

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE ALAGOAS
UNIDADE ACADÊMICA CENTRO DE TECNOLOGIA
CURSO DE ENGENHARIA QUÍMICA**

CARLOS APARECIDO FLOR FILHO

**OTIMIZAÇÃO E AVALIAÇÃO ECONÔMICA E AMBIENTAL DA PRODUÇÃO DE
BIODIESEL ETÍLICO PELAS ROTAS DE HIDRO-ESTERIFICAÇÃO E
ESTERIFICAÇÃO-TRANSESTERIFICAÇÃO**

Maceió
2023

CARLOS APARECIDO FLOR FILHO

**OTIMIZAÇÃO E AVALIAÇÃO ECONÔMICA E AMBIENTAL DA PRODUÇÃO DE
BIODIESEL ETÍLICO PELAS ROTAS DE HIDRO-ESTERIFICAÇÃO E
ESTERIFICAÇÃO-TRANSESTERIFICAÇÃO**

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado
ao curso de Engenharia Química da
Universidade Federal de Alagoas como
requisito parcial para obtenção do título de
Bacharel em Engenharia Química.

Orientador: Prof. Dr. Rodolfo Junqueira
Brandão

Coorientador: Prof. Dr. Allan de Almeida
Albuquerque

Maceió
2023

Catálogo na Fonte
Universidade Federal de Alagoas
Biblioteca Central
Divisão de Tratamento Técnico

Bibliotecário: Marcelino de Carvalho Freitas Neto – CRB-4 – 1767

- F634o Flor Filho, Carlos Aparecido.
Otimização e avaliação econômica e ambiental da produção de biodiesel
etílico pelas rotas de hidro-esterificação e esterificação-transesterificação /
Carlos Aparecido Flor Filho. – 2023.
92 f. il. : figs. ; tabs. color.
- Orientador: Rodolfo Junqueira Brandão.
Co-orientador: Allan de Almeida Albuquerque.
Monografia (Trabalho de Conclusão de Curso em Engenharia Química).
Universidade Federal de Alagoas. Centro de Tecnologia. Maceió, 2023.
- Bibliografia: f. 57-59.
Apêndices: f. 60-92.
1. Biodiesel. 2. Impacto ambiental - Avaliação. 3. Impacto econômico -
Avaliação. 4. Processos industriais - Otimização. I. Título.

CDU:662.754

AGRADECIMENTOS

A Deus por me dar, diariamente, sabedoria e força para que eu lute em prol dos meus objetivos.

Aos meus pais Cicera Sena e Carlos Aparecido (*in memoriam*), por me incentivarem desde cedo aos estudos e me proporcionarem excelentes condições para a conclusão desse curso.

Aos meus tios e familiares que me deram bons conselhos e compartilharam comigo momentos durante o andamento dessa formação

Aos meus amigos de graduação, sobretudo à turma de Engenharia Química 2018.1, pelos conhecimentos compartilhados e pelos obstáculos vencidos em conjunto.

Aos meus orientadores de Trabalho de Conclusão de Curso (TCC) e de pesquisas científicas Dr. Rodolfo Brandão e Dr. Allan Albuquerque, por todo o incentivo, suporte e conhecimento fornecido ao longo dessa graduação.

Ao laboratório FlowLab, por me acolher durante boa parte do curso e me proporcionar excelentes condições para o desenvolvimento de pesquisas científicas e do TCC.

A professora da disciplina de Introdução à Computação Luciana Vieira, por ter me permitido ser monitor e aprimorar meus conhecimentos em programação.

Ao Programa Especial de Capacitação Discente (PEC) e ao Centro Acadêmico de Engenharia Química (CAEQ), nos quais pude me desenvolver quanto a habilidades de trabalho em equipe, proatividade e liderança.

A empresa TIMAC Agro e todos os seus colaboradores, na qual pude estagiar, aprender novos conceitos e aplicar os conhecimentos adquiridos na graduação no âmbito prático.

Ao curso de Engenharia Química e a Universidade Federal de Alagoas por tornarem possível essa formação acadêmica.

A todos que vivenciaram comigo essa grande jornada.

RESUMO

Tendo em vista a crise do petróleo e a necessidade de se obter combustíveis com fontes renováveis, sancionou-se a Lei nº. 11.097/05 contida no Programa Nacional de Produção e Uso do Biodiesel (PNPB), a qual fomentou a produção nacional deste biocombustível. O biodiesel é caracterizado por ter em sua composição, de forma majoritária, ésteres metílicos e/ou etílicos, sendo sua produção realizada por rota etílica ou metílica. A rota metílica é a mais utilizada, visto que a recuperação do álcool é facilitada. Entretanto, a rota etílica tem sido amplamente estudada a fim de melhorar sua implementação, o que surge do grande potencial brasileiro na produção de etanol. Em relação aos processos produtivos, a esterificação-transesterificação (E-T) e a hidro-esterificação (H-E) são os mais empregados. A transesterificação consiste na conversão de triácilgliceróis (TAGs) em ésteres e como os óleos e gorduras residuais (OGRs) possuem um teor de ácidos graxos livres (AGLs), esse processo é precedido por uma esterificação (processo E-T), a qual converte os AGLs em ésteres. Já a hidro-esterificação compreende uma etapa inicial de hidrólise dos TAGs em AGLs e uma posterior esterificação dos AGLs em ésteres. Devido à crescente preocupação relacionada aos impactos ambientais e aos custos de produção, é imprescindível a realização da análise ambiental e econômica do processo, levando em consideração as variáveis de operação e de utilidades da planta química. Nesse contexto, o presente trabalho teve como objetivo otimizar os processos de produção de biodiesel etílico de H-E e E-T a partir de OGRs, levando em conta indicadores de viabilidade ambiental e econômica. Os processos foram simulados no software Aspen e seus dados serão otimizados utilizando a técnica das Redes Neurais Artificiais implementadas em linguagem Python e a aplicação da função de desejabilidade nos mesmos. Mediante a elaboração desse estudo, constatou-se que o processo de hidro-esterificação se demonstrou mais promissor para a rota etílica estudada, dado que obteve os menores indicadores econômicos e de emissão de dióxido de carbono, apesar de ambos os processos apresentarem produtividades equivalentes.

Palavras-Chave: Ambiental, Biodiesel, Econômico, Otimização.

LISTA DE SÍMBOLOS

y_j	Saída calculada pelo neurônio j
FAT	Função de ativação do modelo
n	Número de neurônios de entrada
y_i	Saída calculada pelo neurônio i
w_{ji}	Peso sináptico entre o neurônio j e o neurônio i
b_j	<i>Bias</i> , peso constante atribuído ao neurônio j
p	Número da iteração
$\Delta w(p)_i$	Vetor de correção de w_{ji} na iteração p
C_{TDC}	Capital Total Depreciável
D	Depreciação
C	Custo Total de Produção
S	Total de vendas
$\dot{m}_A$	Vazão mássica de um dado elemento A
$\frac{dm_A}{dt}$	Taxa de variação temporal de $\dot{m}_A$
T	Tempo
$\frac{dE}{dt}$	Taxa de variação de energia no sistema ao decorrer do tempo
Q	Quantidade de calor absorvida
Δh_A	Variação de entalpia de um dado elemento A
d_i	Desejabilidades individuais
y	Variável analisada
y_{min}	Valor mínimo da variável y
$y_{máx}$	Valor máximo da variável y
D_g	Desejabilidade global
nv	Número de variáveis

F_{PR}	Taxa de produção do reator
P_y	Produção anual estimada
C_M	Módulo de custos para o reator
F_{MR}	Fator do material para reatores
p_{proj}	Pressão de projeto do reator
C_{IT}	Módulo de investimento total do reator
MS_{index}	Fator de índice de custos
F_{PI}	Fator do tipo de processo
F_{LG}	Taxa de fluxo de alimentação na coluna de destilação
L	Vazão mássica de alimentação na fase líquida
G	Vazão mássica de alimentação na fase vapor
ρ_L	Densidade da alimentação na fase líquida
ρ_G	Densidade da alimentação na fase vapor
C_{SB}	Parâmetro ligado à velocidade de escoamento de fluido na coluna de destilação
F_{ST}	Fator de tensão superficial
T_S	Tensão superficial da fase líquida da alimentação
C_p	Parâmetro de capacidade da coluna de destilação
F_F	Fator espumante
F_{HA}	Fator de área de orifício das placas de uma coluna de destilação
U_f	Velocidade de inundação
A_d	Área descendente da coluna de destilação
A_T	Área total da torre de destilação
D_I	Diâmetro interno da coluna de destilação
P_{op}	Pressão de operação da torre de destilação
P_d	Pressão de projeto da coluna de destilação
t_p	Espessura da parede da torre de destilação

S_p	Máximo permitido de tensão do material do casco da coluna de destilação
E	Eficiência de soldagem
t_s	Espessura adicional da torre de destilação
W	Peso da coluna de destilação
d_L	Altura tangente-tangente da torre de destilação
ρ	Densidade do material no qual a coluna de destilação foi fabricada
C_V	Custo de aquisição da coluna de destilação
F_M	Fator de ajuste do material da torre de destilação
C_{PL}	Custo de plataformas e escadarias para colunas de destilação
C_{EST}	Custo de estágios
C_{COL}	Custo total da coluna de destilação
CE_{INDEX}	Fator atribuído ao cálculo de custos de equipamento ligado à mão de obra e à materiais para fabricá-lo, entregá-lo e instalá-lo
N_E	Número de estágios
A_{MIN}	Área mínima para fluxo
F_{RT}	Fluxo de alimentação total no extrator (material + solvente)
$R_{MÁX}$	Rendimento máximo desejado no extrator
A_{STR}	Área real da secção transversal de fluxo do extrator
D_{EXT}	Diâmetro do extrator
S_F	Fator de tamanho do extrator
H	Distância total tangente-tangente do extrator
C_{EXT}	Custo total do extrator
C_B	Base de custos de trocador de calor
F_P	Fator de pressão do trocador de calor
P	Pressão de operação
C_{HE}	Custo de aquisição do trocador de calor
C_{util}	Custo de utilidades

C_{inst}	Custo total instalado
C_{resid}	Custo de tratamento de resíduos
T	Temperatura de operação
RR	Razão de refluxo
FS	Estágio de alimentação
D/F	Razão entre vazão de destilado e de alimentação
NRX	Número de estágios reacionais

LISTA DE ABREVIações

PNPB	Programa Nacional de Produção e Uso do Biodiesel
E-T	Processo de esterificação-transesterificação
H-E	Processo de hidro-esterificação
FFA AGL	Ácidos graxos livres
TAG	Trioleína Triáclgliceróis
OGR	Óleos e gorduras residuais
CDC	Coluna de destilação catalítica
RNA	Redes neurais artificiais
<i>FAT</i>	Função de ativação do modelo
GEE	Gás de efeito estufa
ANP	Agência Nacional de Petróleo
NRTL	Modelo Termodinâmico <i>Non-Random Two-Liquid</i>
VLE ELV	Equilíbrio Líquido-vapor
LLE ELL	Equilíbrio Líquido-líquido
VLLE ELLV	Equilíbrio Líquido-líquido-vapor
UNIFAC	Modelo Termodinâmico <i>Universal Functional-group Activity Coefficients</i>
UNIQUAC	Modelo Termodinâmico <i>Universal Quase Chemical</i>
MCP	Modelo de RNA neurônio McCulloch-Pitts
MLP	Modelo de RNA de Percéptrons de Múltiplas Camadas
ReLU	Função de ativação <i>Rectified Linear Unit</i>
CTC	Custo total de capital
COP	Custo operacional
TAC	Custo total anualizado

PBP	Período de payback
API	Interface de Programação de Aplicações
R-1	Reator tubular
H-2	Trocador de calor integrado ao bloco de hidrólise
EXT-1	Extrator líquido-líquido
COL-2	Coluna de destilação do biodiesel

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO.....	4
2 OBJETIVOS.....	6
2.1 Geral	6
2.2 Específicos.....	6
3 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	7
3.1 O biodiesel.....	7
3.2 Rotas de produção	8
3.3 Processos de produção.....	8
3.3.1 O processo de hidro-esterificação.....	8
3.3.2 O processo de esterificação-transesterificação.....	9
3.4 Coluna de destilação catalítica	9
3.5 Modelos Termodinâmicos	10
3.5.1 <i>Non-random two-liquid</i> (NRTL).....	10
3.5.2 <i>Universal Functional-group Activity Coefficients</i> (UNIFAC).....	10
3.6 Simulador Aspen Plus	11
3.7 Linguagem Python.....	11
3.8 Redes Neurais Artificiais.....	11
3.9 Função de desejabilidade.....	13
3.10 Cálculos de custos de aquisição de equipamentos industriais	14
3.10.1 Reatores tubulares.....	14
3.10.2 Colunas de destilação.....	15
3.10.3 Extratores líquido-líquido.....	19
3.10.4 Trocadores de calor.....	20
3.11 Análise ambiental	21
3.12 Métricas de avaliação econômica	22
3.12.1 Custo total de capital (CTC).....	22

3.12.2 Custo operacional (COP).....	22
3.12.3 Custo total anualizado (TAC).....	22
3.12.4 Período de <i>payback</i> (PBP).....	23
4 METODOLOGIA.....	24
4.1 Simulação do processo de hidro-esterificação.....	24
4.2 Simulação do processo de esterificação-transesterificação	24
4.3 Otimização e avaliação econômica e ambiental da hidro-esterificação	25
4.4 Otimização e avaliação econômica e ambiental da esterificação-transesterificação	26
4.5 Análise comparativa entre os processos	27
5 RESULTADOS	28
5.1 Hidro-esterificação	28
5.1.1 Otimização do bloco de hidrólise.....	29
5.1.2 Otimização do bloco de esterificação.....	31
5.1.3 Otimização do bloco de extração.....	32
5.1.4 Otimização do bloco de destilação de biodiesel.....	34
5.1.5 Balanço global: Processo inicial x Processo otimizado.....	36
5.2 Esterificação-transesterificação	40
5.2.1 Otimização do bloco de esterificação	42
5.2.2 Otimização do bloco de transesterificação	44
5.2.3 Otimização do bloco de extração	46
5.2.4 Otimização do bloco de destilação de biodiesel	48
5.2.5 Balanço global: Processo inicial x Processo otimizado	50
5.3 Análise comparativa dos processos otimizados	54
6 CONCLUSÃO.....	56
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	57
APÊNDICE A – Algoritmo de otimização do bloco de hidrólise.....	60
APÊNDICE B – Algoritmo de otimização do bloco de esterificação	66
APÊNDICE C – Algoritmo de otimização do bloco de extração	73

APÊNDICE D – Algoritmo de otimização do bloco de purificação de biodiesel	78
APÊNDICE E – Algoritmo de otimização do bloco de transesterificação.....	86

1 INTRODUÇÃO

Tendo em vista os elevados custos relacionados aos óleos vegetais e ao álcool de cadeia curta em excesso, a produção de biodiesel por diferentes rotas tem sido alvo de estudos e discussões (ALBUQUERQUE, *et al.*, 2021a; JIANG, *et al.*, 2013, VELIČKOVIĆ, *et al.*, 2016). Nesse sentido, destacam-se os processos de esterificação-transesterificação e hidro-esterificação aplicados a matérias-primas de altos teores de ácidos graxos livres (AGLs) e de baixo custo, como os óleos e gorduras residuais (OGRs) (FLOR FILHO; BARBOSA; ALBUQUERQUE, 2021; ALBUQUERQUE, *et al.*, 2018).

O processo de esterificação-transesterificação é o mais comumente utilizado para a produção de biodiesel no âmbito industrial, pois reduz a viscosidade dos óleos no processo, facilitando a produção de ésteres. Entretanto, o processo prévio de esterificação requer um alto volume de álcool de cadeia curta, dado que esse excesso gera um deslocamento dos OGRs para a fase polar, onde ocorre a reação (MA; HANNA, 1999).

Por esse motivo, diversos estudos acerca de processos alternativos de produção de biodiesel, que proporcionassem um menor consumo de álcool, têm sido propostos (ALBUQUERQUE, *et al.*, 2021b, FLOR FILHO; BARBOSA; ALBUQUERQUE, 2021; MACHADO, *et al.*, 2016). Neste contexto, surge o processo de hidro-esterificação, o qual é composto por uma etapa de hidrólise dos triacilgliceróis (TAGs) seguida de uma etapa de esterificação dos AGLs. Portanto, o pré-tratamento realizado durante a etapa de hidrólise possibilita a redução de consumo de etanol ou metanol na etapa de esterificação, reduzindo os custos com o álcool de cadeia curta no processo (FLOR FILHO; BARBOSA; ALBUQUERQUE, 2021).

Em relação às rotas de produção, o biodiesel pode ser obtido pelas rotas metílica ou etílica. Devido ao baixo custo do metanol, à não formação de azeótropo com a água e a fácil separação das fases éster metílico/glicerol por decantação, a rota metílica é a mais empregada na indústria (CANAKCI; VAN GERPEN, 2001). Todavia, a considerável escala de produção de etanol no Brasil tem fomentado estudos para a melhor implementação da rota etílica, visto que pode baratear os custos desse processo (GRISOLI, 2011).

Por outro lado, a utilização de Colunas de Destilação Catalítica (CDC) nos processos são de grande valia, visto que possibilitam a ocorrência da reação e da separação de forma simultânea, além de que deslocam o equilíbrio da reação e, por consequência, reduzem o consumo de álcool (ALBUQUERQUE, *et al.*, 2021a).

A adoção de catalisadores ao processo proporciona maiores velocidades às reações químicas e, conseqüentemente, elevam a produtividade industrial. Esses catalisadores podem ser sólidos ou líquidos. O uso de catalisadores sólidos se torna interessante por sua fácil recuperação e reuso no processo, reduzindo custos com esse componente (FLOR FILHO; BARBOSA; ALBUQUERQUE, 2021).

Para que se possa estudar os parâmetros e as condições de cada processo de produção do biodiesel, é de grande importância o uso de simuladores numéricos. Nesse contexto, tem-se o *software* Aspen, o qual é capaz de reproduzir, por meio de modelos matemáticos e equações empíricas desenvolvidas no campo de estudo das operações unitárias, os fenômenos que acontecem em processos químicos, além de gerar dados importantes acerca deles (FERREIRA; AMORIM; OLIVEIRA, 2014).

Com a obtenção dos dados de processo, é fundamental se encontrar o ponto ótimo de operação. Para tanto, a implementação de Redes Neurais Artificiais (RNAs) se torna uma alternativa viável, as quais são capazes de processar vastos bancos de dados e encontrar modelos que os correlacionem e sejam capazes de fazer previsões a partir de outros valores de entrada (FLECK, *et al.*, 2016).

Dada a necessidade de se reduzir os impactos ambientais e os custos de produção, é de grande importância a realização da análise ambiental e econômica do processo. Para a avaliação econômica do processo, é imprescindível o estudo dos recursos operacionais, os quais são determinantes para uma gestão de custos industriais e envolvem os gastos necessários para que a planta industrial funcione plenamente no dia-a-dia, e das utilidades, as quais englobam recursos necessários para as trocas térmicas no processo e possuem custos significativos associados. Já para a avaliação ambiental, é importante reduzir a emissão de gases de efeito estufa (GEEs), sobretudo o dióxido de carbono (CO₂), tendo em vista as decisões do Protocolo de Kyoto em 1997 e os relatórios do “*Intergovernmental Panel of Climate Change*” em 2007 (ALLORA; OLIVEIRA, 2001; MACHADO; SOUZA, 2007; KOHLHEPP, 2010).

Nesse contexto, o presente trabalho tem como finalidade otimizar, por meio do implemento de redes neurais artificiais e da função de desejabilidade em dados de processo provenientes do simulador numérico *Aspen Plus*, os processos de produção de biodiesel etílico por esterificação-transesterificação e hidro-esterificação, além de analisar as viabilidades ambientais e econômicas de cada linha de produção. Com isso, almeja-se encontrar o processo otimizado com os menores impactos ambientais e econômicos e a melhor produtividade.

2 OBJETIVOS

2.1 Geral

- Otimizar, via redes neurais artificiais tipo do MLP e função de desejabilidade, a produção de biodiesel etílico pelas rotas de hidro-esterificação e esterificação-transesterificação, além de avaliar seus impactos econômicos e ambientais.

2.2 Específicos

- Otimizar o processo produtivo de biodiesel etílico pela rota de hidro-esterificação, a fim de se encontrar a melhor produtividade desse combustível dentro das especificações químicas e físicas requeridas;
- Otimizar o processo produtivo de biodiesel etílico pela rota de esterificação-transesterificação, a fim de se encontrar a melhor produtividade desse combustível dentro das especificações químicas e físicas requeridas;
- Avaliar economicamente os blocos mais importantes de ambos os processos, sobretudo em relação aos custos de instalação, de operação e de utilidades;
- Avaliar ambientalmente os processos, sobretudo em relação às emissões de CO₂;
- Implementar os conceitos de RNAs e função de desejabilidade na avaliação e otimização de processos industriais.

