
5	0	0	0	2,451	0	0	2,45	2,451	0	0	39,332	0	20,046	20	3,9999	20		
6	0	0	2,188	0	0	0	2,19	2,188	0	0	0	17,2121	39,999	19,866	39,999	12		
Resultado	Xf7	Fval	225,4															
1	0	0	0,053	0	0	0,694	2	2	1,25	0,112	0	0	17,438	7,2337	24,938	11,734	0	0
2	0	0	0	0	0,054	0	2	2	1,95	1,955	0	0	4	4,4289	24,997	113,41	0,00012	0
3	0,0339	0,045	0	0	0	2,12	3	3	0,8	0	0	0	29,999	11,4	39,999	21,4	0,00038	0
4	1,854	0	0,07	0	1,076	0	3	3	0	1,933	0	0	17,774	14,924	30,107	19,923	0	0
5	0	0	0,063	1,067	0	0	1,13	1,13	0	0	30,129	0	30,662	20,006	3,9999	20		
6	0	0	2,814	0	0	0	2,81	2,814	0	0	0	26,4568	39,999	21,4	39,999	12		
Resultado	Xf8	Fval	266,8															
1	0	0	0	0,025	0	0,627	2	2	1,35	0,3	0	0	15,598	6,704	23,098	11,204	-4E-15	0
2	0	0	0	0	0,182	0	2	2	1,82	2	0	0	4	5,455	24,997	114,44	0,00011	0
3	0	0	0	0	0	2,167	3	3	0,83	0	0	0	30	9,7776	39,999	19,777	0,00043	-2E-15
4	1,7002	0	0,207	0	1,093	0	3	3	0	1,7	0	0	17,302	14,999	29,634	19,999	-5E-19	0
5	0	0	0	1,275	0	0	1,28	1,275	0	0	32,689	0	29,634	19,999	3,9999	20		
6	0	0	2,794	0	0	0	2,79	2,794	0	0	0	21,727	39,999	19,777	39,999	12		

Tabela D.8: Resultado do problema NLP reduzido para a vazão máxima de água de reposição de 4 t/h.

Processo																	Folga	Folga
Li,K	L ₁	L ₂	L ₃	L ₄	L ₅	L ₆	Lout _i	Lin _i	F _i	W _i	SM ₁	SM ₂	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}	Xout _{i,1}	Xout _{i,2}	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}
Resultado	Xf9	Fval	232,1															
1	0	0	0	0	0	0	2	2	2	0,786	0	0	4	4	11,5	8,4999	-5E-19	0
2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	2	0	0	3,9999	19,999	24,997	128,98	2,4E-05	-4E-35
3	1	0	0	0	0	0	3	3	2	0,214	0	0	6,5	5,5	16,5	15,5	0	0
4	0,2144	0	2,786	0	0	0	3	3	0	1	0	0	16,142	14,999	28,475	19,999	-4E-21	-8E-21
5	0	0	0	2	0	0	2	2	0	0	48,952	0	28,475	19,999	3,9999	20		
6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0		
Resultado	Xf10	Fval	232,8															
1	0	0	0,077	0	0	0	2	2	1,92	0,839	0	0	4,4774	4,4415	11,977	8,9414	0	0
2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	2	0	0	3,9999	19,999	24,997	128,98	2,4E-05	1E-18
3	0,9234	0	0	0	0	0	3	3	2,08	0,161	0	0	6,4553	5,5209	16,455	15,521	0	0
4	0,2377	0	2,762	0	0	0	3	3	0	1	0	0	16,1	14,999	28,433	19,999	0	0
5	0	0	0	2	0	0	2	2	0	0	48,867	0	28,433	19,999	3,9999	20		
6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0		
Resultado	Xf11	Fval	225,3															
1	0	0	0	0	0	0	2	2	2	0,249	0	0	4	4	11,5	8,4999	0	0
2	0	0	0	0	0,824	0	2	2	1,18	1,979	0	0	4	10,592	24,997	119,58	8E-05	0
3	0,0117	0	0	0	0	2,164	3	3	0,82	0	0	0	30	9,7887	39,999	19,788	0,00044	0
4	1,7394	0	0,836	0	0,425	0	3	3	0	1,773	0	0	18,378	13,273	30,711	18,273	0	0
5	0	0,021	0	1,227	0	0	1,25	1,249	0	0	33,233	0	30,613	20,005	3,9999	20		
6	0	0	2,164	0	0	0	2,16	2,164	0	0	0	16,8567	39,999	19,788	39,999	12		

Tabela D.9: Resultado do problema operacional 1 para a vazão máxima de água de reposição de 1 t/h.

Processo																Folga	Folga		
Li,K	L ₁	L ₂	L ₃	L ₄	L ₅	L ₆	Lout _i	Lin _i	F _i	W _i	SM ₁	SM ₂	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}	Xout _{i,1}	Xout _{i,2}	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}	
Resultado	Xf1	Fval	860,7																
1	0	0	0	0	0	1	2	2	1	0	0	0	21,999	7,9999	29,499	12,5	-2E-21	0,00014	
2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	0,153	0	0	3,9999	20	24,997	128,98	2,4E-05	0,00012	
3	0	1,847	0	0	0,064	1,089	3	3	0	0,847	0	0	29,999	84,196	39,998	94,194	0	0	
4	2	0	0	0	1	0	3	3	0	0	0	0	20,999	15	33,332	19,999	4,4E-21	9,8E-05	
5	0	0	0,006	3	0	0,057	3,06	3,064	0	0	90,289	0	33,471	19,999	3,9999	20			
6	0	4E-04	2,147	0	0	0	2,15	2,147	0	0	0	176,478	39,996	94,2	39,999	12			
Resultado	Xf2	Fval	783,5																
1	0	0	0	0	0	1	2	2	1	0	0	0	21,999	7,9999	29,499	12,5	1,5E-19	0,00014	
2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	0,493	0	0	3,9999	20	24,997	128,98	2,4E-05	0,00012	
3	0	1,507	0	0	0,205	1,287	3	3	0	0,507	0	0	29,997	71,325	39,996	81,324	0	0	
4	2	0	0	0	1	0	3	3	0	0	0	0	20,999	15	33,332	19,999	7,4E-19	0,00012	
5	0	0	0,024	3	0	0,182	3,21	3,205	0	0	95,392	0	33,759	19,999	3,9999	20			
6	0	0	2,469	0	0	0	2,47	2,469	0	0	0	171,174	39,996	81,324	39,999	12			
Resultado	Xf3	Fval	858,4																
1	0	0	0	0	0	1	2	2	1	0	0	0	21,999	7,9999	29,499	12,5	1,4E-19	0,00014	
2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	0,146	0	0	3,9999	20	24,997	128,98	2,4E-05	0,00012	
3	0	1,854	0	0	0,061	1,085	3	3	0	0,854	0	0	29,999	84,45	39,998	94,448	0	0	
4	2	0	0	0	1	0	3	3	0	0	0	0	20,999	15	33,332	19,999	3E-19	9,8E-05	
5	0	0	0,006	3	0	0,055	3,06	3,061	0	0	90,188	0	33,465	19,999	3,9999	20			
6	0	4E-04	2,14	0	0	0	2,14	2,14	0	0	0	176,495	39,996	94,454	39,999	12			
Resultado	Xf4	Fval	867,1																
1	0	0	0	0	0	1	2	2	1	0	0	0	21,999	7,9999	29,499	12,5	0	0,00014	
2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	0,777	0	0	3,9999	20	24,997	128,98	2,4E-05	0,00012	
3	0	1,217	0	0	0,326	1,457	3	3	0	0,223	0	0	29,999	60,338	39,998	70,336	0	0	
4	2	0	0	0	1	0	3	3	0	0	0	0	20,999	15	33,332	19,999	-8E-19	9,8E-05	
5	0	0,005	0,034	3	0	0,287	3,33	3,326	0	0	99,657	0	33,962	19,999	3,9999	20			
6	0	3E-04	2,743	0	0	0	2,74	2,743	0	0	0	160,068	39,997	70,342	39,999	12			

Tabela D.9: Resultado do problema operacional 1 para a vazão máxima de água de reposição de 1 t/h.

Processo																	Folga	Folga	
Li,K	L ₁	L ₂	L ₃	L ₄	L ₅	L ₆	Lout _i	Lin _i	F _i	W _i	SM ₁	SM ₂	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}	Xout _{i,1}	Xout _{i,2}	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}	
Resultado	Xf5	Fval	1411																
1	0	0	0	0	0	1	2	2	1	0	0	0	21,999	7,9999	29,499	12,5	-6E-20	0,00014	
2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	0,011	0	0	3,9999	20	24,997	128,98	2,4E-05	0,00012	
3	0	1,989	0	0,025	0	0,986	3	3	0	0,989	0	0	29,996	89,63	39,996	99,628	0	0	
4	2	0	0	0	1	0	3	3	0	0	0	0	20,999	15	33,332	19,999	-3E-19	9,8E-05	
5	0	0	0,002	2,975	0	0,023	3	3	0	0	88,167	0	33,388	19,999	3,9999	20			
6	0	0	2,009	0	0	0	2,01	2,009	0	0	0	176,031	39,996	99,628	39,999	12			
Resultado	Xf6	Fval	Não Convergiu																
Resultado	Xf7	Fval	903,3																
1	0	0	0	0	0	1	2	2	1	0	0	0	21,999	7,9999	29,499	12,5	2,3E-17	0,00014	
2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	0,712	0	0	3,9999	20	24,997	128,98	2,4E-05	0,00012	
3	0	1,284	0	0	0,298	1,418	3	3	0	0,288	0	0	29,999	62,865	39,998	72,864	-3E-17	-1E-17	
4	2	0	0	0	1	0	3	3	0	0	0	0	20,999	15	33,332	19,999	9,6E-18	9,8E-05	
5	0	0,004	0,031	3	0	0,263	3,3	3,298	0	0	98,678	0	33,916	19,999	3,9999	20			
6	0	0	2,681	0	1E-04	0	2,68	2,681	0	0	0	163,169	39,997	72,861	39,999	12			
Resultado	Xf8	Fval	Não Convergiu																
Resultado	Xf9	Fval	774,1																
1	0	0	0	0	0	1	2	2	1	0	0	0	21,999	7,9999	29,499	12,5	0	0,00014	
2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	1	0	0	3,9999	20	24,997	128,98	2,4E-05	0,00012	
3	0	1	0	0	0,417	1,583	3	3	0	0	0	0	29,999	52,1	39,998	62,099	-1E-21	0	
4	2	0	0	0	1	0	3	3	0	0	0	0	20,999	15	33,332	19,999	0	9,8E-05	
5	0	0	0,067	3	0	0,35	3,42	3,417	0	0	103	0	34,145	19,999	3,9999	20			
6	0	2E-04	2,934	0	0	0	2,93	2,934	0	0	0	146,998	39,997	62,104	39,999	12			

Tabela D.9: Resultado do problema operacional 1 para a vazão máxima de água de reposição de 1 t/h.

Processo																	Folga	Folga
Li,K	L ₁	L ₂	L ₃	L ₄	L ₅	L ₆	Lout _i	Lin _i	F _i	W _i	SM ₁	SM ₂	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}	Xout _{i,1}	Xout _{i,2}	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}
Resultado	Xf10	Fval	783,1															
1	0	0	0	0	0	1	2	2	1	0	0	0	21,999	7,9999	29,499	12,5	9E-20	0,00014
2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	0,5	0	0	3,9999	20	24,997	128,98	2,4E-05	0,00012
3	0	1,5	0	0	0,208	1,292	3	3	0	0,5	0	0	29,999	71,029	39,998	81,027	0	0
4	2	0	0	0	1	0	3	3	0	0	0	0	20,999	15	33,332	19,999	0	9,8E-05
5	0	0	0,024	3	0	0,184	3,21	3,208	0	0	95,503	0	33,765	19,999	3,9999	20		
6	0	3E-04	2,476	0	0	0	2,48	2,476	0	0	0	170,966	39,996	81,033	39,999	12		
Resultado	Xf11	Fval	665,2															
1	0	0	0	0	0	1	2	2	1	0	0	0	21,999	7,9999	29,499	12,5	0	0,00014
2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	0,014	0	0	3,9999	20	24,997	128,98	2,4E-05	0,00012
3	0	1,986	0	0,032	0	0,982	3	3	0	0,986	0	0	29,996	89,525	39,996	99,523	0	0
4	2	0	0	0	1	0	3	3	0	0	0	0	20,999	15	33,332	19,999	1E-18	9,8E-05
5	0	5E-04	0,002	2,968	0	0,029	3	3	0	0	88,206	0	33,401	19,999	3,9999	20		
6	0	0	2,012	0	0	0	2,01	2,011	0	0	0	176,057	39,996	99,523	39,999	12		

Tabela D.9: Multiplicadores de Lagrange do problema operacional 1 para a vazão máxima de água de reposição de 1 t/h.

Processo	Restrições Inferiores							Li,K	Restrições Superiores							
	Li,K	L1	L2	L3	L4	L5	L6		F	L1	L2	L3	L4	L5	L6	F
Resultado	Xf1															
1	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0
2	0	0	0	0	0	0	0	0	2	0	0	0	0	0	0	0
3	0	0	0	0	0	0	0	0	3	0	0	0	0	0	0	0
4	0	0	0	0	0	0	0	0	4	66,25624	0	0	0	0	0	0
5	0	0	0	0	0	0	97,67596	0	5	0	0	0	76,04858	0	0	0
6	0	0	7,805656	0	0	0	0	0	6	0	0	0	0	0	0	0
Resultado	Xf2															
1	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0
2	0	0	0	0	0	0	0	0	2	0	0	0	0	0	0	0
3	0	39,45744	0	0	0	0	0	0	3	0	0	0	0	0	0	0
4	0	0	0	0	0	0	0	0	4	54,47319	0	0	0	0	0	0
5	0	0	0	0	0	0	81,85349	0	5	0	0	0	0	0	0	0
6	0	4,543943	0	0	0	0	0	0	6	0	0	0	0	0	0	0
Resultado	Xf3															
1	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0
2	0	0	0	0	0	0	0	0	2	0	0	0	0	0	0	0
3	0	0	0	0	0	0	0	0	3	0	0	0	0	0	0	0
4	0	0	0	0	0	0	0	0	4	66,24919	0	0	0	0	0	0
5	0	0	0	0	0	0	97,66901	0	5	0	0	0	75,46679	0	0	0
6	0	0	7,688695	0	0	0	0	0	6	0	0	0	0	0	0	0
Resultado	Xf4															
1	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0
2	0	0	0	0	0	0	0	0	2	0	0	0	0	0	0	0
3	0	43,20465	0	0	0	0	0	0	3	0	0	0	0	0	0	0
4	0	0	0	0	0	0	0	0	4	62,68277	0	0	0	0	0	0
5	0	0	0	0	0	0	93,33109	0	5	0	0	0	0	0	0	0
6	0	53,97681	0	0	0	0	0	0	6	0	0	23,59475	0	0	0	0
Resultado	Xf5															
1	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0
2	0	0	0	0	0	0	0	0	2	0	0	0	0	0	0	0
3	0	0	0	0	0	0	0	0	3	0	0	0	0	0	0	0
4	0	0	0	0	0	0	0	0	4	0	0	0	0	0	0	0
5	0	0	0	0	0	0	3,028139	0	5	0	0	0	222,0343	0	0	0
6	0	0	134,6996	0	0	0	0	0	6	0	0	0	0	0	0	0
Resultado	Xf6	Não Convergiu														

Tabela D.9: Multiplicadores de Lagrange do problema operacional 1 para a vazão máxima de água de reposição de 1 t/h.

Processo	Restrições Inferiores							Li,K	Restrições Superiores							
	Li,K	L1	L2	L3	L4	L5	L6		F	L1	L2	L3	L4	L5	L6	F
Resultado	Xf7															
1	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0
2	0	0	0	0	0	0	0	0	2	0	0	0	0	0	0	0
3	0	0	0	0	0	0	0	0	3	0	0	0	0	0	0	0
4	0	0	0	0	0	0	0	0	3	0	0	0	0	0	69,39043	0
5	0	0	0	0	0	0	0	0	4	62,70044	0	0	0	0	0	0
6	0	0	0	0	0	0	93,35696	0	5	0	0	0	0	0	0	0
Resultado	Xf8	Não Convergiu														
Resultado	Xf9															
1	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0
2	0	0	0	0	0	0	0	0	2	0	0	0	0	0	0	0
3	0	0	0	0	0	0	0	0	3	0	0	0	0	0	0	0
4	0	0	0	0	0	0	0	0	3	0	0	0	0	0	0	0
5	0	0	0	0	0	0	0	0	4	0	0	0	0	0	0	0
6	0	0	0	0	0	0	0	0	5	0	0	0	0	0	0	0
Resultado	Xf10															
1	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0
2	0	0	0	0	0	0	0	0	2	0	0	0	0	0	0	0
3	0	39,45744	0	0	0	0	0	0	3	0	0	0	0	0	0	0
4	0	0	0	0	0	0	0	0	4	54,47319	0	0	0	0	0	0
5	0	0	0	0	0	0	81,85349	0	5	0	0	0	0	0	0	0
6	0	4,543943	0	0	0	0	0	0	6	0	0	0	0	0	0	0
Resultado	Xf11															
1	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0
2	0	0	0	0	0	0	0	0	2	0	0	0	0	0	0	0
3	0	39,45744	0	0	0	0	0	0	3	0	0	0	0	0	0	0
4	0	0	0	0	0	0	0	0	4	54,47319	0	0	0	0	0	0
5	0	0	0	0	0	0	81,85349	0	5	0	0	0	0	0	0	0
6	0	4,543943	0	0	0	0	0	0	6	0	0	0	0	0	0	0

Tabela D.9: Resultado do problema operacional 1 para a vazão máxima de água de reposição de 4 t/h.

Processo																	Folga	Folga	
Li,K	L ₁	L ₂	L ₃	L ₄	L ₅	L ₆	Lout _i	Lin _i	F _i	W _i	SM ₁	SM ₂	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}	Xout _{i,1}	Xout _{i,2}	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}	
Resultado	Xf1	Fval	541,7																
1	0	0	0,057	0,048	0	0	2	2	1,9	0	0	0	5,7253	5,0744	13,225	9,5743	0	0	
2	0	0	0	0	0,343	0	2	2	1,66	2	0	0	4	6,7477	24,997	115,73	0,0001	0	
3	0,1644	0	0	2,616	0	0	3	3	0,22	2	0	0	29,999	18,255	39,998	28,254	0	0	
4	1,8327	0	0,939	0	0	0	3	3	0,23	0	0	0	20,907	15	33,24	19,999	0	-2E-20	
5	0,0029	0	0,004	0,337	0	0	0,34	0,343	0	0	10,01	0	33,142	19,999	3,9999	20			
6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0,0003	39,998	28,254	39,999	12			
Resultado	Xf2	Fval	Não Convergiu																
Resultado	Xf3	Fval	705																
1	0	0,035	0,014	0,018	0,001	0,226	2	2	1,71	0,02	0	0	8,8689	7,3986	16,369	11,898	0	0	
2	0	0	0	0	0,004	0	2	2	2	0,625	0	0	4	4,0303	24,997	113,02	0,00012	0	
3	0,0576	1,333	0	0,523	0	1,053	3	3	0,03	1,571	0	0	29,997	58,114	39,996	68,113	4,2E-53	-5E-35	
4	1,922	0,008	0,069	0	0,685	0,053	3	3	0,26	1,784	0	0	13,445	14,613	25,778	19,613	-2E-28	-2E-16	
5	0	0	0,007	0,676	0	0,007	0,69	0,69	0	0	15,218	0	26,066	20	3,9999	20			
6	0	0	1,339	0	0	0	1,34	1,339	0	0	0	75,1251	39,996	68,112	39,999	12			
Resultado	Xf4	Fval	580,1																
1	0	0	0	0,502	0	0,028	2	2	1,47	0	0	0	10,164	7,9997	17,664	12,5	0	0	
2	0	0	0	0	0,036	0	2	2	1,96	0,107	0	0	4	4,2908	24,997	113,28	0,00012	0	
3	0,0038	1,873	0	0,056	0	1,038	3	3	0,03	1,852	0	0	29,999	75,295	39,998	85,293	-1E-18	0	
4	1,9962	0,018	0,082	0	0,367	0	3	3	0,54	2,041	0	0	14,201	14,486	26,533	19,486	0	0	
5	0	0,002	0	0,401	0	0	0,4	0,403	0	0	9,0835	0	26,525	20,002	3,9999	20			
6	0	0	1,066	2E-04	0	0	1,07	1,066	0	0	0	78,1364	39,996	85,282	39,999	12			
Resultado	Xf5	Fval	403,3																
1	0	2E-04	0,037	0,048	0,014	0,792	2	2	1,11	0,094	0	0	19,571	7,9669	27,071	12,467	0	-2E-18	
2	0	0	0	0	0,003	0	2	2	2	1,986	0	0	4	4,0277	24,997	113,01	0,00012	-3E-17	
3	0,0278	0,001	0	0,037	0,043	2,121	3	3	0,77	0	0	0	29,999	10,197	39,998	20,197	0,00041	-1E-16	
4	1,8563	0,008	0,012	0	0,987	0,013	3	3	0,12	1,92	0	0	18,642	14,899	30,975	19,899	-6E-17	0	
5	0,0219	0,005	0	0,995	0	0,024	1,05	1,046	0	0	28,33	0	31,075	20	3,9999	20			
6	0	0	2,951	0	0	0	2,95	2,951	0	0	0	24,1872	39,998	20,197	39,999	12			

Tabela D.9: Resultado do problema operacional 1 para a vazão máxima de água de reposição de 4 t/h.

Processo																	Folga	Folga		
Li,K	L ₁	L ₂	L ₃	L ₄	L ₅	L ₆	Lout _i	Lin _i	F _i	W _i	SM ₁	SM ₂	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}	Xout _{i,1}	Xout _{i,2}	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}		
Resultado	Xf6	Fval	436																	
1	0	0	0,007	0,012	0,016	0,656	2	2	1,31	0,694	0	0	16,049	6,9029	23,549	11,403	0	0		
2	0	0	0	0	0,364	0	2	2	1,64	1,988	0	0	4	6,9112	24,997	115,9	0,0001	0		
3	0,0316	0,008	0	0,048	0,002	2,117	3	3	0,79	0,182	0	0	29,999	10,304	39,999	20,303	0,00041	0		
4	1,2745	0	0	0	1,464	0	3	3	0,26	1,137	0	0	12,305	14,953	24,638	19,952	0	0		
5	0	0,004	0	1,804	0	0,038	1,85	1,846	0	0	38,685	0	24,957	19,999	3,9999	20				
6	0	0	2,811	0	0	0	2,81	2,811	0	0	0	23,3452	39,999	20,303	39,999	12				
Resultado	Xf7	Fval	532,8																	
1	0	0	6E-04	0,055	0,048	0,796	2	2	1,1	0,057	0	0	19,12	7,9994	26,619	12,499	0	0		
2	0	0	0	0	0	0	2	2	2	0,025	0	0	4	4	24,997	112,99	0,00012	0		
3	0,0108	1,92	0	0,009	0,012	1,033	3	3	0,02	1,064	0	0	29,999	76,65	39,998	86,649	4,6E-20	0		
4	1,9227	0,055	0,071	0	0,067	0	3	3	0,88	2,855	0	0	19,737	13,768	32,069	18,768	0	0		
5	0,01	0	0,006	0,081	0	0,029	0,13	0,126	0	0	3,761	0	33,847	19,998	3,9999	20				
6	0	0	1,858	0	1E-04	0	1,86	1,858	0	0	0	138,702	39,996	86,645	39,999	12				
Resultado	Xf8	Fval	507,7																	
1	0	0,01	0,01	0	0,061	0	2	2	1,92	0,1	0	0	4,2775	5,3059	11,777	9,8058	0	0		
2	0	0	0	0	0,204	0	2	2	1,8	0,795	0	0	4	5,6281	24,997	114,61	0,00011	0		
3	0,0257	1,18	0	0	0,038	1,473	3	3	0,28	1,48	0	0	29,998	51,682	39,997	61,681	0	0		
4	1,8743	0,006	0,038	0	1,082	0	3	3	0	1,626	0	0	9,3559	14,357	21,689	19,357	0	0		
5	0	0,009	0	1,374	0	0	1,38	1,384	0	0	24,509	0	21,711	20	3,9999	20				
6	0	0	1,473	0	0	0	1,47	1,473	0	0	0	73,1755	39,997	61,681	39,999	12				
Resultado	Xf9	Fval	Não Convergiu																	
Resultado	Xf10	Fval	Não Convergiu																	
Resultado	Xf11	Fval	468,8																	
1	0	0	0	0	0	0,926	2	2	1,07	0,003	0	0	20,672	7,7048	28,171	12,205	0	9E-19		
2	0	0	0	0	0	0	2	2	2	1,968	0	0	4	4	24,997	112,99	0,00012	0		
3	0,5331	0	0	0,293	1E-03	1,582	3	3	0,59	0,111	0	0	29,999	11,244	39,999	21,243	0,00037	0		
4	1,4194	0,03	0,134	0	0,892	0,192	3	3	0,33	1,915	0	0	19,563	15	31,896	19,999	0	0		
5	0,0441	0,003	0,053	0,792	0	0,001	0,89	0,893	0	0	25,176	0	32,183	20,001	3,9999	20				
6	0	0	2,701	0	0	0	2,7	2,701	0	0	0	24,9705	39,999	21,243	39,999	12				

Tabela D.9: Multiplicadores de Lagrange do problema operacional 1 para a vazão máxima de água de reposição de 4 t/h.