3 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

3.1. O biodiesel

Em virtude da crise do petróleo vivenciada em meados de 1970, discussões sobre possíveis meios sustentáveis que proporcionassem menor dependência a esse combustível fóssil foram encorajadas. Nesse sentido, determinou-se a produção e o consumo do biodiesel pela Medida Provisória nº. 214/2004, convertida na Lei nº. 11.097/05 contida no Programa Nacional de Produção e Uso do Biodiesel (PNPB), o qual foi um marco histórico que assegurou sua produção juridicamente e fomentou à indústria nacional (KOHLHEPP, 2010).

O biodiesel é produzido a partir de fontes renováveis e sua composição baseia-se na elevada concentração de alquil ésteres de ácidos graxos provenientes de reações químicas como a esterificação e a transesterificação, as quais transformam óleos e gorduras em ésteres metílicos ou etílicos, componentes majoritários do biodiesel (DELATORRE, 2011).

As matérias-primas utilizadas para produzir o biodiesel variam de acordo com a disponibilidade da região de produção, a viabilidade econômica e as características técnicas desejadas. No contexto brasileiro, as principais matérias-primas utilizadas são a soja, o girassol, o dendê, o algodão, o milho, o pinhão-manso e o sebo bovino. A soja tem um maior destaque no cenário brasileiro, visto que sua elevada produtividade e a infraestrutura existente para seu cultivo e processamento a torna uma escolha estratégica para o país (RAMOS, *et al.*, 2016).

Ademais, outro fator importante na escolha da matéria-prima do biodiesel é o impacto socioambiental, avaliando parâmetros como emissão de GEEs, uso de recursos naturais e reflexo na biodiversidade e no desenvolvimento social (DELATORRE, 2011).

Tendo em vista os dados de produção de biodiesel em escala nacional (entre 2022 e 2023) fornecidos pela Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis (ANP), as regiões Sul e Centro-Oeste se destacam quanto ao volume de produção. Esse indicador reflete o alto volume de produção de soja dessas duas regiões, matéria-prima mais utilizada no país para a produção de biocombustíveis. Segundo informações da Conab, as duas regiões citadas anteriormente somaram cerca de 80% da produção nacional do grão na safra 2022/2023.

Segundo a Resolução ANP Nº 920, as especificações de qualidade de biodiesel são determinadas pelos teores mínimos e máximos de ésteres e impurezas, respectivamente, como mostrado na Tabela 1.

Tabela 1: Especificações do Biodiesel exigidas pela ANP.

Teor mín. éster (% massa)	Teor máx. água (mg/kg_{biod})	Teor máx. (% massa)		
		Glicerol	Álcool	FFA/TAG
96,50	200,00	0,02	0,20	0,25/0,20

Fonte: ANP, 2014.

3.2. Rotas de produção

Dentre as principais rotas de produção do biodiesel, a rota metílica é a mais empregada em virtude do baixo custo do metanol, da maior facilidade de sua recuperação e da separação de fases rica em éster e glicerol. Por outro lado, a rota etílica é mais desafiadora devido à formação azeotrópica entre etanol e água e a maior dificuldade na purificação do biodiesel, já que a cadeia carbônica mais longa do etanol proporciona maior solubilidade nas fases éster e glicerol, aumentando a emulsão entre as fases (MA; HANNA, 1999).

Entretanto, a rota etílica é interessante pelo fato do etanol ser proveniente de fontes ambientalmente sustentáveis, o que possibilita a redução da emissão de GEEs, além de ter um baixo grau de toxicidade quando comparado ao metanol, tendo em vista que a rota metílica gera, no processo produtivo, vapores prejudiciais saúde humana (DAMASCENO; SAMPAIO; SANTOS, 2015).

Dada a menor reatividade do etanol em relação ao metanol, a rota etílica requer maiores teores do álcool, temperaturas e tempos de reação, pontos esses de interesse de estudos para se encontrar os melhores parâmetros de produção à baixos custos (PARENTE; BRANCO, 2003).

3.3. Processos de produção

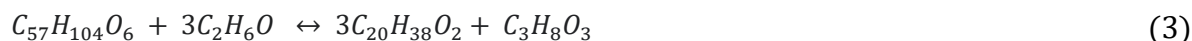
3.3.1 O processo de hidro-esterificação

A hidro-esterificação consiste em um inicial processo de hidrólise e um posterior processo de esterificação. Os TAGs, abundantes em OGRs, são alimentados ao processo de hidrólise juntamente com a água, no qual há a conversão dos TAGs em AGLs (Equação 1). Na esterificação, os AGLs formados reagem com o álcool formando os ésteres, os quais são os componentes majoritários do biodiesel (Equação 2). Após as reações, o produto final é purificado a fim de se atender suas especificações físicas e químicas. O glicerol é gerado como subproduto, proporcionando maior valor agregado ao processo produtivo (FLOR FILHO; BARBOSA; ALBUQUERQUE, 2021).



3.3.2 O processo de esterificação-transesterificação

O processo de transesterificação consiste na conversão de TAGs em ésteres, mediante o contato com álcool (Equação 3). Pelo fato dos OGRs terem em sua composição teores de TAGs e AGLs, a transesterificação é precedida por uma esterificação, já detalhada anteriormente (Equação 2). O glicerol também é subproduto desse processo (FLOR FILHO; BARBOSA; ALBUQUERQUE, 2021).



3.4 Coluna de destilação catalítica

A coluna de destilação catalítica (CDC) é utilizada em processos de destilação que ocorrem concomitantemente com reações químicas catalíticas. Ela é projetada para separar componentes líquidos com a adição de um catalisador, que acelera as reações químicas durante o processo de destilação. As CDCs são comumente utilizadas na indústria petroquímica e nos mais diversos processos de produção de combustíveis (ALBUQUERQUE, *et al.*, 2021a).

A coluna de destilação catalítica possui uma estrutura semelhante à de uma coluna de destilação convencional, que consiste em uma coluna vertical equipada com pratos ou recheios internos. No entanto, ela também inclui um sistema de distribuição de catalisador, que introduz o catalisador na corrente líquida. Durante o processo, a mistura líquida é alimentada na parte inferior da coluna e aquecida. À medida que os componentes da mistura se evaporam, eles sobem pela coluna, entrando em contato com o catalisador distribuído (SOUZA, 2011).

Com a subida da mistura na CDC, ocorre a separação das substâncias de acordo com os pontos de ebulição e a reatividade química. O catalisador utilizado na CDC depende das reações químicas e das características dos componentes da mistura (ALBUQUERQUE, *et al.*, 2020).

Matematicamente, os balanços de massa e energia para uma Coluna de Destilação Catalítica podem ser expressos, respectivamente, pelas Equações 4 e 5:

$$\frac{dm_A}{dt} = \dot{m}_{A_{entrada}} - \dot{m}_{A_{saida}} + \dot{m}_{A_{gerada}} - \dot{m}_{A_{consumida}} \quad (4)$$

$$\frac{dE}{dt} = Q_{entrada} - Q_{saida} + \sum_i \dot{m}_A \cdot \Delta h_A \quad (5)$$

onde $\frac{dm_A}{dt}$ indica a taxa de variação da vazão mássica de um dado elemento A ($\dot{m}_A$) ao decorrer de um período de tempo t, $\frac{dE}{dt}$ expressa a taxa de variação de energia no sistema ao decorrer do tempo, Q simboliza a quantidade de calor e Δh_A indica a variação de entalpia de um dado elemento A (SOUZA, 2011).

3.5 Modelos Termodinâmicos

3.5.1 *Non-random two-liquid* (NRTL)

O modelo Non-Random Two-Liquid (NRTL) representa bem os equilíbrios líquido-vapor (VLE), Líquido-Líquido (LLE) e Líquido-Líquido-Vapor (VLLE) de misturas não eletrolíticas e contendo compostos altamente polares. Comparado aos modelos de Wilson e de Van Laar, se apresenta vantajoso ao ser aplicado à sistemas que fogem significativamente da idealidade, seja em misturas binárias ou multicomponentes (RENON; PRAUSNITZ, 1968). Além disso, a equação de estado de Redlich-Kwong pode ser acoplada ao modelo NRTL a fim de se calcular os coeficientes de fugacidade em sistemas de altas pressões (FLOR FILHO; BARBOSA; ALBUQUERQUE, 2021).

3.5.2 *Universal Functional-group Activity Coefficients* (UNIFAC)

O modelo *Universal Functional-group Activity Coefficients* (UNIFAC) é uma combinação entre o modelo *Universal Quase Chemical* (UNIQUAC) com a correção de Staverman-Guggenheim. Ele pode prever de forma efetiva o equilíbrio líquido-líquido de misturas de ésteres etílicos baseado em parâmetros modificados propostos por Bessa *et al.* (2016). Entretanto, o modelo UNIFAC apresenta algumas limitações, tais como: incapacidade de diferenciar alguns isômeros, limitações de temperatura e pressão, má descrição de compostos supercríticos ou gases não condensáveis, parâmetros LLE diferentes do VLE e desconsideração dos efeitos de proximidade (SÉ, 2001).

3.6 Simulador Aspen Plus

O simulador Aspen Plus tem como objetivo reproduzir os fenômenos que ocorrem em equipamentos industriais por meio do uso de modelos matemáticos de operações unitárias. Essas simulações são importantes para se estudar as variáveis de processo e, a partir disso, evidenciar pontos de melhoria (FERREIRA; AMORIM; OLIVEIRA, 2014).

3.7 Linguagem Python

A linguagem de programação Python foi desenvolvida para ser de fácil leitura e escrita, já que possui uma sintaxe simples e clara. Ela é uma linguagem de código aberto que possui uma vasta gama de bibliotecas, que auxiliam em trabalhos como manipulações de arquivos, análises de dados e estudos estatísticos (PYTHON SOFTWARE FOUNDATION, 2023).

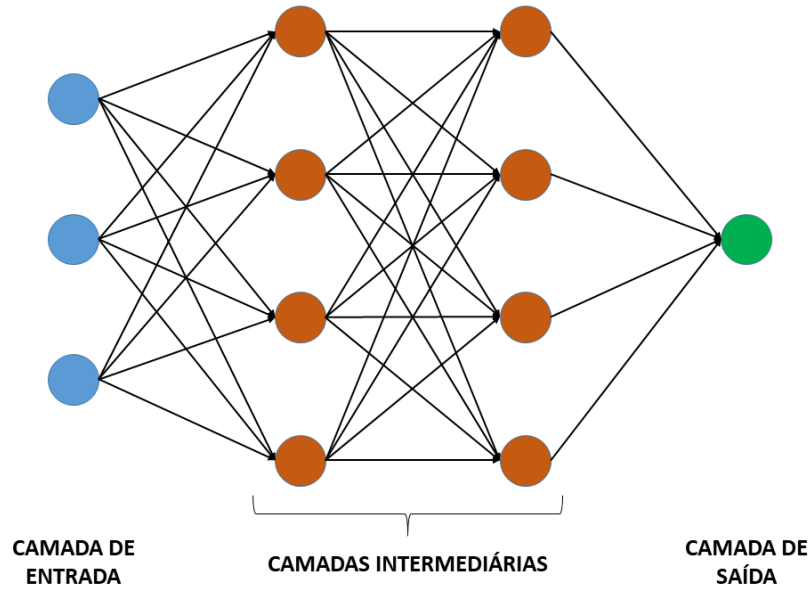
3.8 Redes Neurais Artificiais (RNAs)

As RNAs surgem da necessidade de ferramentas compatíveis com a complexidade dos processos industriais e do alto volume de dados das empresas na atualidade. Elas são projetadas para atuar de modo similar à um cérebro humano, onde unidades de processamento (“neurônios”) se interligam para gerar uma boa aprendizagem do modelo (FLECK *et al.*, 2016).

O primeiro modelo de RNAs foi criado em 1943 por Warren McCulloch e Walter Pitts, intitulado de neurônio McCulloch-Pitts (MCP). Ele é constituído por “n” entradas e um único neurônio de processamento, o qual multiplica as entradas por seus pesos e, ao final, o resultado é somado e comparado aos valores reais para averiguar a acurácia da rede (FIORIN *et al.*, 2011).

No ano de 1958, o modelo de Percéptrons de Múltiplas Camadas (MLP) foi criado por Frank Rosenblatt. Para construir o modelo MLP (Figura 1), é importante se definir inicialmente o número de variáveis de entrada, o número de camadas intermediárias e suas quantidades de neurônios, além do número de neurônios da camada de saída. Os neurônios de entrada repassam as informações alimentadas à rede para a primeira camada intermediária, a qual processa e gera uma resposta que é transmitida para as camadas seguintes, até chegar a camada de saída que gera a resposta final da rede. Nesse repasse de informações processadas entre os neurônios, os valores de resposta dessas unidades de processamento são multiplicados por pesos sinápticos que são atualizados ao final de cada processo iterativo, até que se alcance a convergência (FLECK *et al.*, 2016).

Figura 1: Esquematização de um modelo RNAs MLP.



Fonte: Autor (2023).

A principal característica das RNAs é de aprender a partir de exemplos e sua capacidade de generalizar esse aprendizado para outros dados de alimentação, obtendo uma análise eficiente por meio de um modelo não-linear (FLECK, *et al.*, 2016). O processamento em cada neurônio (y_j) é expresso pela Equação 6:

$$y_j = FAT \left(\sum_{i=1}^n (y_i w_{ji}) + b_j \right) \quad (6)$$

onde FAT expressa a função de ativação do modelo, n indica o número de neurônios de entrada, y_i se refere à saída calculada pelo neurônio i , w_{ji} simboliza o peso sináptico entre o neurônio j e o neurônio i e b_j expressa o valor do *bias*, o qual é um peso constante atribuído ao neurônio j (OSORIO; JOÃO; BITTENCOURT, 2023).

O cálculo dos pesos sinápticos em cada iteração p ($w(p)_{ji}$) é dado por processo iterativo no treino da rede neural, o qual ocorre até a convergência do modelo e é expresso pela Equação 7 (FLECK, *et al.*, 2016), onde $\Delta w(p)_i$ indica o vetor de correção de w_{ji} na iteração p .

$$w(p)_{ji} = w(p - i)_{ji} + \Delta w(p)_i \quad (7)$$

As funções de ativação de uma RNA são implementadas a fim de introduzir não-linearidade nas saídas dos neurônios (FLECK, *et al.*, 2016). As principais são as funções *Sigmoide* (ou Logística) e *Rectified Linear Unit* (ReLU). A função *Sigmoide* possui caráter probabilístico que mapeia os valores para a escala entre 0 e 1 e é modelada pela Equação 8.

$$f(x) = \frac{1}{1 + \exp(-x)} \quad (8)$$

onde $f(x)$ expressa a função de ativação para um dado processado x (HASTIE; TIBSHIRANI; FRIEDMAN; 2009).

Já a função ReLU retorna zero para valores de entrada negativos e o próprio valor de entrada para os positivos. Possui alta eficiência e evita problemas com gradientes descendentes. Matematicamente é dada pela Equação 9 (HASTIE; TIBSHIRANI; FRIEDMAN; 2009).

$$f(x) = \max(0, x) \quad (9)$$

A convergência da rede neural MLP é dada quando a função de perda (*loss function*) não apresenta variação significativa durante 10 iterações, com uma tolerância de 0,0001 (SCI-KIT-LEARN ORG, 2023).

3.9 Função de desejabilidade

A função de desejabilidade é amplamente utilizada no ramo industrial quando se deseja avaliar problemas multivariáveis e encontrar uma resposta que melhor represente essas variáveis estudadas. Ela foi proposta por Harrington em 1965 e aperfeiçoada em 1980 por Derringer e Suich e é baseada na otimização simultânea dos diversos parâmetros envolvidos no problema, na qual se tem desejabilidades individuais d_i calculadas para cada variável avaliada e, ao final, uma desejabilidade global (D_g) representada pela raiz enésima do produto das desejabilidades individuais (FERNANDES, 2016).

O cálculo da desejabilidade individual (d_i) pode ser tanto para maximizar a variável de interesse ou minimizá-la, a depender do contexto do problema a ser resolvido (MACIEL, 2013).

Matematicamente, a desejabilidade individual para maximização da variável de interesse, a desejabilidade individual para minimização da variável de interesse e a desejabilidade global são expressas, respectivamente, pelas equações 10, 11 e 12:

$$d_i (\text{maximização}) = \frac{y - y_{\min}}{y_{\max} - y_{\min}} \quad (10)$$

$$d_i (\text{minimização}) = \frac{y_{\max} - y}{y_{\max} - y_{\min}} \quad (11)$$

$$D_g = \sqrt[nv]{d_1 \times d_2 \times d_3 \times \dots \times d_{nv}} \quad (12)$$

onde y é o valor da variável analisada, $y_{\min}$ é o valor mínimo da variável y , $y_{\max}$ é o valor máximo da variável y e nv expressa o número de variáveis estudadas (MACIEL, 2013).

Os valores das desejabilidades variam de 0 a 1, no qual os mais próximos à 1 representam as melhores desejabilidades, isto é, o conjunto de parâmetros ótimos das variáveis de estudo. Desse modo, essa ferramenta é de grande aplicabilidade na otimização de problemas multivariados recorrentes em processos químicos (FERNANDES, 2016).

3.10 Cálculos de custos de aquisição de equipamentos industriais

3.10.1 Reatores tubulares

Para o cálculo de custos de reatores tubulares, é necessário, primeiramente, conhecer qual o volume mássico de produção desejado no ano. Após isso, deve-se encontrar a taxa de produção (F_{PR}) usando a regra dos seis décimos, a qual é dada matematicamente pela Equação 13:

$$F_{PR} = \left(\frac{P_y}{1 \times 10^7} \right)^{0,6} \quad (13)$$

onde P_y indica a produção anual estimada, em libras (SEIDER, *et al.*, 2017).

Em seguida, deve-se calcular o módulo de custos para o reator (C_M) (Equação 14), o qual envolve a taxa de produção (F_{PR}), o fator do material do reator (F_{MR}) e a pressão de projeto (p_{proj}) (SEIDER, *et al.*, 2017).

$$C_M = F_{PR} F_{MR} \left(\frac{p_{proj}}{100} \right)^{0,25} (\$160000) \quad (14)$$

Os fatores de alguns dos materiais utilizados na fabricação de reatores podem ser vistos na Tabela 2 (SEIDER, *et al.*, 2017).

Tabela 2 – Fatores de materiais utilizados para revestimento de reatores.

<i>Materiais</i>	<i>F_{MR}</i>
<i>Aço carbono</i>	1,0
<i>Cobre</i>	1,2
<i>Aço inoxidável</i>	2,0
<i>Liga de níquel</i>	2,5
<i>Revestimento de titânio</i>	3,0

Fonte: SEIDER, *et al.*, 2017.

Pelo fato do módulo de custos não envolver os gastos com tubulações, instrumentação e controles automáticos, torna-se necessário um cálculo de orçamento mais completo. Nesse cenário, tem-se o módulo de investimento total (C_{IT}), o qual é expresso pela Equação 15:

$$C_{IT} = F_{PI} \left(\frac{MS_{index}}{1365} \right) C_M \quad (15)$$

onde MS_{index} é o fator de índice de custos e F_{PI} representa o fator do tipo de processo que está envolvido no reator, os quais podem ser vistos na Tabela 3 (SEIDER, *et al.*, 2017).

Tabela 3 – Fatores de tipo de processo.

<i>Tipo de processo</i>	<i>F_{PI}</i>
<i>Manuseio de sólidos</i>	1,85
<i>Manuseio de sólidos e fluidos</i>	2,00
<i>Manuseio de fluidos</i>	2,15

Fonte: SEIDER, *et al.*, 2017.

3.10.2 Colunas de destilação

Para o dimensionamento de uma coluna de destilação, deve-se, inicialmente, conhecer a vazão mássica, a densidade e o peso molecular da matéria-prima alimentada, tanto da fase

líquida quanto da fase vapor, além de também ser necessário saber a tensão superficial dessa alimentação na fase líquida (SEIDER, *et al.*, 2017).