Processo	Restrições Inferiores							Li,K	Restrições Superiores							
	Li,K	L1	L2	L3	L4	L5	L6		F	L1	L2	L3	L4	L5	L6	F
Resultado	Xf1															
1	0	0	0	0	0	0	0	19,51368	1	0	0	0	44,59358	0	0	0
2	0	0	0	0	0	0	0	0	2	0	0	0	0	0	0	86,36104
3	0	0	0	0	48,52092	0	0	0	3	0	0	0	0	0	0	0
4	0	0	0	0	0	0	0	23,895	4	0	0	2,768165	0	0	0	0
5	78,28375	0	0	0	0	0	107,9529	0	5	0	0	0	0	0	0	0
6	0	0	140,0758	0	0	0	0	0	6	0	0	0	0	0	0	0
Resultado	Xf2 Não Convergiu															
Resultado	Xf3															
1	0	0	0	10,57983	0	157,4191	0	0	1	0	15,2519	24,23243	0	0	0	0
2	0	0	0	0	13,50518	0	0	0	2	0	0	0	0	0	0	0
3	0	0	0	0	100,8003	0	86,21006	0	3	0	0	0	46,19044	0	0	0
4	0	0	0	0	0	166,3894	0,445388	0	4	0	0	16,39375	0	0	0	0
5	39,99415	0	0	67,01109	0	257,8643	0	0	5	0	0	0	0	0	0	0
6	70,99106	102,2058	0	0	216,883	0	0	0	6	0	0	113,7463	0	0	0	0
Resultado	Xf4															
1	0	0	0	0	0	121,1514	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0
2	0	0	0	0	0	0	0	0	2	0	0	0	0	0	0	21,30889
3	0	20,40239	0	0	19,24709	0	0	0	3	0	0	0	18,12557	0	13,53092	0
4	0	0	0	0	0	166,6017	8,092633	0	4	0	36,4083	0	0	0	0	0
5	17,25284	0	0	106,3604	0	204,574	0	0	5	0	0	0	0	0	0	0
6	0	102,6966	0	0	36,2847	0	0	0	6	0	0	0	0	0	0	0
Resultado	Xf5															
1	0	0	0	0	0	55,97007	60,61422	0	1	0	0	1,153047	0,688037	0	0	0
2	0	0	0	0	21,02313	0	0	0	2	0	0	0	0	0	0	0
3	0	92,40407	0	0	33,27118	0	0	0	3	3,091697	0	0	0	0	2,706815	0
4	0	0	3,325125	0	0	16,7564	0	0	4	0	10,90365	0	0	0	0	16,64603
5	16,11781	0	27,65491	19,10032	0	41,32841	0	0	5	0	0	0	0	0	0	0
6	0	102,5627	0	3,492241	37,46194	0	0	0	6	0	0	3,972312	0	0	0	0
Resultado	Xf6															
1	0	0	0	0	0	11,01303	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0
2	0	0	0	0	0	0	0	0	2	0	0	0	0	0	0	46,63824
3	0	89,25156	0	0	58,88522	0	0	0	3	6,588725	0	0	0	0	16,06835	0
4	0	0	0	0	0	18,05724	11,74465	0	4	0	0	0	0	13,87503	0	0
5	1,873005	0	0	0	0	26,88956	0	0	5	0	0	0	13,22905	0	0	0
6	0	82,37424	0	0	0	0	0	0	6	0	0	0	0	0	0	0

Tabela D.9: Multiplicadores de Lagrange do problema operacional 1 para a vazão máxima de água de reposição de 4 t/h.

Processo	Restrições Inferiores							Li,K	Restrições Superiores							
	Li,K	L1	L2	L3	L4	L5	L6		F	L1	L2	L3	L4	L5	L6	F
Resultado	Xf7															
1	0	0	0	0	0	92,48669	43,98959	1	0	0	0	14,04071	0	0	0	
2	0	0	0	0	48,37595	0	0	2	0	0	0	0	0	0	0	
3	0	0	0	0	54,41045	0	8,213903	3	0	0	0	0	0	46,47233	0	
4	0	0	0	0	23,23674	75,584	0	4	0	6,4587	4,278782	0	0	0	10,25934	
5	0	0	0	4,628607	0	87,99409	0	5	0	0	0	0	0	0	0	
6	0	43,67822	0	0	0	0	0	6	0	0	0	0	0	0	0	
Resultado	Xf8															
1	0	0	0	0	0	57,0467	0	1	0	13,92825	0	0	0	0	14,32941	
2	0	0	0	0	25,16187	0	0	2	0	0	0	0	0	0	0	
3	0	0	0	0	48,2831	0	21,68627	3	0	4,314637	0	0	0	65,70418	0	
4	0	0	2,338167	0	0	60,33575	0	4	1,253399	0	0	0	0	0	0	
5	5,425515	0	13,21794	11,64918	0	81,40055	0	5	0	22,03616	0	0	0	0	0	
6	0	80,75594	0	0	32,8062	0	0	6	0	0	0	0	0	0	0	
Resultado	Xf9	Não Convergiu														
Resultado	Xf10	Não Convergiu														
Resultado	Xf11															
1	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	8,918652	0	
2	0	0	0	0	67,86859	0	0	2	0	0	0	0	0	0	0	
3	0	88,35033	0	0	80,9213	0	0	3	21,44791	0	0	32,69735	0	0	0	
4	0	0	0	0	68,16954	0	0	4	0	0	65,3492	0	0	0	0	
5	31,78122	0	39,4314	34,28551	0	109,0676	0	5	0	0	0	0	0	0	0	
6	0	64,06346	0	0	0	0	0	6	0	0	52,83774	0	0	0	0	

Tabela D.10: Resultados do operacional 2 para a vazão máxima de água de reposição de 1 t/h.

Processo																	Folga	Folga	
Li,K	L ₁	L ₂	L ₃	L ₄	L ₅	L ₆	Lout _i	Lin _i	F _i	W _i	SM ₁	SM ₂	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}	Xout _{i,1}	Xout _{i,2}	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}	
Resultado	Xf1	Fval	600,1																
1	0	0	0	0	0	1	2	2	1	0	0	0	21,999	7,9999	29,499	12,5	1E-20	0,00014	
2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	6E-04	0	0	3,9999	20	24,997	128,98	2,4E-05	0,00012	
3	0	2	0	0	0	1	3	3	0	1	0	0	29,999	89,975	39,998	99,973	1,9E-20	0	
4	2	0	0	0	1	0	3	3	0	0	0	0	20,999	15	33,332	19,999	-2E-20	9,8E-05	
5	0	0	0	3	0	2E-04	3	3	0	0	88,005	0	33,333	19,999	3,9999	20			
6	0	0	2,001	0	2E-04	0	2	2,001	0	0	0	175,996	39,996	99,967	39,999	12			
Resultado	Xf2	Fval	620,3																
1	0	0	0	0	0	1	2	2	1	0	0	0	21,999	7,9999	29,499	12,5	-3E-21	0,00014	
2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	1	0	0	3,9999	20	24,997	128,98	2,4E-05	0,00012	
3	0	1	0	0	0,417	1,583	3	3	0	0	0	0	29,999	52,1	39,998	62,099	-3E-20	0	
4	1,9997	0	0	0	1	2E-04	3	3	0	0	0	0	20,999	15	33,332	19,999	-1E-20	0,00028	
5	0,0003	0	0,067	3	0	0,35	3,42	3,417	0	0	103	0	34,144	19,999	3,9999	20			
6	0	2E-04	2,934	0	0	0	2,93	2,934	0	0	0	146,998	39,997	62,104	39,999	12			
Resultado	Xf3	Fval	Não Convergiu																
Resultado	Xf4	Fval	Não Convergiu																
Resultado	Xf5	Fval	614,9																
1	0	0	0	0	0	1	2	2	1	0	0	0	21,999	7,9999	29,499	12,5	2,7E-21	0,00014	
2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	1	0	0	3,9999	20	24,997	128,98	2,4E-05	0,00012	
3	0	1	0	0	0,417	1,583	3	3	0	0	0	0	29,999	52,105	39,998	62,104	1,1E-21	0	
4	2	0	0	0	1	0	3	3	0	0	0	0	21	15	33,332	19,999	0,00024	3,6E-05	
5	0	1E-04	0,066	3	0	0,35	3,42	3,417	0	0	103	0	34,145	19,999	3,9999	20			
6	0	0	2,934	0	1E-04	0	2,93	2,934	0	0	0	146,998	39,997	62,102	39,999	12			
Resultado	Xf6	Fval	Não Convergiu																

Tabela D.10: Resultados do operacional 2 para a vazão máxima de água de reposição de 1 t/h.

Processo																	Folga	Folga			
Li,K	L ₁	L ₂	L ₃	L ₄	L ₅	L ₆	Lout _i	Lin _i	F _i	W _i	SM ₁	SM ₂	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}	Xout _{i,1}	Xout _{i,2}	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}			
Resultado	Xf7	Fval	716,8																		
1	0	0	0	0	0	1	2	2	1	0	0	0	21,999	7,9999	29,499	12,5	-2E-19	0,00014			
2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	0,977	0	0	3,9999	20	24,997	128,98	2,4E-05	0,00012			
3	0	1,018	0	0	0,409	1,573	3	3	0	0,023	0	0	29,999	52,799	39,998	62,798	0	0			
4	2	0	0	0	1	0	3	3	0	0	0	0	20,999	15	33,332	19,999	-1E-18	9,8E-05			
5	0	0,004	0,054	3	0	0,351	3,41	3,409	0	0	102,66	0	34,112	19,999	3,9999	20					
6	0	0	2,923	0	1E-04	0	2,92	2,923	0	0	0	148,499	39,997	62,796	39,999	12					
Resultado	Xf8	Fval	693,8																		
1	0	0	0	0	0	1	2	2	1	0	0	0	21,999	7,9999	29,499	12,5	5,6E-20	0,00014			
2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	0,632	0	0	3,9999	20	24,997	128,98	2,4E-05	0,00012			
3	0	1,308	0	1,243	0,058	0,391	3	3	0	0,368	0	0	29,998	66,482	39,997	76,48	0	0			
4	2	0	0	0	1	0	3	3	0	0	0	0	20,999	15	33,332	19,999	2,6E-19	9,8E-05			
5	0	0,06	0,052	1,757	0	1,189	3,06	3,058	0	0	97,474	0	35,872	19,999	3,9999	20					
6	0	0	2,58	0	0	0	2,58	2,58	0	0	0	166,343	39,996	76,479	39,999	12					
Resultado	Xf9	Fval	668,5																		
1	0	0	0	0	0	1	2	2	1	0	0	0	21,999	7,9999	29,499	12,5	4,3E-21	0,00014			
2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	0,201	0	0	3,9999	20	24,997	128,98	2,4E-05	0,00012			
3	0	1,799	0	0,451	0	0,75	3	3	0	0,799	0	0	29,998	83,372	39,997	93,37	0	0			
4	2	0	0	0	1	0	3	3	0	0	0	0	20,999	15	33,332	19,999	2,2E-21	9,8E-05			
5	0	0	0,044	2,549	0	0,407	3	3	0	0	91,008	0	34,334	19,999	3,9999	20					
6	0	0	2,156	0	0	0	2,16	2,156	0	0	0	175,47	39,996	93,367	39,999	12					
Resultado	Xf10	Fval	Não Convergiu																		
Resultado	Xf11	Fval	493,2																		
1	0	0	0	0	0	1	2	2	1	0	0	0	21,999	7,9999	29,499	12,5	4,4E-45	0,00014			
2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	0,093	0	0	3,9999	20	24,997	128,98	2,4E-05	0,00012			
3	0	1,905	0	0	0,039	1,055	3	3	0	0,907	0	0	29,999	86,393	39,998	96,391	2,1E-18	0			
4	2	0	0	0	1	0	3	3	0	0	0	0	20,999	15	33,332	19,999	-5E-19	9,8E-05			
5	0	0,002	0,001	3	0	0,036	3,04	3,039	0	0	89,39	0	33,409	19,999	3,9999	20					
6	0	4E-04	2,092	0	0	0	2,09	2,092	0	0	0	176,569	39,996	96,397	39,999	12					

Tabela D.10: Multiplicadores de Lagrange do operacional 2 para a vazão máxima de água de reposição de 1 t/h.

Processo		Restrições Inferiores						Li,K Restrições Superiores								
Li,K	L1	L2	L3	L4	L5	L6	F	Li,K	L1	L2	L3	L4	L5	L6	F	
Resultado	Xf1															
1	0	0	0	0	0	0,14921	0	1	0	0	0	0	0,420969	0	0	
2	0	0	0	0	0	0	0	2	0	0	0	0	1,74229	0	0	
3	0	1,892212	0	0	0	0	0	3	0	0	0	0	0	0	0	
4	0	0	0	0	0	0,117518	0	4	0	0	0	0	0,452666	0	0	
5	0,452666	0	0	0,260965	0	0,570183	0	5	0	0	0	0	0	0	0	
6	0,052166	1,967106	1,742134	0	0,179915	0	0	6	0	0	0	0	0	0	0	
Resultado	Xf2															
1	0	0	0	0	0	1,287623	0	1	0	0	0	0	0	0	0	
2	0	0	0	0	0	0	0	2	0	0	0	0	0	0	0	
3	0	0	0	0	0,376568	0	0	3	0	0	0	0	0	0	0	
4	0	0	0	0	0	1,29438	0	4	0	0	0	0	0	0	0	
5	0	0	0	0	0	1,287623	0	5	0	0	5,532318	0	0	0	0	
6	0	0,179832	0	0	0,232777	0	0	6	0	0	0	0	0	0	0	
Resultado	Xf3	Não Convergiu														
Resultado	Xf4	Não Convergiu														
Resultado	Xf5															
1	0	0	0	0	0	0,738563	0	1	0	0	0	0	0	0	0	
2	0	0	0	0	0	0	0	2	0	0	0	0	0	0	0	
3	0	0	0	0	0	0	0	3	0	0	0	0	0	0,347026	0	
4	0	0	0	0	0	0,741429	0	4	0	0	0	0	1,73E-06	0	0	
5	0	0	0	0	0	0,741433	0	5	0	4,847832	1,703594	0	0	0	0	
6	0	0,481118	0,02739	0	0,371614	0	0	6	0	0	0	0	0	0	0	
Resultado	Xf6	Não Convergiu														

Tabela D.10: Multiplicadores de Lagrange do operacional 2 para a vazão máxima de água de reposição de 1 t/h.

Processo	Restrições Inferiores							F	Li,K Restrições Superiores						
	Li,K	L1	L2	L3	L4	L5	L6		L1	L2	L3	L4	L5	L6	F
Resultado	Xf7														
1	0	0	0	0	0	0,633272	0	1	0	0	0	0	0	0	0
2	0	0	0	0	0	0	0	2	0	0	0	0	0	0	0
3	0	0	0	0	0	0,145506	0	3	0,19645	0	0	0	0	0,190783	0
4	0	0	0	0	0	0	0,228234	4	0	0	0	0	0,485477	0	0
5	0,485477	0	0	0	0	0	0,713713	5	0	4,649231	1,615805	0	0	0	0
6	0	0,295029	0	0	0	0,361023	0	6	0	0	0	0	0	0	0
Resultado	Xf8														
1	0	0	0	0	0	0,370665	0	1	0	0	0	0	0	0	0
2	0	0	0	0	0	0	0	2	0	0	0	0	0	0	0
3	0	0,365044	0	0	0	0,417179	0	3	0	0	0	0	0	0	0
4	0	0	0	0	0	0	0,371934	4	0	0	0	0	0	0	0
5	0,347221	0	0	0	0,241942	0	0,814784	5	0	4,480234	2,101621	0	0	0	0
6	0	0,346889	0	0	0	0,379614	0	6	0	0	0	0	0	0	0
Resultado	Xf9														
1	0	0	0	0	0	0,804309	0	1	0	0	0	0	0	0	0
2	0	0	0	0	0	0	0	2	0	0	0	0	0	0	0
3	0	0	0	0	0	0,360564	0	3	0	0	0	1,14268	0	0,858454	0
4	0	0	0	0	0	0	0,804328	3	0	0	0	0	0	0	0
5	0,268422	0	0	0	0,265908	0	1,162217	4	0	0	1,010754	0	0	0	0
6	0	1,258451	0	0	0	2,071542	0	5	0	0	0	0	0	0	0
Resultado	Xf10	Não Convergiu													
Resultado	Xf11														
1	0	0	0	0	0	1,287623	0	1	0	0	0	0	0	0	0
2	0	0	0	0	0	0	0	2	0	0	0	0	0	0	0
3	0	0	0	0	0	0,376568	0	3	0	0	0	0	0	0	0
4	0	0	0	0	0	0	1,29438	3	0	0	0	0	0	0	0
5	0	0	0	0	0	0	1,287623	4	0	0	5,532318	0	0	0	0
6	0	0,179832	0	0	0	0,232777	0	5	0	0	0	0	0	0	0

Tabela D.10: Resultado do problema operacional 2 para a vazão máxima de água de reposição de 4 t/h.

Processo	Li,K	L ₁	L ₂	L ₃	L ₄	L ₅	L ₆	Lout _i	Lin _i	F _i	W _i	SM ₁	SM ₂	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}	Xout _{i,1}	Xout _{i,2}	Folga Xin _{i,1}	Folga Xin _{i,2}
Resultado	Xf1	Fval	491,5																
	1	0	0	0,07	0,078	0	0	2	2	1,85	0,862	0	0	5,39	5,0256	12,89	9,5255	0	0
	2	0	0	0	0	2	0	2	2	0	2	0	0	3,9999	19,999	24,997	128,98	2,4E-05	0
	3	0,8524	0	0	0	0	0	3	3	2,15	0,216	0	0	6,526	5,57	16,526	15,57	0	0
	4	0,2859	0	2,714	0	0	0	3	3	0	0,922	0	0	16,179	14,994	28,512	19,993	0	0
	5	0	1E-04	0	2	0	0	2	2	0	0	49,025	0	28,512	19,999	3,9999	20		
	6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0		
Resultado	Xf2	Fval	Não Convergiu																
Resultado	Xf3	Fval	568,9																
	1	0	0,068	0	0	0	0	2	2	1,93	0	0	0	4,7163	7,84	12,216	12,34	0	0
	2	0	0	0	0	0,447	0	2	2	1,55	1,055	0	0	4	7,5743	24,997	116,56	9,9E-05	0
	3	0,2404	0,771	0	0	0	1,662	3	3	0,33	0,025	0	0	29,999	38,018	39,998	48,017	0	0
	4	1,7153	0,079	0	0	0,038	0,979	3	3	0,19	2,921	0	0	20,999	14,56	33,332	19,559	0	0
	5	0,0443	0,027	0,012	0,079	0	0,323	0,48	0,485	0	0	15,288	0	35,533	20,001	3,9999	20		
	6	0	0	2,964	3E-04	0	0	2,96	2,964	0	0	0	106,748	39,998	48,014	39,999	12		
Resultado	Xf4	Fval	626,3																
	1	0	0	0,047	0,265	0	0,073	2	2	1,61	0	0	0	10,047	6,8764	17,547	11,376	0	0
	2	0	0	0	0	0,228	0	2	2	1,77	1,851	0	0	4	5,8278	24,997	114,81	0,00011	0
	3	0,0418	0,043	0	0,647	0,056	1,599	3	3	0,61	0,075	0	0	29,999	13,707	39,998	23,707	0,00027	0
	4	1,9582	0,066	0,06	0	0,335	0,581	3	3	0	2,075	0	0	20,996	14,995	33,329	19,995	0	0
	5	0	0,04	0,061	0,013	0	0,504	0,62	0,619	0	0	21,593	0	38,881	19,996	3,9999	20		
	6	0	0	2,757	0	0	0	2,76	2,757	0	0	0	32,2734	39,998	23,707	39,999	12		

Tabela D.10: Resultado do problema operacional 2 para a vazão máxima de água de reposição de 4 t/h.

Processo																	Folga	Folga			
Li,K	L ₁	L ₂	L ₃	L ₄	L ₅	L ₆	Lout _i	Lin _i	F _i	W _i	SM ₁	SM ₂	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}	Xout _{i,1}	Xout _{i,2}	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}			
Resultado	Xf5	Fval	413,9																		
1	0	0	0	0	0	1	2	2	1	0,335	0	0	21,999	7,9998	29,499	12,5	-6E-17	2,9E-21			
2	0	0	0	0	0	0	2	2	2	1,912	0	0	4	4	24,997	112,99	0,00012	0			
3	0,0358	0,048	0	0,532	0,073	1,679	3	3	0,63	0,08	0	0	29,999	13,516	39,999	23,516	0,00028	0			
4	1,6295	0,038	0,064	0	0,723	0,177	3	3	0,37	1,673	0	0	20,999	14,732	33,332	19,732	-5E-25	-3E-17			
5	0	0,002	0	0,794	0	0	0,8	0,797	0	0	23,346	0	33,308	19,999	3,9999	20					
6	0	0	2,856	0	0	0	2,86	2,856	0	0	0	32,8896	39,999	23,516	39,999	12					
Resultado	Xf6	Fval	387,2																		
1	0	0	0,032	0,023	0	0,817	2	2	1,13	0	0	0	19,602	7,999	27,102	12,499	0	0			
2	0	0	0	0	0	0	2	2	2	1,422	0	0	4	4	24,997	112,99	0,00012	0			
3	0	0,537	0	0	0	1,853	3	3	0,61	0,277	0	0	29,999	28,45	39,998	38,45	1,9E-18	0			
4	1,9999	0,041	0,021	0	0,676	0	3	3	0,26	2,301	0	0	19,94	14,999	32,273	19,998	0	0			
5	0	0	0	0,676	0	0	0,68	0,676	0	0	19,11	0	32,273	19,999	3,9999	20					
6	0,0001	0	2,67	0	0	0	2,67	2,67	0	0	0	70,6328	39,998	38,448	39,999	12					
Resultado	Xf7	Fval	520																		
1	0	8E-04	0	0,033	0	0,922	2	2	1,04	0	0	0	21,093	7,9998	28,593	12,5	0	0			
2	0	0	0	0	0,056	0	2	2	1,94	1,636	0	0	4	4,4448	24,997	113,43	0,00012	0			
3	0,0487	0,259	0	0,519	0	1,56	3	3	0,61	0	0	0	29,999	20,5	39,998	30,499	-1E-18	0			
4	1,9496	0,068	0,001	0	0,54	0,044	3	3	0,4	2,364	0	0	20,999	15	33,332	19,999	0	0			
5	0,0018	0,037	0,018	0,084	0	0,455	0,6	0,595	0	0	20,298	0	38,097	19,999	3,9999	20					
6	0	0	2,98	0	0	0	2,98	2,98	0	0	0	55,1339	39,998	30,499	39,999	12					
Resultado	Xf8	Fval	362,2																		
1	0	0	0,014	0,018	0	0,801	2	2	1,17	1,357	0	0	18,816	7,4669	26,316	11,967	-8E-19	-1E-21			
2	0	0	0	0	0,636	0	2	2	1,36	1,983	0	0	4	9,091	24,997	118,08	8,9E-05	-3E-18			
3	0,2889	0,017	0	0	0,013	1,978	3	3	0,7	0,046	0	0	29,999	10,759	39,998	20,758	0,00039	-6E-17			
4	0,3541	0	0,158	0	1,718	0,004	3	3	0,77	0,615	0	0	8,5799	14,999	20,913	19,999	-3E-19	-1E-17			
5	0	0	0	2,368	0	0	2,37	2,368	0	0	40,046	0	20,913	19,999	3,9999	20					
6	0	0	2,782	0	0	0	2,78	2,782	0	0	0	24,3683	39,998	20,758	39,999	12					

Tabela D.10: Resultado do problema operacional 2 para a vazão máxima de água de reposição de 4 t/h.

Processo																		Folga	Folga
Li,K	L ₁	L ₂	L ₃	L ₄	L ₅	L ₆	Lout _i	Lin _i	F _i	W _i	SM ₁	SM ₂	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}	Xout _{i,1}	Xout _{i,2}	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}	
Resultado	Xf9	Fval	Não Convergiu																
Resultado	Xf10	Fval	494,4																
1	0	0	0,031	0	0	0	2	2	1,97	0	0	0	4,4269	4,5936	11,927	9,0935	0	0	
2	0	0	0	0	1,113	0	2	2	0,89	1,537	0	0	3,9999	12,907	24,997	121,89	6,7E-05	0	
3	0,8454	0,464	0	1,691	0	0	3	3	0	2,268	0	0	21,814	32,67	31,814	42,669	0	0	
4	1,1547	0	0,701	0	0	0	3	3	1,14	0,196	0	0	13,552	14,999	25,885	19,998	0	0	
5	0	0	0	1,113	0	0	1,11	1,113	0	0	24,368	0	25,885	19,998	3,9999	20	0	0	
6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
Resultado	Xf11	Fval	487,9																
1	0	0	0	0	0	1	2	2	1	0	0	0	21,999	7,9998	29,499	12,5	0	-2E-18	
2	0	0	0	0	0	0	2	2	2	1,815	0	0	4	4	24,997	112,99	0,00012	0	
3	1,9708	0,177	0	0,031	0	0,643	3	3	0,18	0,004	0	0	29,999	17,871	39,998	27,871	0,0001	0	
4	0	0	0,42	0	0,826	0,933	3	3	0,82	2,181	0	0	20,23	14,233	32,563	19,232	0	0	
5	0,0292	0,009	0	0,788	0	0	0,83	0,826	0	0	23,436	0	32,373	20	3,9999	20	0	0	
6	0	0	2,576	0	0	0	2,58	2,576	0	0	0	40,8829	39,998	27,871	39,999	12	0	0	

Tabela D.10: Multiplicadores de Lagrange do operacional 2 para a vazão máxima de água de reposição de 4 t/h.