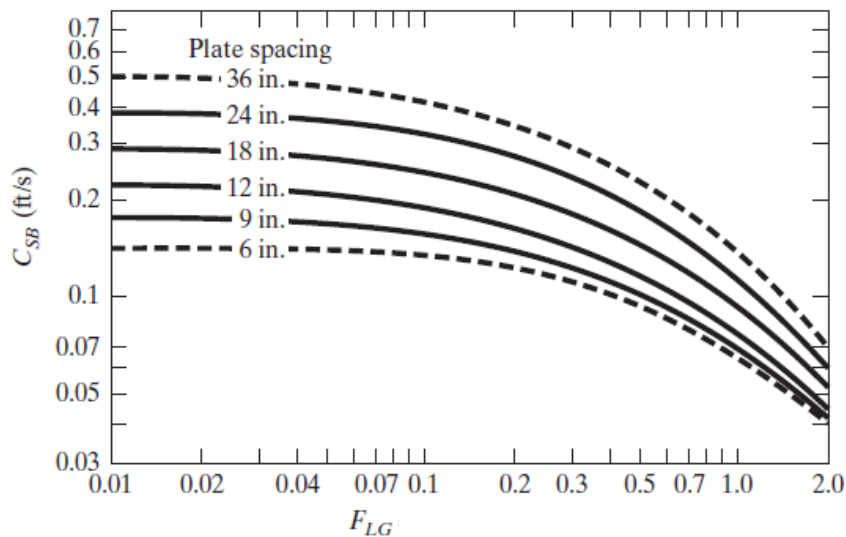
Em seguida, calcula-se a taxa de fluxo de alimentação, F_{LG} , a qual é dada pela Equação 16,

$$F_{LG} = \left(\frac{L}{G} \right) \left(\frac{\rho_G}{\rho_L} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (16)$$

onde L é a vazão mássica de alimentação na fase líquida, G é a vazão mássica de alimentação na fase vapor, ρ_L indica a densidade da alimentação na fase líquida e ρ_G expressa a densidade da alimentação na fase vapor (SEIDER, *et al.*, 2017).

A partir do valor do F_{LG} e do tamanho das bandejas, deve-se analisar o gráfico de correlação de Fair (1961) a fim de se encontrar o parâmetro C_{SB} , o qual está intimamente ligado à velocidade de escoamento do fluido dentro da coluna. O gráfico de correlação de Fair pode ser analisado na Figura 2 (SEIDER, *et al.*, 2017).

Figura 2: Correlação de Fair.



Fonte: Adaptado de SEIDER, *et al.*, 2017.

Após isso, é calculado o fator de tensão superficial (F_{ST}) via Equação 17, onde T_S é a tensão superficial da fase líquida da alimentação (SEIDER, *et al.*, 2017).

$$F_{ST} = \left(\frac{T_S}{20} \right)^{0,2} \quad (17)$$

Em seguida, calcula-se o parâmetro de capacidade (C_p) (Equação 18), o qual envolve o fator C_{SB} , o fator de tensão superficial, o fator espumante (F_F) e o fator de área de orifício das placas (F_{HA}) (SEIDER, *et al.*, 2017).

$$C_p = C_{SB} F_{ST} F_F F_{HA} \quad (18)$$

Mediante o valor do parâmetro de capacidade, é encontrada a velocidade de inundação (U_f), a qual é dada pela Equação 19 (SEIDER, *et al.*, 2017).

$$U_f = C_p \times \left(\frac{\rho_L - \rho_G}{\rho_G} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (19)$$

Outro parâmetro importante a ser calculado é a razão $\frac{A_d}{A_T}$, a qual expressa a relação entre a área descendente e a área total da secção circular da coluna. Matematicamente, essa razão é descrita pela Equação 20 (SEIDER, *et al.*, 2017).

$$\frac{A_d}{A_T} = 0,1 + \frac{(F_{LG} - 0,1)}{9} \quad (20)$$

Geralmente, assume-se uma inundação de 80% no sistema. Desse modo, o diâmetro interno da torre de destilação (D_I) é modelado pela Equação 21 abaixo (SEIDER, *et al.*, 2017).

$$D_I = \left(\frac{4 G}{(0,8 U_f) \pi \left(1 - \frac{A_d}{A_T} \right) \rho_G} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (21)$$

A pressão de operação (P_{op}) é dada pela diferença entre a pressão do topo da coluna e a pressão ambiente. Já a pressão de projeto (P_d) é descrita pela Equação 22 a seguir (SEIDER, *et al.*, 2017).

$$P_d = \exp\{0,60608 + 0,91615 [\ln(P_{op})] + 0,0015655 [\ln(P_{op})]^2\} \quad (22)$$

Em seguida, deve-se encontrar a espessura da parede (t_p) que suporte os impactos internos, a qual é dada pela Equação 23:

$$t_p = \frac{P_d D_I}{2 S_p E^{-1,2} P_d} \quad (23)$$

onde S_p representa o máximo permitido de tensão do material do casco na temperatura de projeto e E indica a fração de eficiência de soldagem. Já a espessura adicional da torre de destilação (t_s), para evitar efeitos de corrosão, é expressa pela Equação 24 (SEIDER, *et al.*, 2017).

$$t_s = \frac{1}{8} t_p \quad (24)$$

Outra variável importante de projeto que tem influência nos custos é o peso do equipamento (W), a qual é dada pela Equação 25 a seguir:

$$W = \pi (D_I + t_p + t_s) (d_L + 0,8 D_I) (t_p + t_s) \rho \quad (25)$$

onde d_L é a altura tangente-tangente da coluna e ρ é a densidade do material no qual a coluna foi fabricada (SEIDER, *et al.*, 2017).

O custo de aquisição do equipamento (C_V) é modelado pela Equação 26. F_M expressa o fator de ajuste do material do equipamento, o qual pode ser analisado na Figura 3 (SEIDER, *et al.*, 2017).

$$C_V = \exp\{7,2756 + 0,18255 \times [\ln(W)] + 0,02297 \times [\ln(W)]^2\} \quad (26)$$

Tabela 4 – Fatores de ajuste dos materiais de fabricação do equipamento.

<i>Material</i>	<i>F_M</i>
<i>Aço carbono</i>	1,0
<i>Aço de baixa liga</i>	1,2
<i>Aço inoxidável 304</i>	1,7
<i>Aço inoxidável 316</i>	2,1
<i>Carpinteiro 20CB-3</i>	3,2
<i>Níquel-200</i>	5,4
<i>Monel-400</i>	3,6
<i>Inconel-600</i>	3,9
<i>Incoloy-825</i>	3,7
<i>Titânio</i>	7,7

Fonte: SEIDER, *et al.*, 2017.

O custo adicional envolvendo plataformas e escadarias (C_{PL}) e quantidade de estágios (C_{EST}) para a coluna de destilação é descrito pela Equação 27 e 28, respectivamente (SEIDER, *et al.*, 2017).

$$C_{PL} = 300,9 \times D_I^{0,63316} \times d_L^{0,80161} \quad (27)$$

$$C_{EST} = 468 \times \exp(0,1739 \times D_I) \quad (28)$$

Desse modo, o custo total da coluna de destilação (C_{COL}) é expresso pela Equação 29:

$$C_{COL} = \left(\frac{CE_{INDEX}}{500} \right) \times (C_V + C_{PL} + C_{EST} \times N_E) \quad (29)$$

onde CE_{INDEX} é um fator atribuído ao cálculo de custos de equipamento que se remete a mão de obra e materiais para fabricá-lo, entregá-lo e instalá-lo e N_E se refere ao número de estágios da coluna (SEIDER, *et al.*, 2017).

3.10.3 Extratores líquido-líquido

A fim de se dimensionar e estimar os custos envolvidos na aquisição de um extrator líquido-líquido, deve-se, inicialmente, conhecer as vazões volumétricas de alimentação do material que sofrerá o processo de extração e do solvente do processo. Com isso, é encontrada a área mínima para fluxo (A_{MIN}), a qual é dada pela Equação 30:

$$A_{MIN} = \frac{F_{RT}}{R_{M\acute{A}X}} \quad (30)$$

onde F_{RT} é o fluxo de alimentação total (material e solvente) e $R_{M\acute{A}X}$ é o rendimento máximo desejado no extrator (SEIDER, *et al.*, 2017).

Após isso, calcula-se a área real da secção transversal de fluxo (A_{STR}) vide Equação 31, a qual considera uma transferência de 60% do valor máximo dessa área de fluxo (SEIDER, *et al.*, 2017).

$$A_{STR} = \frac{A_{MIN}}{0,6} \quad (31)$$

Já o diâmetro do extrator (D_{EXT}) é descrito matematicamente pela Equação 32 (SEIDER, *et al.*, 2017).

$$D_{EXT} = \left(\frac{4 \times A_{STR}}{\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (32)$$

O fator de tamanho (S_F) é dado pela Equação 33:

$$S_F = H \times D_{EXT}^{1,5} \quad (33)$$

onde H é a distância total tangente-tangente do equipamento. Desse modo, o custo total do extrator líquido-líquido (C_{EXT}) será dado pela Equação 34 (SEIDER, *et al.*, 2017).

$$C_{EXT} = 320 \times S_F^{0,84} \quad (34)$$

3.10.4 Trocadores de calor

A base de custos de um trocador de calor (C_B) é dada pela Equação 35, onde Q se refere à carga térmica absorvida pelo equipamento (SEIDER, *et al.*, 2017).

$$C_B = \exp\{0,32325 + 0,766 \times [\ln(Q)]\} \quad (35)$$

Nesse sentido, é necessário o cálculo do fator de pressão (F_P), o qual é expresso matematicamente pela Equação 36:

$$F_P = 0,986 - 0,0035 \times \left(\frac{P}{500}\right) + 0,0175 \times \left(\frac{P}{500}\right)^2 \quad (36)$$

onde P indica a pressão do sistema. Sendo assim, o custo de aquisição do trocador de calor (C_{HE}) é dado pela Equação 37:

$$C_{HE} = F_M \times F_P \times C_B \quad (37)$$

onde F_M é o fator de ajuste do material de revestimento do equipamento, o qual pode ser visto na Tabela 4 (SEIDER, *et al.*, 2017).

3.11 Análise ambiental

Na avaliação ambiental de processos, é fundamental analisar as emissões de GEEs, tendo em vista o Protocolo de Kyoto em 1997. Diante disso, a emissão de CO₂ tem um impacto acentuado, o que gera a necessidade de se reduzir o seu volume produzido (KOHLHEPP, 2010). Em termos de processo, os principais pontos de emissão de CO₂ ocorrem onde há reações químicas, processos de queima ou outras trocas térmicas (CAMIOTO, 2017). Gerações acentuadas desse poluente podem proporcionar penalidades consideráveis para a instituição, como multas aplicadas pelos órgãos locais de fiscalização, além de comprometer toda a fauna, flora e população existente nas proximidades. Na Agência de Proteção Ambiental dos Estados Unidos (EPA), por exemplo, as multas aplicadas em situações como essa giram em torno de 0,015US\$/kg emitido (ALBUQUERQUE, *et al.*, 2021a).

3.12 Métricas de avaliação econômica

3.12.1 Custo total de capital (CTC)

O Custo total de capital (CTC) envolve os gastos financeiros necessários para que a planta química seja instalada e opere plenamente, tanto os serviços industriais quanto os outros serviços paralelos. Nesse tópico são avaliados os custos de processos, serviços externos (manutenção, laboratório, pesquisa e desenvolvimento, etc), armazenamentos e logísticas durante o período de depreciação do equipamento. Quando o custo inclui investimentos em fornecedores terceiros, essa quantia não é considerada em uma estimativa de CTC (SEIDER; SEADER; LEWIN; WIDAGDO; 2017).

3.12.2 Custo operacional (COP)

Os COPs envolvem despesas diárias necessárias para que o processo seja mantido em funcionamento. Esses valores englobam gastos com matérias-primas, utilidades, eletricidade, folhas de pagamento de trabalhadores, manutenções periódicas, entre outros. É importante ter o conhecimento dos COPs para identificar as possíveis margens de lucro periódicas e promover o equilíbrio financeiro da empresa (SEIDER; SEADER; LEWIN; WIDAGDO; 2017).

3.12.3 Custo total anualizado (TAC)

O TAC é amplamente utilizado para estimar e comparar processos alternativos para a produção de um produto. Ele indica a soma do custo de produção anual e do retorno razoável do investimento do capital original. Desse modo, o TAC possibilita a associação entre custo de produção e retorno de investimento, o que é fundamental para equacionar o balanço financeiro de uma empresa. Matematicamente, o TAC desconsidera as receitas de vendas de produtos e é expresso pela Equação 38:

$$TAC = C_{util} + \frac{C_{inst}}{3} + C_{resid} \quad (38)$$

onde C_{util} representa o custo de utilidades, C_{inst} expressa o custo total instalado e C_{resid} indica o custo de tratamento de resíduos (ALBUQUERQUE *et al.*, 2022; SEIDER; SEADER; LEWIN; WIDAGDO; 2017).

3.12.4 Período de payback (PBP)

O PBP indica o tempo necessário para que o retorno anual de rendimento seja igual ao investimento original realizado. Ele é importante para investigar quando se terá o retorno financeiro de dado investimento e é expresso pela Equação 39:

$$PBP = \frac{C_{TDC}}{(1 - t)(S - C) + D} \quad (39)$$

onde C_{TDC} representa o capital total depreciable, t expressa a alíquota de imposto de renda, S indica o total de vendas do produto, C é o custo total de produção e D simboliza a depreciação do equipamento ou investimento realizado (SEIDER; SEADER; LEWIN; WIDAGDO; 2017).

4 METODOLOGIA

4.1. Simulação do processo de hidro-esterificação

Neste processo, foram utilizados os modelos cinéticos propostos por Machado *et al.* (2016) e Jiang *et al.* (2013) nas reações de hidrólise e esterificação, respectivamente. As variáveis cinéticas e condições operacionais aplicadas podem ser observadas na Tabela 5.

Tabela 5 – Parâmetros cinéticos e informações para as reações de hidrólise e esterificação

<i>Parâmetros\Unidade</i>	<i>Hidrólise</i>	<i>Esterificação</i>
<i>Fator pré-exponencial da reação direta reversa (s^{-1})</i>	156,90 2,42	114,14 2,67
<i>Energia de ativação da reação direta reversa (kJ/mol)</i>	40,42 40,42	24,80 23,59
<i>Catalisador sólido</i>	Nb ₂ O ₅	SCER
<i>Pressão, P (bar)</i>	56,0	3,0
<i>Temperatura, T (°C)</i>	260,0	82,0
<i>Razão Molar água/óleo ou etanol/AGLs</i>	5,7	9,0

Fonte: MACHADO *et al.*, 2016; JIANG *et al.*, 2013.

A corrente de alimentação de OGRs foi mantida constante tanto para este processo quanto para a rota de esterificação-transesterificação e teve uma composição de 3382,35 kg/h de trioleína e 596,012 kg/h de ácido oleico, sendo alimentada sob pressão e temperatura ambiente.

O modelo NRTL foi utilizado para a representação do ELV, com a equação de Redlich-Kwong nos blocos de hidrólise a fim de se calcular os coeficientes de fugacidade sob altas pressões (ALBUQUERQUE, *et al.*, 2021a). Além disso, utilizou-se o modelo UNIFAC para descrever o ELL de misturas de ésteres etílicos. Para melhor predição das composições de fases de mistura, utilizou-se os parâmetros de interação binária estudados por Bessa *et al.* (2016).

4.2. Simulação do processo de esterificação-transesterificação

Neste processo, calculou-se o ELV com o modelo NRTL, enquanto o ELL foi representado pelo modelo UNIFAC, com o implemento dos parâmetros de Bessa *et al.* (2016).

A corrente de alimentação de OGRs possuiu a mesma configuração daquela alimentada no processo descrito no tópico 4.1.

As cinéticas utilizadas na transesterificação e na esterificação foram, respectivamente, as propostas por Veličković *et al.* (2016), com o catalisador sólido óxido de cálcio (CaO), e Jiang *et al.* (2013), com a resina de troca catiônica sulfonada como catalisador. As variáveis cinéticas e operacionais implementadas neste processo podem ser analisadas na Tabela 6.

Tabela 6 – Parâmetros cinéticos e informações para as reações de transesterificação e esterificação

<i>Parâmetros\Unidade</i>	<i>Transesterificação</i>	<i>Esterificação</i>
<i>Razão Molar etanol/óleo</i>	12,00	9,00
<i>Temperatura, T (°C)</i>	75,00	82,00
<i>Energia de ativação (kJ/mol)</i>	94,00	92,25
<i>Tempo de reação (h)</i>	8,50	8,00

Fonte: VELIČKOVIĆ *et al.*, 2016; JIANG *et al.*, 2013.

4.3. Otimização e avaliação econômica e ambiental da hidro-esterificação

Para otimizar esse processo, em termos de produtividade, ambientais e econômicos, avaliou-se os quatro principais blocos: hidrólise, esterificação, extração líquido-líquido e destilação de biodiesel. Parâmetros importantes de operação (pressão e/ou temperatura de operação, vazão de alimentação de matérias-primas e catalisadores, número de tubos para reatores tubulares e número de pratos, razão de refluxo e vazão de base ou destilado para colunas de destilação) foram variados. Os resultados obtidos via análise de sensibilidade (provenientes do simulador Aspen) foram empregados em posterior otimização por meio de RNAs em uma Interface de Programação de Aplicações (API) em Python.

Quanto ao funcionamento da API, os parâmetros operacionais foram, inicialmente, tratados e utilizados para o dimensionamento dos seus respectivos equipamentos, a fim de obter seus custos associados (CTC, COP, TAC e PBP). Após isso, os dados gerados foram treinados e testados por meio de RNAs do tipo MLP e os valores preditos seguiram para a análise da desejabilidade, na qual se encontrou as variáveis capazes de otimizar o processo com o maior volume de produção e os melhores indicadores econômicos e ambientais possíveis. No Quadro 1 estão presentes informações referentes aos números de neurônios, às quantidades de simulações alimentadas e à função de ativação das redes neurais implementadas em cada bloco e no Quadro 2 constam os parâmetros de entrada e as respostas avaliadas.

Quadro 1: Informações referentes aos números de neurônios, às quantidades de simulações alimentadas e à função de ativação das redes neurais construídas na otimização do processo de hidro-esterificação.

Informação	Hidrólise	Esterificação	Extração	Destilação de biodiesel
Número de dados alimentados	11000	31900	6000	17000
Número de neurônios de processamento	8	10	8	8
Função de ativação	<i>ReLU</i>	<i>ReLU</i>	<i>ReLU</i>	<i>ReLU</i>

Fonte: Autor, 2023.

Quadro 2: Parâmetros variados e de interesse por bloco no processo de hidro-esterificação.

Bloco de hidrólise (Reator tubular)			
Variável	Valor mínimo	Valor máximo	Variáveis de interesse
Pressão de operação	45 bar	65 bar	• Conversão de TAG; • Emissão de CO₂; • Avaliação econômica.
Alimentação de água	100 kmol/h	140 kmol/h	
Nº de tubos	5	14	
Bloco de esterificação (CDC)			
Variável	Valor mínimo	Valor máximo	Variáveis de interesse
Pressão 1º estágio	2 bar	4 bar	• Conversão AGL; • Emissão de CO₂; • Avaliação econômica.
Alimentação de etanol	5500 kg/h	6100 kg/h	
Nº de pratos	18	27	
Razão de refluxo	0,4	1	
Vazão de produto de fundo	4500 kg/h	5000 kg/h	
Volume de catalisador	1000 L	2000 L	
Bloco de extração (Extrator líquido-líquido)			
Variável	Valor mínimo	Valor máximo	Variáveis de interesse
Alimentação de água	50 kg/h	100 kg/h	• Vazão de glicerol na corrente de ésteres; • Avaliação econômica.
Temperatura	30 °C	70 °C	
Bloco de destilação de biodiesel (Coluna de destilação)			
Variável	Valor mínimo	Valor máximo	Variáveis de interesse
Razão de refluxo	0,4	1	• Composição biodiesel; • Emissão de CO₂; • Avaliação econômica.
Vazão de produto de fundo	3700 kg/h	4300 kg/h	
Pressão 1º estágio	0.4 bar	1 bar	

Fonte: Adaptado de ALBUQUERQUE, *et al.*, 2020; ALBUQUERQUE, *et al.*, 2021a.

4.4. Otimização e avaliação econômica e ambiental da esterificação-transesterificação

Na otimização desse processo, também se avaliou os quatro principais blocos: esterificação, transesterificação, extração líquido-líquido e destilação de biodiesel. Os dados de operação foram variados e utilizados em uma posterior otimização em uma API em linguagem Python, semelhante ao que está detalhado na seção 4.3.