Processo		Restrições Inferiores						Li,K	Restrições Superiores						
Li,K	L1	L2	L3	L4	L5	L6	F	L1	L2	L3	L4	L5	L6	F	
Resultado	Xf1														
1	0	0	0,044239	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0,840067	
2	1,47E-05	0	6,21E-06	0	0	0	0	2	0	0	0	1,221223	0	0,999978	
3	0,179859	0	0	0	0	0	0	3	0	0	0	0	0	0,725207	
4	0,113216	0	0	0	0	0	0	4	0	0	0	0	0	0	
5	1,511428	0	1,343944	1,221346	0	0	0	5	0	1,799473	0	0	0	0	
6	0	0	0	0	0	0	0	6	0	0	0	0	0	0	
Resultado	Xf2	Não Convergiu													
Resultado	Xf3														
1	0	0	0	0	0	0,079642	0	1	0	0,057988	0	0	0	0,835574	
2	0	0	0	0	0	0	0	2	0	0	0	0	0	0,51388	
3	0	0,109316	0	0	0,518863	0	0	3	0	0	0	0	0	0,405268	
4	0	0	0,041244	0	0	0,16813	0	4	0,590586	0	0	0	0,421294	0,931989	
5	0	0	0	0,488288	0	0,767869	0	5	0	1,731521	0,162612	0	0	0	
6	0,419639	0,531479	0	0,176171	0,94341	0	0	6	0	0	0,105253	0	0	0	
Resultado	Xf4														
1	0	0,006969	0	0	0,019213	0	0	1	0	0	0,084879	0,026508	0	0,769604	
2	0	0	0	0,009579	0	0,089735	0	2	0	0	0	0	0,166082	0,948397	
3	0	0,202156	0	0	0,782284	0	0	3	0	0	0	0	0	0,137408	
4	0	0	0	0	0	0	0	4	0,438384	0	0,084762	0	0	0	
5	0	0	0,059454	0,201716	0	0,594195	0	5	0	3,461108	0	0	0	0	
6	0,196484	0,461508	0	0,16153	1,021538	0	0	6	0	0	0,080336	0	0	0	
Resultado	Xf5														
1	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0,744158	
2	0	0	0	0	0	0	0	2	0	0	0	0	0	0,971057	
3	0	0,163299	0	0	0,727268	0	0	3	0	0	0	0,150763	0	0,399668	
4	0,137141	0	0	0	0	0,078428	0	4	0	0,417672	0	0	0	0,636083	
5	0,434775	0	0,19327	0,276391	0	0,457446	0	5	0	1,770066	0	0	0	0	
6	0,418588	0,602571	0	0,261438	1,193239	0	0	6	0	0	0,011282	0	0	0	
Resultado	Xf6														
1	0	0	0	0,495006	0	0,709152	0	1	0	0	0	0	0	0,076513	
2	0	0	0	0,071265	0	0	0	2	0	0	0	0	0	0,700783	
3	0	0	0	0	0,148683	0	0	3	0	0	0	0	0	0,380403	
4	0	0	0	0	0	0,709101	0	4	0	1,996196	0	0	0	0,077355	
5	0,683472	0	0	0,494836	0	1,438085	0	5	0	0	0	0	0	0	
6	0	0,480848	0	0,246111	0,659751	0	0	6	0,283711	0	0	0	0	0	

Tabela D.10: Multiplicadores de Lagrange do operacional 2 para a vazão máxima de água de reposição de 4 t/h.

Processo	Restrições Inferiores							Li,K	Restrições Superiores							
	Li,K	L1	L2	L3	L4	L5	L6		F	L1	L2	L3	L4	L5	L6	F
Resultado	Xf7															
1	0	0,002976	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0,737322	
2	0	0	0	0,044762	0	0,06037	0	2	0	0	0	0	0,041274	0	0,772891	
3	0	0,061634	0	0	0,737133	0	0	3	0,157255	0	0	0,289724	0	0,529241	0	
4	0	0,031457	0	0	0	0,040745	0	4	0	0	0,023731	0	0	0	0,728313	
5	0,367415	0	0	0,258892	0	0,508991	0	5	0	2,04819	0	0	0	0	0	
6	0,375343	0,61057	0	0,24264	1,277987	0	0	6	0	0	0,051158	0	0	0	0	
Resultado	Xf8															
1	0	0	0	0,101447	0,179736	0,094725	0	1	0	0,918276	0	0	0	0	0,652528	
2	0	0	0	0	0	0	0	2	0	0	0	0	0	0	0,994703	
3	0,218225	0	0	0,377949	0,947951	0	0	3	0	0,051118	0	0	0	0,23948	0	
4	0,446717	0	0	0	0	0,449783	0	4	0	0	0,039068	0	0	0	0,113694	
5	0,564952	0	0	0,004856	0	0,567947	0	5	0	0	0	0	0	0	0	
6	0,493539	0,540903	0	0,691203	1,305806	0	0	6	0	0	0,005409	0	0	0	0	
Resultado	Xf9	Não Convergiu														
Resultado	Xf10															
1	0	0,204731	0	0	0,669204	0	0	1	0	0	0,257657	0	0	0,249674	0	
2	0	0	0	0,021163	0	0,010546	0	2	0	0	0	0	0,238567	0	0,904861	
3	0	0,236343	0	0	0,695841	0	0,022111	3	0,284927	0	0	0	0	0,258119	0	
4	0	0	0,280281	0	0,082322	0,40337	0	4	0	0,540432	0	0	0	0	0,462458	
5	0	0	0,232718	0,325219	0	0,427257	0	5	0	1,107689	0	0	0	0	0	
6	0	0,763036	0	0,278239	1,043237	0	0	6	0	0	0	0	0	0	0	
Resultado	Xf11															
1	0	0,204731	0	0	0,669204	0	0	1	0	0	0,257657	0	0	0,249674	0	
2	0	0	0	0,021163	0	0,010546	0	2	0	0	0	0	0,238567	0	0,904861	
3	0	0,236343	0	0	0,695841	0	0,022111	3	0,284927	0	0	0	0	0,258119	0	
4	0	0	0,280281	0	0,082322	0,40337	0	4	0	0,540432	0	0	0	0	0,462458	
5	0	0	0,232718	0,325219	0	0,427257	0	5	0	1,107689	0	0	0	0	0	
6	0	0,763036	0	0,278239	1,043237	0	0	6	0	0	0	0	0	0	0	

Tabela D.11: Resultado do problema operacional 3 para a vazão máxima de água de reposição de 1 t/h.

Processo																		
Li,K	L ₁	L ₂	L ₃	L ₄	L ₅	L ₆	Lout _i	Lin _i	F _i	W _i	SM ₁	SM ₂	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}	Xout _{i,1}	Xout _{i,2}	Folga Xin _{i,1}	Folga Xin _{i,2}
Resultado	Xf1	Fval	Não convergiu															
Resultado	Xf2	Fval	732,6															
	1	0	0	0	0	1,000	2,000	2,000	1	0	0	0	21,999	7,9999	29,499	12,5	-2E-25	1E-04
	2	0	0	0	2,000	0	2,000	2,000	0	1	0	0	3,9999	20	24,997	128,98	2E-05	1E-04
	3	0	0,971	0	0	0,429	1,601	3,000	3,000	0	0	0	29,999	50,99	39,998	60,989	6E-22	-4E-25
	4	2,000	0	0	0	1,000	0	3,000	3,000	0	0	0	20,999	15	33,332	19,999	-2E-26	1E-04
	5	0	0,03	0	3	0	0,400	3,429	3,429	0	0	103	34,038	19,999	3,9999	20		
	6	0	0	3,000	0	0	0	3,000	3,000	0	0	0	39,997	60,994	39,999	12		
Resultado	Xf3	Fval	Não convergiu															
Resultado	Xf4	Fval	3890															
	1	0	0	0	0	1	2	2	1	0	0	0	21,999	7,9999	29,499	12,5	-5E-19	1E-04
	2	0	0	0	2	0	2	2,0003	0	1	0	0	3,9999	20	24,997	128,98	2E-05	1E-04
	3	0	0,988	0	0	0,4215	1,5902	3	3,0001	0	0	0	29,999	51,664	39,998	61,663	1E-17	1E-18
	4	2	0	0	0	1	0	3	3,0001	0	0	0	20,999	15	33,332	19,999	-1E-18	1E-04
	5	0	0,012	0,04	3	0	0,3696	3,4217	3,4216	0	0	103	34,102	19,999	3,9999	20		
	6	0	0	2,96	0	0,0001	0	2,9599	2,9598	0	0	0	39,997	61,661	39,999	12		
Resultado	Xf5	Fval	Não convergiu															
Resultado	Xf6	Fval	Não convergiu															
Resultado	Xf7	Fval	Não convergiu															

Tabela D.11: Resultado do problema operacional 3 para a vazão máxima de água de reposição de 1 t/h.

Resultado	Xf8	Fval	732															
1	0	0	0	0	0	1	2	2	1	0	0	0	21,999	7,9999	29,499	12,5	4E-20	1E-04
2	0	0	0	0	2	0	2	2,0003	0	1	0	0	3,9999	20	24,997	128,98	2E-05	1E-04
3	0	0,974	0	0	0,4274	1,5985	3	3,0001	0	0	0	0	29,999	51,121	39,998	61,119	0E+00	0E+00
4	2	0	0	0	1	0	3	3,0001	0	0	0	0	20,999	15	33,332	19,999	0E+00	1E-04
5	0	0,026	0,007	3	0	0,394	3,4276	3,4276	0	0	103	0	34,05	19,999	3,9999	20		
6	0	0	2,993	0	0,0001	0	2,9927	2,9925	0	0	0	147	39,997	61,118	39,999	12		
Resultado	Xf9	Fval	Não convergiu															
Resultado	Xf10	Fval	732															
1	0	0	0	0	0	1	2	2	1	0	0	0	21,999	7,9999	29,499	12,5	4E-20	1E-04
2	0	0	0	0	2	0	2	2,0003	0	1	0	0	3,9999	20	24,997	128,98	2E-05	1E-04
3	0	0,974	0	0	0,4274	1,5985	3	3,0001	0	0	0	0	29,999	51,121	39,998	61,119	0E+00	0E+00
4	2	0	0	0	1	0	3	3,0001	0	0	0	0	20,999	15	33,332	19,999	0E+00	1E-04
5	0	0,026	0,007	3	0	0,394	3,4276	3,4276	0	0	103	0	34,05	19,999	3,9999	20		
6	0	0	2,993	0	0,0001	0	2,9927	2,9925	0	0	0	147	39,997	61,118	39,999	12		
Resultado	Xf11	Fval	559,5															
1	0	0	0	0	0	1	2	2	1	0	0	0	21,999	7,9999	29,499	12,5	0	0,00014
2	0	0	0	0	2	0	2	2,0003	0	0,12	0	0	3,9999	20	24,997	128,98	2E-05	1E-04
3	0	1,883	0	0	0,0485	1,0682	3	3,0001	0	0,88	0	0	29,999	85,565	39,998	95,563	-1E-18	0E+00
4	2	0	0	0	1	0	3	3,0001	0	0	0	0	20,999	15	33,332	19,999	7E-21	1E-04
5	0	0,002	0,002	3	0	0,0447	3,0488	3,0487	0	0	89,73	0	33,43	19,999	3,9999	20		
6	0	0	2,113	0	0,0002	0	2,1131	2,113	0	0	0	176,57	39,996	95,557	39,999	12		

Tabela D.11: Matriz de ganhos e matriz RGA do problema operacional 3 para a vazão máxima de água de reposição de 1 t/h.

Problema		Matriz de Ganhos			RGA				Emparelhamento
Xf1	Não convergiu								
Xf2		Matriz de Ganhos			RGA				Emparelhamento
		-12,45	-2,35	-2,60	-14,09	-0,0147	-0,1882	-0,4909	1,6938 [L56, L45, L36, F1]
		0,01	0,00	0,00	0,00	1,0037	0,0015	-0,0089	0,0037
		-7,56	-0,74	-17,42	-27,96	0,0037	-0,0048	1,3953	-0,3942
		-8,98	-7,32	-1,96	-8,04	0,0073	1,1916	0,1045	-0,3033
Xf3	Não convergiu								
Xf4		Matriz de Ganhos			RGA				Emparelhamento
		-4,03	0,05	-3,14	-14,27	-2,755	0,000	-0,015	3,770 [L56, L63, L53, F1]
		0,00	-0,01	0,00	0,00	0,000	1,000	0,000	0,000
		-3,07	-11,91	-981,31	-26,41	-0,004	0,000	1,000	0,004
		-3,23	0,03	-2,99	-8,41	3,759	0,000	0,015	-2,774
Xf5	Não convergiu								
Xf6	Não convergiu								
Xf7	Não convergiu								
Xf8		Matriz de Ganhos			RGA				Emparelhamento
		-8,95	-2,27	-14,07	-54,52	0,010	-0,199	1,288	-0,099 [L56, L45, F1, L63]
		0,02	0,00	0,00	0,01	0,989	0,001	0,000	0,010
		-0,09	-0,45	-27,94	-1391,50	0,000	-0,001	-0,058	1,060
		-6,32	-7,26	-8,00	-55,55	0,001	1,199	-0,230	0,029
Xf9	Não convergiu								
Xf10		Matriz de Ganhos			RGA				Emparelhamento
		-8,95	-2,27	-14,07	-54,52	0,010	-0,199	1,288	-0,099 [L56, L45, F1, L63]
		0,02	0,00	0,00	0,01	0,989	0,001	0,000	0,010
		-0,09	-0,45	-27,94	-1391,50	0,000	-0,001	-0,058	1,060
		-6,32	-7,26	-8,00	-55,55	0,001	1,199	-0,230	0,029
Xf11		Matriz de Ganhos			RGA				Emparelhamento
		-18,00	8,80	87,00	-682770,00	0,168	-0,007	0,798	0,041 [F1, L16, L63, L32]
		0,00	-0,01	0,00	0,00	-0,013	1,013	0,000	0,000
		-62,77	4,92	-62,82	99478,00	0,848	-0,006	0,155	0,003
		-11,91	6,21	-122,66	-17021000,0	-0,004	0,000	0,047	0,956

Tabela D.11: Resultado do problema operacional 3 para a vazão máxima de água de reposição de 4 t/h.

Processo	Li,K	L ₁	L ₂	L ₃	L ₄	L ₅	L ₆	Lout _i	Lin _i	F _i	W _i	SM ₁	SM ₂	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}	Xout _{i,1}	Xout _{i,2}	Folga Xin _{i,1}	Folga Xin _{i,2}
Resultado	Xf1	Fval	420,9																
	1	0	0	0	0,06	0	0	2	2	1,94	0,8	0	0	4,7343	4,4787	12,234	8,9786	0	0
	2	0	0	0	0	2	0,000	2,000	2,000	0	2	0	0	3,9999	19,999	24,997	128,98	2E-05	6E-18
	3	1	0	0	0	0,000	0	3,000	3,000	2,06	0,26	0	0	6,5805	5,5602	16,58	15,56	0E+00	0E+00
	4	0	0	3	0	0,000	0,000	3,000	3,000	0	0,94	0	0	16,21	14,999	28,543	19,999	0E+00	0E+00
	5	0,000	0	0	2	0,000	0	2,000	2,000	0	0	49,09	0	28,543	19,999	3,9999	20		
	6	0	0,00	0	0	0	0,000	0,000	0,000	0	0	0	0	0	0	0	0		
Resultado	Xf2	Fval	Não convergiu																
Resultado	Xf3	Fval	Não convergiu																
Resultado	Xf4	Fval	Não convergiu																
Resultado	Xf5	Fval	Não convergiu																
Resultado	Xf6	Fval	254,1																
Resultado	Xf7	Fval	2451																
	1	0	0	0	0	0	1	2	2	1,28	0,54	0	0	16,866	7,3998	24,365	11,9	-2E-16	-5E-13
	2	0	0	0	0	9E-01	0	2	2,0003	1,13	1,55	0	0	4,0028	10,997	25	119,98	4,5E-05	-6E-17
	3	0	0	0	1	0,13	1	3	3,0001	0,21	0,22	0	0	29,987	25,387	39,986	35,386	0,00031	-3E-17
	4	0,8635	0,09	0,001	0	0,522	0,7323	3	3,0001	0,79	1,1	0	0	19,295	14,505	31,627	19,504	-1E-15	-5E-18
	5	0,3616	0,061	0,005	0,74	0	0,3611	1,5265	1,5246	0	0	42,22	0	31,653	19,975	3,9999	20		
	6	0	0	2,73	0	0	0	2,7298	2,7288	0	0	0	63,853	39,985	35,387	39,999	12		
Resultado	Xf8	Fval	Não convergiu																
Resultado	Xf9	Fval	Não convergiu																
Resultado	Xf10	Fval	Não convergiu																
Resultado	Xf11	Fval	511																
	1	0	0	0	0	0	1	2	2	1	0	0	0	18,598	7,8584	26,098	12,358	-2E-11	4E-17
	2	0	0	0	0	0	0	2	2,0003	1,98	2	0	0	4	4,1782	24,997	113,16	0,00012	-1E-33
	3	0	0	0	0	0	2,1667	3	3,0001	0,83	-0	0	0	30	9,7776	39,999	19,777	0,00043	-1E-15
	4	1,9624	0	0,022	0	1,015	0	3	3,0001	0	1,96	0	0	18,722	15	31,055	19,999	-7E-13	-3E-16
	5	0	0	0	1,04	0	0	1,0376	1,0376	0	0	28,07	0	31,055	19,999	3,9999	20		
	6	0	0	3	0	0	0	2,8198	2,8197	0	0	0	21,931	39,999	19,777	39,999	12		

Tabela D.11: Matriz de ganhos e matriz RGA do problema operacional 3 para a vazão máxima de água de reposição de 4 t/h.

Problema								Matriz de Ganhos				RGA		Emparelhamento	
Resultado	Xf1	Tempo	4813	Fval	Xf1	Xf1	Matriz de Ganhos				RGA		Emparelhamento		
							0,0	15,8	0,0	-0,1	0,0	1,1	-0,1	0,0	[L43, L14, L41, L54]
							0,0	0,0	0,0	0,0	-0,9	0,0	1,9	0,0	
							1,1	2,7	-1,1	31,1	-0,3	0,0	-0,2	1,5	
							-0,3	3,5	-0,1	-1,1	2,2	-0,1	-0,7	-0,5	
Resultado	Xf2	Tempo	-	Fval	Xf2	Xf2	Não Convergiu								
Resultado	Xf3	Tempo	-	Fval	Xf3	Xf3	Não Convergiu								
Resultado	Xf4	Tempo	-	Fval	Xf4	Xf4	Não Convergiu								
Resultado	Xf5	Tempo	-	Fval	Xf5	Xf5	Não Convergiu								
Resultado	Xf6	Tempo	-	Fval	Xf6	Xf6	Não Convergiu								
Resultado	Xf7	Tempo	4186	Fval	Xf7	Xf7	Matriz de Ganhos				RGA		Emparelhamento		
							-54,2	-0,3	350,5	-1249500,0	1,0	0,0	-141,9	141,9	[L54, L45, L31, F1]
							0,0	0,0	0,0	-0,1	0,0	0,5	0,5	0,0	
							0,4	0,0	-1494,3	5326400,0	0,0	0,0	141,7	-140,7	
							-13,1	-5,1	0,4	-406,2	0,0	0,5	0,7	-0,2	
Resultado	Xf8	Tempo	-	Fval	Xf8	Xf8	Não Convergiu								
Resultado	Xf9	Tempo	-	Fval	Xf9	Xf9	Não Convergiu								
Resultado	Xf10	Tempo	-	Fval	Xf10	Xf10	Não Convergiu								
Resultado	Xf11	Tempo	2030	Fval	Xf11	Xf11	Matriz de Ganhos				rga		Emparelhamento		
							-21,6	-21,1	3,7	-9,4	0,4	-1,280	1,732	0,130	[F1, L43, L16, L54]
							-0,9	-2,8	0,0	-11,1	-0,1	-0,237	0,000	1,309	
							0,6	99,8	-12,8	0,4	0,0	1,725	-0,720	-0,001	
							-13,0	-7,5	0,0	-14,2	0,7	0,792	-0,011	-0,437	

Tabela D.12: Comparação dos resultados para a estimativa inicial 1 para a vazão máxima de água de reposição de 1 t/h.

Processo	Li,K	L ₁	L ₂	L ₃	L ₄	L ₅	L ₆	Lout _i	Lin _i	F _i	W _i	SM ₁	SM ₂	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}	Xout _{i,1}	Xout _{i,2}	Folga Xin _{i,1}	Folga Xin _{i,2}
Inicial	xo1																		
	1	0	0	0	0	0	1	2	2,000024	1	0	0	0	21,9993	7,9999	29,49899	12,4997	0	0,00014
	2	0	0	0	0	2	0	2	2,00026	0	0,75913	0	0	3,9999	20	24,99665	128,983	2,4E-05	0,00012
	3	0	1,12289	0	1,38268	0,10945	0,385	3	3,00006	0	0,00396	0	0	29,9975	59,765	39,99674	69,7636	0	0
	4	2	0	0	0	0,99999	0	3	3,000052	0	0,23701	0	0	20,9994	15	33,33213	19,9993	0	9,8E-05
	5	0	0,11823	0	1,38036	0	1,611	3,1096	3,109455	0	0	100,965	0	36,4691	19,999	3,999904	19,9995		
	6	0	0	2,9961	0	0	0	2,9961	2,995925	0	0	0	173,068	39,9967	69,764	39,99904	11,9997		
NLP Reduzido			Fval	473,9															
	1	0	0	0	0	0	1	2	2,000024	1	0	0	0	21,9993	7,9999	29,49899	12,4997	9E-17	0,00014
	2	0	0	0	0	2	0	2	2,00026	0	0,15225	0	0	3,9999	20	24,99665	128,983	2,4E-05	0,00012
	3	0	1,84356	0	0	0,06506	1,0914	3	3,00006	0	0,84788	0	0	29,9991	84,062	39,9983	94,0599	-5,9E-17	3E-17
	4	2	0	0	0	0,99999	0	3	3,000052	0	0	0	0	20,9994	15	33,33213	19,9993	-3E-17	9,8E-05
	5	0	0,00445	0	3,00005	0	0,0608	3,0653	3,065209	0	0	90,2805	0	33,4522	19,999	3,999904	19,9995		
	6	0	0	2,15217	0	0,00015	0	2,1523	2,152149	0	0	0	176,611	39,9958	94,055	39,99904	11,9997		
NLP Original			Fval	474,079															
	1	0	0	0	0	0	1	2	2,000024	1	0	0	0	21,9993	7,9999	29,49899	12,4997	-1,6E-17	0,00014
	2	0	0	0	0	2	0	2	2,00026	0	0,12152	0	0	3,9999	20	24,99665	128,983	2,4E-05	0,00012
	3	0	1,87569	0	0	0,05166	1,0726	3	3,00006	0	0,87861	0	0	29,9991	85,279	39,9983	95,2768	0	0
	4	2	0	0	0	0,99999	0	3	3,000052	0	0	0	0	20,9994	15	33,33213	19,9993	-1,4E-17	9,8E-05
	5	0	0,00305	0,00068	3,00005	0	0,0481	3,0519	3,051818	0	0	89,8195	0	33,4304	19,999	3,999904	19,9995		
	6	0	0	2,12077	0	0,00015	0	2,1209	2,120744	0	0	0	176,615	39,9957	95,271	39,99904	11,9997		
MINLP Reduzido			Fval	475,464															
	1	0	0	0	0	1,0001	2	2,000024	0,99989	0	0	0	0	22,0016	8,0003	29,50122	12,5002	0,00223	0,00055
	2	0	0	0	0	2	0	2	2,00026	0	0	0	0	3,9999	20	24,99665	128,983	2,4E-05	0,00012
	3	0	2,00023	0	0	0	0,9998	3	3,00006	0	1	0	0	29,9963	89,997	39,99552	99,9952	0	0
	4	2	0	0	0	0,99986	0	3	3,000052	0,00011	0,0001	0	0	21,001	14,999	33,33374	19,9989	0,00161	0
	5	0	0	0	2,99995	0	0	2,9999	2,999862	0	0	88,0004	0	33,3337	19,999	3,999904	19,9995		
	6	0	0	2,00006	0	0	0	2,0001	1,999888	0	0	0	175,999	39,9955	99,995	39,99904	11,9997		

Tabela D.12: Comparação dos resultados para a estimativa inicial 2 para a vazão máxima de água de reposição de 1 t/h.