Os dados operacionais foram alimentados à uma API em linguagem Python para os processos de tratamento, dimensionamento de equipamentos, predição em RNAs e avaliação de desejabilidade (otimização), cujo mecanismo de funcionamento é similar ao discutido no tópico anterior. As informações referentes aos números de neurônios, às quantidades de simulações alimentadas e à função de ativação das redes neurais implementadas em cada bloco estão presentes no Quadro 3 e as variações de cada parâmetro e as variáveis de resposta a serem obtidas nesse processo podem ser observadas no Quadro 4.

Quadro 3: Informações referentes aos números de neurônios, às quantidades de simulações alimentadas e à função de ativação das redes neurais construídas no processo de esterificação-transesterificação

Informação	Esterificação	Transesterificação	Extração	Destilação de biodiesel
Número de dados alimentados	31900	27900	6000	17000
Número de neurônios de processamento	10	12/14	8	8
Função de ativação	<i>ReLU</i>	<i>ReLU</i>	<i>ReLU</i>	<i>ReLU</i>

Fonte: Autor, 2023.

Quadro 4: Parâmetros variados e de interesse por bloco no processo de esterificação-transesterificação.

Bloco de esterificação (CDC 1)			
Variável	Valor mínimo	Valor máximo	Variáveis de interesse
Pressão 1° estágio	0,4 bar	1,0 bar	• Conversão de AGL; • Emissão de CO₂; • Avaliação econômica.
Alimentação de etanol	4900 kg/h	5500 kg/h	
N° de pratos	15	24	
Razão de refluxo	1	2	
Vazão de destilado	3500 kg/h	4500 kg/h	
Volume de catalisador	2000 L	4000 L	
Bloco de transesterificação (CDC 2)			
Variável	Valor mínimo	Valor máximo	Variáveis de interesse
Pressão 1° estágio	0,4 bar	1,0 bar	• Conversão TAG; • Emissão de CO₂; • Avaliação econômica.
Alimentação de etanol	300 kg/h	700 kg/h	
N° de pratos	21	30	
Razão de refluxo	1	2	
Volume de catalisador	1000 L	2000 L	
Bloco de extração (Extrator líquido-líquido)			
Variável	Valor mínimo	Valor máximo	Variáveis de interesse
Alimentação de água	1000 kg/h	2000 kg/h	• Vazão de glicerol na corrente rica em éster; • Avaliação econômica.
Temperatura	50 °C	100 °C	
Bloco de destilação de biodiesel (Coluna de destilação)			
Variável	Valor mínimo	Valor máximo	Variáveis de interesse
Razão de refluxo	0,4	1,0	• Composição biodiesel; • Emissão de CO₂; • Avaliação econômica.
Vazão de destilado	10 kg/h	20 kg/h	
Pressão 1° estágio	0,1 bar	1 bar	

Fonte: Adaptado de ALBUQUERQUE, *et al.*, 2018; ALBUQUERQUE, *et al.*, 2021b.

4.5. Análise comparativa entre os processos

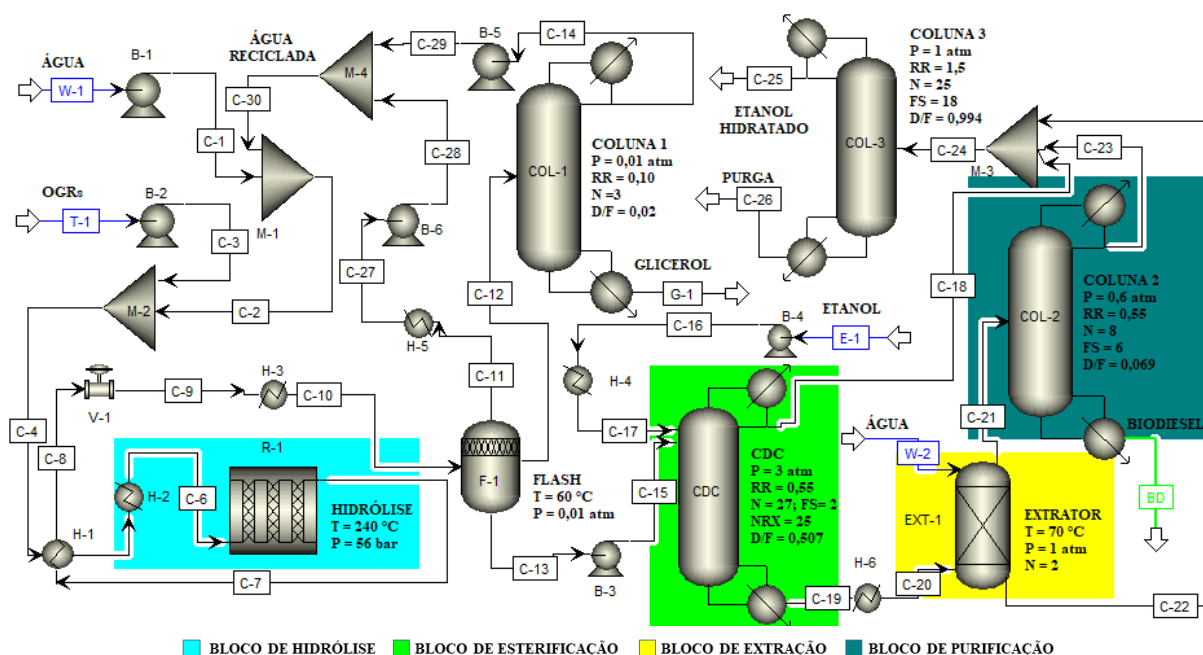
Após os estudos dos processos abordados em relação à produtividade e aos impactos ambientais e econômicos gerados por cada um destes, elaborou-se uma análise comparativa a fim de se identificar qual a linha produtiva é a mais viável nestes aspectos elencados.

5 RESULTADOS

5.1 Hidro-esterificação

O processo inicialmente simulado no Aspen pode ser visto na Figura 3, bem como as localizações dos seus blocos de hidrólise, esterificação, extração e purificação (destilação de biodiesel). Esse projeto produziu o biocombustível obedecendo as normas estabelecidas pela ANP (2014), atendendo o teor mínimo de ésteres e com quantidades de impurezas inferiores ao máximo requerido, conforme consta na Tabela 7. Entretanto, o processo ainda não havia passado por um procedimento de otimização em seus principais blocos, o que tornaria possível sua melhoria quanto aos indicadores de produtividade, econômicos e ambientais e que será alvo de estudo nos tópicos seguintes desse trabalho.

Figura 3: Processo de hidro-esterificação simulado inicialmente. (Legenda: P: Pressão de operação; T: Temperatura de operação; N_E: Número de estágios; RR: Razão de refluxo; FS: estágio de alimentação; D/F: Razão entre vazão de destilado e de alimentação; NRX: Número de estágios reacionais)



Fonte: Autor, 2023.

Tabela 7 – Composição mássica obtida e requerida do biodiesel produzido via hidro-esterificação.

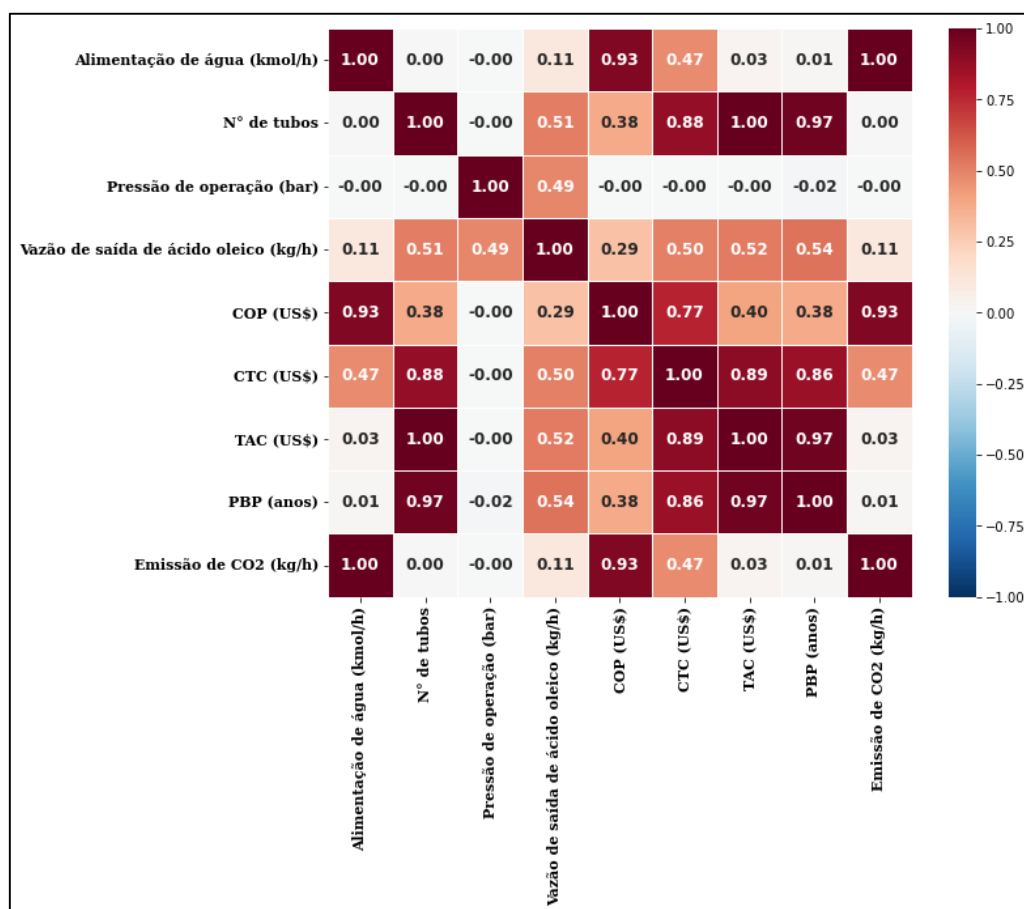
Componente	Composição obtida (%)	Composição requerida pela ANP (%)
Etil oleato	99,420	≥ 96,500
Ácido oleico	0,190	≤ 0,250
Trioleína	0,180	≤ 0,200
Etanol	0,190	≤ 0,200
Glicerol	0,010	≤ 0,020
Água	0,010	≤ 0,020

Fonte: Autor, 2023.

5.1.1 Otimização do bloco de hidrólise

As correlações entre as variáveis dos dados utilizados na otimização desse bloco podem ser vistas no mapa de calor presente na Figura 4. Nesse gráfico, observa-se que todas os parâmetros de resposta do processo têm correlação significativa com ao menos uma variável de entrada estudada, com correlações superiores à 0,3 (MUKAKA, 2012). Com isso, todas as variáveis de resposta serão utilizadas para a predição das RNAs, visto que essa adequada correlação permite que a rede encontre resultados com eficácia. No mapa de calor, valores positivos indicam o quanto dois dados parâmetros estão correlacionados diretamente, isto é, há o aumento do valor de ambos de forma simultânea. Já valores negativos neste gráfico apontam o qual duas referidas variáveis se correlacionam indiretamente, ou seja, o aumento de uma ocasiona a redução da outra (PYDATA ORG, 2023).

Figura 4: Mapa de calor de correlação entre as variáveis envolvidas no bloco de hidrólise.



Fonte: Autor, 2023.

As variáveis otimizadas por meio das RNAs, bem como os seus valores iniciais, constam na Tabela 8 abaixo.

Tabela 8 – Variáveis iniciais e otimizadas do bloco de hidrólise do processo de hidro-esterificação.

<i>Variáveis</i>	<i>Inicial</i>	<i>Otimizada</i>	<i>Diferença (%)</i>
<i>Pressão de operação (bar)</i>	56,00	65,00	
<i>Alimentação de água (kmol/h)</i>	120,00	140,00	
<i>Nº de tubos</i>	10	7	
<i>Vazão de ácido oleico (kg/h)</i>	3826,05	3829,36	+ 0,09
<i>Fração mássica de trioleína ($\times 10^{-3}$)</i>	1,18	1,16	- 1,69
<i>COP (MUS\$/ano)</i>	16,59	16,60	+ 0,06
<i>CTC (MUS\$)</i>	199,00	199,00	≈ 0
<i>TAC(MUS\$/ano)</i>	0,07	0,06	- 14,29
<i>PBP (anos)</i>	3,75	3,75	≈ 0
<i>Emissão de CO₂ (kg/h)</i>	4,32	4,72	+ 9,24

Fonte: Autor, 2023.

Nota-se que houve diferenças discretas em relação às variáveis econômicas COP e CTC. O aumento de consumo de água no processo, da pressão de operação e da alimentação de água tenderam a elevar esses indicadores, tendo em vista a necessidade de maior espessura da parede do reator tubular para suportar essa pressão interna. Entretanto, a redução do número de tubos proporcionou um decréscimo desse gasto que seria elevado, dado que promoveu uma mudança significativa no custo do equipamento, equilibrando os parâmetros econômicos em questão e resultando nessas diferenças modestas de custo de capital e operacional entre o bloco inicial e otimizado.

O TAC foi a variável de resposta cuja variação foi a mais relevante na otimização deste bloco, o que é decorrente do fato deste parâmetro sofrer maior impacto do custo de equipamentos e pouca influência do consumo de matéria-prima, estando diretamente atrelado ao número de tubos para os reatores tubulares. Desse modo, a redução de tubos no reator foi crucial para a queda desse indicador econômico.

Em relação à vazão de ácido oleico, o processo otimizado também promoveu uma pequena diferença quando comparado ao processo inicial, o que é justificável pelo fato da trioleína já ter sido praticamente consumida em sua totalidade, dada as baixas frações mássicas da mesma tanto no projeto inicial quanto na otimização.

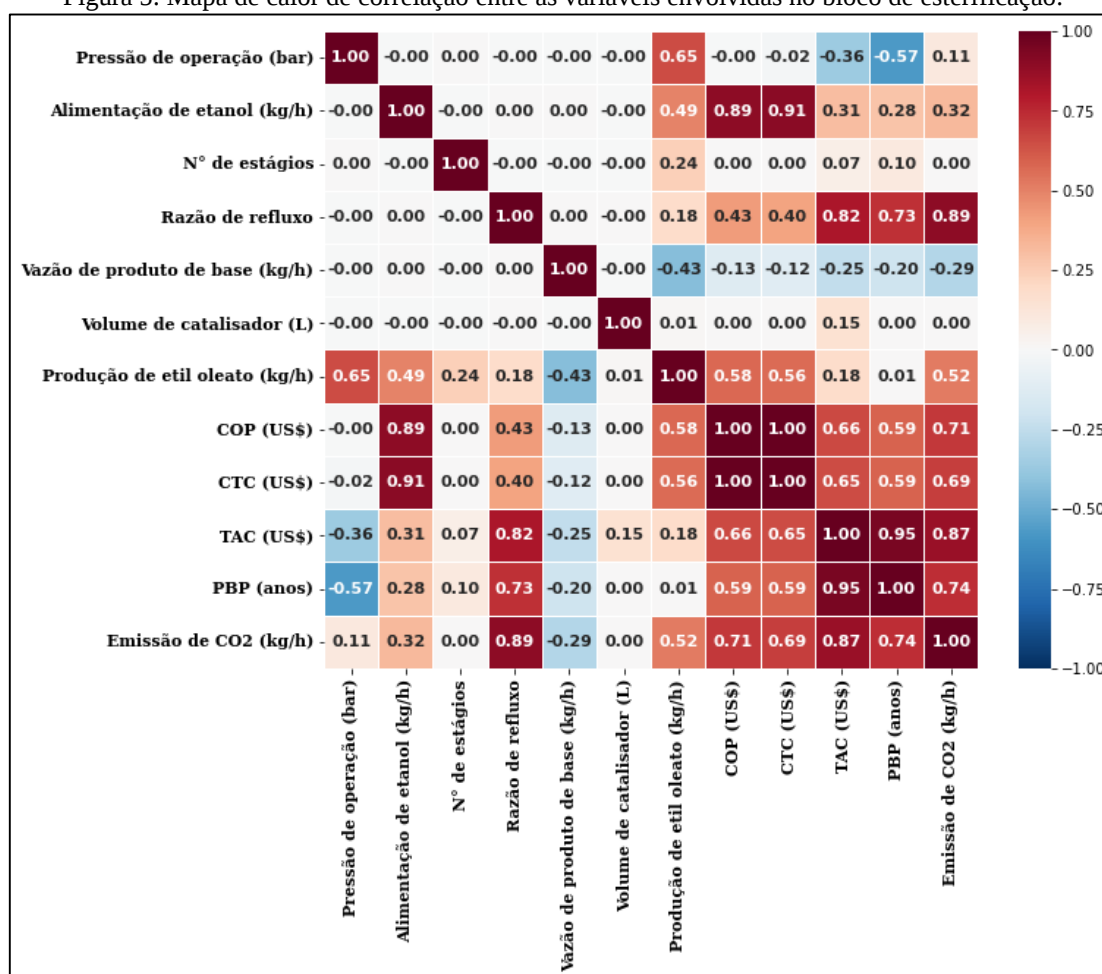
Em relação ao contexto ambiental, observou-se um aumento da emissão de dióxido de carbono, o que é justificável dado o aumento da pressão de operação do reator e, por consequência, a necessidade de um maior consumo de utilidades pelo trocador de calor desse bloco. Apesar disso, é importante se comparar esses valores de emissão de CO₂ da hidrólise com os dos demais blocos desse processo para se avaliar a magnitude desse valor.

Desse modo, constata-se que, apesar do sensível aumento da emissão de CO₂, o projeto otimizado da hidrólise obteve importantes ganhos econômicos, sobretudo no TAC e no PBP.

5.1.2 Otimização do bloco de esterificação

As correlações dos parâmetros utilizados na otimização da esterificação estão presentes no mapa de calor da Figura 5. Nele observou-se que, de modo similar ao que ocorreu no bloco anterior, todas as variáveis de resposta do processo tiveram correlação significativa com pelo menos uma das variáveis de entrada analisadas, com correlações maiores que 0,3 e/ou menores que -0,3 (MUKAKA, 2012). Em relação aos parâmetros de entrada, notou-se que o número de estágios e o volume de catalisador não tiveram impacto relevante nos resultados, o que foi justificável pelo fato da reação e do orçamento do equipamento dimensionado não terem dependência significativa com as mudanças da quantidade de pratos da coluna avaliadas, além de que a reação ocorreu adequadamente na faixa de volumes de catalisadores estudada. Desse modo, a variação da quantidade de pratos e de catalisador foram retiradas do modelo preditivo.

Figura 5: Mapa de calor de correlação entre as variáveis envolvidas no bloco de esterificação.



Fonte: Autor, 2023.

Os parâmetros de projeto otimizados pelas RNAs, bem como os valores iniciais dos mesmos, podem ser observados na Tabela 9.

Tabela 9 – Variáveis iniciais e otimizadas do bloco de esterificação do processo de hidro-esterificação.

<i>Variáveis</i>	<i>Inicial</i>	<i>Otimizada</i>	<i>Diferença (%)</i>
<i>Pressão de operação (bar)</i>	3,00	4,00	
<i>Alimentação de etanol (kg/h)</i>	5.800,44	5.500,00	
<i>Razão de refluxo</i>	0,55	0,40	
<i>Vazão de produto de base (kg/h)</i>	4.763,16	4.625,00	
<i>Vazão de etil oleato (kg/h)</i>	3.936,56	4.194,01	+ 6,54
<i>COP (MUS\$/ano)</i>	36,52	34,36	- 5,91
<i>CTC (MUS\$)</i>	430,00	407,00	- 7,37
<i>TAC(MUS\$/ano)</i>	3,60	1,52	- 57,73
<i>PBP (anos)</i>	5,64	5,50	- 2,40
<i>Emissão de CO₂ (kg/h)</i>	536,94	515,59	- 0,56

Fonte: Autor, 2023.

Observou-se um aumento de produtividade de 6,54% no projeto otimizado, o que é justificável pela elevação da pressão de operação da coluna reativa, a qual possibilitou uma maior disponibilidade do etanol na fase líquida no meio e, por consequência, favoreceu a ocorrência da reação química.

Em relação aos indicadores econômicos, notou-se reduções significativas de custos em todos os indicadores, sobretudo em relação ao TAC. Esses ganhos refletem tanto a redução da razão de refluxo, a qual culmina em um menor retorno de líquido para a coluna e uma consequente diminuição do diâmetro do equipamento, quanto a menor vazão de etanol alimentado, que também contribui para a redução do dimensionamento da coluna, além de gerar um corte de gastos com essa matéria-prima.

Outro ganho, porém modesto, do processo otimizado deste bloco foi a redução da taxa de emissão de dióxido de carbono, fato esse influenciado pela menor da razão de refluxo implementada. A mudança dessa variável de projeto proporcionou que menores quantidades de fluidos passassem pelo refeedor, exigindo menos energia para a evaporação. Com isso, há um menor consumo de utilidade industrial e, consequentemente, uma redução na geração de CO₂.