Processo	Li,K	L ₁	L ₂	L ₃	L ₄	L ₅	L ₆	Lout _i	Lin _i	F _i	W _i	SM ₁	SM ₂	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}	Xout _{i,1}	Xout _{i,2}	Folga Xin _{i,1}	Folga Xin _{i,2}
Inicial	xo2																		
	1	0	0	0	0	0	0,99999	2	2,000024	1	0	0	0	21,9993	7,9999	29,499	12,4997	5,198E-19	0,000136
	2	0	0	0	0	2	0	2	2,00026	0	1,0001	0	0	3,9999	19,9995	24,9967	128,983	2,4E-05	0,00012
	3	0	0,9124	0	1,279759	0,2161	0,59173	3	3,00006	0	0	0	0	29,9991	51,567	39,9983	61,5658	2,319E-19	0
	4	2	0	0	0	0,99999	0	3	3,000052	0	0	0	0	20,9994	14,9996	33,3321	19,9993	9,431E-21	9,772E-05
	5	0	0,08747	0,03497	1,720293	0	1,37346	3,216	3,216105	0	0	103	0	36,025	19,9989	3,9999	19,9995		
	6	0	0,00025	2,96509	0	0	0	2,965	2,965188	0	0	0	147	39,9971	61,5714	39,999	11,9997		
NLP Reduzido			Fval	591,976															
	1	0	0	0	0	0	0,99999	2	2,000024	1	0	0	0	21,9993	7,9999	29,499	12,4997	0	0,000136
	2	0	0	0	0	2	0	2	2,00026	0	1,0001	0	0	3,9999	19,9995	24,9967	128,983	2,4E-05	0,00012
	3	0	0,99508	0	0	0,41865	1,58625	3	3,00006	0	0	0	0	29,9991	51,9187	39,9983	61,9174	-6,76E-19	0
	4	2	0	0	0	0,99999	0	3	3,000052	0	0	0	0	20,9994	14,9996	33,3321	19,9993	1,255E-18	9,772E-05
	5	0	0,00503	0,05534	3,000052	0	0,35843	3,419	3,418863	0	0	103	0	34,1267	19,9996	3,9999	19,9995		
	6	0	0	2,94472	0	0,0001	0	2,945	2,944676	0	0	0	147	39,997	61,916	39,999	11,9997		
NLP Original			Fval	591,976															
	1	0	0	0	0	0	0,99999	2	2,000024	1	0	0	0	21,9993	7,9999	29,499	12,4997	0	0,000136
	2	0	0	0	0	2	0	2	2,00026	0	1,0001	0	0	3,9999	19,9995	24,9967	128,983	2,4E-05	0,00012
	3	0	0,99508	0	0	0,41865	1,58625	3	3,00006	0	0	0	0	29,9991	51,9187	39,9983	61,9174	-6,76E-19	0
	4	2	0	0	0	0,99999	0	3	3,000052	0	0	0	0	20,9994	14,9996	33,3321	19,9993	1,255E-18	9,772E-05
	5	0	0,00503	0,05534	3,000052	0	0,35843	3,419	3,418863	0	0	103	0	34,1267	19,9996	3,9999	19,9995		
	6	0	0	2,94472	0	0,0001	0	2,945	2,944676	0	0	0	147	39,997	61,916	39,999	11,9997		
MINLP Reduzido			Fval	475,464															
	1	0	0	0	0	0	1,00011	2	2,000024	0,9999	0	0	0	22,0016	8,00031	29,5012	12,5002	0,0022321	0,000552
	2	0	0	0	0	2	0	2	2,00026	0	0	0	0	3,9999	19,9995	24,9967	128,983	2,4E-05	0,00012
	3	0	2,00023	0	0	0	0,99977	3	3,00006	0	1	0	0	29,9963	89,9972	39,9955	99,9952	0	0
	4	2	0	0	0	0,99986	0	3	3,000052	0,0001	0,0001	0	0	21,001	14,9993	33,3337	19,9989	0,0016141	0
	5	0	0	0	2,99995	0	0	3	2,999862	0	0	88	0	33,3337	19,9989	3,9999	19,9995		
	6	0	0	2,00006	0	0	0	2	1,999888	0	0	0	176	39,9955	99,9952	39,999	11,9997		

Tabela D.12: Comparação dos resultados para a estimativa inicial 2 para a vazão máxima de água de reposição de 1 t/h.

Processo	Li,K	L ₁	L ₂	L ₃	L ₄	L ₅	L ₆	Lout _i	Lin _i	F _i	W _i	SM ₁	SM ₂	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}	Xout _{i,1}	Xout _{i,2}	Folga Xin _{i,1}	Folga Xin _{i,2}
MINLP Original			Fval	475,464															
	1	0	0	0	0	0	1,00011	2	2,000024	0,9999	0	0	0	22,0016	8,00031	29,5012	12,5002	0,0022321	0,000552
	2	0	0	0	0	2	0	2	2,00026	0	0	0	0	3,9999	19,9995	24,9967	128,983	2,4E-05	0,00012
	3	0	2,00023	0	0	0	0,99977	3	3,00006	0	1	0	0	29,9963	89,9972	39,9955	99,9952	0	0
	4	2	0	0	0	0,99986	0	3	3,000052	0,0001	0,0001	0	0	21,001	14,9993	33,3337	19,9989	0,0016141	0
	5	0	0	0	2,99995	0	0	3	2,999862	0	0	88	0	33,3337	19,9989	3,9999	19,9995		
	6	0	0	2,00006	0	0	0	2	1,999888	0	0	0	176	39,9955	99,9952	39,999	11,9997		
Operacional 1			Fval	783,458															
	1	0	0	0	0	0	0,99999	2	2,000024	1	0	0	0	21,9993	7,9999	29,499	12,4997	1,548E-19	0,000136
	2	0	0	0	0	2	0	2	2,00026	0	0,4929	0	0	3,9999	19,9995	24,9967	128,983	2,4E-05	0,00012
	3	0	1,50735	0	0	0,20534	1,28731	3	3,00006	0	0,5072	0	0	29,9971	71,3255	39,9963	81,3239	0	0
	4	2	0	0	0	1	0	3	3,000052	0	0	0	0	20,9994	14,9997	33,3321	19,9993	7,428E-19	0,0001203
	5	0	0	0,02368	3,000052	0	0,18166	3,205	3,205343	0	0	95,39	0	33,7591	19,9989	3,9999	19,9995		
	6	0	0	2,46916	0	0	0	2,469	2,468986	0	0	0	171,2	39,9963	81,3239	39,999	11,9997		
Operacional 2			Fval	620,271															
	1	0	0	0	0	0	0,99999	2	2,000024	1	0	0	0	21,9993	7,9999	29,499	12,4997	-2,87E-21	0,000136
	2	0	0	0	0	2	0	2	2,00026	0	1,0001	0	0	3,9999	19,9995	24,9967	128,983	2,4E-05	0,00012
	3	0	0,99987	0	0	0,41666	1,58347	3	3,00006	0	0	0	0	29,9991	52,0999	39,9983	62,0987	-3,36E-20	0
	4	1,9997	0	0	0	1,00008	0,00022	3	3,000052	0	0	0	0	20,9994	14,9998	33,3321	19,9995	-9,58E-21	0,0002838
	5	0,0003	0	0,06651	3,000052	0	0,34997	3,417	3,416751	0	0	103	0	34,1444	19,9989	3,9999	19,9995		
	6	0	0,00025	2,93355	0	0	0	2,934	2,933648	0	0	0	147	39,997	62,1043	39,999	11,9997		
Operacional 3			Fval	732,61															
	1	0	0	0	0	0	1,000	2,000	2,0000	1	0	0	0	21,999	7,9999	29,499	12,5	-2E-25	1E-04
	2	0	0	0	0	2,000	0	2,000	2,0003	0	1,0001	0	0	3,9999	20	24,997	128,98	2E-05	1E-04
	3	0	0,971	0	0	0,429	1,601	3,000	3,0001	0	0	0	0	29,999	50,99	39,998	60,989	6E-22	-4E-25
	4	2,000	0	0	0	1,000	0	3,000	3,0001	0	0	0	0	20,999	15	33,332	19,999	-2E-26	1E-04
	5	0	0,029	0	3,000	0	0,400	3,429	3,4289	0	0	103	0	34,038	19,999	3,9999	20		
	6	0	0,000	3,000	0	0	0	3,000	3,0001	0	0	0	147	39,997	60,994	39,999	12		

Tabela D.12: Comparação dos resultados para a estimativa inicial 3 para a vazão máxima de água de reposição de 1 t/h.

Processo	Li,K	L ₁	L ₂	L ₃	L ₄	L ₅	L ₆	Lout _i	Lin _i	F _i	W _i	SM ₁	SM ₂	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}	Xout _{i,1}	Xout _{i,2}	Folga Xin _{i,1}	Folga Xin _{i,2}	
Inicial		xo3																		
	1	0	0	0	0	0	0,99999	2	2,000024	1	0	0	0	21,9993	7,9999	29,499	12,4997	0	0,00014	
	2	0	0	0	0	2	0	2	2,00026	0	0,02262	0	0	3,9999	19,9995	24,9967	128,983	2E-05	0,00012	
	3	0	1,91905	0	0,00166	0,03349	1,04581	3	3,00006	0	0,04856	0	0	29,9968	86,9254	39,996	96,9235	0	0	
	4	2	0	0	0	0,99999	0	3	3,000052	0	0,92888	0	0	20,9994	14,9996	33,3321	19,9993	5E-23	9,8E-05	
	5	0	0,05859	0,010085	2,06952	0	0,8954	3,0336	3,033511	0	0	94,53112	0	35,1611	19,9989	3,9999	19,9995			
	6	0	0	2,941418	0	0	0	2,9415	2,941203	0	0	0	249,799	39,9956	96,9225	39,999	11,9997			
NLP Reduzido			Fval	não convergiu																
NLP Original			Fval	473,898																
	1	0	0	0	0	0	0,99999	2	2,000024	1	0	0	0	21,9993	7,9999	29,499	12,4997	0	0,00014	
	2	0	0	0	0	2	0	2	2,00026	0	0,15367	0	0	3,9999	19,9995	24,9967	128,983	2E-05	0,00012	
	3	0	1,84209	0	0	0,06567	1,09224	3	3,00006	0	0,84646	0	0	29,9991	84,006	39,9983	94,0042	0	0	
	4	2	0	0	0	0,99999	0	3	3,000052	0	0	0	0	20,9994	14,9996	33,3321	19,9993	0	9,8E-05	
	5	0	0,00449	0	3,00005	0	0,06135	3,0659	3,065822	0	0	90,30189	0	33,4533	19,9989	3,9999	19,9995			
	6	0	0	2,153604	0	0,00015	0	2,1538	2,153579	0	0	0	176,609	39,9958	93,9989	39,999	11,9997			
MINLP Reduzido			Fval	475,4641																
	1	0	0	0	0	0	1,00011	2	2,000024	0,9999	0	0	0	22,0016	8,00031	29,5012	12,5002	0,0022	0,00055	
	2	0	0	0	0	2	0	2	2,00026	0	0	0	0	3,9999	19,9995	24,9967	128,983	2E-05	0,00012	
	3	0	2,00023	0	0	0	0,99977	3	3,00006	0	1	0	0	29,9963	89,9972	39,9955	99,9952	0	0	
	4	2	0	0	0	0,99986	0	3	3,000052	0,0001	0,0001	0	0	21,001	14,9993	33,3337	19,9989	0,0016	0	
	5	0	0	0	2,99995	0	0	2,9999	2,999862	0	0	88,00039	0	33,3337	19,9989	3,9999	19,9995			
	6	0	0	2,000064	0	0	0	2,0001	1,999888	0	0	0	175,999	39,9955	99,9952	39,999	11,9997			
MINLP Original			Fval	475,4641																
	1	0	0	0	0	0	1,00011	2	2,000024	0,9999	0	0	0	22,0016	8,00031	29,5012	12,5002	0,0022	0,00055	
	2	0	0	0	0	2	0	2	2,00026	0	0	0	0	3,9999	19,9995	24,9967	128,983	2E-05	0,00012	
	3	0	2,00023	0	0	0	0,99977	3	3,00006	0	1	0	0	29,9963	89,9972	39,9955	99,9952	0	0	
	4	2	0	0	0	0,99986	0	3	3,000052	0,0001	0,0001	0	0	21,001	14,9993	33,3337	19,9989	0,0016	0	
	5	0	0	0	2,99995	0	0	2,9999	2,999862	0	0	88,00039	0	33,3337	19,9989	3,9999	19,9995			
	6	0	0	2,000064	0	0	0	2,0001	1,999888	0	0	0	175,999	39,9955	99,9952	39,999	11,9997			
Operacional 1			Fval	858,4133																
	1	0	0	0	0	0	0,99999	2	2,000024	1	0	0	0	21,9993	7,9999	29,499	12,4997	1E-19	0,00014	
	2	0	0	0	0	2	0	2	2,00026	0	0,14608	0	0	3,9999	19,9995	24,9967	128,983	2E-05	0,00012	
	3	0	1,85382	0	0	0,06078	1,0854	3	3,00006	0	0,85405	0	0	29,9991	84,4501	39,9983	94,4483	0	0	
	4	2	0	0	0	0,99999	0	3	3,000052	0	0	0	0	20,9994	14,9996	33,3321	19,9993	3E-19	9,8E-05	
	5	0	0	0,005884	3,00005	0	0,05492	3,0609	3,06077	0	0	90,18801	0	33,4646	19,9988	3,9999	19,9995			
	6	0	0,00037	2,140123	0	0	0	2,1405	2,140313	0	0	0	176,495	39,9957	94,4542	39,999	11,9997			
Operacional 2			Fval	Não Convergiu																
Operacional 3			Fval	Não Convergiu																

Tabela D.12: Comparação dos resultados para a estimativa inicial 4 para a vazão máxima de água de reposição de 1 t/h.

Processo	Li,K	L ₁	L ₂	L ₃	L ₄	L ₅	L ₆	Lout _i	Lin _i	F _i	W _i	SM ₁	SM ₂	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}	Xout _{i,1}	Xout _{i,2}	Folga Xin _{i,1}	Folga Xin _{i,2}
Inicial	xo4																		
	1	0	0	0	0	0	0,99999	2	2,000024	1	0	0	0	21,99934	7,999896	29,49899	12,4997	0	0,00014
	2	0	0	0	0	2	0	2	2,00026	0	0,999711	0	0	3,999904	19,99952	24,99665	128,983	2,4E-05	0,00012
	3	0	0,96325	0	0,13535	0,40686	1,49454	3	3,00006	0	0,000418	0	0	29,99901	51,00694	39,99821	61,0057	0	0
	4	2	0	0	0	0,99999	0	3	3,000052	0	0	0	0	20,99937	14,99965	33,33213	19,9993	0	9,8E-05
	5	0	0,03707	0	2,86469	0	0,50519	3,40696	3,406861	0	0	103	0	34,23001	19,99892	3,999904	19,9995		
	6	0	0,00023	2,99964	0	0	0	2,99987	2,999722	0	0	0	147,03	39,99708	61,01085	39,99904	11,9997		
NLP Reduzido			Fval	592,002															
	1	0	0	0	0	0	0,99999	2	2,000024	1	0	0	0	21,99934	7,999896	29,49899	12,4997	0	0,00014
	2	0	0	0	0	2	0	2	2,00026	0	1,000146	0	0	3,999904	19,99952	24,99665	128,983	2,4E-05	0,00012
	3	0	0,97736	0	0	0,42604	1,59659	3	3,00006	0	0	0	0	29,9991	51,2473	39,9983	61,2461	2,1E-18	0
	4	2	0	0	0	0,99999	0	3	3,000052	0	0	0	0	20,99937	14,99965	33,33213	19,9993	1,2E-18	9,8E-05
	5	0	0,02275	0,01524	3,00005	0	0,3882	3,42624	3,426348	0	0	103	0	34,06179	20,00014	3,999904	19,9995		
	6	0	0	2,98482	0	0,0001	0	2,98492	2,984777	0	0	0	146,99	39,99707	61,24467	39,99904	11,9997		
NLP Original			Fval	592,015															
	1	0	0	0	0	0	0,99999	2	2,000024	1	0	0	0	21,99934	7,999896	29,49899	12,4997	0	0,00014
	2	0	0	0	0	2	0	2	2,00026	0	1,000146	0	0	3,999904	19,99952	24,99665	128,983	2,4E-05	0,00012
	3	0	0,97235	0	0	0,42812	1,59951	3	3,00006	0	0	0	0	29,9991	51,05765	39,9983	61,0564	0	0
	4	2	0	0	0	0,99999	0	3	3,000052	0	0	0	0	20,99937	14,99965	33,33213	19,9993	1,4E-18	9,8E-05
	5	0	0,02776	0,00361	3,00005	0	0,3969	3,42833	3,428225	0	0	103	0	34,0435	19,99892	3,999904	19,9995		
	6	0	0	2,99645	0	0,0001	0	2,99655	2,996401	0	0	0	147	39,99708	61,05504	39,99904	11,9997		
MINLP Reduzido			Fval	475,464															
	1	0	0	0	0	0	1,00011	2	2,000024	0,99989	0	0	0	22,00157	8,000312	29,50122	12,5002	0,00223	0,00055
	2	0	0	0	0	2	0	2	2,00026	0	0	0	0	3,999904	19,99952	24,99665	128,983	2,4E-05	0,00012
	3	0	2,00023	0	0	0	0,99977	3	3,00006	0	0,999996	0	0	29,99632	89,99721	39,99552	99,9952	0	0
	4	2	0	0	0	0,99986	0	3	3,000052	0,00011	0,000102	0	0	21,00098	14,99928	33,33374	19,9989	0,00161	0
	5	0	0	0	2,99995	0	0	2,99995	2,999862	0	0	88	0	33,33374	19,99893	3,999904	19,9995		
	6	0	0	2,00006	0	0	0	2,00006	1,999888	0	0	0	176	39,99552	99,99521	39,99904	11,9997		

Tabela D.12: Comparação dos resultados para a estimativa inicial 4 para a vazão máxima de água de reposição de 1 t/h.

Processo	Li,K	L ₁	L ₂	L ₃	L ₄	L ₅	L ₆	Lout _i	Lin _i	F _i	W _i	SM ₁	SM ₂	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}	Xout _{i,1}	Xout _{i,2}	Folga Xin _{i,1}	Folga Xin _{i,2}
MINLP Original			Fval	475,464															
	1	0	0	0	0	0	1,00011	2	2,000024	0,99989	0	0	0	22,00157	8,000312	29,50122	12,5002	0,00223	0,00055
	2	0	0	0	0	2	0	2	2,00026	0	0	0	0	3,999904	19,99952	24,99665	128,983	2,4E-05	0,00012
	3	0	2,00023	0	0	0	0,99977	3	3,00006	0	0,999996	0	0	29,99632	89,99721	39,99552	99,9952	0	0
	4	2	0	0	0	0,99986	0	3	3,000052	0,00011	0,000102	0	0	21,00098	14,99928	33,33374	19,9989	0,00161	0
	5	0	0	0	2,99995	0	0	2,99995	2,999862	0	0	88	0	33,33374	19,99893	3,999904	19,9995		
	6	0	0	2,00006	0	0	0	2,00006	1,999888	0	0	0	176	39,99552	99,99521	39,99904	11,9997		
Operacional 1			Fval	867,064															
	1	0	0	0	0	0	0,99999	2	2,000024	1	0	0	0	21,99934	7,999896	29,49899	12,4997	0	0,00014
	2	0	0	0	0	2	0	2	2,00026	0	0,777295	0	0	3,999904	19,99952	24,99665	128,983	2,4E-05	0,00012
	3	0	1,21732	0	0	0,32604	1,45664	3	3,00006	0	0,222841	0	0	29,9991	60,33762	39,9983	70,3362	0	0
	4	2	0	0	0	0,99999	0	3	3,000052	0	0	0	0	20,99937	14,99965	33,33213	19,9993	-8E-19	9,8E-05
	5	0	0,00536	0,03397	3,00005	0	0,28675	3,32614	3,326077	0	0	99,66	0	33,96152	19,99914	3,999904	19,9995		
	6	0	0,00029	2,74325	0	0	0	2,74354	2,743384	0	0	0	160,07	39,99671	70,34245	39,99904	11,9997		
Operacional 2			Fval	Não convergiu															
Operacional 3			Fval	3889,91															
	1	0	0	0	0	0	0,99999	2	2	1	0	0	0	21,999	7,9999	29,499	12,5	-5E-19	0,00014
	2	0	0	0	0	2	0	2	2,0003	4,4E-16	1,0001	0	0	3,9999	20	24,997	128,98	2,4E-05	0,00012
	3	0	0,98836	0	0	0,42145	1,5902	3	3,0001	0	-4,4E-11	0	0	29,999	51,664	39,998	61,663	1,4E-17	1,3E-18
	4	2	0	0	0	0,99999	0	3	3,0001	0	0	0	0	20,999	15	33,332	19,999	-1E-18	9,8E-05
	5	0	0,01175	0,04022	3,0001	0	0,36963	3,4217	3,4216	0	0	103	0	34,102	19,999	3,9999	20		
	6	0	0	2,9598	0	0,0001	0	2,9599	2,9598	0	0	0	147	39,997	61,661	39,999	12		

Tabela D.12: Comparação dos resultados para a estimativa inicial 5 para a vazão máxima de água de reposição de 1 t/h.

Processo	Li,K	L ₁	L ₂	L ₃	L ₄	L ₅	L ₆	Lout _i	Lin _i	F _i	W _i	SM ₁	SM ₂	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}	Xout _{i,1}	Xout _{i,2}	Folga Xin _{i,1}	Folga Xin _{i,2}
Inicial	xo5																		
	1	0	0	0	0	0	1	2	2,000024	1	0	0	0	21,99934	7,999896	29,49899	12,4997	0	0,00014
	2	0	0	0	0	2	0	2	2,00026	0	0,88671	0	0	3,999904	19,99952	24,99665	128,983	2,4E-05	0,00012
	3	0	1,007	0	1,276	0,1774	0,539	3	3,00006	0	0	0	0	29,99775	55,14379	39,99695	65,1425	3,3E-19	0
	4	2	0	0	0	1	0	3	3,000052	0	0,11343	0	0	20,99937	14,99965	33,33213	19,9993	0	9,8E-05
	5	0	0,10655	0,0013	1,61	0	1,459	3,1775	3,177407	0	0	102,05	0	36,11752	19,99888	3,999904	19,9995		
	6	0	0	2,9987	0	0	0	2,9987	2,998553	0	0	0	159,36	39,99695	65,14249	39,99904	11,9997		
NLP Reduzido			Fval	592															
	1	0	0	0	0	0	1	2	2,000024	1	0	0	0	21,99934	7,999896	29,49899	12,4997	1,3E-20	0,00014
	2	0	0	0	0	2	0	2	2,00026	0	1,00015	0	0	3,999904	19,99952	24,99665	128,983	2,4E-05	0,00012
	3	0	0,99896	0	0	0,417	1,584	3	3,00006	0	0	0	0	29,9991	52,06558	39,9983	62,0643	1,4E-19	0
	4	2	0	0	0	1	0	3	3,000052	0	0	0	0	20,99937	14,99965	33,33213	19,9993	2,2E-21	9,8E-05
	5	0	0,00115	0,0639	3	0	0,352	3,4172	3,417135	0	0	103	0	34,14097	19,9989	3,999904	19,9995		
	6	0	0	2,9361	0	0,0001	0	2,9362	2,936079	0	0	0	147	39,99704	62,06287	39,99904	11,9997		
NLP Original			Fval	593,17															
	1	0	0	0	0	0	1	2	2,000024	1	0	0	0	21,99934	7,999896	29,49899	12,4997	0	0,00014
	2	0	0	0	0	2	0	2	2,00026	0	0,85874	0	0	3,999904	19,99952	24,99665	128,983	2,4E-05	0,00012
	3	0	1,12761	0	0	0,3634	1,509	3	3,00006	0	0,1414	0	0	29,9991	56,93914	39,9983	66,9378	0	0
	4	2	0	0	0	1	0	3	3,000052	0	0	0	0	20,99937	14,99965	33,33213	19,9993	0	9,8E-05
	5	0	0,01391	0,0233	3	0	0,326	3,3636	3,363537	0	0	100,88	0	33,99072	19,99892	3,999904	19,9995		
	6	0	0	2,8354	0	0,0001	0	2,8355	2,835325	0	0	0	155,77	39,99684	66,9359	39,99904	11,9997		
MINLP Reduzido			Fval	475,46															
	1	0	0	0	0	0	1	2	2,000024	0,9999	0	0	0	22,00157	8,000312	29,50122	12,5002	0,00223	0,00055
	2	0	0	0	0	2	0	2	2,00026	0	0	0	0	3,999904	19,99952	24,99665	128,983	2,4E-05	0,00012
	3	0	2,00023	0	0	0	1	3	3,00006	0	1	0	0	29,99632	89,99721	39,99552	99,9952	2,4E-23	8,8E-24
	4	2	0	0	0	0,9999	0	3	3,000052	0,0001	0,0001	0	0	21,00098	14,99928	33,33374	19,9989	0,00161	5,4E-25
	5	0	0	0	3	0	0	2,9999	2,999862	0	0	88	0	33,33374	19,99893	3,999904	19,9995		
	6	0	0	2,0001	0	0	0	2,0001	1,999888	0	0	0	176	39,99552	99,99521	39,99904	11,9997		

Tabela D.12: Comparação dos resultados para a estimativa inicial 6 para a vazão máxima de água de reposição de 1 t/h.

Processo		L_1	L_2	L_3	L_4	L_5	L_6	L_{out_i}	L_{in_i}	F_i	W_i	SM_1	SM_2	$X_{in_{i,1}}$	$X_{in_{i,2}}$	$X_{out_{i,1}}$	$X_{out_{i,2}}$	Folga	Folga
L_i, K																		$X_{in_{i,1}}$	$X_{in_{i,2}}$
Inicial	xo6																		
1	0	0	0	0	0	0,99999	2	2,000024	1	0	0	0	0	21,9993	7,9999	29,499	12,4997	0	0,00014
2	0	0	0	0	2	0	2	2,00026	0	0,99189	0	0	0	3,9999	19,9995	24,9967	128,983	2E-05	0,00012
3	0	1,00366	0	0,00013	0,41505	1,58114	3	3,00006	0	0,00741	0	0	0	29,9991	52,2438	39,9983	62,2426	0	0
4	2	0	0	0	0,99999	0	3	3,000052	0	0,00085	0	0	0	20,9994	14,9996	33,3321	19,9993	1E-21	9,8E-05
5	0	0,00472	0,05526	2,99907	0	0,35621	3,41526	3,415157	0	0	102,88	0	0	34,1238	19,9989	3,9999	19,9995		
6	0	0	2,93739	0	0,0001	0	2,9375	2,937348	0	0	0	147,6	0	39,997	62,2411	39,999	11,9997		
NLP Reduzido	Fval	591,979																	
1	0	0	0	0	0	0,99999	2	2,000024	1	0	0	0	0	21,9993	7,9999	29,499	12,4997	2E-22	0,00014
2	0	0	0	0	2	0	2	2,00026	0	1,00015	0	0	0	3,9999	19,9995	24,9967	128,983	2E-05	0,00012
3	0	0,98943	0	0	0,421	1,58955	3	3,00006	0	0	0	0	0	29,9991	51,7047	39,9983	61,7035	6E-19	0
4	2	0	0	0	0,99999	0	3	3,000052	0	0	0	0	0	20,9994	14,9996	33,3321	19,9993	1E-19	9,8E-05
5	0	0,01068	0,04262	3,00005	0	0,36785	3,42121	3,421113	0	0	103	0	0	34,106	19,9989	3,9999	19,9995		
6	0	0	2,95744	0	0,0001	0	2,95754	2,957391	0	0	0	147	0	39,9971	61,702	39,999	11,9997		
NLP Original	Fval	592,04																	
1	0	0	0	0	0	0,99999	2	2,000024	1	0	0	0	0	21,9993	7,99989	29,499	12,4997	0	0,00013
2	0	0	0	0	2	0	2	2,00026	0	0,9928	0	0	0	3,9999	19,9995	24,9967	128,983	2E-05	0,00012
3	0	1,00313	0	0	0,4153	1,58156	3	3,00006	0	0,00734	0	0	0	29,9991	52,2236	39,9983	62,2224	0	0
4	2	0	0	0	0,99999	0	3	3,000052	0	0	0	0	0	20,9994	14,9996	33,3321	19,9993	-8E-19	9,7E-05
5	0	0,00433	0,05607	3,00005	0	0,35505	3,4155	3,4154	0	0	102,89	0	0	34,1241	19,9989	3,9999	19,9995		
6	0	0	2,93665	0	0,0001	0	2,93675	2,936602	0	0	0	147,5	0	39,997	62,2209	39,999	11,9997		
MINLP Reduzido	Fval	475,464																	
1	0	0	0	0	0	1,00011	2	2,000024	1	0	0	0	0	22,0016	8,00031	29,5012	12,5002	0,0022	0,00055
2	0	0	0	0	2	0	2	2,00026	0	0	0	0	0	3,9999	19,9995	24,9967	128,983	2E-05	0,00012
3	0	2,00023	0	0	0	0,99977	3	3,00006	0	1	0	0	0	29,9963	89,9972	39,9955	99,9952	0	0
4	2	0	0	0	0,99986	0	3	3,000052	1E-04	0,0001	0	0	0	21,001	14,9993	33,3337	19,9989	0,0016	0
5	0	0	0	2,99995	0	0	2,99995	2,999862	0	0	88	0	0	33,3337	19,9989	3,9999	19,9995		
6	0	0	2,00006	0	0	0	2,00006	1,999888	0	0	0	176	0	39,9955	99,9952	39,999	11,9997		
MINLP Original	Fval	475,464																	
1	0	0	0	0	0	1,00011	2	2,000024	1	0	0	0	0	22,0016	8,00031	29,5012	12,5002	0,0022	0,00055
2	0	0	0	0	2	0	2	2,00026	0	0	0	0	0	3,9999	19,9995	24,9967	128,983	2E-05	0,00012
3	0	2,00023	0	0	0	0,99977	3	3,00006	0	1	0	0	0	29,9963	89,9972	39,9955	99,9952	0	0
4	2	0	0	0	0,99986	0	3	3,000052	1E-04	0,0001	0	0	0	21,001	14,9993	33,3337	19,9989	0,0016	0
5	0	0	0	2,99995	0	0	2,99995	2,999862	0	0	88	0	0	33,3337	19,9989	3,9999	19,9995		
6	0	0	2,00006	0	0	0	2,00006	1,999888	0	0	0	176	0	39,9955	99,9952	39,999	11,9997		
Operacional 1	Fval	Não Convergiu																	
Operacional 2	Fval	Não Convergiu																	
Operacional 3	Fval	Não Convergiu																	

Tabela D.12: Comparação dos resultados para a estimativa inicial 7 para a vazão máxima de água de reposição de 1 t/h.

Processo	Li,K	L ₁	L ₂	L ₃	L ₄	L ₅	L ₆	Lout _i	Lin _i	F _i	W _i	SM ₁	SM ₂	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}	Xout _{i,1}	Xout _{i,2}	Folga Xin _{i,1}	Folga Xin _{i,2}
Inicial	xo7																		
	1	0	0	0	0	0	0,99999	2	2,000024	1	0	0	0	21,9993	7,999896	29,499	12,4997	0	0,000136
	2	0	0	0	0	2	0	2	2,00026	0	1	0	0	3,9999	19,99952	24,9967	128,983	2,4E-05	0,00012
	3	0	0,93324	0	0,8032	0,2957	0,9679	3	3,00006	0	0	0	0	29,9991	51,32082	39,9983	61,3196	-4,9E-19	0
	4	2	0	0	0	1	0	3	3,000052	0	0	0	0	20,9994	14,99965	33,3321	19,9993	0	9,772E-05
	5	0	0,06663	0,02016	2,1969	0	1,0121	3,2958	3,295678	0	0	103	0	35,2517	19,99887	3,9999	19,9995		
	6	0	0,00024	2,9799	0	0	0	2,9801	2,979993	0	0	0	147	39,9971	61,32515	39,999	11,9997		
NLP Reduzido			Fval	591,983															
	1	0	0	0	0	0	0,99999	2	2,000024	1	0	0	0	21,9993	7,999896	29,499	12,4997	2,66E-19	0,000136
	2	0	0	0	0	2	0	2	2,00026	0	1	0	0	3,9999	19,99952	24,9967	128,983	2,4E-05	0,00012
	3	0	0,98695	0	0	0,422	1,59099	3	3,00006	0	0	0	0	29,9991	51,61072	39,9983	61,6095	-9,4E-19	0
	4	2	0	0	0	1	0	3	3,000052	0	0	0	0	20,9994	14,99965	33,3321	19,9993	-6,7E-17	9,772E-05
	5	0	0,01316	0,03702	3,0001	0	0,37201	3,4222	3,422154	0	0	103	0	34,0969	19,99899	3,9999	19,9995		
	6	0	0	2,96304	0	0,0001	0	2,9631	2,962992	0	0	0	147	39,9971	61,60805	39,999	11,9997		
NLP Original			Fval	591,99															
	1	0	0	0	0	0	0,99999	2	2,000024	1	0	0	0	21,9993	7,999896	29,499	12,4997	0	0,000136
	2	0	0	0	0	2	0	2	2,00026	0	1	0	0	3,9999	19,99952	24,9967	128,983	2,4E-05	0,00012
	3	0	0,98318	0	0	0,4236	1,59319	3	3,00006	0	0	0	0	29,9991	51,46784	39,9983	61,4666	-5,8E-18	0
	4	2	0	0	0	1	0	3	3,000052	0	0	0	0	20,9994	14,99965	33,3321	19,9993	-3,6E-18	9,772E-05
	5	0	0,01693	0,02846	3,0001	0	0,37837	3,4238	3,423713	0	0	103	0	34,0831	19,99892	3,9999	19,9995		
	6	0	0	2,9716	0	0,0001	0	2,9717	2,971555	0	0	0	147	39,9971	61,46519	39,999	11,9997		
MINLP Reduzido			Fval	475,464															
	1	0	0	0	0	0	1,00011	2	2,000024	1	0	0	0	22,0016	8,000312	29,5012	12,5002	0,002232	0,000552
	2	0	0	0	0	2	0	2	2,00026	0	0	0	0	3,9999	19,99952	24,9967	128,983	2,4E-05	0,00012
	3	0	2,00023	0	0	0	0,99977	3	3,00006	0	1	0	0	29,9963	89,99721	39,9955	99,9952	2,22E-24	3,459E-24
	4	2	0	0	0	0,9999	0	3	3,000052	1E-04	1E-04	0	0	21,001	14,99928	33,3337	19,9989	0,001614	-2,65E-23
	5	0	0	0	2,9999	0	0	2,9999	2,999862	0	0	88	0	33,3337	19,99893	3,9999	19,9995		
	6	0	0	2,00006	0	0	0	2,0001	1,999888	0	0	0	176	39,9955	99,99521	39,999	11,9997		

Tabela D.12: Comparação dos resultados para a estimativa inicial 8 para a vazão máxima de água de reposição de 1 t/h.

Processo	Li,K	L ₁	L ₂	L ₃	L ₄	L ₅	L ₆	Lout _i	Lin _i	F _i	W _i	SM ₁	SM ₂	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}	Xout _{i,1}	Xout _{i,2}	Folga Xin _{i,1}	Folga Xin _{i,2}
Inicial		xo8																	
	1	0	0	0	0	0	1	2	2,000024	1	0	0	0	21,99934	7,999896	29,49899	12,4997	-3E-24	0,00014
	2	0	0	0	0	2	0	2	2,00026	0	0,7856	0	0	3,999904	19,99952	24,99665	128,983	2,4E-05	0,00012
	3	0	1,19974	0	1,8003	0	0	3	3,00006	0	0	0	0	29,99866	63,58324	39,99786	73,5818	0	0
	4	2	0	0	0	1	0	3	3,000052	0	0,21453	0	0	20,99937	14,99965	33,33213	19,9993	1,8E-23	9,8E-05
	5	0	0,014923	0,23343	0,9847	0	1,767	3,0001	3,000001	0	0	101,2	0	37,73597	19,99885	3,999904	19,9995		
	6	0	0	2,76663	0,0005	0	0	2,76716	2,766992	0	0	0	170,4	39,99658	73,57147	39,99904	11,9997		
NLP Reduzido			Fval	591,982															
	1	0	0	0	0	0	1	2	2,000024	1	0	0	0	21,99934	7,999896	29,49899	12,4997	2E-19	0,00014
	2	0	0	0	0	2	0	2	2,00026	0	1,00015	0	0	3,999904	19,99952	24,99665	128,983	2,4E-05	0,00012
	3	0	0,996963	0	0	0,418	1,5852	3	3,00006	0	0	0	0	29,9991	51,98991	39,9983	61,9887	2E-19	0
	4	2	0	0	0	1	0	3	3,000052	0	0	0	0	20,99937	14,99965	33,33213	19,9993	-4E-19	9,8E-05
	5	0	0,003151	0,05958	3,0001	0	0,3553	3,41807	3,418189	0	0	103	0	34,13363	20,0002	3,999904	19,9995		
	6	0	0	2,94048	0	1E-04	0	2,94058	2,940435	0	0	0	147	39,99704	61,9872	39,99904	11,9997		
NLP Original			Fval	594,758															
	1	0	0	0	0	0	1	2	2,000024	1	0	0	0	21,99934	7,999896	29,49899	12,4997	-9E-20	0,00014
	2	0	0	0	0	2	0	2	2,00026	0	0,66297	0	0	3,999904	19,99952	24,99665	128,983	2,4E-05	0,00012
	3	0	1,321642	0	0	0,283	1,3957	3	3,00006	0	0,33717	0	0	29,9991	64,28973	39,9983	74,2882	0	0
	4	2	0	0	0	1	0	3	3,000052	0	0	0	0	20,99891	14,99978	33,33167	19,9994	0	0,00023
	5	0	0,015651	0,00689	3,0001	0	0,2602	3,28283	3,282727	0	0	97,94	0	33,83445	19,99892	3,999904	19,9995		
	6	0	0	2,656	0	1E-04	0	2,65613	2,655963	0	0	0	165,4	39,99655	74,2856	39,99904	11,9997		

Tabela D.12: Comparação dos resultados para a estimativa inicial 8 para a vazão máxima de água de reposição de 1 t/h.

Processo	Li,K	L ₁	L ₂	L ₃	L ₄	L ₅	L ₆	Lout _i	Lin _i	F _i	W _i	SM ₁	SM ₂	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}	Xout _{i,1}	Xout _{i,2}	Folga Xin _{i,1}	Folga Xin _{i,2}
MINLP Reduzido			Fval	475,464															
	1	0	0	0	0	0	1,0001	2	2,000024	1	0	0	0	22,00157	8,000312	29,50122	12,5002	0,00223	0,00055
	2	0	0	0	0	2	0	2	2,00026	0	0	0	0	3,999904	19,99952	24,99665	128,983	2,4E-05	0,00012
	3	0	2,000226	0	0	0	0,9998	3	3,00006	0	1	0	0	29,99632	89,99721	39,99552	99,9952	0	0
	4	2	0	0	0	1	0	3	3,000052	0	0,0001	0	0	21,00098	14,99928	33,33374	19,9989	0,00161	0
	5	0	0	0	2,9999	0	0	2,99995	2,999862	0	0	88	0	33,33374	19,99893	3,999904	19,9995		
	6	0	0	2,00006	0	0	0	2,00006	1,999888	0	0	0	176	39,99552	99,99521	39,99904	11,9997		
MINLP Original			Fval	475,464															
	1	0	0	0	0	0	1,0001	2	2,000024	1	0	0	0	22,00157	8,000312	29,50122	12,5002	0,00223	0,00055
	2	0	0	0	0	2	0	2	2,00026	0	0	0	0	3,999904	19,99952	24,99665	128,983	2,4E-05	0,00012
	3	0	2,000226	0	0	0	0,9998	3	3,00006	0	1	0	0	29,99632	89,99721	39,99552	99,9952	0	0
	4	2	0	0	0	1	0	3	3,000052	0	0,0001	0	0	21,00098	14,99928	33,33374	19,9989	0,00161	0
	5	0	0	0	2,9999	0	0	2,99995	2,999862	0	0	88	0	33,33374	19,99893	3,999904	19,9995		
	6	0	0	2,00006	0	0	0	2,00006	1,999888	0	0	0	176	39,99552	99,99521	39,99904	11,9997		
Operacional 1			Fval	Não Convergiu															
Operacional 2			Fval	693,778															
	1	0	0	0	0	0	1	2	2,000024	1	0	0	0	21,99934	7,999896	29,49899	12,4997	5,6E-20	0,00014
	2	0	0	0	0	2	0	2	2,00026	0	0,63172	0	0	3,999904	19,99952	24,99665	128,983	2,4E-05	0,00012
	3	0	1,30821	0	1,2429	0,058	0,3908	3	3,00006	0	0,36841	0	0	29,99786	66,48166	39,99706	76,4801	0	0
	4	2	0	0	0	1	0	3	3,000052	0	0	0	0	20,99937	14,99965	33,33213	19,9993	2,6E-19	9,8E-05
	5	0	0,060333	0,05194	1,7571	0	1,1888	3,05822	3,058114	0	0	97,47	0	35,8725	19,99885	3,999904	19,9995		
	6	0	0	2,57971	0	0	0	2,57975	2,579586	0	0	0	166,3	39,99646	76,47919	39,99904	11,9997		
Operacional 3			Fval	732,044															
	1	0	0	0	0	0	1	2	2	1	0	0	0	21,999	7,9999	29,499	12,5	4E-20	1E-04
	2	0	0	0	0	2	0	2	2,0003	0	1,0001	0	0	3,9999	20	24,997	128,98	2E-05	1E-04
	3	0	0,97402	0	0	0,427	1,5985	3	3,0001	0	0	0	0	29,999	51,121	39,998	61,119	0E+00	0E+00
	4	2	0	0	0	1	0	3	3,0001	0	0	0	0	20,999	15	33,332	19,999	0E+00	1E-04
	5	0	0,026096	0,00748	3,0001	0	0,394	3,4276	3,4276	0	0	103	0	34,05	19,999	3,9999	20		
	6	0	0	2,9926	0	1E-04	0	2,9927	2,9925	0	0	0	147	39,997	61,118	39,999	12		

Tabela D.12: Comparação dos resultados para a estimativa inicial 9 para a vazão máxima de água de reposição de 1 t/h.

Processo	Li,K	L ₁	L ₂	L ₃	L ₄	L ₅	L ₆	Lout _i	Lin _i	F _i	W _i	SM ₁	SM ₂	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}	Xout _{i,1}	Xout _{i,2}	Folga Xin _{i,1}	Folga Xin _{i,2}
Inicial	xo9																		
	1	0	0	0	0	0	0,99999	2	2,000024	1	0	0	0	21,9993	7,999896	29,49899	12,4997	-7,5E-22	0,000136
	2	0	0	0	0	2	0	2	2,00026	0	1,0001	0	0	3,9999	19,99952	24,99665	128,983	2,4E-05	0,00012
	3	0,2375	0,99986	0	1,7536	0,0091	0	3	3,00006	0	0	0	0	29,9991	55,84927	39,9983	65,848	1,1E-20	0
	4	1,7625	0	0	0	1,0925	0,14498	3	3,000052	0	0	0	0	20,7207	15,20668	33,05348	20,2063	-3,1E-17	0,207133
	5	0	0	0,2708	1,2465	0	1,58441	3,10165	3,101549	0	0	103	0	37,2078	19,99886	3,999904	19,9995		
	6	0	0,00026	2,7293	0	0	0	2,72953	2,729383	0	0	0	147	39,9969	65,85391	39,99904	11,9997		
NLP Reduzido			Fval	591,98															
	1	0	0	0	0	0	0,99999	2	2,000024	1	0	0	0	21,9993	7,999896	29,49899	12,4997	-1,4E-21	0,000136
	2	0	0	0	0	2	0	2	2,00026	0	1,0001	0	0	3,9999	19,99952	24,99665	128,983	2,4E-05	0,00012
	3	0	0,99308	0	0	0,4195	1,58743	3	3,00006	0	0	0	0	29,9991	51,84279	39,9983	61,8416	-9,3E-20	0
	4	2	0	0	0	1	0	3	3,000052	0	0	0	0	20,9994	14,99965	33,33213	19,9993	4,1E-22	9,77E-05
	5	0	0,00703	0,0508	3,0001	0	0,36178	3,4197	3,419599	0	0	103	0	34,1193	19,99895	3,999904	19,9995		
	6	0	0	2,9492	0	0,0001	0	2,94935	2,949199	0	0	0	147	39,997	61,8401	39,99904	11,9997		
NLP Original			Fval	592,39															
	1	0	0	0	0	0	0,99999	2	2,000024	1	0	0	0	21,9993	7,999896	29,49899	12,4997	-2,4E-19	0,000136
	2	0	0	0	0	2	0	2	2,00026	0	0,9528	0	0	3,9999	19,99952	24,99665	128,983	2,4E-05	0,00012
	3	0	1,04671	0	0	0,3971	1,55614	3	3,00006	0	0,0473	0	0	29,9991	53,87453	39,9983	63,8733	-6E-36	0
	4	2	0	0	0	1	0	3	3,000052	0	0	0	0	20,9994	14,99965	33,33213	19,9993	0	9,77E-05
	5	0	0,00071	0,0596	3,0001	0	0,33694	3,39734	3,397243	0	0	102,29	0	34,1086	19,99892	3,999904	19,9995		
	6	0	0	2,8931	0	0,0001	0	2,89322	2,893071	0	0	0	150,1	39,997	63,87162	39,99904	11,9997		
MINLP Reduzido			Fval	475,46															
	1	0	0	0	0	0	1,00011	2	2,000024	1	0	0	0	22,0016	8,000312	29,50122	12,5002	0,00223	0,000552
	2	0	0	0	0	2	0	2	2,00026	0	0	0	0	3,9999	19,99952	24,99665	128,983	2,4E-05	0,00012
	3	0	2,00023	0	0	0	0,99977	3	3,00006	0	1	0	0	29,9963	89,99721	39,99552	99,9952	0	-9,23E-15
	4	2	0	0	0	0,9999	0	3	3,000052	1E-04	0,0001	0	0	21,001	14,99928	33,33374	19,9989	0,00161	0
	5	0	0	0	2,9999	0	0	2,99995	2,999862	0	0	88	0	33,3337	19,99893	3,999904	19,9995		
	6	0	0	2,0001	0	0	0	2,00006	1,999888	0	0	0	176	39,9955	99,99521	39,99904	11,9997		

Tabela D.12: Comparação dos resultados para a estimativa inicial 10 para a vazão máxima de água de reposição de 1 t/h.

Processo	Li,K	L ₁	L ₂	L ₃	L ₄	L ₅	L ₆	Lout _i	Lin _i	F _i	W _i	SM ₁	SM ₂	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}	Xout _{i,1}	Xout _{i,2}	Folga Xin _{i,1}	Folga Xin _{i,2}
Inicial	xo10																		
	1	0	0	0	0	0	1	2	2,000024	1	0	0	0	21,99934	7,999896	29,49899	12,4997	0	0,00014
	2	0	0	0	0	2	0	2	2,00026	0	0,996	0	0	3,999904	19,99952	24,99665	128,983	2,4E-05	0,00012
	3	0	0,98206	0	0	0,4242	1,5938	3	3,00006	0	2E-04	0	0	29,99786	51,42572	39,99706	61,4245	-2,1E-18	0
	4	2	0	0	0	1	0	3	3,000052	0	0,004	0	0	20,99937	14,99965	33,33213	19,9993	0	9,8E-05
	5	0	0,02179	0,0176	2,997	0	0,3884	3,424	3,424185	0	0	103	0	34,06948	19,99892	3,999904	19,9995		
	6	0	0	2,9822	0	0	0	2,982	2,982097	0	0	0	147,4	39,99706	61,42449	39,99904	11,9997		
NLP Reduzido		Fval	591,98																
	1	0	0	0	0	0	1	2	2,000024	1	0	0	0	21,99934	7,999896	29,49899	12,4997	-3,1E-19	0,00014
	2	0	0	0	0	2	0	2	2,00026	0	1	0	0	3,999904	19,99952	24,99665	128,983	2,4E-05	0,00012
	3	0	0,987	0	0	0,422	1,591	3	3,00006	0	0	0	0	29,9991	51,61262	39,9983	61,6114	1,76E-18	0
	4	2	0	0	0	1	0	3	3,000052	0	0	0	0	20,99937	14,99965	33,33213	19,9993	-1,2E-17	9,8E-05
	5	0	0,01311	0,0371	3	0	0,3719	3,422	3,422134	0	0	103	0	34,09709	19,999	3,999904	19,9995		
	6	0	0	2,9629	0	0,0001	0	2,963	2,962878	0	0	0	147	39,99706	61,60995	39,99904	11,9997		
NLP Original		Fval	592,03																
	1	0	0	0	0	0	1	2	2,000024	1	0	0	0	21,99934	7,999897	29,49899	12,4997	-4E-20	0,00014
	2	0	0	0	0	2	0	2	2,00026	0	0,997	0	0	3,999904	19,99952	24,99665	128,983	2,4E-05	0,00012
	3	0	0,98252	0	0	0,4239	1,5936	3	3,00006	0	0,004	0	0	29,9991	51,4426	39,9983	61,4414	0	0
	4	2	0	0	0	1	0	3	3,000052	0	0	0	0	20,99937	14,99965	33,33213	19,9993	2,21E-18	9,8E-05
	5	0	0,02114	0,0186	3	0	0,3843	3,424	3,423995	0	0	102,9	0	34,06513	19,99892	3,999904	19,9995		
	6	0	0	2,978	0	0,0001	0	2,978	2,977929	0	0	0	147,24	39,99706	61,43995	39,99904	11,9997		

Tabela D.12: Comparação dos resultados para a estimativa inicial 10 para a vazão máxima de água de reposição de 1 t/h.