Desse modo, o bloco otimizado de esterificação proporcionou importantes ganhos econômicos, ambientais e de produtividade quando comparado à simulação inicial.

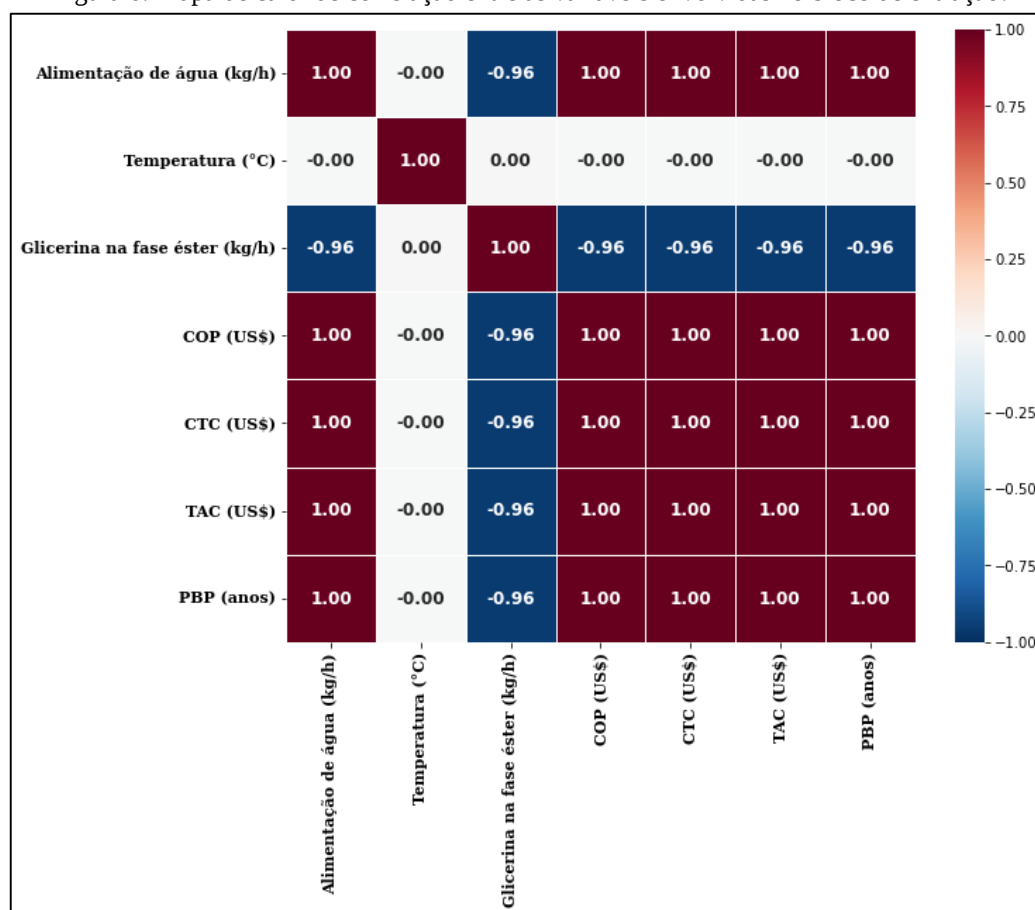
5.1.3 Otimização do bloco de extração

As correlações dos parâmetros utilizados para a otimização do bloco de extração constam no mapa de calor presente na Figura 6. A partir dele, pôde-se observar que todas as

variáveis de resposta do processo elencadas tiveram correlação expressiva apenas com a alimentação de água, apresentando correlações superiores à 0,3 e inferiores à -0,3 (MUKAKA, 2012). A não-correlação da variação da temperatura com o andamento do processo foram ocasionada pela solubilidade se manter constante na faixa operacional estudada. Desse modo, todos os parâmetros de resposta abordados e a vazão de água inserida foram utilizados na predição, visto que essa adequada correlação promoveram resultados satisfatórios.

Não foi incluída a otimização da emissão de dióxido de carbono neste bloco pelo fato do mesmo não necessitar do uso de utilidades industriais de aquecimento para o seu pleno funcionamento, culminando na não geração desse poluente.

Figura 6: Mapa de calor de correlação entre as variáveis envolvidas no bloco de extração.



Fonte: Autor, 2023.

Os parâmetros de projeto otimizados pelas RNAs, bem como os seus valores iniciais, podem ser observados na Tabela 10.

Tabela 10 – Variáveis iniciais e otimizadas do bloco de extração do processo de hidro-esterificação.

<i>Variáveis</i>	<i>Inicial</i>	<i>Otimizada</i>	<i>Diferença (%)</i>
<i>Alimentação de água (kg/h)</i>	70,00	67,08	
<i>Vazão de glicerol na fase éster (kg/h)</i>	0,45	0,37	- 17,88
<i>COP (MUS\$/ano)</i>	≈ 0	≈ 0	≈ 0
<i>CTC (MUS\$)</i>	0,02	0,02	0
<i>TAC (MUS\$/ano)</i>	≈ 0	≈ 0	≈ 0
<i>PBP (anos)</i>	≈ 0	≈ 0	≈ 0

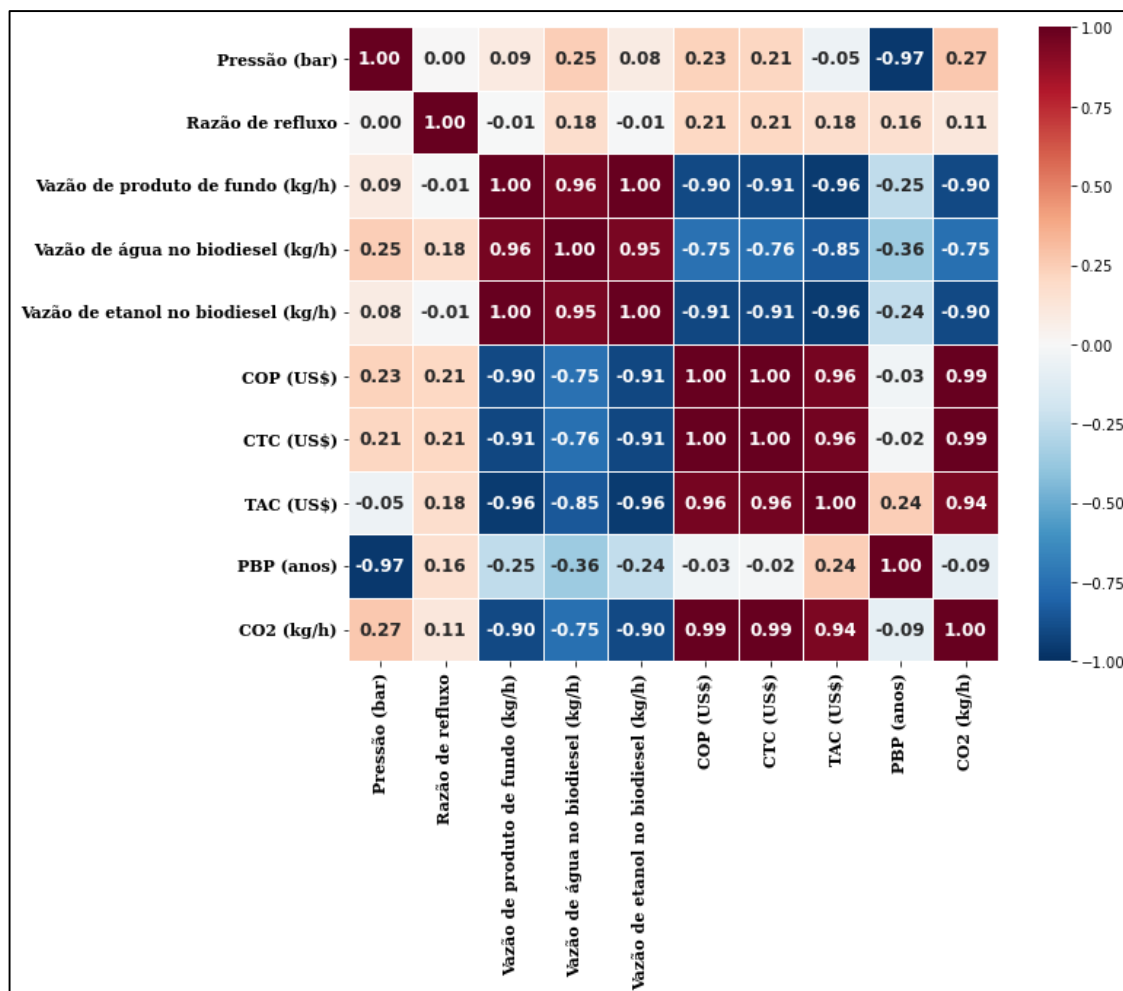
Fonte: Autor, 2023.

Em relação aos indicadores econômicos avaliados, notou-se mudanças discretas para COP, CTC, TAC e PBP. Já ao diz respeito à eficiência de extração, notou-se um decréscimo percentual significativo entre a massa residual de glicerol presente na corrente rica em éster. Entretanto, como volume de entrada de glicerina a ser extraído foi de cerca 23,31 kg/h, a diferença obtida de 0,08 kg/h torna-se praticamente irrelevante (menos de 0,5% de variação em relação ao todo). Essas mudanças modestas entre o bloco inicial e o otimizado refletem as poucas alterações entre os modelos quanto aos parâmetros de entrada, que foi a pequena redução na alimentação do solvente. Desse modo, pode-se afirmar que a extração simulada inicialmente possui variáveis de projeto muito próximas ao do modelo ótimo.

5.1.4 Otimização do bloco de destilação de biodiesel

As correlações entre as variáveis utilizadas na otimização do bloco de destilação de biodiesel estão presentes no mapa de calor da Figura 7. Nesse gráfico, constatou-se que todas as variáveis de resposta avaliadas tiveram correlações satisfatórias com ao menos uma variável de entrada estudada, com correlações maiores que 0,3 e/ou menores que -0,3 (MUKAKA, 2012). Em relação aos parâmetros de entrada, notou-se que a razão de refluxo não teve impacto significativo nos resultados, o que já era esperado visto que sua maior contribuição foi na purificação do produto de topo e que as mudanças de seus custos associados foram irrelevantes avaliando-se o equipamento de forma global. Desse modo, tal variável de projeto foi retirada da análise preditiva.

Figura 7: Mapa de calor de correlação entre as variáveis envolvidas no bloco de destilação de biodiesel.



Fonte: Autor, 2023.

As variáveis otimizadas pelas RNAs para a purificação, bem como os valores do projeto inicial, podem ser analisadas na Tabela 11. Como esse bloco operacional teve o objetivo de minimizar os teores de água e etanol presentes no biodiesel, apenas esses componentes foram avaliados nos modelos preditivos.

Tabela 11 – Variáveis iniciais e otimizadas do bloco de purificação do processo de hidro-esterificação.

Variáveis	Inicial	Otimizada	Diferença (%)
Pressão de operação (bar)	0,60	0,57	
Vazão de produto de fundo Biodiesel (kg/h)	4215,00	4217,95	
Vazão de água na corrente de biodiesel (kg/h)	0,15	0,09	- 39,92
Vazão de etanol na corrente de biodiesel (kg/h)	7,33	7,90	+ 7,90
COP (MUS\$/ano)	0,68	0,57	- 16,18
CTC (MUS\$)	8,32	6,90	- 17,10
TAC(MUS\$/ano)	0,19	0,16	- 15,79
PBP (anos)	0,24	0,20	- 16,72
Emissão de CO ₂ (kg/h)	78,62	68,53	- 12,84

Fonte: Autor, 2023.

Observou-se, no modelo otimizado, um aumento percentual acentuado de água na corrente de biodiesel. Entretanto, quando comparada a magnitude dessa diferença de vazão desse componente (entre o projeto inicial e o otimizado) com o total de biodiesel produzido, o ganho com esse item torna-se irrelevante.

Também foi constatada uma elevação no teor de etanol na composição do biodiesel no projeto otimizado, o que já era esperado tendo em vista o aumento da vazão do produto de fundo, o que proporcionou um leve acréscimo de impurezas ao biocombustível. Entretanto, apesar dessa variação, o biodiesel produzido atendeu as especificações da ANP (2014), como pode ser visto na Tabela 12.

Tabela 12 – Composição mássica obtida e requerida do biodiesel produzido pelo processo de hidro-esterificação otimizado.

<i>Componente</i>	<i>Composição obtida (%)</i>	<i>Composição requerida pela ANP (%)</i>
<i>Etil oleato</i>	99,43	$\geq 96,50$
<i>Ácido oleico</i>	0,19	$\leq 0,25$
<i>Trioleína</i>	0,18	$\leq 0,20$
<i>Etanol</i>	0,19	$\leq 0,20$
<i>Glicerol</i>	0,01	$\leq 0,02$
<i>Água</i>	0,01	$\leq 0,02$

Fonte: Autor, 2023.

Em relação aos indicadores econômicos, notou-se reduções percentuais significativas de custos, fato esse que teve forte influência do decréscimo do teor de glicerina proveniente do bloco anterior, componente esse que possui um ponto de ebulição relativamente alto (290 °C). Logo, a baixa presença desse composto químico reduz a temperatura necessária para vaporizar os demais componentes. Com isso, a coluna de destilação necessitará de um dimensionamento mais simples, reduzindo o custo de aquisição do equipamento. Além disso, pelo fato da glicerina possuir uma alta viscosidade, o decréscimo da mesma facilita as trocas de calor no sistema, culminando em uma queda de custos com utilidades e eletricidade, o que também resultou em uma menor taxa de emissão de dióxido de carbono nesse bloco operacional.

5.1.5 Balanço global: Processo inicial x Processo otimizado

No quesito produtividade, a planta química do processo de hidro-esterificação otimizada apresentou um discreto aumento percentual na produção de biodiesel quando comparada a simulação inicial, como pode ser visto na Tabela 13.

Tabela 13 – Balanço global dos processos inicial e otimizado em termos de produtividade.

<i>Projeto</i>	<i>Produtividade (kg/h)</i>
<i>Inicial</i>	4215,00
<i>Otimizado</i>	4217,95
<i>Ganho total de produtividade do projeto otimizado (kg/h)</i>	2,95
<i>Ganho percentual de produtividade (%)</i>	0,07%

Fonte: Autor, 2023.

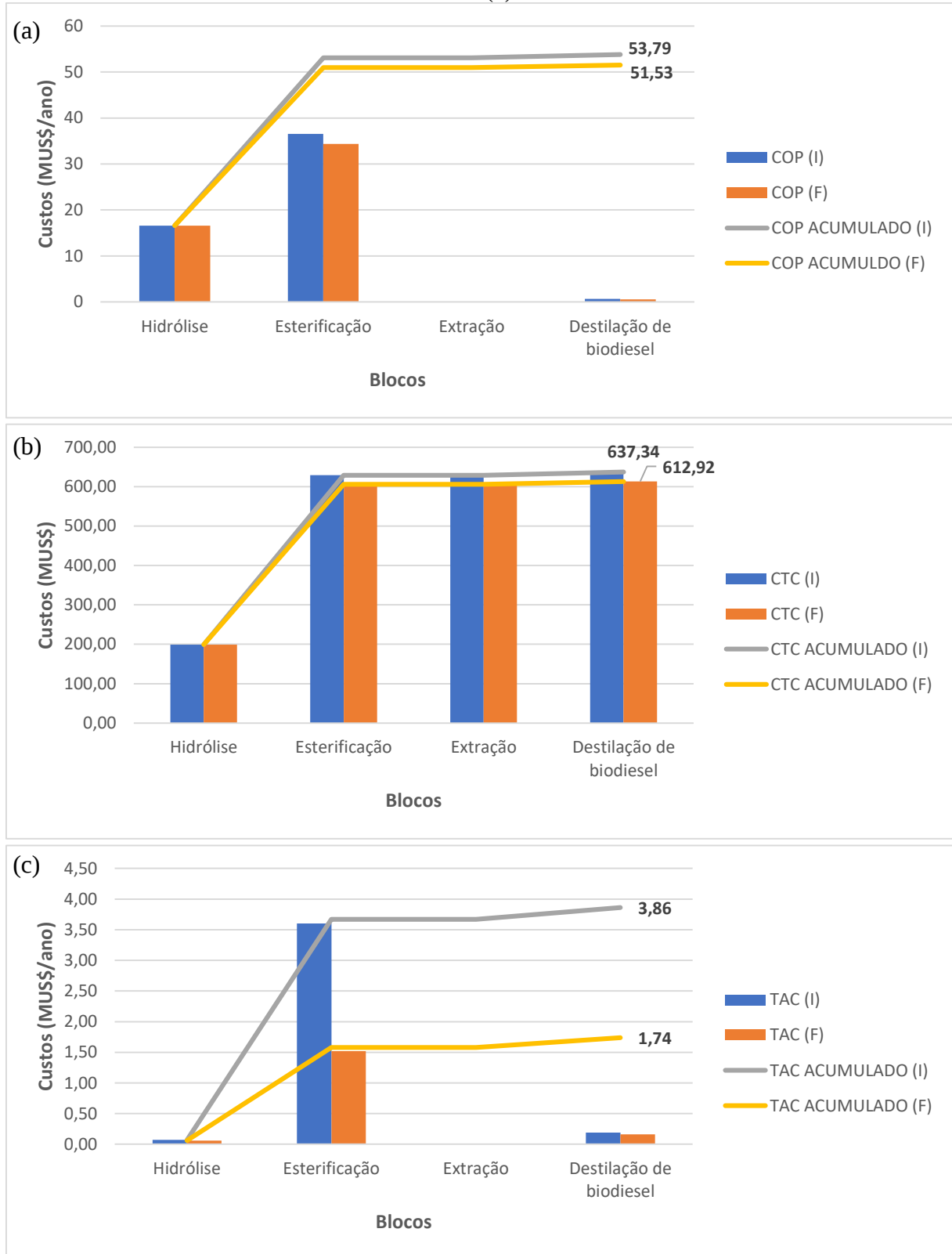
Já no aspecto econômico, a otimização proporcionou reduções percentuais significativas quanto aos indicadores COP, CTC, TAC e PBP, conforme mostrado nas Tabelas 14 e 15. Essas melhorias refletem as mudanças de dimensionamento dos equipamentos e das quedas de consumo de matérias-primas, utilidades industriais e eletricidade. Os comportamentos desses indicadores nas simulações inicial e otimizada estão presentes nas Figuras 8 e 9.

Tabela 14 – Balanço global dos processos de hidro-esterificação inicial e otimizado em termos financeiros.

<i>Projeto</i>	<i>Bloco</i>	<i>COP (MUS\$/ano)</i>	<i>CTC (MUS\$)</i>	<i>TAC (MUS\$/ano)</i>
<i>Inicial</i>	Hidrólise	16,59	199,00	0,07
	Esterificação	36,52	430,00	3,60
	Extração	0	0,02	0,00
	Destilação de biodiesel	0,68	8,32	0,19
	Total – Projeto inicial	53,79	637,34	3,86
<i>Otimizado</i>	Hidrólise	16,6	199,00	0,06
	Esterificação	34,36	407,00	1,52
	Extração	0	0,02	0,00
	Destilação de biodiesel	0,57	6,90	0,16
	Total – Projeto otimizado	51,53	612,92	1,74
<i>Reduções de custos (%)</i>		4,20	3,83	54,92

Fonte: Autor, 2023.

Figura 8: Comportamentos dos indicadores (a) COP, (b) CTC e (c) TAC para as simulações inicial (I) e otimizada (F).



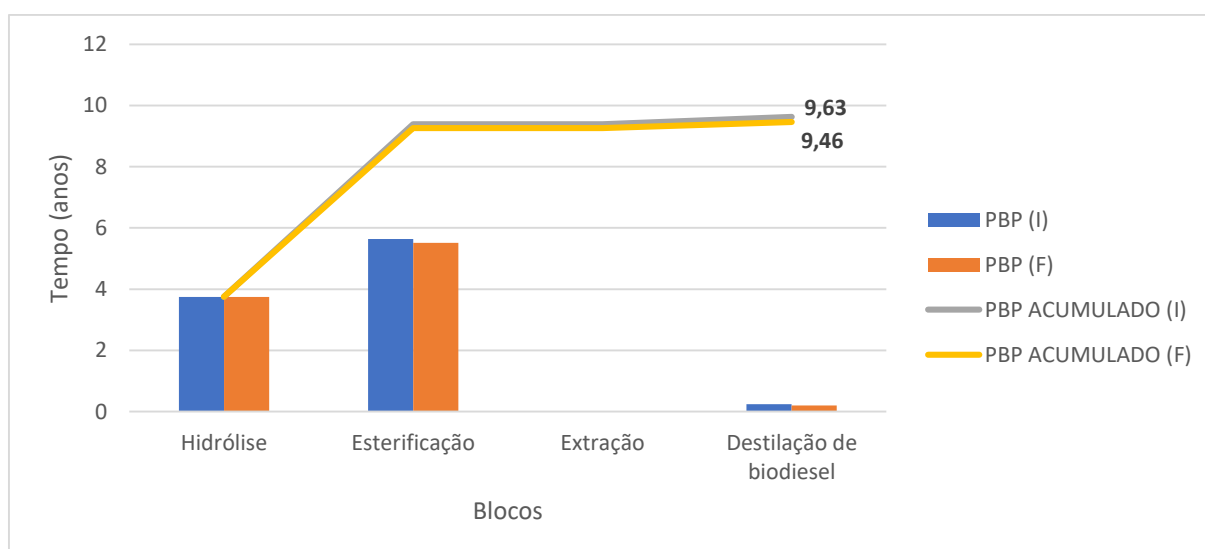
Fonte: Autor, 2023.