Processo	Li,K	L ₁	L ₂	L ₃	L ₄	L ₅	L ₆	Lout _i	Lin _i	F _i	W _i	SM ₁	SM ₂	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}	Xout _{i,1}	Xout _{i,2}	Folga Xin _{i,1}	Folga Xin _{i,2}
MINLP Reduzido			Fval	475,46															
	1	0	0	0	0	0	1,0001	2	2,000024	1	0	0	0	22,00157	8,000312	29,50122	12,5002	0,002232	0,00055
	2	0	0	0	0	2	0	2	2,00026	0	0	0	0	3,999904	19,99952	24,99665	128,983	2,4E-05	0,00012
	3	0	2,00023	0	0	0	0,9998	3	3,00006	0	1	0	0	29,99632	89,99721	39,99552	99,9952	-1,6E-23	-1,6E-24
	4	2	0	0	0	0,9999	0	3	3,000052	1E-04	1E-04	0	0	21,00098	14,99928	33,33374	19,9989	0,001614	-1,4E-23
	5	0	0	0	3	0	0	3	2,999862	0	0	88	0	33,33374	19,99893	3,999904	19,9995		
	6	0	0	2,0001	0	0	0	2	1,999888	0	0	0	176	39,99552	99,99521	39,99904	11,9997		
MINLP Original			Fval	475,46															
	1	0	0	0	0	0	1,0001	2	2,000024	1	0	0	0	22,00157	8,000312	29,50122	12,5002	0,002232	0,00055
	2	0	0	0	0	2	0	2	2,00026	0	0	0	0	3,999904	19,99952	24,99665	128,983	2,4E-05	0,00012
	3	0	2,00023	0	0	0	0,9998	3	3,00006	0	1	0	0	29,99632	89,99721	39,99552	99,9952	0	0
	4	2	0	0	0	0,9999	0	3	3,000052	1E-04	1E-04	0	0	21,00098	14,99928	33,33374	19,9989	0,001614	0
	5	0	0	0	3	0	0	3	2,999862	0	0	88	0	33,33374	19,99893	3,999904	19,9995		
	6	0	0	2,0001	0	0	0	2	1,999888	0	0	0	176	39,99552	99,99521	39,99904	11,9997		
Operacional 1			Fval	783,09															
	1	0	0	0	0	0	1	2	2,000024	1	0	0	0	21,99934	7,999896	29,49899	12,4997	9,02E-20	0,00014
	2	0	0	0	0	2	0	2	2,00026	0	0,5	0	0	3,999904	19,99952	24,99665	128,983	2,4E-05	0,00012
	3	0	1,49953	0	0	0,2084	1,292	3	3,00006	0	0,5	0	0	29,9991	71,02854	39,9983	81,0269	0	0
	4	2	0	0	0	1	0	3	3,000052	0	0	0	0	20,99937	14,99965	33,33213	19,9993	0	9,8E-05
	5	0	0	0,0241	3	0	0,1843	3,209	3,208427	0	0	95,5	0	33,76526	19,99889	3,999904	19,9995		
	6	0	0,00033	2,4762	0	0	0	2,477	2,476353	0	0	0	170,97	39,99628	81,03338	39,99904	11,9997		
Operacional 2			Fval	Não convergiu															
Operacional 3			Fval	732,04															
	1	0	0	0	0	0	1	2	2	1	0	0	0	21,999	7,9999	29,499	12,5	4,47E-20	0,00014
	2	0	0	0	0	2	0	2	2,0003	0	1	0	0	3,9999	20	24,997	128,98	2,4E-05	0,00012
	3	0	0,97402	0	0	0,4274	1,5985	3	3,0001	0	0	0	0	29,999	51,121	39,998	61,119	0	0
	4	2	0	0	0	1	0	3	3,0001	0	0	0	0	20,999	15	33,332	19,999	0	9,8E-05
	5	0	0,0261	0,0075	3	0	0,394	3,428	3,4276	0	0	103	0	34,05	19,999	3,9999	20		
	6	0	0	2,9926	0	0,0001	0	2,993	2,9925	0	0	0	147	39,997	61,118	39,999	12		

Tabela D.12: Comparação dos resultados para a estimativa inicial 11 para a vazão máxima de água de reposição de 1 t/h.

Processo	Li,K	L ₁	L ₂	L ₃	L ₄	L ₅	L ₆	Lout _i	Lin _i	F _i	W _i	SM ₁	SM ₂	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}	Xout _{i,1}	Xout _{i,2}	Folga Xin _{i,1}	Folga Xin _{i,2}
Inicial	xo11																		
	1	0	0	0	0	0	0,99999	2	2,000024	1	0	0	0	21,9993	7,9999	29,499	12,4997	0	0,00014
	2	0	0	0	0	2	0	2	2,00026	0	1,0001	0	0	3,9999	19,9995	24,9967	128,983	2,4E-05	0,00012
	3	0	0,85749	0	2,0453	0,0972	0	3	3,00006	0	0	0	0	29,9991	51,1501	39,9983	61,1489	0	0
	4	2	0	0	0	1	0	3	3,000052	0	0	0	0	20,9994	14,9996	33,3321	19,9993	0	9,8E-05
	5	0	0,14262	0,0093	0,9542	0	1,99115	3,0973	3,097214	0	0	103	0	37,2543	19,9989	3,9999	19,9995		
	6	0	0	2,9907	0,0005	0	0	2,9913	2,991137	0	0	0	147	39,9971	61,1414	39,999	11,9997		
NLP Reduzido			Fval	474,14															
	1	0	0	0	0	0	0,99999	2	2,000024	1	0	0	0	21,9993	7,9999	29,499	12,4997	0	0,00014
	2	0	0	0	0	2	0	2	2,00026	0	0,1164	0	0	3,9999	19,9995	24,9967	128,983	2,4E-05	0,00012
	3	0	1,88249	0	0	0,0488	1,06866	3	3,00006	0	0,8837	0	0	29,9991	85,5365	39,9983	95,5346	0	0
	4	2	0	0	0	1	0	3	3,000052	0	0	0	0	20,9994	14,9996	33,3321	19,9993	0	9,8E-05
	5	0	0,00135	0,0028	3,0001	0	0,04488	3,0491	3,048985	0	0	89,743	0	33,4327	19,999	3,9999	19,9995		
	6	0	0	2,1136	0	0,0002	0	2,1137	2,113531	0	0	0	176,6	39,9957	95,5292	39,999	11,9997		
NLP Original			Fval	602,42															
	1	0	0	0	0	0	0,99999	2	2,000024	1	0	0	0	21,9993	7,9999	29,499	12,4997	0	0,00014
	2	0	0	0	0	2	0	2	2,00026	0	0,6772	0	0	3,9999	19,9995	24,9967	128,983	2,4E-05	0,00012
	3	0	1,32308	0	0	0,282	1,39495	3	3,00006	0	0,0916	0	0	29,9991	64,3444	39,9983	74,3429	0	0
	4	2	0	0	0	1	0	3	3,000052	0	0,2314	0	0	20,9994	14,9996	33,3321	19,9993	0	9,8E-05
	5	0	0	0,0659	2,7687	0	0,44765	3,2822	3,282102	0	0	99,698	0	34,3752	19,9989	3,9999	19,9995		
	6	0	0	2,8426	0	0,0001	0	2,8428	2,842597	0	0	0	177,2	39,9965	74,3403	39,999	11,9997		
MINLP Reduzido			Fval	475,46															
	1	0	0	0	0	0	1,00011	2	2,000024	1	0	0	0	22,0016	8,00031	29,5012	12,5002	0,00223	0,00055
	2	0	0	0	0	2	0	2	2,00026	0	0	0	0	3,9999	19,9995	24,9967	128,983	2,4E-05	0,00012
	3	0	2,00023	0	0	0	0,99977	3	3,00006	0	1	0	0	29,9963	89,9972	39,9955	99,9952	0	0
	4	2	0	0	0	0,9999	0	3	3,000052	0	0,0001	0	0	21,001	14,9993	33,3337	19,9989	0,00161	0
	5	0	0	0	2,9999	0	0	2,9999	2,999862	0	0	88	0	33,3337	19,9989	3,9999	19,9995		
	6	0	0	2,0001	0	0	0	2,0001	1,999888	0	0	0	176	39,9955	99,9952	39,999	11,9997		

Tabela D.12: Comparação dos resultados para a estimativa inicial 11 para a vazão máxima de água de reposição de 1 t/h.

Processo	Li,K	L ₁	L ₂	L ₃	L ₄	L ₅	L ₆	Lout _i	Lin _i	F _i	W _i	SM ₁	SM ₂	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}	Xout _{i,1}	Xout _{i,2}	Folga Xin _{i,1}	Folga Xin _{i,2}
MINLP Original			Fval	475,46															
	1	0	0	0	0	0	1,00011	2	2,000024	1	0	0	0	22,0016	8,00031	29,5012	12,5002	0,00223	0,00055
	2	0	0	0	0	2	0	2	2,00026	0	0	0	0	3,9999	19,9995	24,9967	128,983	2,4E-05	0,00012
	3	0	2,00023	0	0	0	0,99977	3	3,00006	0	1	0	0	29,9963	89,9972	39,9955	99,9952	0	0
	4	2	0	0	0	0,9999	0	3	3,000052	0	0,0001	0	0	21,001	14,9993	33,3337	19,9989	0,00161	0
	5	0	0	0	2,9999	0	0	2,9999	2,999862	0	0	88	0	33,3337	19,9989	3,9999	19,9995		
	6	0	0	2,0001	0	0	0	2,0001	1,999888	0	0	0	176	39,9955	99,9952	39,999	11,9997		
Operacional 1			Fval	665,17															
	1	0	0	0	0	0	0,99999	2	2,000024	1	0	0	0	21,9993	7,9999	29,499	12,4997	0	0,00014
	2	0	0	0	0	2	0	2	2,00026	0	0,0138	0	0	3,9999	19,9995	24,9967	128,983	2,4E-05	0,00012
	3	0	1,98593	0	0,0322	0	0,98191	3	3,00006	0	0,9863	0	0	29,9963	89,5254	39,9955	99,5234	0	0
	4	2	0	0	0	1	0	3	3,000052	0	0	0	0	20,9994	14,9996	33,3321	19,9993	1E-18	9,8E-05
	5	0	0,00053	0,0022	2,9679	0	0,02944	3,0001	2,999999	0	0	88,206	0	33,401	19,9989	3,9999	19,9995		
	6	0	0	2,0115	0	0	0	2,0115	2,011333	0	0	0	176,1	39,9955	99,5234	39,999	11,9997		
Operacional 2			Fval	493,25															
	1	0	0	0	0	0	0,99999	2	2,000024	1	0	0	0	21,9993	7,9999	29,499	12,4997	4,4E-45	0,00014
	2	0	0	0	0	2	0	2	2,00026	0	0,0929	0	0	3,9999	19,9995	24,9967	128,983	2,4E-05	0,00012
	3	0	1,9051	0	0	0,0394	1,05548	3	3,00006	0	0,9072	0	0	29,9991	86,3931	39,9983	96,3911	2,1E-18	0
	4	2	0	0	0	1	0	3	3,000052	0	0	0	0	20,9994	14,9996	33,3321	19,9993	-4,7E-19	9,8E-05
	5	0	0,0019	0,0011	3,0001	0	0,03645	3,0395	3,039416	0	0	89,39	0	33,4093	19,999	3,9999	19,9995		
	6	0	0,00037	2,0917	0	0	0	2,0921	2,091915	0	0	0	176,6	39,9957	96,3969	39,999	11,9997		
Operacional 3			Fval	559,48															
	1	0	0	0	0	0	0,99999	2	2	1	0	0	0	21,999	7,9999	29,499	12,5	0	0,00014
	2	0	0	0	0	2	0	2	2,0003	0	0,1153	0	0	3,9999	20	24,997	128,98	2E-05	1E-04
	3	0	1,8832	0	0	0,0485	1,0682	3	3,0001	0	0,8848	0	0	29,999	85,565	39,998	95,563	-1E-18	0E+00
	4	2	0	0	0	1	0	3	3,0001	0	0	0	0	20,999	15	33,332	19,999	7E-21	1E-04
	5	0	0,00171	0,0023	3,0001	0	0,04474	3,0488	3,0487	0	0	89,726	0	33,43	19,999	3,9999	20		
	6	0	0	2,113	0	0,0002	0	2,1131	2,113	0	0	0	176,6	39,996	95,557	39,999	12		

Tabela D.12: Comparação dos resultados para a estimativa inicial 2 para a vazão máxima de água de reposição de 4 t/h.

Processo	L_i, K	L_1	L_2	L_3	L_4	L_5	L_6	L_{out_i}	L_{in_i}	F_i	W_i	SM_1	SM_2	$X_{in_i,1}$	$X_{in_i,2}$	$X_{out_i,1}$	$X_{out_i,2}$	Folga	Folga
																		$X_{in_i,1}$	$X_{in_i,2}$
Inicial	xo2																		
	1	0	0,000245	0,0003	0,00097	0	0,99343	2	2,000024	1,00507	0	0	0	21,9029	7,99978	29,4025	12,4996	0	2,97E-19
	2	0	0	0	0	2	0	2	2,00026	0	1,70666	0	0	3,9999	19,9994	24,9967	128,983	2E-05	-4,8E-19
	3	2	0,115683	0	0,16024	0,001	0,5602	3	3,00006	0,16255	0,1202	0	0	29,9983	16,8279	39,9975	26,8274	5E-20	0
	4	0	0,177527	0	0	0	1,25758	3	3,000052	1,56489	0,90596	0	0	20,3331	14,7494	32,6659	19,749	0	0
	5	0	0,000148	0,0684	1,9328	0	0	2,0013	2,001289	0	0	57,87	0	32,9158	19,999	3,9999	19,9995		
	6	0	0	2,8112	0	0	0	2,8113	2,811142	0	0	0	41,685	39,9973	26,8272	39,999	11,9997		
NLP Reduzido			Fval	267,18															
	1	0	0	0	0	0	0	2	2,000024	2	0	0	0	4	4	11,4999	8,4999	0	0
	2	0	0	0	0	0,913	0	2	2,00026	1,08742	1,93019	0	0	3,99996	11,3004	24,9967	120,285	8E-05	0
	3	0,666	0	0	0,02856	0	2,0057	3	3,00006	0,29968	0	0	0	29,9995	10,4878	39,9987	20,4874	0,0004	0
	4	1,334	0,058791	0,9943	0	0	0	3	3,000052	0,61291	2,07016	0	0	19,678	13,7444	32,0108	18,7441	0	0
	5	0	0,011277	0	0,90133	0	0	0,9126	0,912577	0	0	25,48	0	31,9241	19,9988	3,9999	19,9995		
	6	0	0	2,0057	0	0	0	2,0057	2,0057	0	0	0	17,024	39,9987	20,4874	39,999	11,9997		
NLP Original			Fval	226,66															
	1	0	0,011702	0	0	0	0	2	2,000024	1,9883	0,13683	0	0	4,12285	4,67063	11,6227	9,17052	0	0
	2	0	0	0	0	0,703	0	2	2,00026	1,29655	1,93644	0	0	3,99997	9,62744	24,9967	118,612	9E-05	-2,8E-21
	3	0,058	0,040803	0	0	0,055	2,1305	3	3,00006	0,71515	0	0	0	29,9995	11,6344	39,9987	21,6339	0,0004	-1,8E-22
	4	1,805	0	0,8695	0	0,326	0	3	3,000052	0	1,92708	0	0	19,0197	13,959	31,3525	18,9587	-3E-21	-5,2E-19
	5	0	0,01132	0	1,07298	0	0	1,0843	1,084266	0	0	29,59	0	31,2861	19,999	3,9999	19,9995		
	6	0	0	2,1305	0	0	0	2,1305	2,130501	0	0	0	20,526	39,9987	21,6339	39,999	11,9997		
MINLP Reduzido			Fval	225,05															
	1	0	0	0	0	0	0	2	2,000024	2	0,7117	0	0	4	4	11,4999	8,4999	0	0
	2	0	0	0	0	0,833	0	2	2,00026	1,16669	2,00026	0	0	3,99996	10,6663	24,9967	119,651	8E-05	0
	3	0	0	0	0	0	2,16669	3	3,00006	0,83331	0	0	0	29,9995	9,77762	39,9987	19,7772	0,0004	0
	4	1,288	0	0,8334	0	0,878	0	3	3,000052	0	1,28838	0	0	17,2207	14,9994	29,5535	19,999	0	-2,4E-15
	5	0	0	0	1,71168	0	0	1,7117	1,711633	0	0	43,74	0	29,5535	19,999	3,9999	19,9995		
	6	0	0	2,1667	0	0	0	2,1667	2,166685	0	0	0	16,852	39,9987	19,7772	39,999	11,9997		
MINLP Original			Fval	260,32															
	1	0	0	0	0	0	0	2	2,000024	2	0,00047	0	0	4	4	11,4999	8,4999	0	0
	2	0	0	0	0	0,833	0	2	2,00026	1,16669	1,97362	0	0	3,99996	10,6663	24,9967	119,651	8E-05	0
	3	0	0	0	0	0	2,16669	3	3,00006	0,83331	0	0	0	29,9995	9,77762	39,9987	19,7772	0,0004	0
	4	2	0	0,8334	0	0,167	0	3	3,000052	0	2,02626	0	0	18,9987	12,2731	31,3315	17,2728	0	0
	5	0	0,02664	0	0,97379	0	0	1,0004	1,000407	0	0	27,17	0	31,1628	19,999	3,9999	19,9995		
	6	0	0	2,1667	0	0	0	2,1667	2,166685	0	0	0	16,852	39,9987	19,7772	39,999	11,9997		
Operacional 1		Fval	Não Convergiu																
Operacional 2		Fval	Não Convergiu																
Operacional 3		Fval	Não Convergiu																

Tabela D.12: Comparação dos resultados para a estimativa inicial 3 para a vazão máxima de água de reposição de 4 t/h.

Processo	Li,K	L ₁	L ₂	L ₃	L ₄	L ₅	L ₆	Lout _i	Lin _i	F _i	W _i	SM ₁	SM ₂	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}	Xout _{i,1}	Xout _{i,2}	Folga Xin _{i,1}	Folga Xin _{i,2}
Inicial		xo3																	
	1	0	0	0	0	0	0,92751	2	2,000024	1,0725	0,1218	0	0	20,6947	7,70991	28,1944	12,2098	0	0
	2	0	0	0	0	1,2686	0	2	2,00026	0,7314	0,4665	0	0	3,99994	14,1481	24,9967	123,132	5,9E-05	0
	3	0,52969	1,28807	0	0,48343	0,0285	0,66651	3	3,00006	0,0037	0	0	0	29,9974	61,0197	39,9966	71,0182	0	0
	4	0,39362	0,14652	0,004	0	0,1233	1,05536	3	3,000052	1,2773	2,4968	0	0	20,9116	14,456	33,2444	19,4557	0	0
	5	0,9549	0,09913	0	0,01911	0	0,34726	1,4204	1,420255	0	0	38,245	0	30,9251	19,9975	3,9999	19,9995		
	6	0	0	2,9961	0,00073	0	0	2,99681	2,996508	0	0	0	176,83	39,995	71,0057	39,999	11,9997		
NLP Reduzido			Fval	367,98															
	1	0	0,02647	0	0	0	0	2	2,000024	1,9735	0	0	0	4,27792	5,50862	11,7778	10,0085	0	0
	2	0	0	0	0	0,6237	0	2	2,00026	1,3763	1,9133	0	0	3,99997	8,98955	24,9967	117,974	9E-05	0
	3	0,03676	0	0	0,83336	0	1,47969	3	3,00006	0,6502	0	0	0	29,9993	12,4639	39,9985	22,4635	0,00032	0
	4	1,96326	0,0225	0,9794	0	0,0349	0	3	3,000052	0	2,087	0	0	20,9995	15,0003	33,3323	20	-1,1E-18	-2E-20
	5	0	0,03797	0,058	0,07966	0	0,48296	0,65859	0,658571	0	0	22,608	0	38,3277	19,9989	3,9999	19,9995		
	6	0	0	1,9627	0	0	0	1,96267	1,962646	0	0	0	20,537	39,9985	22,4635	39,999	11,9997		
NLP Original			Fval	252,56															
	1	0	0	0,0373	0	0	0,59291	2	2,000024	1,3698	0	0	0	15,3435	6,66582	22,8432	11,1657	0	0
	2	0	0	0	0	1,0671	0	2	2,00026	0,9329	1,9416	0	0	3,99995	12,5366	24,9967	121,521	6,9E-05	0
	3	0	0	0	0	0	2,16669	3	3,00006	0,8333	0,1292	0	0	29,9995	9,77762	39,9987	19,7772	0,00043	0
	4	2,00002	0	0,0517	0	0,062	0,02228	3	3,000052	0,864	1,9295	0	0	17,4494	9,43908	29,7822	14,4388	0	0
	5	0	0,05863	0	1,07055	0	0	1,12918	1,129149	0	0	28,833	0	29,5338	19,999	3,9999	19,9995		
	6	0	0	2,7819	0	0	0	2,7819	2,781874	0	0	0	21,636	39,9987	19,7772	39,999	11,9997		
MINLP Reduzido			Fval	225,05															
	1	1,2E-29	-1E-16	0	-2E-29	-3E-14	-1E-44	2	2,000024	2	0,7117	0	0	4	4	11,4999	8,4999	0	0
	2	0	0	0	0	0,8333	0	2	2,00026	1,1667	2,0003	0	0	3,99996	10,6663	24,9967	119,651	8E-05	0
	3	0	0	0	0	0	2,16669	3	3,00006	0,8333	0	0	0	29,9995	9,77762	39,9987	19,7772	0,00043	0
	4	1,28832	0	0,8334	0	0,8783	0	3	3,000052	0	1,2884	0	0	17,2207	14,9994	29,5535	19,999	0	0
	5	0	0	0	1,71168	0	0	1,71168	1,711633	0	0	43,74	0	29,5535	19,999	3,9999	19,9995		
	6	0	0	2,1667	0	0	0	2,1667	2,166685	0	0	0	16,852	39,9987	19,7772	39,999	11,9997		

Tabela D.12: Comparação dos resultados para a estimativa inicial 4 para a vazão máxima de água de reposição de 4 t/h.

Processo	Li,K	L ₁	L ₂	L ₃	L ₄	L ₅	L ₆	Lout _i	Lin _i	F _i	W _i	SM ₁	SM ₂	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}	Xout _{i,1}	Xout _{i,2}	Folga Xin _{i,1}	Folga Xin _{i,2}
Inicial		xo4																	
	1	0	0	0	0,51788	0	0,0508	2	2,000024	1,4313	0,0072	0	0	11,6415	7,86609	19,141	12,3659	0	0
	2	0	0	0	0	1,99998	0	2	2,00026	0	1,339	0	0	3,9999	19,9994	24,997	128,983	2,4E-05	0
	3	0,0557	0,5079	0	2,11831	0	0,3181	3	3,00006	0	0	0	0	29,9958	36,1522	39,995	46,1513	0	0
	4	1,92987	0	0	0	0,54306	0,3254	3	3,000052	0,2017	0,287	0	0	17,6452	13,1457	29,978	18,1454	0	0
	5	0,00726	0,1534	0,05642	0,07685	0	2,2492	2,54313	2,54303	0	0	88,328	0	38,7318	19,9987	3,9999	19,9995		
	6	0	0	2,94364	0	0	0	2,94364	2,943347	0	0	0	100,5	39,995	46,1513	39,999	11,9997		
NLP Reduzido			Fval	388,915															
	1	0	0,0186	0	0	0	0,5296	2	2,000024	1,4519	0	0	0	13,7267	7,13473	21,226	11,6346	-3E-14	0
	2	0	0	0	0	0,06747	0	2	2,00026	1,9325	1,9419	0	0	4	4,53972	24,997	113,525	0,00012	-5,3E-14
	3	0,04824	0	0	0,86666	0,03207	1,4374	3	3,00006	0,6156	0	0	0	29,9995	12,7488	39,999	22,7484	0,00031	-3,1E-33
	4	1,95178	0	0,48268	0	0,56554	0	3	3,000052	0	2,0584	0	0	20,9994	14,9996	33,332	19,9993	-2E-17	7,7E-34
	5	0	0,0398	0,06326	0,07494	0	0,4871	0,66509	0,665068	0	0	22,846	0	38,35	19,9988	3,9999	19,9995		
	6	0	0	2,45412	0	0	0	2,45412	2,454099	0	0	0	26,38	39,9987	22,7484	39,999	11,9997		
NLP Original			Fval	211,755															
	1	0	0	0	0	0	0	2	2,000024	2	0	0	0	4	4	11,5	8,4999	-5E-21	-2,3E-19
	2	0	0	0	0	0,96253	0	2	2,00026	1,0375	1,9597	0	0	3,99995	11,7	24,997	120,684	7,4E-05	-1,2E-38
	3	0	0	0	0,00061	0	2,1662	3	3,00006	0,8332	0	0	0	29,9995	9,779	39,999	19,7786	0,00043	-1,8E-20
	4	2,00002	0,0118	0,83383	0	0,02502	0	3	3,000052	0,1294	2,0406	0	0	19,0879	11,9768	31,421	16,9765	-1E-16	0
	5	0	0,0288	0	0,95879	0	0	0,98758	0,987549	0	0	26,895	0	31,2334	19,999	3,9999	19,9995		
	6	0	0	2,16623	0	0	0	2,16623	2,166218	0	0	0	16,85	39,9987	19,7786	39,999	11,9997		
MINLP Reduzido			Fval	225,051															
	1	0	0	0	0	0	0	2	2,000024	2	0,7117	0	0	4	4	11,5	8,4999	0	0
	2	0	0	0	0	0,83331	0	2	2,00026	1,1667	2,0003	0	0	3,99996	10,6663	24,997	119,651	8E-05	0
	3	0	0	0	0	0	2,1667	3	3,00006	0,8333	0	0	0	29,9995	9,77762	39,999	19,7772	0,00043	0
	4	1,28832	0	0,83336	0	0,87832	0	3	3,000052	0	1,2884	0	0	17,2207	14,9994	29,553	19,999	0	0
	5	0	0	0	1,71168	0	0	1,71168	1,711633	0	0	43,74	0	29,5535	19,999	3,9999	19,9995		
	6	0	0	2,1667	0	0	0	2,1667	2,166685	0	0	0	16,85	39,9987	19,7772	39,999	11,9997		

Tabela D.12: Comparação dos resultados para a estimativa inicial 5 para a vazão máxima de água de reposição de 4 t/h.

Processo	Li,K	L ₁	L ₂	L ₃	L ₄	L ₅	L ₆	Lout _i	Lin _i	F _i	W _i	SM ₁	SM ₂	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}	Xout _{i,1}	Xout _{i,2}	Folga Xin _{i,1}	Folga Xin _{i,2}
Inicial	xo5																		
	1	0	0	0	0,0018	0	0,99303	2	2,000024	1,00517	0,8321	0	0	21,90032	7,98629	29,39997	12,48614	0	8,4E-18
	2	0	0	0	0	1,01611	0	2	2,00026	0,98389	1,3142	0	0	3,999951	12,1287	24,9967	121,1129	7,1E-05	0
	3	0,3723	0,47326	0	1,64831	0,20651	0,29207	3	3,00006	0,00754	0	0	0	29,99906	34,1587	39,99826	44,15784	5,1E-17	0
	4	0,2315	0,12732	0	0	0,4111	1,16597	3	3,000052	1,06413	0,9147	0	0	20,84228	14,9267	33,17504	19,9264	0	3,1E-18
	5	0,564	0,08547	0,00056	0,43527	0	0,54848	1,6338	1,6337	0	0	48,584	0	33,73728	19,9986	3,999904	19,99952		
	6	0,0002	0	2,9995	0	0	0	2,9997	2,999551	0	0	0	96,459	39,99771	44,1562	39,99904	11,99971		
NLP Reduzido			Fval	211,962															
	1	0	0	0	0	0	0	2	2,000024	2	0,0123	0	0	4	4	11,49986	8,499898	0	0
	2	0	0	0	0	0,94697	0	2	2,00026	1,05303	1,9261	0	0	3,999955	11,5756	24,9967	120,5599	7,5E-05	0
	3	0	0	0	0	0	2,16669	3	3,00006	0,83331	0	0	0	29,99953	9,77762	39,99873	19,77722	0,00043	0
	4	1,9877	0,06335	0,83336	0	0,00189	0	3	3,000052	0,11366	2,062	0	0	19,41261	13,8358	31,7454	18,83548	0	0
	5	0	0,01085	0	0,93803	0	0	0,9489	0,948862	0	0	26,254	0	31,66821	19,999	3,999904	19,99952		
	6	0	0	2,1667	0	0	0	2,1667	2,166685	0	0	0	16,852	39,99873	19,7772	39,99904	11,99971		
NLP Original			Fval	222,965															
	1	0	0,01472	0,03169	0	0	0,73614	2	2,000024	1,21745	0,0019	0	0	17,97511	7,99976	25,4748	12,49961	0	1,8E-17
	2	0	0	0	0	0,05071	0	2	2,00026	1,94924	1,9855	0	0	4,000729	4,40609	24,99748	113,3914	0,00085	0
	3	0	0	0	0	0	2,16669	3	3,00006	0,83331	0	0	0	29,99953	9,77762	39,99873	19,77722	0,00043	0
	4	1,9982	0	0,06552	0	0,93631	0	3	3,000052	0	2,0129	0	0	19,08962	14,9993	31,4224	19,99897	0	3,5E-17
	5	0	0	0	0,98705	0	0	0,9871	0,987023	0	0	27,067	0	31,42241	19,999	3,999904	19,99952		
	6	0	0	2,90284	0	0	0	2,9028	2,90282	0	0	0	22,577	39,99873	19,7772	39,99904	11,99971		
MINLP Reduzido			Fval	225,051															
	1	0	0	0	0	0	0	2	2,000024	2	0,7117	0	0	4	4	11,49986	8,499898	0	0
	2	0	0	0	0	0,83331	0	2	2,00026	1,16669	2,0003	0	0	3,99996	10,6663	24,99671	119,6508	8E-05	0
	3	0	0	0	0	0	2,16669	3	3,00006	0,83331	0	0	0	29,99953	9,77762	39,99873	19,77722	0,00043	0
	4	1,2883	0	0,83336	0	0,87832	0	3	3,000052	0	1,2884	0	0	17,22066	14,9994	29,55349	19,99901	0	-5,2E-17
	5	0	0	0	1,71168	0	0	1,7117	1,711633	0	0	43,74	0	29,55349	19,999	3,999904	19,99952		
	6	0	0	2,1667	0	0	0	2,1667	2,166685	0	0	0	16,852	39,99873	19,7772	39,99904	11,99971		

Tabela D.12: Comparação dos resultados para a estimativa inicial 6 para a vazão máxima de água de reposição de 4 t/h.

Processo	Li,K	L ₁	L ₂	L ₃	L ₄	L ₅	L ₆	Lout _i	Lin _i	F _i	W _i	SM ₁	SM ₂	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}	Xout _{i,1}	Xout _{i,2}	Folga Xin _{i,1}	Folga Xin _{i,2}
Inicial	xo6																		
	1	0	0	0	0,19413	0	0,612	2	2,000024	1,1939	0,4281	0	0	17,81416	7,95329	25,31385	12,45314	0	1,44E-18
	2	0	0	0	0	1,5022	0	2	2,00026	0,4978	0,5379	0	0	3,999928	16,0174	24,99668	125,0012	4,8E-05	-9,18E-17
	3	0,2623	1,31603	0	0,71391	0,0358	0,67205	3	3,00006	0	0	0	0	29,99897	63,4927	39,99817	73,49119	0	0
	4	0,6833	0,03866	0	0	0,8433	0,94769	3	3,000052	0,4871	1,2129	0	0	20,497	14,5091	32,82976	19,50872	0	-1,73E-18
	5	0,6264	0,10766	0	0,87845	0	0,76883	2,3814	2,38114	0	0	68,616	0	32,81321	19,9977	3,999904	19,99952		
	6	0	0	3,00006	0,0007	0	0	3,0008	3,000568	0	0	0	184,5	39,9965	73,4786	39,99904	11,99971		
NLP Reduzido			Fval	223,549															
	1	0	0	0	0	0	0,03194	2	2,000024	1,9681	0,6721	0	0	4,57496	4,12777	12,07482	8,627664	0	0
	2	0	0	0	0	0,7836	0	2	2,00026	1,2164	2,0003	0	0	3,999962	10,2684	24,99671	119,2529	8,2E-05	0
	3	0,009	0	0	0,01942	0	2,15603	3	3,00006	0,8155	0,7985	0	0	29,99984	9,86673	39,99904	19,86633	0,00043	0
	4	1,3188	0	0,01361	0	1,6675	0	3	3,000052	0	0,5295	0	0	7,713088	14,9997	20,04607	19,99934	0	0
	5	0	0	0	2,45115	0	0	2,4512	2,451166	0	0	39,332	0	20,04609	19,9996	3,999904	19,99952		
	6	0	0	2,18799	0	0	0	2,188	2,187987	0	0	0	17,21	39,99904	19,8663	39,99904	11,99971		
NLP Original			Fval	222,946															
	1	0	0	0,0467	0	0	0,7291	2	2,000024	1,2242	0,0298	0	0	17,96389	7,2857	25,46358	11,78556	0	0
	2	0	0	0	0	0,049	0	2	2,00026	1,951	1,9959	0	0	3,999998	4,39208	24,99675	113,3773	0,00012	0
	3	0	0	0	0	0,0085	2,16669	3	3,00006	0,8248	0	0	0	29,99953	9,82301	39,99873	19,82261	0,00043	0
	4	1,9702	0	0,05756	0	0,9722	0	3	3,000052	0	1,9746	0	0	18,78646	14,6017	31,11925	19,60135	0	0
	5	0	0,00437	0	1,02542	0	0	1,0298	1,02976	0	0	27,902	0	31,09331	19,999	3,999904	19,99952		
	6	0	0	2,8958	0	0	0	2,8958	2,895781	0	0	0	22,65	39,99873	19,8226	39,99904	11,99971		
MINLP Reduzido			Fval	260,051															
	1	0	0	0	0	0	0	2	2,000024	2	0,7117	0	0	4	4	11,49986	8,499898	-2,3E-19	-4,14E-17
	2	0	0	0	0	0,8333	0	2	2,00026	1,1667	2,0003	0	0	3,99996	10,6663	24,99671	119,6508	8E-05	-7,97E-20
	3	0	0	0	0	0	2,16669	3	3,00006	0,8333	0	0	0	29,99953	9,77762	39,99873	19,77722	0,00043	0
	4	1,2883	0	0,83336	0	0,8783	0	3	3,000052	0	1,2884	0	0	17,22067	14,9994	29,55349	19,99901	0	-2,07E-17
	5	0	0	0	1,71168	0	0	1,7117	1,711633	0	0	43,74	0	29,55349	19,999	3,999904	19,99952		
	6	0	0	2,1667	0	0	0	2,1667	2,166685	0	0	0	16,85	39,99873	19,7772	39,99904	11,99971		

Tabela D.12: Comparação dos resultados para a estimativa inicial 7 para a vazão máxima de água de reposição de 4 t/h.

Processo	Li,K	L ₁	L ₂	L ₃	L ₄	L ₅	L ₆	Lout _i	Lin _i	F _i	W _i	SM ₁	SM ₂	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}	Xout _{i,1}	Xout _{i,2}	Folga Xin _{i,1}	Folga Xin _{i,2}
Inicial	xo7																		
	1	0	0,00066	0	0,02545	0,0006	0,94233	2	2,000024	1,031	0,04868	0	0	21,3315	7,99963	28,8312	12,4995	-1,4E-19	0
	2	0	0	0	0	1,3162	0	2	2,00026	0,6838	0,75505	0	0	3,99994	14,5293	24,9967	123,513	5,8E-22	-4E-18
	3	0,3157	1,06853	0	1,37175	0,0059	0,23814	3	3,00006	0	0	0	0	29,9978	54,8248	39,997	64,8235	1,9E-19	0
	4	1,4623	0,04667	0,00063	0	0,5236	0,31389	3	3,000052	0,6529	1,56406	0	0	20,2046	13,6446	32,5374	18,6443	-1,8E-18	-1E-16
	5	0,1733	0,12936	0	0,03878	0	1,50491	1,84639	1,84631	0	0	62,303	0	37,7428	19,9987	3,9999	19,9995		
	6	0	0	2,99943	0	0	0	2,99943	2,99927	0	0	0	158,44	39,997	64,8235	39,999	11,9997		
NLP Reduzido			Fval	225,397															
	1	0	0	0,05264	0	0	0,69395	2	2,000024	1,2534	0,11215	0	0	17,4382	7,23366	24,9379	11,7335	0	0
	2	0	0	0	0	0,0536	0	2	2,00026	1,9464	1,95478	0	0	4	4,42888	24,9967	113,414	0,00012	0
	3	0,0339	0,04548	0	0	0	2,12046	3	3,00006	0,8002	0	0	0	29,9995	11,4004	39,9987	21,4	0,00038	0
	4	1,854	0	0,06954	0	1,0764	0	3	3,000052	0	1,93341	0	0	17,7742	14,9235	30,1071	19,9232	0	0
	5	0	0	0,06344	1,06664	0	0	1,13008	1,130449	0	0	30,129	0	30,6623	20,0061	3,9999	19,9995		
	6	0	0	2,81444	0	0	0	2,81444	2,814417	0	0	0	26,457	39,9987	21,4	39,999	11,9997		
NLP Original			Fval	222,812															
	1	0	0	0	0	0	0,76769	2	2,000024	1,2323	0,22202	0	0	17,818	7,07064	25,3177	11,5705	-6,9E-17	-4E-37
	2	0	0	0	0	0,0656	0	2	2,00026	1,9344	2,00026	0	0	4	4,52501	24,9967	113,51	0,00012	0
	3	0	0	0	0	0	2,16669	3	3,00006	0,8333	0,00402	0	0	29,9995	9,77762	39,9987	19,7772	0,00043	0
	4	1,778	0	0,06165	0	1,1604	0	3	3,000052	0	1,77404	0	0	17,374	14,9994	29,7068	19,999	-1,2E-18	0
	5	0	0	0	1,22601	0	0	1,22601	1,225983	0	0	31,517	0	29,7068	19,999	3,9999	19,9995		
	6	0	0	2,93439	0	0	0	2,93439	2,934372	0	0	0	22,823	39,9987	19,7772	39,999	11,9997		
MINLP Reduzido			Fval	225,051															
	1	0	0	0	0	0	0	2	2,000024	2	0,7117	0	0	4	4	11,4999	8,4999	1,4E-20	0
	2	0	0	0	0	0,8333	0	2	2,00026	1,1667	2,00026	0	0	3,99996	10,6663	24,9967	119,651	8E-05	0
	3	0	0	0	0	0	2,16669	3	3,00006	0,8333	0	0	0	29,9995	9,77762	39,9987	19,7772	0,00043	0
	4	1,2883	0	0,83336	0	0,8783	0	3	3,000052	0	1,28838	0	0	17,2207	14,9994	29,5535	19,999	0	-5E-17
	5	0	0	0	1,71168	0	0	1,71168	1,711633	0	0	43,74	0	29,5535	19,999	3,9999	19,9995		
	6	0	0	2,1667	0	0	0	2,1667	2,166685	0	0	0	16,852	39,9987	19,7772	39,999	11,9997		

Tabela D.12: Comparação dos resultados para a estimativa inicial 7 para a vazão máxima de água de reposição de 4 t/h.

Processo	Li,K	L ₁	L ₂	L ₃	L ₄	L ₅	L ₆	Lout _i	Lin _i	F _i	W _i	SM ₁	SM ₂	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}	Xout _{i,1}	Xout _{i,2}	Folga Xin _{i,1}	Folga Xin _{i,2}
MINLP Original			Fval	260,317															
	1	0	0	0	0	0	0	2	2,000024	2	0,00051	0	0	4	4	11,4999	8,4999	0	0
	2	0	0	0	0	0,8333	0	2	2,00026	1,1667	1,97362	0	0	3,99996	10,6663	24,9967	119,651	8E-05	0
	3	0	0	0	0	0	2,16669	3	3,00006	0,8333	0	0	0	29,9995	9,77762	39,9987	19,7772	0,00043	0
	4	1,9995	0	0,83336	0	0,1671	0	3	3,000052	0	2,02622	0	0	18,9986	12,2732	31,3314	17,2729	0	0
	5	0	0,02664	0	0,97383	0	0	1,00047	1,000443	0	0	27,176	0	31,1627	19,999	3,9999	19,9995		
	6	0	0	2,1667	0	0	0	2,1667	2,166685	0	0	0	16,852	39,9987	19,7772	39,999	11,9997		
Operacional 1			Fval	532,846															
	1	0	0	0,00064	0,05505	0,0476	0,79644	2	2,000024	1,1003	0,05657	0	0	19,1198	7,99941	26,6194	12,4993	0	0
	2	0	0	0	0	0	0	2	2,00026	2	0,02487	0	0	4	4	24,9968	112,985	0,00012	0
	3	0,0108	1,9202	0	0,00938	0,0117	1,03256	3	3,00006	0,0154	1,06413	0	0	29,9991	76,6504	39,9983	86,6487	4,6E-20	0
	4	1,9227	0,05519	0,07116	0	0,0667	0	3	3,000052	0,8843	2,85469	0	0	19,7366	13,7679	32,0694	18,7676	0	0
	5	0,01	0	0,0061	0,08094	0	0,029	0,12601	0,125998	0	0	3,761	0	33,8467	19,9977	3,9999	19,9995		
	6	0	0	1,85803	0	0,0001	0	1,85814	1,858003	0	0	0	138,7	39,9961	86,6445	39,999	11,9997		
Operacional 2			Fval	519,955															
	1	0	0,00081	0	0,03347	0	0,92189	2	2,000024	1,0438	0	0	0	21,093	7,99975	28,5927	12,4996	0	0
	2	0	0	0	0	0,0556	0	2	2,00026	1,9444	1,63611	0	0	4	4,4448	24,9967	113,43	0,00012	0
	3	0,0487	0,25867	0	0,51885	0	1,55976	3	3,00006	0,614	0	0	0	29,9991	20,4995	39,9983	30,4989	-1,5E-18	0
	4	1,9496	0,06766	0,00141	0	0,5397	0,04392	3	3,000052	0,3977	2,36421	0	0	20,9995	14,9995	33,3322	19,9992	0	0
	5	0,0018	0,03701	0,01834	0,08352	0	0,45467	0,5953	0,595276	0	0	20,298	0	38,0974	19,9989	3,9999	19,9995		
	6	0	0	2,9803	0	0	0	2,9803	2,980247	0	0	0	55,134	39,9983	30,4989	39,999	11,9997		
Operacional 3			Fval	2451,15															
	1	0	0	0,04575	0,00113	0	0,66818	2	2	1,2849	0,54096	0	0	16,866	7,3998	24,365	11,9	-1,9E-16	-5E-13
	2	0	0	0	0	0,8744	0	2	2,0003	1,1254	1,5523	0	0	4,0028	10,997	25	119,98	4,5E-05	-6E-17
	3	0,2338	0,29723	0	1,1623	0,1297	0,96797	3	3,0001	0,209	0,2182	0	0	29,987	25,387	39,986	35,386	3,1E-04	-3E-17
	4	0,8635	0,08999	0,00129	0	0,5223	0,73229	3	3,0001	0,7906	1,0987	0	0	19,295	14,505	31,627	19,504	-1,1E-15	-5E-18
	5	0,3616	0,06066	0,00521	0,73791	0	0,36113	1,5265	1,5246	0	0	42,219	0	31,653	19,975	3,9999	20		
	6	0	0	2,7295	0	0	0	2,7298	2,7288	0	0	0	63,853	39,985	35,387	39,999	12		

Tabela D.12: Comparação dos resultados para a estimativa inicial 8 para a vazão máxima de água de reposição de 4 t/h.

Processo	Li,K	L ₁	L ₂	L ₃	L ₄	L ₅	L ₆	Lout _i	Lin _i	F _i	W _i	SM ₁	SM ₂	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}	Xout _{i,1}	Xout _{i,2}	Folga Xin _{i,1}	Folga Xin _{i,2}
Inicial		x08																	
	1	0	0,0033	0	0,12213	0,0171	0,6752	2	2,000024	1,1823	0,7489	0	0	17,9789	7,999845	25,479	12,5	0	0
	2	0	0	0	0	0,485	0	2	2,00026	1,515	0,8084	0	0	3,99998	7,879866	24,997	116,86	-8,8E-21	0
	3	0,27685	1,0981	0	0,70489	0,1335	0,7866	3	3,00006	0	0,0397	0	0	29,999	52,66545	39,998	62,664	-1,5E-21	0
	4	0,73841	0,0278	0	0	0,9942	0,96	3	3,000052	0,2796	1,3801	0	0	21,0002	14,99872	33,333	19,998	0	0
	5	0,23587	0,0627	0	0,7929	0	0,5384	1,62989	1,629815	0	0	49,024	0	34,0775	19,99857	3,9999	20		
	6	0	0	2,9603	0	0	0	2,96032	2,960257	0	0	0	149,984	39,9982	62,66419	39,999	12		
NLP Reduzido			Fval	266,81															
	1	0	0	0	0,0246	0	0,6268	2	2,000024	1,3486	0,2998	0	0	15,598	6,704042	23,098	11,204	-3,7E-15	0
	2	0	0	0	0	0,1819	0	2	2,00026	1,8181	2,0003	0	0	3,99999	5,455018	24,997	114,44	0,00011	0
	3	0	0	0	0	0	2,1667	3	3,00006	0,8333	0	0	0	29,9995	9,777619	39,999	19,777	0,00043	-1,9E-15
	4	1,70021	0	0,2065	0	1,0933	0	3	3,000052	0	1,7003	0	0	17,3015	14,99943	29,634	19,999	-4,7E-19	0
	5	0	0	0	1,27518	0	0	1,27518	1,275157	0	0	32,689	0	29,6343	19,99909	3,9999	20		
	6	0	0	2,7935	0	0	0	2,79354	2,793514	0	0	0	21,727	39,9987	19,77722	39,999	12		
NLP Original			Fval	351,67															
	1	0	0	0	0	0	0,9504	2	2,000024	1,0496	0,8354	0	0	21,1064	7,801382	28,606	12,301	-1,3E-21	0
	2	0	0	0	0	0	0	2	2,00026	2	0,7341	0	0	4	4	24,997	112,99	0,00012	0
	3	0	1,2309	0	0	0	1,4486	3	3,00006	0,3205	0,5879	0	0	29,9978	52,57837	39,997	62,577	-4,2E-22	-5,1E-21
	4	1,16463	0,0339	0,0131	0	1,1585	0	3	3,000052	0,6299	1,8429	0	0	13,9466	14,88899	26,279	19,889	-5,5E-20	-1,2E-19
	5	0	0,0014	0	1,15714	0	0	1,15852	1,158491	0	0	25,81	0	26,2779	19,99907	3,9999	20		
	6	0	0	2,3991	0	0	0	2,39913	2,399008	0	0	0	121,344	39,997	62,57712	39,999	12		
MINLP Reduzido			Fval	225,05															
	1	0	0	0	0	0	0	2	2,000024	2	0,7117	0	0	4	4	11,5	8,4999	0	0
	2	0	0	0	0	0,8333	0	2	2,00026	1,1667	2,0003	0	0	3,99996	10,66632	24,997	119,65	8E-05	0
	3	0	0	0	0	0	2,1667	3	3,00006	0,8333	0	0	0	29,9995	9,777619	39,999	19,777	0,00043	0
	4	1,28832	0	0,8334	0	0,8783	0	3	3,000052	0	1,2884	0	0	17,2207	14,99936	29,553	19,999	0	-5,2E-17
	5	0	0	0	1,71168	0	0	1,71168	1,711633	0	0	43,74	0	29,5535	19,99901	3,9999	20		
	6	0	0	2,1667	0	0	0	2,1667	2,166685	0	0	0	16,8518	39,9987	19,77722	39,999	12		

Tabela D.12: Comparação dos resultados para a estimativa inicial 9 para a vazão máxima de água de reposição de 4 t/h.

Processo	L_i, K	L_1	L_2	L_3	L_4	L_5	L_6	L_{out_i}	L_{in_i}	F_i	W_i	SM_1	SM_2	$X_{in,i,1}$	$X_{in,i,2}$	$X_{out,i,1}$	$X_{out,i,2}$	Folga	Folga
Inicial		xo9																	
	1	0	0	0	0,540222	0	0	2	2,000024	1,4598	0,0104	0	0	10,8024	7,999626	18,3021	12,499	0	1,07E-20
	2	0	0	0	0	1,99998	0	2	2,00026	0	1,9547	0	0	3,9999	19,99933	24,9967	128,98	-3,8E-21	-2,1E-19
	3	0,03822	0,00289	0	0,030714	0,419	0	3	3,00006	2,5092	1,155	0	0	4,46025	6,614898	14,46	16,615	0	0
	4	1,9512	0	1,01778	0	0	0	3	3,000052	0,031	0,8802	0	0	16,8508	13,80768	29,1836	18,807	0	0
	5	0,00018	0,04265	0,82732	1,548873	0	0	2,419	2,418988	0	0	48,558	0	24,0734	19,99924	3,9999	20		
	6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0		
NLP Reduzido		Fval	232,147																
	1	0	0	0	0	0	0	2	2,000024	2	0,7856	0	0	4	4	11,4999	8,4999	-5,3E-19	0
	2	0	0	0	0	1,99999	0	2	2,00026	0	2,0003	0	0	3,9999	19,9994	24,9967	128,98	2,4E-05	-4,2E-35
	3	1,00001	0	0	0	0	0	3	3,00006	2	0,2145	0	0	6,49999	5,499988	16,4997	15,5	0	0
	4	0,21442	0	2,78558	0	0	0	3	3,000052	0	1	0	0	16,1423	14,99938	28,4751	19,999	-3,7E-21	-8,1E-21
	5	0	0	0	2,000034	0	0	2	1,999985	0	0	48,952	0	28,4751	19,99903	3,9999	20		
	6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0		
NLP Original		Fval	282,618																
	1	0	0	0,26161	0	0	0	2	2,000024	1,7384	1,0001	0	0	5,60103	5,501228	13,1009	10,001	0	0
	2	0	0	0	0	1,99999	0	2	2,00026	0	2,0003	0	0	3,9999	19,9994	24,9967	128,98	2,4E-05	0
	3	0,7384	0	0	0	0	0	3	3,00006	2,2616	0	0	0	6,24004	5,47708	16,2397	15,477	0	0
	4	0,26155	0	2,73845	0	0	0	3	3,000052	0	1	0	0	15,9661	14,99938	28,2989	19,999	0	0
	5	0	0	0	2,000034	0	0	2	1,999985	0	0	48,599	0	28,2989	19,99903	3,9999	20		
	6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0,01281	0,181734	39,999	12		
MINLP Reduzido		Fval	282,819																
	1	0	0	0,26708	0	0	0	2	2,000024	1,7329	0,9947	0	0	5,63559	5,533647	13,1354	10,034	0	0
	2	0	0	0	0	2	0	2	2,00026	0	2,0003	0	0	3,9999	19,99952	24,9967	128,98	2,4E-05	0,000119
	3	0,73829	0	0	0	0	0	3	3,00006	2,2617	0	0	0	6,24821	5,484837	16,2479	15,485	0	0
	4	0,26702	0	2,73298	0	0	0	3	3,000052	0	1	0	0	15,9709	14,99935	28,3037	19,999	0	0
	5	0	0	0	2,000049	0	0	2	1,999997	0	0	48,609	0	28,3037	19,999	3,9999	20		
	6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0		
MINLP Original		Fval	232,147																
	1	0	0	0	0	0	0	2	2,000024	2	0,7856	0	0	4	4	11,4999	8,4999	0	0
	2	0	0	0	0	1,99999	0	2	2,00026	0	2,0003	0	0	3,9999	19,9994	24,9967	128,98	2,4E-05	0
	3	1,00001	0	0	0	0	0	3	3,00006	2	0,2145	0	0	6,49999	5,499988	16,4997	15,5	0	0
	4	0,21442	0	2,78558	0	0	0	3	3,000052	0	1	0	0	16,1423	14,99938	28,4751	19,999	0	0
	5	0	0	0	2,000034	0	0	2	1,999985	0	0	48,952	0	28,4751	19,99903	3,9999	20		
	6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0,10211	0,123515	39,999	12		
Operacional 1		Fval	Não convergiu																
Operacional 2		Fval	Não convergiu																
Operacional 3		Fval	Não Convergiu																

Tabela D.12: Comparação dos resultados para a estimativa inicial 10 para a vazão máxima de água de reposição de 4 t/h.