Tabela 15 – Balanço global dos processos inicial e otimizado em relação ao período de *payback*.

<i>Projeto</i>	<i>Bloco</i>	<i>PBP (anos)</i>	<i>PBP global (anos)</i>
<i>Inicial</i>	Hidrólise	3,75	9,63
	Esterificação	5,64	
	Extração	≈ 0	
	Destilação de biodiesel	0,24	
<i>Otimizado</i>	Hidrólise	3,75	9,46
	Esterificação	5,51	
	Extração	≈ 0	
	Destilação de biodiesel	0,20	
<i>Redução total de PBP do projeto otimizado (anos)</i>			0,17
<i>Redução percentual de PBP (%)</i>			1,76

Fonte: Autor, 2023.

Figura 9: Comportamento do PBP nas simulações inicial (I) e otimizada (F).



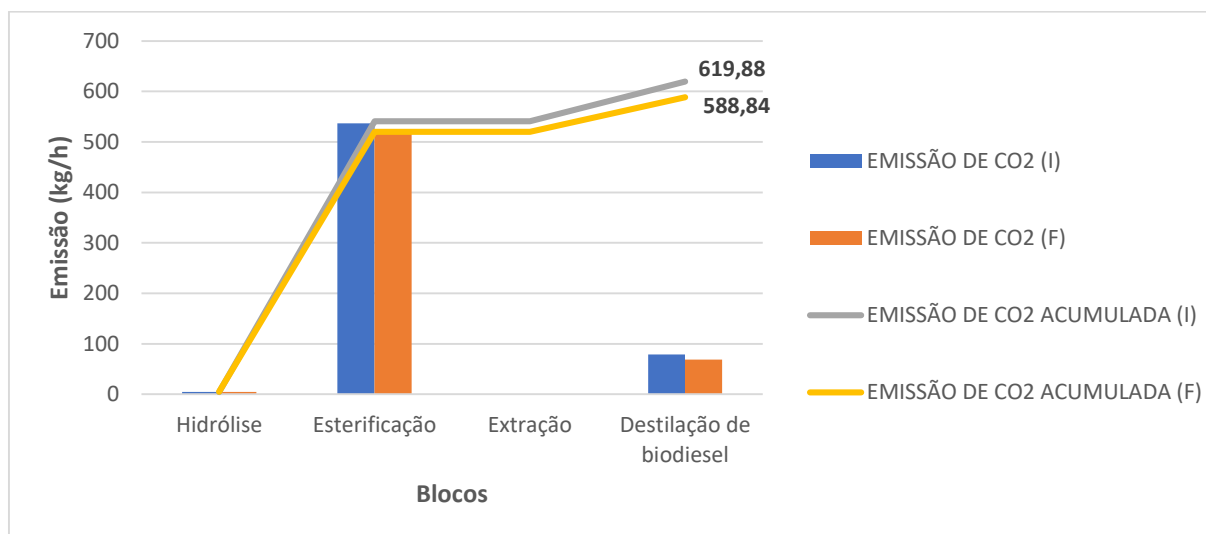
Fonte: Autor, 2023.

Em termos ambientais, notou-se uma significativa queda das emissões de dióxido de carbono no projeto otimizado, como pode ser visto na Tabela 16. Tais mudanças refletem, principalmente, as reduções de consumo de utilidades industriais e de eletricidade nos blocos operacionais estudados. O perfil de comportamento de geração de CO₂ tanto na simulação inicial quanto na otimizada consta na Figura 10.

Tabela 16 – Balanço global dos processos inicial e otimizado em termos de emissão de CO₂.

PROJETO	BLOCO	CO ₂ (kg/h)	CO ₂ GLOBAL (kg/h)
<i>Inicial</i>	Hidrólise	4,32	619,88
	Esterificação	536,94	
	Extração	0	
	Destilação de biodiesel	78,62	
<i>Otimizado</i>	Hidrólise	4,72	588,84
	Esterificação	515,59	
	Extração	0	
	Destilação de biodiesel	68,53	
Redução total de emissão de CO₂ do projeto otimizado (kg/h)			31,04
Redução percentual da emissão de CO₂ (%)			5,01

Fonte: Autor, 2023.

Figura 10: Perfil da emissão de CO₂ nas simulações inicial (I) e otimizada (F).

Fonte: Autor, 2023.

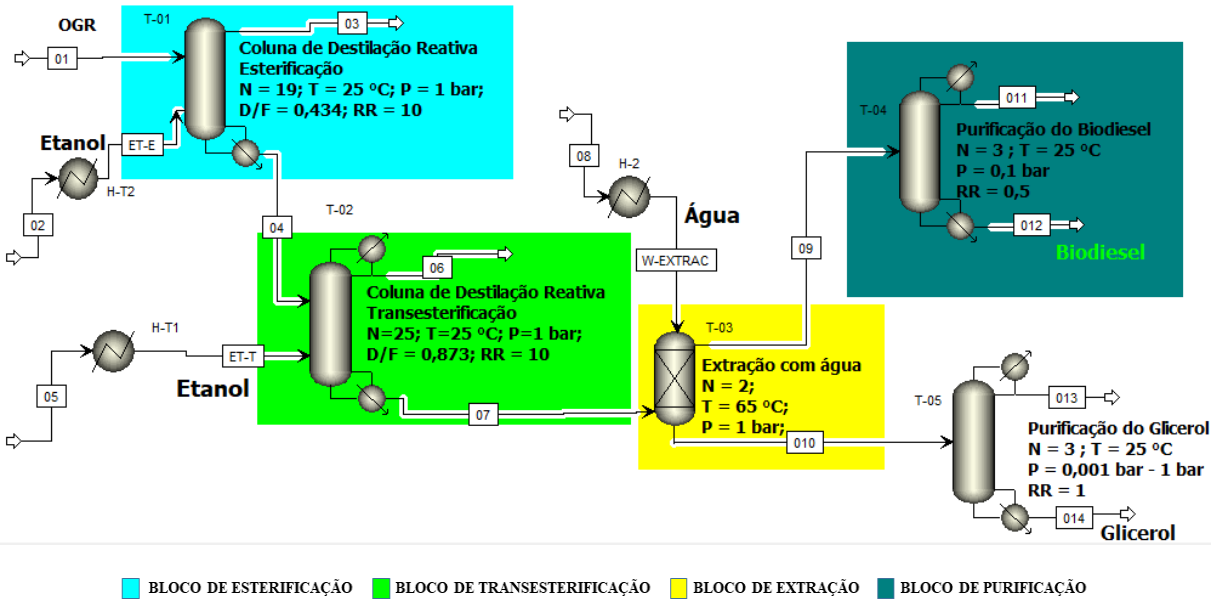
Em virtude do que foi discutido, pode-se afirmar que o procedimento de otimização do processo de hidro-esterificação via RNAs proporcionou importantes ganhos econômicos e ambientais, mantendo uma adequada produtividade de biodiesel.

5.2 Esterificação-transesterificação

O fluxograma do processo de Esterificação-transesterificação inicialmente simulado no Aspen pode ser observado na Figura 11, demonstrando as localizações dos seus respectivos blocos de esterificação, transesterificação, extração e purificação (ou destilação de biodiesel). Essa simulação resultou no biocombustível de acordo as normas estabelecidas pela ANP

(2014), contendo o teor mínimo de ésteres e com quantidades de impurezas inferiores ao máximo permitido, conforme observado na Tabela 17. Entretanto, até esse momento, o processo não havia passado por uma otimização dos seus principais blocos, o que abriu espaço para uma possível melhoria do mesmo em aspectos econômicos, ambientais e de produtividade.

Figura 11: Fluxograma do processo de esterificação-transesterificação simulado. (Legenda: P: Pressão de operação; T: Temperatura de operação; N: Número de estágios; RR: Razão de refluxo; D/F: Razão entre vazão de destilado e de alimentação)



Fonte: Autor, 2023.

Tabela 17 – Composição mássica obtida e requerida do biodiesel produzido pela esterificação-transesterificação inicial.

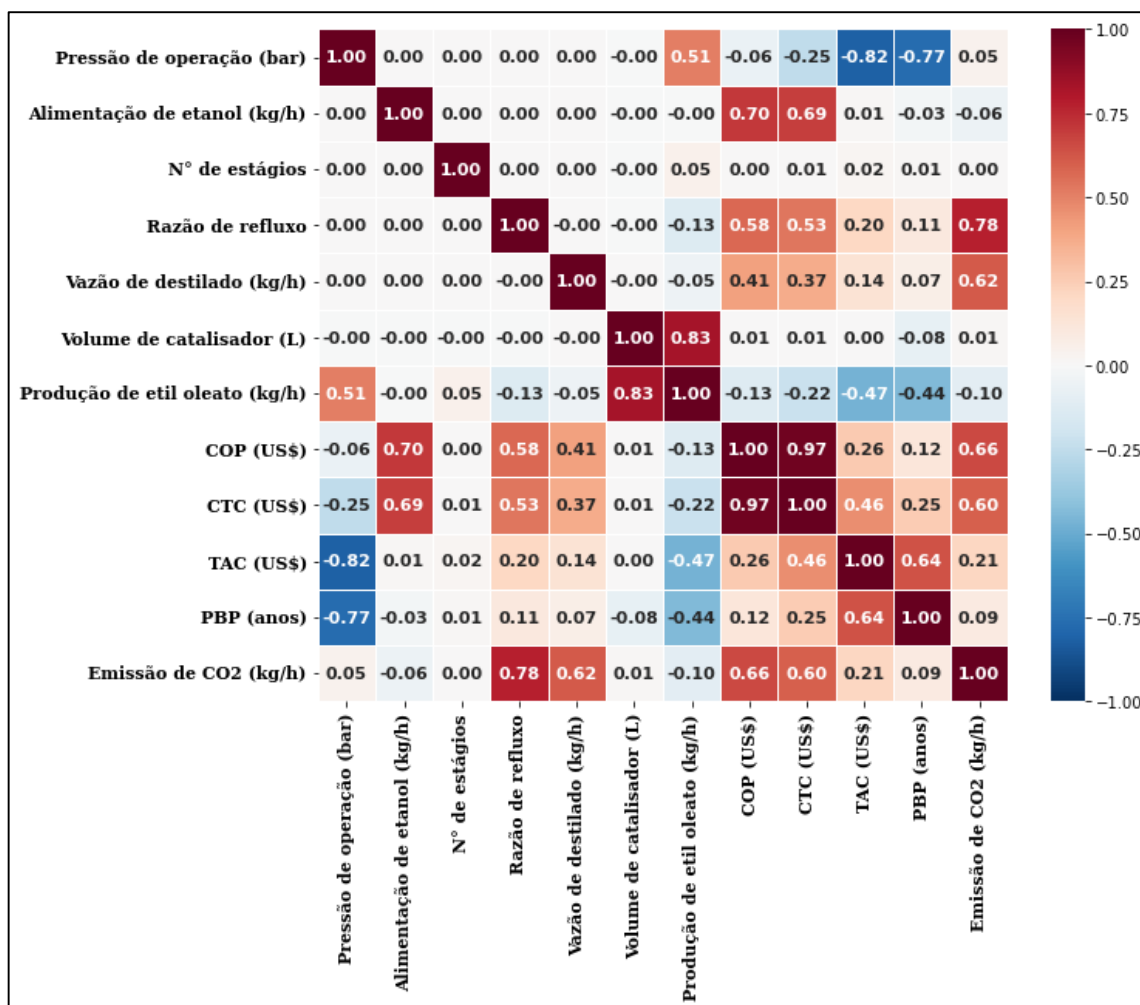
Componente	Composição obtida (%)	Composição requerida pela ANP (%)
Etil oleato	99,924	≥ 96,500
Ácido oleico	0,000	≤ 0,250
Trioleína	0,001	≤ 0,200
Etanol	0,056	≤ 0,200
Glicerol	0,000	≤ 0,020
Água	0,019	≤ 0,020

Fonte: Autor, 2023.

5.2.1 Otimização do bloco de esterificação

As correlações entre as variáveis de projeto dos dados implementados na otimização desse bloco constam no mapa de calor da Figura 12. Nesse gráfico, pôde-se observar que todas as variáveis de resposta desse processo tiveram correlação significativa com pelo menos uma variável de entrada avaliada, com correlações superiores à 0,3 e/ou inferiores à -0,3 (MUKAKA, 2012). Já em relação aos parâmetros de entrada, notou-se que o número de estágios não possuiu impacto relevante nos resultados, o que foi justificável pelo fato da reação e do orçamento do equipamento dimensionado não ter alteração significativa com a variação da quantidade de pratos estudada. Desse modo, essa variável de projeto foi retirada do modelo preditivo.

Figura 12: Mapa de calor de correlação entre as variáveis envolvidas no bloco de esterificação.



Fonte: Autor, 2023.

As variáveis otimizadas por meio das RNAs, bem como os seus valores iniciais, constam na Tabela 18.

Tabela 18 – Variáveis iniciais e otimizadas do bloco de esterificação do processo de esterificação-transesterificação.

<i>Variáveis</i>	<i>Inicial</i>	<i>Otimizada</i>	<i>Diferença (%)</i>
<i>Pressão de operação (bar)</i>	1,00	1,00	
<i>Alimentação de etanol (kg/h)</i>	5.228,86	4.900,00	
<i>Razão de refluxo</i>	2,00	1,00	
<i>Vazão de destilado (kg/h)</i>	4.000,00	3.700,00	
<i>Volume de catalisador (L)</i>	2.810,00	4.000,00	
<i>Vazão de etil oleato (kg/h)</i>	655,15	655,15	0
<i>COP (MUS\$/ano)</i>	35,36	30,72	- 13,12
<i>CTC (MUS\$)</i>	415,00	366,00	- 11,81
<i>TAC(MUS\$/ano)</i>	1,04	1,03	- 0,96
<i>PBP (anos)</i>	5,55	5,24	- 5,62
<i>Emissão de CO₂ (kg/h)</i>	695,06	484,58	- 30,28

Fonte: Autor, 2023.

Observou-se uma manutenção da produtividade do processo inicial no projeto otimizado. A redução de alimentação de etanol poderia proporcionar uma menor produção de etil oleato, porém é importante manter a vazão de álcool em valores que acima daqueles propostos pela cinética de esterificação para converter a maior parte da trioleína presente na corrente de OGRs (JIANG *et al.*, 2013). Além disso, o aumento do volume de catalisador também colaborou para a efetiva reação de esterificação.

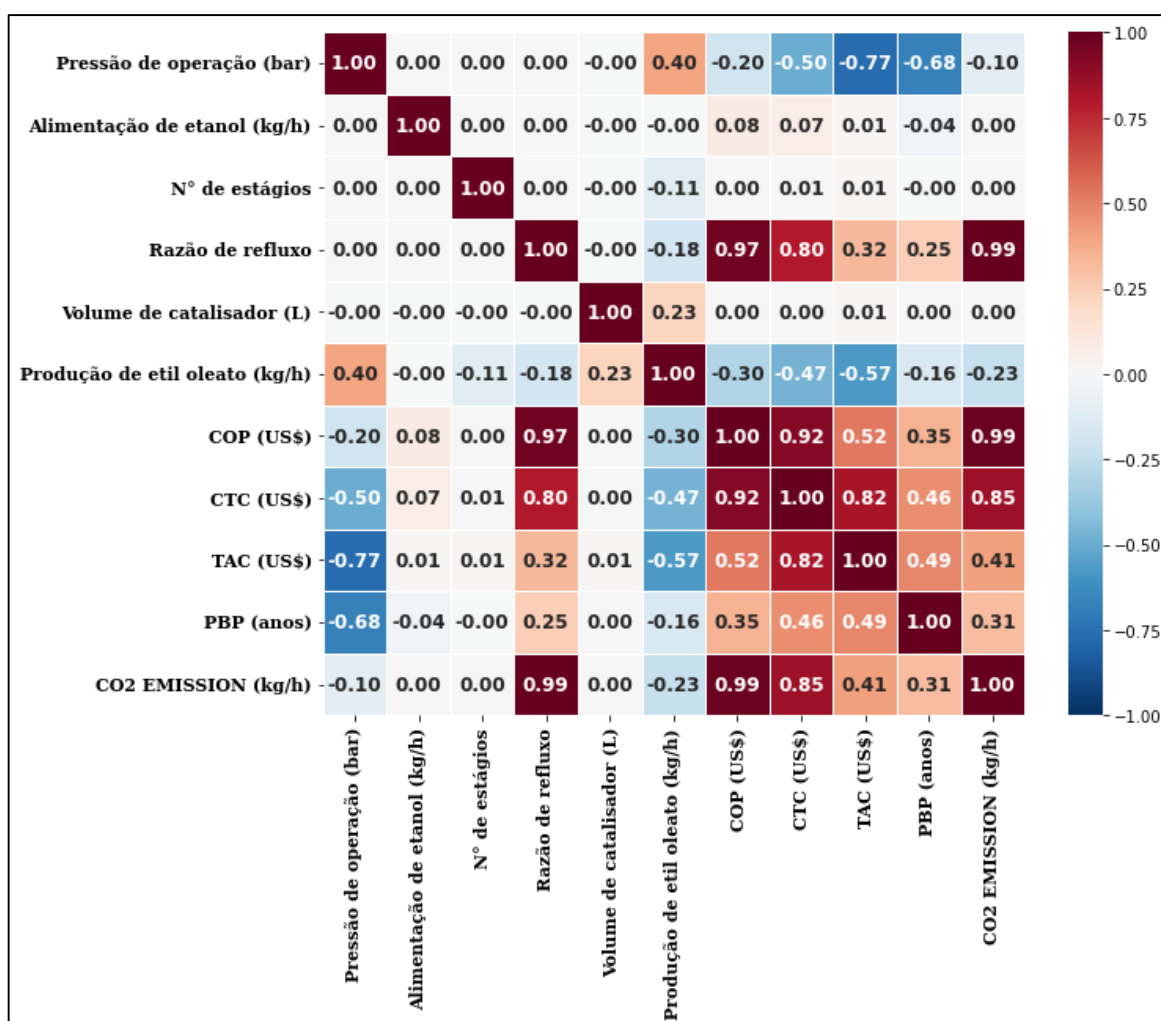
Em relação aos indicadores econômicos, notou-se reduções significativas de custos, os quais refletem, principalmente, a redução da alimentação de etanol no processo, proporcionando menores gastos com essa matéria-prima, e a diminuição do valor da razão de refluxo, a qual possibilitou menores custos energéticos nos trocadores de calor da coluna reativa.

Outro ganho considerável da otimização deste bloco foi a redução das emissões de CO₂ equivalente, o que foi influenciado pela redução da razão de refluxo. A alteração dessa variável de projeto possibilitou que menores volumes de fluidos circulassem no refeedor, necessitando de menor energia para a realização da evaporação. Sendo assim, há um menor consumo de utilidade industrial e, por consequência, uma importante redução na produção de CO₂ equivalente no processo. Desse modo, a otimização do bloco de esterificação possibilitou importantes ganhos econômicos e ambientais, além de manter adequada produtividade de etil oleato.

5.2.2 Otimização do bloco de transesterificação

As correlações entre as variáveis alimentadas na otimização do bloco de transesterificação constam no mapa de calor da Figura 13. Nele, observou-se que todas as variáveis de resposta estudadas tiveram correlações satisfatórias com pelo menos uma variável de entrada, com correlações maiores que 0,3 e/ou menores que -0,3 (MUKAKA, 2012). No que diz respeito aos parâmetros de entrada, notou-se que a alimentação de etanol, o número de estágios e o volume de catalisador não possuíram impacto notório nos resultados, o que foi justificável tendo em vista que a reação e o orçamento do equipamento dimensionado não terem alteração significativa com o intervalo de variação da quantidade de pratos estudada, além de que o processo reacional ocorreu adequadamente para os valores elencados de vazão de álcool e de catalisador. Desse modo, essas referidas variáveis de projeto foram retiradas do modelo preditivo.