Processo	Li,K	L ₁	L ₂	L ₃	L ₄	L ₅	L ₆	Lout _i	Lin _i	F _i	W _i	SM ₁	SM ₂	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}	Xout _{i,1}	Xout _{i,2}	Folga Xin _{i,1}	Folga Xin _{i,2}
Inicial	x010																		
1	0	0,000989	0,000561	1,557038	0	0	0	2	2,000024	0,44141	0,01483	0	0	13,6189	7,99942	21,1187	12,499	0	0
2	0	0	0	0	1,56463	0	0	2	2,00026	0,43537	1,83894	0	0	3,99992	16,5167	24,9967	125,5	4,49E-05	0
3	1,694427	0,148261	0	1,012992	0,01308	0	0	3	3,00006	0,13124	2,14493	0	0	18,8709	16,5806	28,8703	26,58	0	0
4	0	0	0	0	0,00968	0	0	3	3,000052	2,99031	0	0	0	4,00007	4,05202	16,3331	9,0519	0	0
5	0,290767	0,012064	0,854572	0,430022	0	0	0	1,5874	1,587815	0	0	31,7864	0	24,0248	20,0044	3,9999	20	0	0
6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
NLP Reduzido	Fval		232,8439																
1	0	0	0,076652	0	0	0	0	2	2,000024	1,92335	0,83899	0	0	4,47735	4,44154	11,9772	8,9414	0	0
2	0	0	0	0	1,99999	0	0	2	2,00026	0	2,00026	0	0	3,9999	19,9994	24,9967	128,98	2,4E-05	1E-18
3	0,923363	0	0	0	0	0	0	3	3,00006	2,07664	0,16107	0	0	6,45529	5,52091	16,455	15,521	0	0
4	0,237667	0	2,762333	0	0	0	0	3	3,000052	0	1,00002	0	0	16,1002	14,9994	28,4331	19,999	0	0
5	0	0	0	2,000034	0	0	0	2	1,999986	0	0	48,8673	0	28,4331	19,999	3,9999	20	0	0
6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
NLP Original	Fval		204,9393																
1	0	0	0,000784	0	0	0	0	2	2,000024	1,99922	0,7684	0	0	4,00512	4,00464	11,505	8,5045	0	-4,2E-21
2	0	0	0	0	1,99999	0	0	2	2,00026	0	2,00026	0	0	3,9999	19,9994	24,9967	128,98	2,4E-05	0
3	1,212912	0	0	0	0	0	0	3	3,00006	1,78709	0,27912	0	0	7,0343	5,82121	17,034	15,821	0	0
4	0,01868	0	2,720157	0	0,04748	0	0	3	3,000052	0,21368	0,95257	0	0	15,8649	14,9996	28,1978	19,999	0	-4,9E-20
5	0	0	0	2,047487	0	0	0	2,0475	2,047467	0	0	49,5456	0	28,1975	19,999	3,9999	20	0	0
6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1,1E-10	39,999	12	0	0

Tabela D.12: Comparação dos resultados para a estimativa inicial 10 para a vazão máxima de água de reposição de 4 t/h.

Processo																		Folga	Folga		
Li,K	L ₁	L ₂	L ₃	L ₄	L ₅	L ₆	Lout _i	Lin _i	F _i	W _i	SM ₁	SM ₂	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}	Xout _{i,1}	Xout _{i,2}	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}			
MINLP Reduzido		Fval	204,2943																		
1	0	0	0	0	0	0	2	2,000024	2	0,78853	0	0	4	4	11,4999	8,4999	0,0001	0			
2	0	0	0	0	2	0	2	2,00026	0	2,00026	0	0	3,9999	19,9995	24,9967	128,98	2,43E-05	0,00012			
3	1,211495	0	0	0	0	0	3	3,00006	1,78851	0,20761	0	0	7,02868	5,8172	17,0283	15,817	0	0,0001			
4	0	0	2,79245	0	0	0	3	3,000052	0,20755	1	0	0	16,127	14,9994	28,4598	19,999	0,0001	0			
5	0	0	0	2,000049	0	0	2	1,999998	0	0	48,9213	0	28,4598	19,999	3,9999	20					
6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0					
MINLP Original		Fval	232,147																		
1	0	0	0	0	0	0	2	2,000024	2	0,78559	0	0	4	4	11,4999	8,4999	0	0			
2	0	0	0	0	1,99999	0	2	2,00026	0	2,00026	0	0	3,9999	19,9994	24,9967	128,98	2,4E-05	0			
3	1,000015	0	0	0	0	0	3	3,00006	1,99999	0,21448	0	0	6,49999	5,49999	16,4997	15,5	0	0			
4	0,214422	0	2,785578	0	0	0	3	3,000052	0	1,00002	0	0	16,1423	14,9994	28,4751	19,999	0	0			
5	0	0	0	2,000034	0	0	2	1,999985	0	0	48,9515	0	28,4751	19,999	3,9999	20					
6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	3,5E-08	1,5E-09	39,999	12					
Operacional 1		Fval	Não convergiu																		
Operacional 2		Fval	494,3891																		
1	0	0	0,0307	0	0	0	2	2,000024	1,9693	0	0	0	4,42694	4,59357	11,9268	9,0935	0	0			
2	0	0	0	0	1,11344	0	2	2,00026	0,88656	1,5367	0	0	3,99995	12,9072	24,9967	121,89	6,66E-05	0			
3	0,845366	0,463559	0	1,691075	0	0	3	3,00006	0	2,26815	0	0	21,8144	32,67	31,8138	42,669	0	0			
4	1,154658	0	0,701207	0	0	0	3	3,000052	1,14414	0,19552	0	0	13,552	14,9988	25,8849	19,998	0	0			
5	0	0	0	1,11346	0	0	1,1135	1,113398	0	0	24,3683	0	25,8849	19,9984	3,9999	20					
6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0					
Operacional 3		Fval	Não Convergiu																		

Tabela D.12: Comparação dos resultados para a estimativa inicial 11 para a vazão máxima de água de reposição de 4 t/h.

Processo		L ₁	L ₂	L ₃	L ₄	L ₅	L ₆	Lout _i	Lin _i	F _i	W _i	SM ₁	SM ₂	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}	Xout _{i,1}	Xout _{i,2}	Folga Xin _{i,1}	Folga Xin _{i,2}	
Inicial	xo11																			
	1	0	0	0	0,0014	0	0,99685	2	2,000024	1,0018	0,00731	0	0	21,96313	7,99843	29,463	12,49828	0	-1E-20	
	2	0	0	0	0	1,99999	0	2	2,00026	0	0,91937	0	0	3,999904	19,9994	24,997	128,9826	2,4E-05	2,4E-21	
	3	1,26891	1,0592	0	0,00417	0,00647	0,64794	3	3,00006	0,0133	0,30982	0	0	29,9991	53,508	39,998	63,50674	2,7E-22	0	
	4	0,49758	0,0058	0	0	1,22972	1,04556	3	3,000052	0,2213	0	0	0	20,81052	14,9996	33,143	19,9992	0	-1,2E-17	
	5	0,22622	0,0156	0	2,99448	0	0	3,23626	3,236171	0	0	93,3566	0	32,84682	19,9989	3,9999	19,99952			
	6	0	0,0002	2,6902	0	0	0	2,69048	2,690339	0	0	0	138,6	39,99698	63,5125	39,999	11,99971			
NLP Reduzido	Fval			225,27																
	1	0	0	0	0	0	0	2	2,000024	2	0,24884	0	0	4	4	11,5	8,499898	0	0	
	2	0	0	0	0	0,82402	0	2	2,00026	1,176	1,97891	0	0	3,99996	10,5919	24,997	119,5764	8E-05	0	
	3	0,01174	0	0	0	0	2,16424	3	3,00006	0,824	0	0	0	29,99954	9,78871	39,999	19,78832	0,00044	0	
	4	1,73944	0	0,8358	0	0,42475	0	3	3,000052	0	1,7726	0	0	18,3778	13,273	30,711	18,27272	0	0	
	5	0	0,0214	0	1,22745	0	0	1,24881	1,249148	0	0	33,2331	0	30,6129	20,005	3,9999	19,99952			
	6	0	0	2,1643	0	0	0	2,16426	2,16424	0	0	0	16,857	39,99874	19,7883	39,999	11,99971			
NLP Original	Fval			226,32																
	1	0	0	0,0373	0	0	0	2	2,000024	1,9627	0,59449	0	0	4,671245	4,30019	12,171	8,800086	0	0	
	2	0	0	0	0	0,72649	0	2	2,00026	1,2735	2,00026	0	0	3,999965	9,81174	24,997	118,7963	8,5E-05	0	
	3	0,05846	0	0	0,06891	0,00581	2,10304	3	3,00006	0,7638	0	0	0	29,99952	10,0999	39,999	20,09951	0,00042	0	
	4	1,34708	0	0,8597	0	0,79321	0	3	3,000052	0	1,40559	0	0	17,98513	14,9993	30,318	19,99898	0	-4,6E-19	
	5	0	0	0	1,52555	0	0	1,52555	1,525514	0	0	40,1499	0	30,31795	19,999	3,9999	19,99952			
	6	0	0	2,1031	0	0	0	2,10306	2,103042	0	0	0	17,035	39,99872	20,0995	39,999	11,99971			
MINLP Reduzido	Fval			225,05																
	1	0	0	0	0	0	0	2	2,000024	2	0,7117	0	0	4	4	11,5	8,499898	0	-1,4E-20	
	2	0	0	0	0	0,83331	0	2	2,00026	1,1667	2,00026	0	0	3,99996	10,6663	24,997	119,6508	8E-05	-2,7E-20	
	3	0	0	0	0	0	2,16669	3	3,00006	0,8333	0	0	0	29,99953	9,77762	39,999	19,77722	0,00043	-5,4E-20	
	4	1,28832	0	0,8334	0	0,87832	0	3	3,000052	0	1,28838	0	0	17,22066	14,9994	29,553	19,99901	0	-5,2E-17	
	5	0	0	0	1,71168	0	0	1,71168	1,711633	0	0	43,7396	0	29,55349	19,999	3,9999	19,99952			
	6	0	0	2,1667	0	0	0	2,1667	2,166685	0	0	0	16,852	39,99873	19,7772	39,999	11,99971			

Tabela D.12: Comparação dos resultados para a estimativa inicial 11 para a vazão máxima de água de reposição de 4 t/h.

Processo	Li,K	L ₁	L ₂	L ₃	L ₄	L ₅	L ₆	Lout _i	Lin _i	F _i	W _i	SM ₁	SM ₂	Xin _{i,1}	Xin _{i,2}	Xout _{i,1}	Xout _{i,2}	Folga Xin _{i,1}	Folga Xin _{i,2}
MINLP Original			Fval	260,19															
1	0	0	0	0	0	0	0	2	2,000024	2	0,46232	0	0	4	4	11,5	8,499898	0	0
2	0	0	0	0	0	0,83331	0	2	2,00026	1,1667	1,98637	0	0	3,99996	10,6663	24,997	119,6508	8E-05	0
3	0	0	0	0	0	0	2,16669	3	3,00006	0,8333	0	0	0	29,99953	9,77762	39,999	19,77722	0,00043	0
4	1,53771	0	0,8334	0	0,62894	0	0	3	3,000052	0	1,55166	0	0	17,84412	14,0434	30,177	19,04309	0	0
5	0	0,0139	0	1,44839	0	0	0	1,46229	1,46225	0	0	38,2065	0	30,12771	19,999	3,9999	19,99952		
6	0	0	2,1667	0	0	0	0	2,1667	2,166685	0	0	0	16,852	39,99873	19,7772	39,999	11,99971		
Operacional 1			Fval	468,77															
1	0	0	0	0	0	0	0,92623	2	2,000024	1,0738	0,00342	0	0	20,67163	7,70477	28,171	12,20463	0	9E-19
2	0	0	0	0	0	0	0	2	2,00026	2	1,96761	0	0	4	4	24,997	112,9853	0,00012	0
3	0,53308	0	0	0,29308	0,00099	1,58164	3	3,00006	0,5912	0,11098	0	0	0	29,99947	11,2438	39,999	21,24333	0,00037	0
4	1,41942	0,0296	0,1343	0	0,89232	0,19235	3	3,000052	0,332	1,91535	0	0	0	19,5633	14,9996	31,896	19,99923	0	0
5	0,04411	0,0031	0,0534	0,79163	0	0,0011	0,89333	0,89338	0	0	25,1764	0	0	32,18265	20,0007	3,9999	19,99952		
6	0	0	2,7013	0	0	0	0	2,70135	2,701325	0	0	0	24,971	39,99867	21,2433	39,999	11,99971		
Operacional 2			Fval	487,95															
1	0	0	0	0	0	0	0,99998	2	2,000024	1	0	0	0	21,99909	7,99976	29,499	12,49961	0	-2,1E-18
2	0	0	0	0	0	0	0	2	2,00026	2	1,8148	0	0	4	4	24,997	112,9853	0,00012	0
3	1,9708	0,1766	0	0,03096	0	0,64315	3	3,00006	0,1785	0,00433	0	0	0	29,99921	17,8714	39,998	27,87082	0,0001	0
4	0	0	0,4198	0	0,82596	0,93274	3	3,000052	0,8215	2,18119	0	0	0	20,2302	14,2327	32,563	19,2324	0	0
5	0,02923	0,0089	0	0,7879	0	0	0,82599	0,82592	0	0	23,4362	0	0	32,3734	19,9996	3,9999	19,99952		
6	0	0	2,5759	0	0	0	0	2,5759	2,575863	0	0	0	40,883	39,99841	27,8708	39,999	11,99971		
Operacional 3			Fval	510,96															
1	0	0	0,158	0	0	0,65305	2	2	2	1,189	0,03767	0	0	18,598	7,8584	26,098	12,358	-1,7E-11	4,5E-17
2	0	0	0	0	0,02228	0	0	2	2,0003	1,9777	2,0003	0	0	4	4,1782	24,997	113,16	1,2E-04	-1E-33
3	0	0	0	0	0	2,1667	3	3,0001	0,8333	0	0	0	0	30	9,7776	39,999	19,777	4,3E-04	-1,2E-15
4	1,9624	0	0,0223	0	1,0153	0	0	3	3,0001	0	1,9624	0	0	18,722	15	31,055	19,999	-6,7E-13	-3E-16
5	0	0	0	1,0376	0	0	0	1,0376	1,0376	0	0	28,074	0	31,055	19,999	3,9999	20		
6	0	0	2,8198	0	0	0	0	2,8198	2,8197	0	0	0	21,931	39,999	19,777	39,999	12		

Tabela D.13: Melhores resultados para as implementações desenvolvidas

Processo	Li,K	L1	L2	L3	L4	L5	L6	Lout	Lin	F	W	Sm1	Sm2	Xin1	Xin2	Xout1	Xout2	Folga	Folga	
Origem	Problema NLP Original						Resultado	Xf3												
	1	0	0	0	0	0	1	2	2,00002	1	0	0	0	21,9993	7,9999	29,499	12,4997	0	0,000136	
	2	0	0	0	0	2	0	2	2,00026	0	0,153673	0	0	3,9999	20	24,9967	128,983	2,4E-05	0,00012	
	3	0	1,84209	0	0	0,06566913	1,0922	3	3,00006	0	0,846456	0	0	29,9991	84,006	39,9983	94,0042	0	0	
	4	2,000009	0	0	0	0,99999082	0	3	3,00005	0	0	0	0	20,9994	15	33,3321	19,9993	0	9,77E-05	
	5	0	0,00449	0	3,00005	0	0,0614	3,0659	3,06582	0	0	90,302	0	33,4533	19,999	3,9999	19,9995			
	6	0	0	2,153604	0	0,00015196	0	2,1538	2,15358	0	0	0	176,61	39,9958	93,999	39,999	11,9997			
Origem	Problema MINLP Reduzido						Resultado	Xf1												
	1	0	0	0	0	0	1,0001	2	2,00002	0,9999	0	0	0	22,0016	8,0003	29,5012	12,5002	0,002232	0,000552	
	2	0	0	0	0	2	0	2	2,00026	0	0	0	0	3,9999	20	24,9967	128,983	2,4E-05	0,00012	
	3	0	2,00023	0	0	0	0,9998	3	3,00006	0	0,999996	0	0	29,9963	89,997	39,9955	99,9952	0	0	
	4	2,000024	0	0	0	0,99986199	0	3	3,00005	0,0001	0,000102	0	0	21,001	14,999	33,3337	19,9989	0,001614	0	
	5	0	0	0	2,99995	0	0	2,9999	2,99986	0	0	88	0	33,3337	19,999	3,9999	19,9995			
	6	0	0	2,000064	0	0	0	2,0001	1,99989	0	0	0	176	39,9955	99,995	39,999	11,9997			
Origem	Problema Operacional 1						Resultado	Xf11												
	1	0	0	0	0	0	1	2	2,00002	1	0	0	0	21,9993	7,9999	29,499	12,4997	0	0,000136	
	2	0	0	0	0	2	0	2	2,00026	0	0,013803	0	0	3,9999	20	24,9967	128,983	2,4E-05	0,00012	
	3	0	1,98593	0	0,03217	0	0,9819	3	3,00006	0	0,986328	0	0	29,9963	89,525	39,9955	99,5234	0	0	
	4	2,000009	0	0	0	0,99999082	0	3	3,00005	0	0	0	0	20,9994	15	33,3321	19,9993	1,02E-18	9,77E-05	
	5	0	0,00053	0,002222	2,96788	0	0,0294	3,0001	3	0	0	88,206	0	33,401	19,999	3,9999	19,9995			
	6	0	0	2,011509	0	0	0	2,0115	2,01133	0	0	0	176,06	39,9955	99,523	39,999	11,9997			
Origem	Problema Operacional 2						Resultado	Xf11												
	1	0	0	0	0	0	1	2	2,00002	1	0	0	0	21,9993	7,9999	29,499	12,4997	4,41E-45	0,000136	
	2	0	0	0	0	2	0	2	2,00026	0	0,09289	0	0	3,9999	20	24,9967	128,983	2,4E-05	0,00012	
	3	0	1,9051	0	0	0,03940562	1,0555	3	3,00006	0	0,90724	0	0	29,9991	86,393	39,9983	96,3911	2,12E-18	0	
	4	2,000009	0	0	0	0,99999082	0	3	3,00005	0	0	0	0	20,9994	15	33,3321	19,9993	-4,68E-19	9,77E-05	
	5	0	0,0019	0,001095	3,00005	0	0,0364	3,0395	3,03942	0	0	89,39	0	33,4093	19,999	3,9999	19,9995			
	6	0	0,00037	2,091724	0	0	0	2,0921	2,09192	0	0	0	176,57	39,9957	96,397	39,999	11,9997			
Origem	Problema Operacional 3						Resultado	Xf11												
	1	0	0	0	0	0	1	2	2	1	0	0	0	21,999	7,9999	29,499	12,5	0	0,000136	
	2	0	0	0	0	2	0	2	2,0003	0	0,11531	0	0	3,9999	20	24,997	128,98	2E-05	1E-04	
	3	0	1,8832	0	0	0,048517	1,0682	3	3,0001	0	0,88482	0	0	29,999	85,565	39,998	95,563	-1E-18	0E+00	
	4	2	0	0	0	0,99999	0	3	3,0001	0	0	0	0	20,999	15	33,332	19,999	7E-21	1E-04	
	5	0	0,00171	0,00225	3,0001	0	0,0447	3,0488	3,0487	0	0	89,726	0	33,43	19,999	3,9999	20			
	6	0	0	2,113	0	0,00015279	0	2,1131	2,113	0	0	0	176,57	39,996	95,557	39,999	12			

Tabela D.13: Melhores resultados para as implementações desenvolvidas

Processo	Li,K	L1	L2	L3	L4	L5	L6	Lout	Lin	F	W	Sm1	Sm2	Xin1	Xin2	Xout1	Xout2	Folga Xin1	Folga Xin2	
Origem	Problema NLP Original						Resultado	Xf10												
1	0	0	0,000784	0	0	0	2	2,00002	1,9992	0,768403	0	0	4,00512	4,0046	11,505	8,50454	0	-4,24E-21		
2	0	0	0	0	1,999985	0	2	2,00026	0	2,00026	0	0	3,9999	19,999	24,9967	128,983	2,4E-05	0		
3	1,212912	0	0	0	0	0	3	3,00006	1,7871	0,279119	0	0	7,0343	5,8212	17,034	15,8209	0	0		
4	0,01868	0	2,720157	0	0,04748222	0	3	3,00005	0,2137	0,952565	0	0	15,8649	15	28,1978	19,9992	0	-4,9E-20		
5	0	0	0	2,04749	0	0	2,0475	2,04747	0	0	49,546	0	28,1975	19,999	3,9999	19,9995				
6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1E-10	39,999	11,9997				
Origem	Problema NLP Original usado nos testes dinâmicos						Resultado	Xf6												
1	0	0	0,046696	0	0	0,7291	2	2,00002	1,2242	0,029822	0	0	17,9639	7,2857	25,4636	11,7856	0	0		
2	0	0	0	0	0,04901108	0	2	2,00026	1,951	1,995891	0	0	4	4,3921	24,9967	113,377	0,000118	0		
3	0	0	0	0	0,0085113	2,1667	3	3,00006	0,8248	0	0	0	29,9995	9,823	39,9987	19,8226	0,000427	0		
4	1,970202	0	0,05756	0	0,97223777	0	3	3,00005	0	1,974633	0	0	18,7865	14,602	31,1193	19,6014	0	0		
5	0	0,00437	0	1,02542	0	0	1,0298	1,02976	0	0	27,902	0	31,0933	19,999	3,9999	19,9995				
6	0	0	2,895804	0	0	0	2,8958	2,89578	0	0	0	22,654	39,9987	19,823	39,999	11,9997				
Origem	Problema MINLP Original						Resultado	Xf1												
1	0	0	0	0	0	0	2	2,00002	2	0,794639	0	0	4	4	11,4999	8,4999	0	0		
2	0	0	0	0	1,99999572	0	2	2,00026	0	2,00026	0	0	3,9999	19,999	24,9967	128,983	2,4E-05	8,58E-05		
3	1,205385	0	0	0	0	0	3	3,00006	1,7946	0,205436	0	0	7,01341	5,808	17,0131	15,8077	0	0		
4	0	0	2,794624	0	0	0	3	3,00005	0,2054	1,000007	0	0	16,1222	14,999	28,455	19,999	0	0		
5	0	0	0	2,00004	0	0	2	2	0	0	48,912	0	28,455	19,999	3,9999	19,9995				
6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	6,2E-05	0,0948	39,999	11,9997				
Origem	Problema Operacional 1						Resultado	Xf5												
1	0	0,00017	0,037091	0,04768	0,0137239	0,7922	2	2,00002	1,1092	0,094136	0	0	19,5712	7,9669	27,0709	12,4668	0	-1,67E-18		
2	0	0	0	0	0,00346647	0	2	2,00026	1,9965	1,985834	0	0	4	4,0277	24,9968	113,013	0,00012	-2,98E-17		
3	0,027777	0,00115	0	0,03685	0,04259204	2,1206	3	3,00006	0,7711	0	0	0	29,9991	10,197	39,9983	20,1968	0,000412	-1,25E-16		
4	1,856256	0,00817	0,012364	0	0,98651557	0,0135	3	3,00005	0,1232	1,920374	0	0	18,6422	14,899	30,975	19,8991	-6,2E-17	0		
5	0,021855	0,00494	0	0,99514	0	0,0244	1,0463	1,04634	0	0	28,33	0	31,0755	20	3,9999	19,9995				
6	0	0	2,950605	0	0	0	2,9506	2,95055	0	0	0	24,187	39,9983	20,197	39,999	11,9997				

Tabela D.14: Pesos utilizados nos termos econômicos e operacionais das funções objetivos.

Problema	Otimização Externa			Otimização Interna			
	w_1	w_2	w_3	w_1	w_2	w_3	w_4
MINLP Original	1	100	-	-	-	-	-
MINLP Reduzido	1	100	-	-	-	-	-
NLP Original	1	100	-	-	-	-	-
NLP Reduzido	1	100	-	-	-	-	-
Estimativas Iniciais	-	1000	-	-	-	-	-
Operacional 1	1	10000	1	1	1	10	10
Operacional 2	1	10000	10	1	1,00E-02	10	-
Operacional 3	1	1000	2	-	-	-	-