Figura 13: Mapa de calor de correlação entre as variáveis envolvidas no bloco de transesterificação.



Fonte: Autor, 2023.

As variáveis otimizadas pelas redes neurais, bem como os seus valores iniciais, são apresentadas na Tabela 19.

Tabela 19 – Variáveis iniciais e otimizadas do bloco de transesterificação do processo de esterificação-transesterificação.

<i>Variáveis</i>	<i>Inicial</i>	<i>Otimizada</i>	<i>Diferença (%)</i>
<i>Pressão de operação (bar)</i>	1,00	1,00	
<i>Razão de refluxo</i>	2,00	1,00	
<i>Vazão de etil oleato (kg/h)</i>	4.213,74	4.227,36	+ 0,32
<i>COP (MUS\$/ano)</i>	75,20	52,87	- 29,70
<i>CTC (MUS\$)</i>	843,00	624,00	- 25,98
<i>TAC(MUS\$/ano)</i>	7,89	4,76	- 39,65
<i>PBP (anos)</i>	7,17	6,52	- 9,03
<i>Emissão de CO₂ (kg/h)</i>	4.702,75	2.218,83	- 52,82

Fonte: Autor, 2023.

Constatou-se, no projeto otimizado, um discreto aumento da produtividade. Tal fato, de forma similar ao que ocorreu no tópico anterior, é consequente do consumo praticamente total do volume de trioleína contido nos OGRs, o que evitou que houvessem sobras de TAGs na reação e manteve a razão álcool:trioleína acima do valor proposto na cinética (VELIČKOVIĆ *et al.*, 2016).

Acerca dos indicadores econômicos, observou-se impactantes reduções de custos associados, os quais refletem principalmente a redução do valor da razão de refluxo, o qual proporcionou menores gastos energéticos nos trocadores de calor desta coluna de destilação.

Outro ganho considerável da otimização deste bloco foi a redução da taxa de emissão de CO₂ equivalente, devido à diminuição do valor da razão de refluxo. Tal modificação resultou em menores vazões no refeedor, reduzindo a demanda energética para vaporização. Logo, há uma considerável redução no consumo de utilidade industrial e, consequentemente, uma queda na produção de CO₂ equivalente no processo.

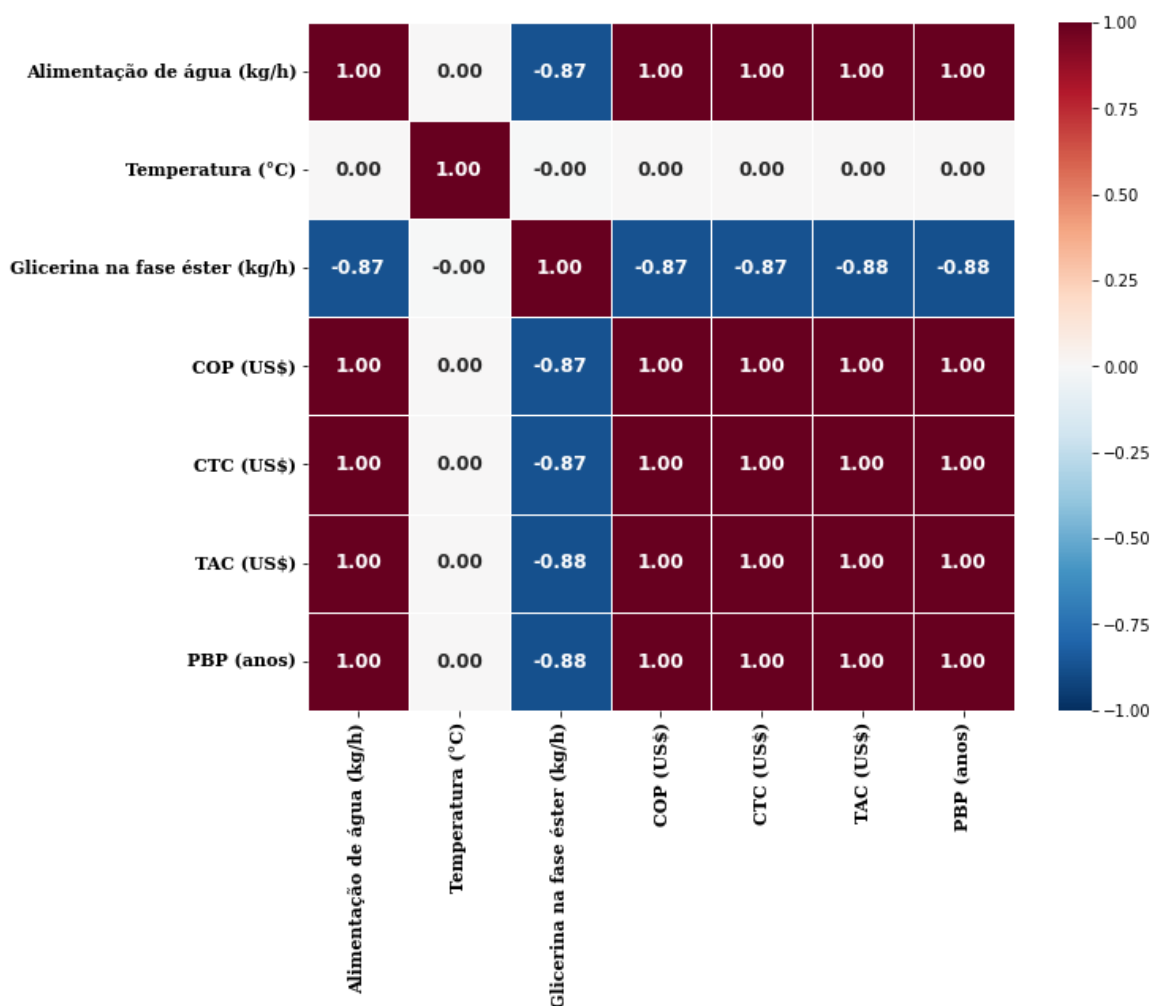
Em virtude dos fatos mencionados, a otimização do bloco de transesterificação possibilitou grandes avanços econômicos e ambientais, além de manter produtividade adequada de etil oleato.

5.2.3 Otimização do bloco de extração

As correlações das variáveis implementadas na otimização desse bloco são apresentadas no mapa de calor da Figura 14. Nele, observou-se que todos os parâmetros de resposta elencados tiveram correlação significativas com a alimentação de água no extrator, apresentando correlações superiores à 0,3 e inferiores à -0,3 (MUKAKA, 2012). O mesmo não ocorreu para a temperatura, dado que a solubilidade se manteve constante na faixa operacional avaliada. Nesse sentido, todos os parâmetros de resposta abordados e vazão de alimentação de água na entrada foram utilizados para a predição das RNAs, tendo em vista que essas adequadas correlações promovem resultados efetivos.

Não foi estudada a otimização da taxa de emissão de CO₂ equivalente pelo fato da coluna de extração não necessitar de utilidades industriais de aquecimento no seu funcionamento, não produzindo esse poluente.

Figura 14: Mapa de calor de correlação entre as variáveis envolvidas no bloco de extração.



Fonte: Autor, 2023.

As variáveis de projeto otimizadas pelas redes neurais, bem como os seus valores iniciais, podem ser analisadas na Tabela 20.

Tabela 20 – Variáveis iniciais e otimizadas do bloco de extração do processo de esterificação-transesterificação.

<i>Variáveis</i>	<i>Inicial</i>	<i>Otimizada</i>	<i>Diferença (%)</i>
<i>Alimentação de água (kg/h)</i>	1300,00	1358,97	
<i>Vazão de glicerol na fase éster (kg/h)</i>	≈ 0	≈ 0	≈ 0
<i>COP (MUS\$/ano)</i>	0,01	0,01	0
<i>CTC (MUS\$)</i>	0,13	0,14	+ 7,14
<i>TAC(MUS\$/ano)</i>	≈ 0	≈ 0	≈ 0
<i>PBP (anos)</i>	≈ 0	≈ 0	≈ 0

Fonte: Autor, 2023.

Em relação aos indicadores econômicos avaliados, notou-se mudanças discretas. Para o CTC, notou-se uma variação percentual um pouco mais acentuada. Entretanto, as magnitudes dos valores encontrados desses parâmetros nesse bloco são extremamente baixas quando comparada aquelas dos demais blocos da esterificação-transesterificação, evidenciando que essas diferenças são irrelevantes quando os processos inicial e otimizado são avaliados de forma global. Esses resultados podem ser atribuídos a tentativa de otimização realizada por Santos *et al.* (2023), que realizou análise de sensibilidade no extrator a partir das variáveis de entrada, temperatura e vazão de água alimentada, identificando um ponto considerado ótimo em termos técnicos sem que houvesse alteração significativa da vazão de glicerol na fase éster.

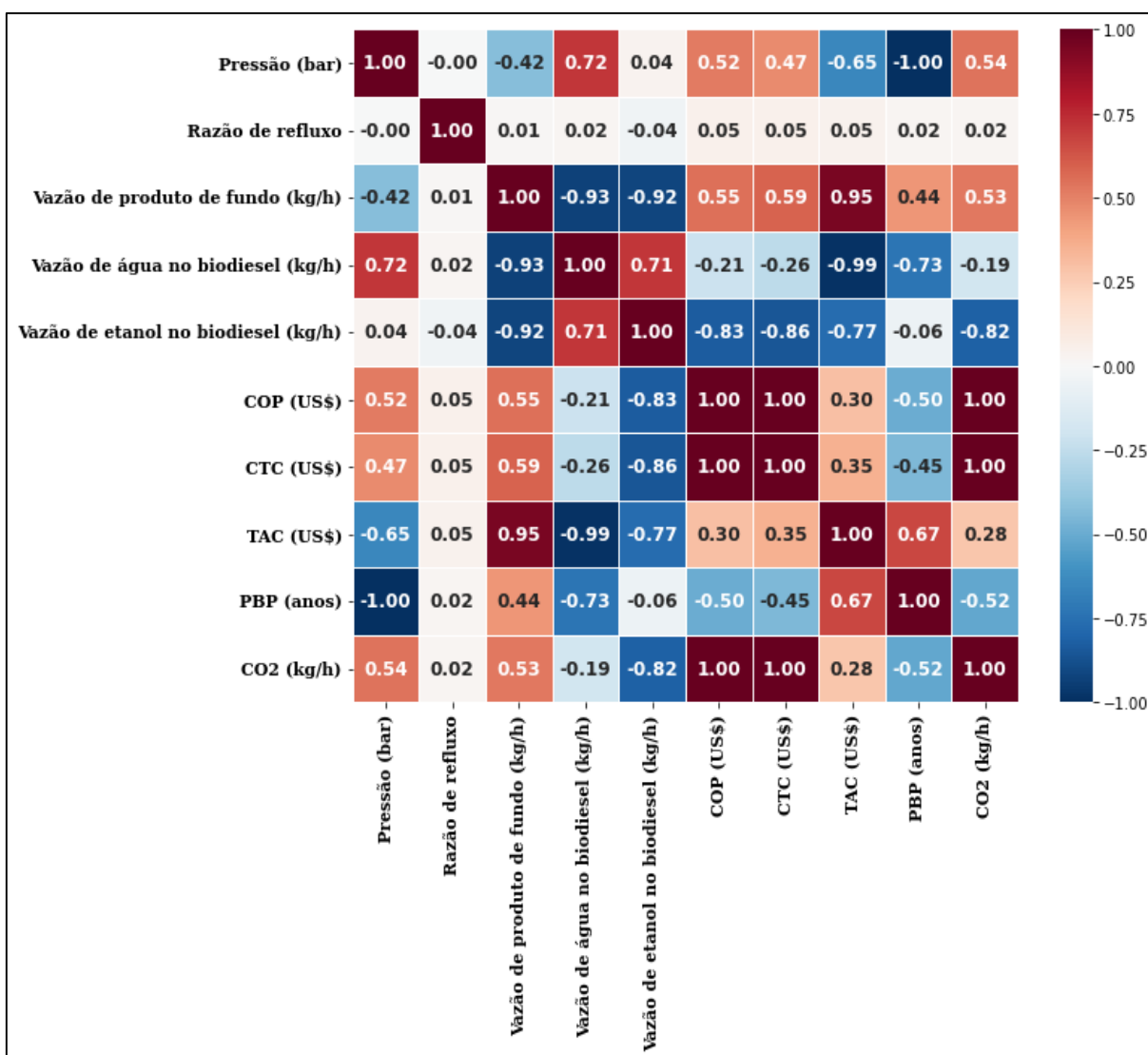
Constatou-se, também, uma estabilização da massa residual de glicerol presente na corrente de produtos, a qual é praticamente desprezível, mantendo a qualidade do processo de extração.

Tais alterações modestas entre o bloco inicial e o otimizado expressam as poucas mudanças nos parâmetros de entrada, que foi o leve aumento na vazão de alimentação de solvente. Com isso, de modo semelhante à extração do projeto de hidro-esterificação, a extração simulada inicialmente na esterificação-transesterificação apresenta variáveis de projeto muito próximas aquelas do modelo ótimo.

5.2.4 Otimização do bloco de destilação de biodiesel

As correlações dos parâmetros empregados na otimização do bloco de destilação de biodiesel constam no mapa de calor da Figura 15. Pode-se avaliar que, semelhantemente aos resultados dos blocos anteriores, todas as variáveis de saída possuem correlações efetivas com pelo menos uma das variáveis de entrada, conforme valores maiores que 0,3 e/ou menores que -0,3 (MUKAKA, 2012). Em relação aos parâmetros de entrada, constatou-se que a razão de refluxo não teve impacto acentuado nos resultados, o que se justifica dado que esse parâmetro operacional tem maior influência na purificação do produto do topo da coluna e que as variações de seus custos foram desprezíveis quando o equipamento foi avaliado de forma global. Sendo assim, essa variável de projeto não foi levada em consideração na predição.

Figura 15: Mapa de calor de correlação entre as variáveis envolvidas no bloco de destilação de biodiesel.



Fonte: Autor, 2023.

Os parâmetros otimizados de projeto pelas Redes Neurais Artificiais, bem como os valores iniciais dos mesmos, constam na Tabela 21. Tendo em vista que esse bloco operacional teve o intuito de minimizar os teores de água e etanol presentes no biodiesel e enquadrá-lo nas especificações requeridas pelas ANP (2014), apenas esses dois componentes foram avaliados nos modelos preditivos.

Tabela 21 – Variáveis iniciais e otimizadas do bloco de destilação de biodiesel do processo de esterificação-transesterificação.

<i>Variáveis</i>	<i>Inicial</i>	<i>Otimizada</i>	<i>Diferença (%)</i>
<i>Pressão de operação (bar)</i>	0,45	0,50	
<i>Vazão de destilado (kg/h)</i>	11,80	11,18	
<i>Vazão de biodiesel (kg/h)</i>	4.215,40	4.215,42	≈ 0
<i>Vazão de água na corrente de biodiesel (kg/h)</i>	0,83	0,79	- 5,08
<i>Vazão de etanol na corrente de biodiesel (kg/h)</i>	2,26	1,77	- 21,54
<i>COP (MUS\$/ano)</i>	0,41	0,44	+ 6,82
<i>CTC (MUS\$)</i>	5,14	5,51	+ 7,20
<i>TAC(MUS\$/ano)</i>	0,19	0,18	- 0,81
<i>PBP (anos)</i>	0,15	0,16	+ 6,67
<i>Emissão de CO₂ (kg/h)</i>	63,87	69,13	+ 8,23

Fonte: Autor, 2023.

Notou-se, no projeto otimizado, uma queda percentual considerável de água e um declínio do teor de etanol na composição do biodiesel, o que já era previsto tendo em vista a redução de alimentação de etanol nos blocos operacionais anteriores. Porém, quando é comparada as magnitudes dessas diferenças de vazões desses componentes (projeto inicial vs otimizado) com a totalidade de biodiesel produzido, o ganho com esse item é praticamente irrelevante.

O biodiesel produzido atendeu as normas estabelecidas pela ANP (2014), conforme mostra a Tabela 22.

Tabela 22 – Composição mássica obtida e requerida do biodiesel produzido pela esterificação-transesterificação otimizada.

<i>Componente</i>	<i>Composição obtida (%)</i>	<i>Composição requerida pela ANP (%)</i>
<i>Etil oleato</i>	99,94	≥ 96,50
<i>Ácido oleico</i>	≈ 0	≤ 0,25
<i>Trioleína</i>	≈ 0	≤ 0,20
<i>Etanol</i>	0,04	≤ 0,20
<i>Glicerol</i>	≈ 0	≤ 0,02
<i>Água</i>	0,02	≤ 0,02

Fonte: Autor, 2023.

Em relação aos indicadores econômicos COP, CTC e PBP, constatou-se aumentos percentuais significativos de custos, o que teve forte influência do leve aumento de pressão de operação desse bloco, o qual provocou a necessidade de maiores demandas energéticas para aquecer os fluidos presentes no meio. No que diz respeito ao TAC, foi observada uma modesta variação percentual. Entretanto, as magnitudes das variações dos valores otimizados de custos são desprezíveis quando comparados a esses indicadores nos blocos de esterificação e transesterificação, não apresentando um impacto significativo no processo global.

No aspecto ambiental, notou-se aumento percentual na emissão de CO₂, o que é fruto da elevação da demanda energética para o aquecimento dos fluidos contidos no sistema. Todavia, a alteração dessa taxa é pequena quando comparada às outras emissões de CO₂ dos principais blocos do processo de esterificação-transesterificação.

Em virtude do que foi mencionado, o bloco otimizado de destilação de biodiesel do processo de esterificação-transesterificação proporcionou leves reduções de impurezas com variações de custos e de geração de CO₂ que são irrelevantes quando se analisa o processo de forma global. Além disso, o biodiesel produzido atendeu as exigências da ANP (2014).

5.2.5 Balanço global: Processo inicial x Processo otimizado

Em termos de produtividade, a planta do processo de esterificação-transesterificação otimizada apresentou uma manutenção de produção mássica de biodiesel quando comparada a simulação inicial, como consta na Tabela 23. Essa estabilidade de produtividade reflete que houveram conversões e separações com eficiências semelhantes em ambos os casos, com consumos totais dos OGRs.

Tabela 23 – Balanço global dos processos inicial e otimizado em termos de produtividade.

<i>Projeto</i>	<i>Produtividade (kg/h)</i>
<i>Inicial</i>	4215,40
<i>Otimizado</i>	4215,42
<i>Ganho total de produtividade do projeto otimizado (kg/h)</i>	0,02
<i>Ganho percentual de produtividade (%)</i>	≈ 0

Fonte: Autor, 2023.

No aspecto econômico, a otimização gerou reduções percentuais importantes quanto aos indicadores COP, CTC, TAC e PBP, como pode ser observado nas Tabelas 24 e 25. Tais avanços refletem nas modificações no dimensionamento dos equipamentos e nas quedas de

consumo de matérias-primas, utilidades industriais e eletricidade. Os perfis desses indicadores nas simulações inicial e otimizada constam nas Figuras 16 e 17.

Tabela 24 – Balanço global dos processos de esterificação-transesterificação inicial e otimizado em termos financeiros.

<i>Projeto</i>	<i>Bloco</i>	<i>COP</i> (MUS\$/ano)	<i>CTC</i> (MUS\$)	<i>TAC</i> (MUS\$/ano)
<i>Inicial</i>	Esterificação	35,36	415,00	1,04
	Transferificação	75,20	843,00	7,89
	Extração	0,01	0,13	0,00
	Destilação de biodiesel	0,41	5,14	0,19
	Total – Projeto inicial	110,98	1263,27	9,12
<i>Otimizado</i>	Esterificação	30,72	366,00	1,03
	Transsterificação	52,87	624,00	4,76
	Extração	0,01	0,14	0,00
	Destilação de biodiesel	0,44	5,51	0,18
	Total – Projeto otimizado	84,04	995,65	5,98
Reduções de custos (%)		24,28%	21,18%	34,43%

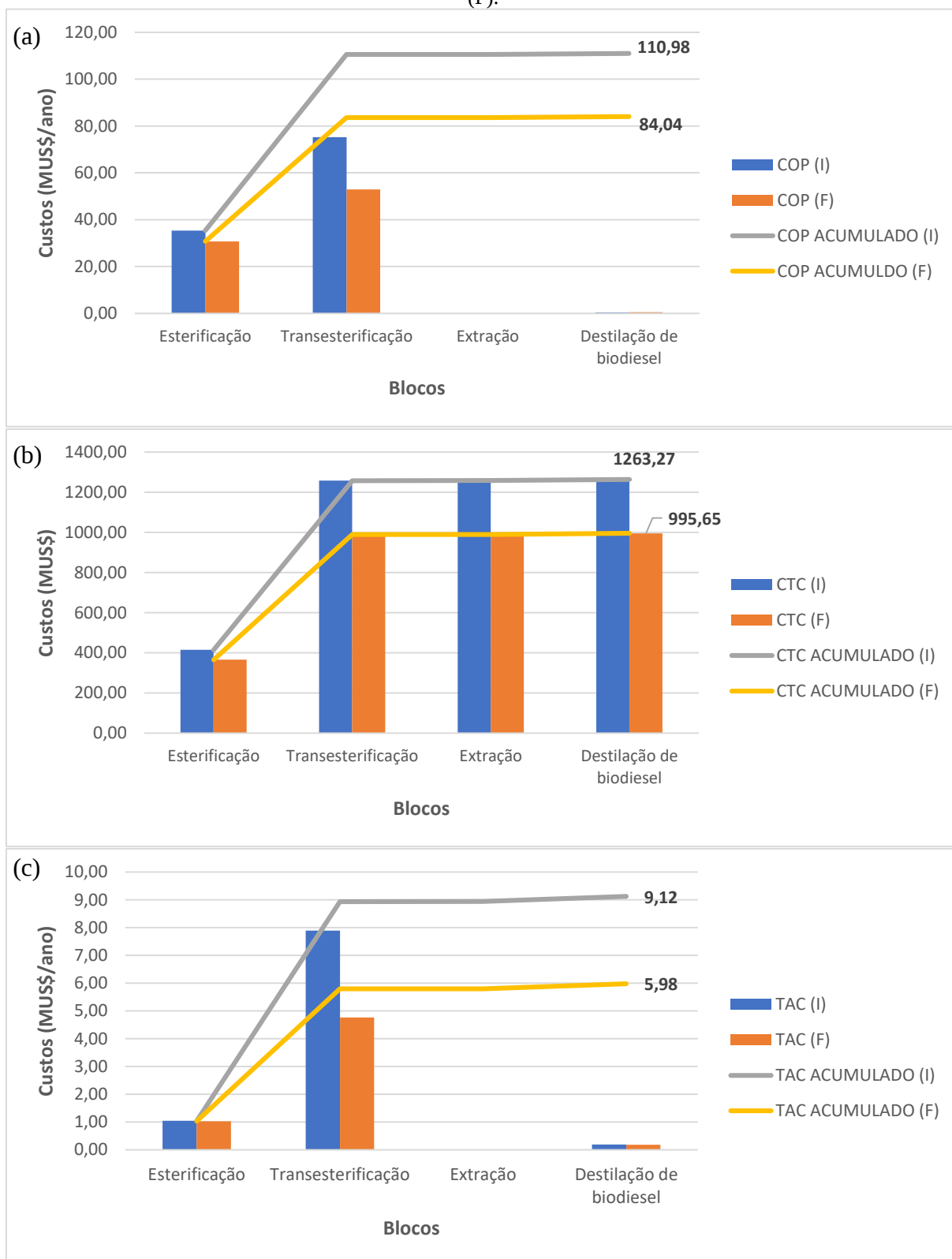
Fonte: Autor, 2023.

Tabela 25 – Balanço global dos processos inicial e otimizado em relação ao período de *payback*.

<i>Projeto</i>	<i>Bloco</i>	<i>PBP (anos)</i>	<i>PBP global (anos)</i>
<i>Inicial</i>	Esterificação	5,55	12,87
	Transsterificação	7,17	
	Extração	≈ 0	
	Destilação de biodiesel	0,15	
<i>Otimizado</i>	Esterificação	5,24	11,92
	Transesterificação	6,52	
	Extração	≈ 0	
	Destilação de biodiesel	0,16	
Redução total de PBP do projeto otimizado (anos)			0,95
Redução percentual de PBP (%)			7,38

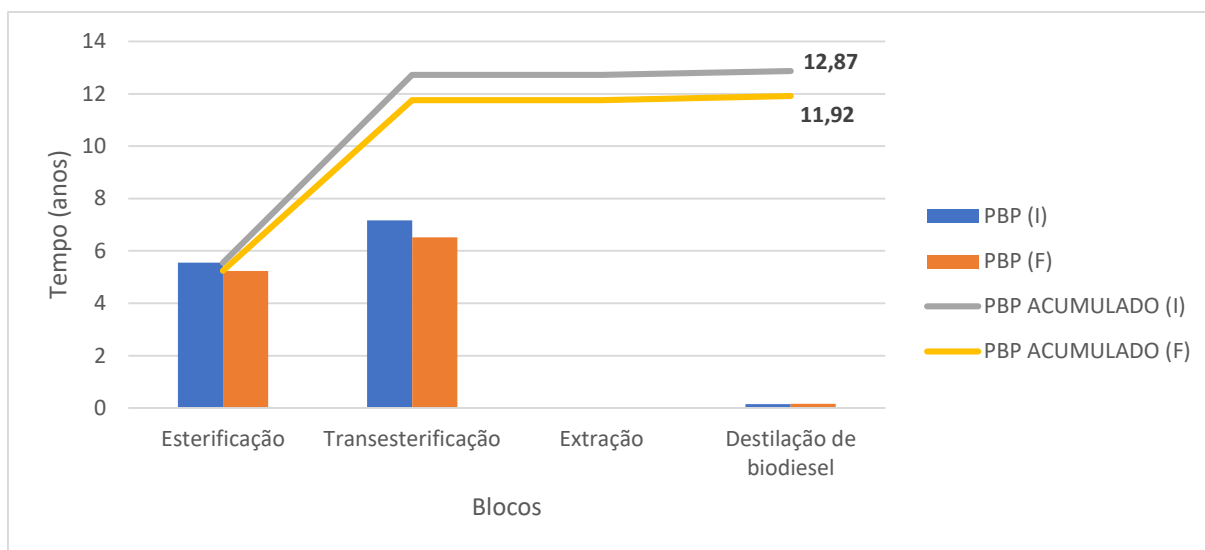
Fonte: Autor, 2023.

Figura 16: Comportamentos dos indicadores (a) COP, (b) CTC e (c) TAC nas simulações inicial (I) e otimizada (F).



Fonte: Autor, 2023.

Figura 17: Comportamento do PBP nas simulações inicial (I) e otimizada (F).



Fonte: Autor, 2023.

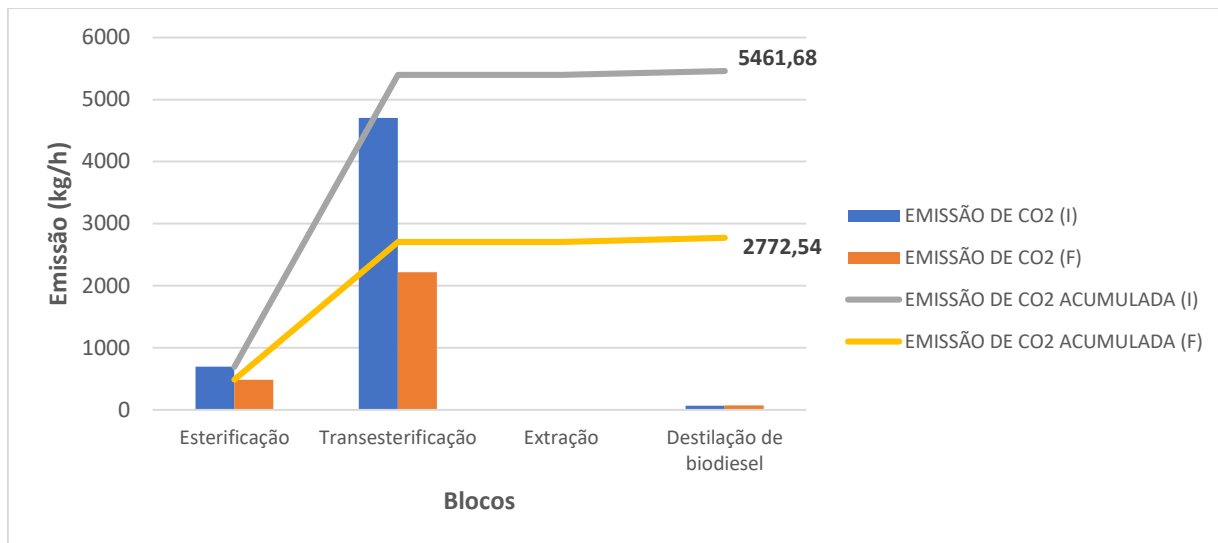
Em termos ambientais, observou-se uma grande queda das emissões equivalentes de CO₂ no processo otimizado, conforme apresentado na Tabela 26. Esse resultado é reflexo, principalmente, das reduções de consumo de utilidades industriais e de eletricidade nos blocos avaliados. O comportamento dessas emissões por blocos para as simulações inicial e otimizada são observadas na Figura 18.

Tabela 26 – Balanço global dos processos inicial e otimizado em termos de emissão de CO₂ equivalente.

Projeto	Bloco	CO ₂ (kg/h)	CO ₂ global (kg/h)
Inicial	Esterificação	695,06	5.461,68
	Transterificação	4.702,75	
	Extração	0	
	Destilação de biodiesel	63,87	
Otimizado	Esterificação	484,58	2.772,54
	Transterificação	2.218,83	
	Extração	0	
	Destilação de biodiesel	69,13	
Redução total de emissão de CO ₂ do projeto otimizado (kg/h)			2.689,14
Redução percentual de emissão de CO ₂ (%)			49,24

Fonte: Autor, 2023.

Figura 18: Perfil da emissão de CO₂ equivalente para as simulações inicial (I) e otimizada (F).



Fonte: Autor, 2023.

Em virtude dos fatos mencionados, constata-se que o procedimento de otimização do processo de esterificação-transesterificação via predição em Redes Neurais Artificiais possibilitou importantes avanços econômicos e ambientais, além de manter adequada produtividade de biodiesel.

5.3 Análise comparativa dos processos otimizados

A comparação global dos indicadores envolvidos nos processos de hidro-esterificação e esterificação-transesterificação otimizados constam na Tabela 27.

Tabela 27 – Indicadores globais dos processos otimizados de hidro-esterificação e esterificação-transesterificação (Observações: O melhor valor de cada indicador está grifado em negrito e a diferença percentual está em relação ao maior valor de cada indicador).

Indicador	Processos		Diferença (%)
	Hidro-esterificação	Esterificação-transesterificação	
Produtividade (kg/h)	4.217,95	4.215,42	0,06
COP (MUS\$/ano)	51,53	84,04	38,68
CTC (MUS\$)	613,00	996,00	38,45
TAC (MUS\$/ano)	1,74	5,98	70,90
PBP (anos)	9,46	11,92	4,93
Emissão de CO ₂ (kg/h)	588,84	2.772,54	78,76

Fonte: Autor, 2023.

No quesito produtividade, observa-se que há uma diferença perceptível desprezível entre as vazões mássicas de biodiesel geradas em cada processo, o que reflete uma semelhança de eficácia nas conversões reacionais e nos processos de separação em ambos os projetos.

Em relação ao aspecto econômico, o projeto otimizado de hidro-esterificação apresenta os menores custos financeiros, o que expressa os dimensionamentos menos robustos dos seus equipamentos, as naturezas dos blocos estudados em cada processo (colunas de destilação tendem a ser mais caras que reatores, por exemplo) e os menores gastos com matérias primas, utilidades industriais e eletricidade.

No âmbito ambiental, a hidro-esterificação apresentou menor taxa de emissão de dióxido de carbono nos blocos avaliados, o que é justificável pela inferior demanda de utilidades e eletricidade nos trocadores de calor de aquecimento abordados neste estudo.

6 CONCLUSÃO

Abordou-se, nesse trabalho, a aplicação das RNAs para a otimização da produção de biodiesel etílico pelos processos de hidro-esterificação e esterificação-transesterificação e a comparação destes em termos de econômicos, ambientais e de produtividade.

Em virtude disso, pode-se afirmar que, para a rota etílica, o processo otimizado de hidro-esterificação se apresentou mais promissor nos aspectos econômicos e ambientais, tendo em vista que este possibilitou os menores gastos com matérias-primas, utilidades e eletricidade, além de possuir um dimensionamento mais simples dos seus blocos operacionais e emitir menos CO₂ equivalente.

Em relação à produtividade mássica de biodiesel, os projetos otimizados apresentaram diferenças desprezíveis, demonstrando eficiências similares nos processos de conversão e separação.

Desse modo, observa-se que a aplicação das Redes Neurais Artificiais na indústria química é de extrema utilidade para se fazer previsões do processo a ser construído e viabilizar a implementação de melhorias.

Como uma sugestão futura para o aprimoramento deste trabalho, indica-se inserir as correntes de reciclo de etanol nos blocos de esterificação e avaliar o impacto nos indicadores de projeto, dado que há uma grande possibilidade de haver uma redução significativa dos custos relacionados à vazão de alimentação de etanol ao processo.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- AGÊNCIA NACIONAL DO PETRÓLEO, GÁS NATURAL E BIOCOMBUSTÍVEIS (ANP). Produção de Biocombustíveis. Disponível em: <https://www.gov.br/anp/pt-br/centrais-de-conteudo/dados-abertos/producao-de-biocombustiveis>. Acesso em: 14 jun. 2023.
- AGÊNCIA NACIONAL DO PETRÓLEO, GÁS NATURAL E BIOCOMBUSTÍVEIS (ANP). Resolução ANP nº 45, de 25 de agosto de 2014. Diário Oficial da União, Brasília, DF, 26 ago. 2014. Ano 2014. Seção 1, p. 100.
- ALBUQUERQUE, A. A. Reactive separation processes applied to biodiesel production: phase equilibrium, design, optimization and techno-economic assessment. Tese de Doutorado. Universidade Federal de Pernambuco, Recife, 2019.
- ALBUQUERQUE, A. A., CAVALCANTI, C. J. S., SOARES, C. H. M., PIMENTEL, M. F., & STRAGEVITCH, L. Optimization of the extraction of free fatty acids applied to biodiesel production. Brazilian Journal of Chemical Engineering, São Paulo, v. 35, n. 2, p. 327-340, 2018.
- ALBUQUERQUE, A. A., FLORA, N. G., DANIELSKI, L., STRAGEVITCH, L. A new process for biodiesel production from tall oil via catalytic distillation. Chemical Engineering Research and Design, v. 170, p. 314-328, 2021a.
- ALBUQUERQUE, A. A., FLORA, N. G., DANIELSKI, L., STRAGEVITCH, L. Phase equilibrium modeling in biodiesel production by reactive distillation. Fuel, v. 271, p. 117688, 2020. ISSN 0016-2361.
- ALBUQUERQUE, A. A., NG, F. T. T., DANIELSKI, L., STRAGEVITCH, L. Reactive separation processes applied to biodiesel production from residual oils and fats: design, optimization and techno-economic assessment of routes using solid catalysts. Energy, 2021b.
- ALLORA, V.; OLIVEIRA, S. E. O método UP' - Unidade de Produção© (UEP') e sua aplicação no benchmarking interno dos processos de fabricação. In: VII Congreso del Instituto Internacional de Costos, León, 2001.
- BESSA, L. C. B. A., FERREIRA, M. C., ABREU, C. R. A., BATISTA, E. A. C., MEIRELLES, A. J. A. A new Unifac parameterization for the prediction of liquid-liquid equilibrium of biodiesel systems. Fluid Phase Equilibria, v. 425, p. 98-107, 2016.
- CAMIOTO, F. C. Consumo energético nos setores industriais brasileiros: uma avaliação de desempenho e estratégias para a redução da emissão de CO₂. Tese de Doutorado. Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2017.
- CANAKCI, M.; VAN GERPEN, J. Biodiesel production from oils and fats with high free fatty acids. Transactions of the ASAE, v. 44, n. 6, p. 1429, 2001.
- CONAB. Boletim da Safra de Grãos. 9º Levantamento – Safra 2022/2023. Disponível em: <https://www.conab.gov.br/info-agro/safras/graos/boletim-da-safra-de-graos>. Acesso em: 14 jun. 2023.
- DAMASCENO, N. T. S.; SAMPAIO, B. E. O.; SANTOS, V. M. L. Avaliação dos impactos ambientais do processo produtivo do biodiesel bruto de mamona utilizando a matriz de Leopold. XXXV Encontro Nacional de Engenharia de Produção, Fortaleza, 2015.

DELATORRE, A. B. Produção de biodiesel: considerações sobre as diferentes matérias-primas e rotas tecnológicas de processos. *Biológicas & Saúde*, v. 1, n. 1, 24 jun. 2011.

FERNANDES, J. C. B. Função de desejabilidade na qualidade de biodiesel a partir das misturas de biodieseis de mamona e amendoim. 2016. 51f. Dissertação (Programa de Pós-Graduação em Ciências Agrárias - PPGCA)- Universidade Estadual da Paraíba, Campina Grande, 2016.

FERREIRA, A. F. B.; AMORIM, N. S.; OLIVEIRA, K. B. Simulação do processamento primário de gás natural usando o simulador Aspen Plus. In: *Anais do XX Congresso Brasileiro de Engenharia Química - COBEQ 2014*. São Paulo: Blucher, 2015. p. 11294-11301.

FLECK, L.; TAVARES, M. H. F.; EYNG, E.; HELMANN, A. C.; ANDRADE, M. A. M. Redes neurais artificiais: princípios básicos. In: *Revista Eletrônica Científica Inovação e Tecnologia*, v. 1, n. 13, Medianeira, 2016, p. 47-57.

FLOR FILHO, C. A.; BARBOSA, E. L.; ALBUQUERQUE, A. A. Processo de produção de biodiesel etílico por hidro-esterificação via destilação catalítica. In: *ANAIS DO 23º CONGRESSO BRASILEIRO DE ENGENHARIA QUÍMICA*, 2021, Gramado. *Anais eletrônicos...* Campinas: Galoá, 2021.

FIORIN, D. V., MARTINS, F. R., SCHUCH, N. J., PEREIRA, E. B. Aplicações de redes neurais e previsões de disponibilidade de recursos energéticos solares. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, v. 33, n. 1, p. 01-20, 2011.

GRISOLI, R. P. S. Comparação das emissões de gases de efeito estufa no ciclo do etanol de cana-de-açúcar no Brasil e os critérios da Diretiva Europeia para Energias Renováveis. 2011. 110 f. Dissertação (Mestrado em Energia) – Escola Politécnica / Faculdade de Economia, Administração e Contabilidade / Instituto de Energia e Ambiente / Instituto de Física da Universidade de São Paulo, São Paulo, 2011.

HASTIE, T.; TIBSHIRANI, R.; FRIEDMAN, J. *The elements of statistical learning*. Springer, 2009.

HILLIS, S.; HOORMANN, S. Precision and recall: understanding the trade-off. 2016. Disponível em: <https://medium.com/opex-analytics/why-you-need-to-understand-the-trade-off-between-precision-and-recall-525a33919942>. Acesso em: 21 jul. 2019.

JIANG, Y., LU, J., SUN, K., MA, L., DING, J. Esterification of oleic acid with ethanol catalyzed by sulfonated cation exchange resin: Experimental and kinetic studies. *Energy Conversion and Management*, v. 76, p. 980-985, 2013.

KOHLPHEPP, G. Análise da situação da produção de etanol e biodiesel no Brasil. *Estudos Avançados*, v. 24, n. 68, p. 223-253, 2010.

MA, F.; HANNA, M. A. Biodiesel production: a review. *Bioresource Technology*, v. 70, n. 1, p. 1-15, 1999.

MACHADO, D. G.; SOUZA, M. A. Análise das relações entre a gestão de custos e a gestão do preço de venda: um estudo das práticas adotadas por empresas industriais conserveiras estabelecidas no RS. *Revista Universo Contábil*, [S.l.], v. 2, n. 1, p. 42-60, 2007. ISSN 1809-3337.

MACHADO, G. D., SOUZA, T., ARANDA, D. A. G., PESSOA, F., CASTIER, M., CABRAL, V., CARDOZO FILHO, L. Computer simulation of biodiesel production by hydro-esterification. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, v. 103, p. 37-45, 2016.

MACIEL, A. C. Avaliação da Simulação a Eventos Discretos, Projeto de Experimentos e Função Desejabilidade para verificar a viabilidade de metas estabelecidas para uma Célula de Manufatura. 2013. 113 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia de Produção) – Universidade Federal de Itajubá, Itajubá, 2013.

MUKAKA, M. M. Statistics corner: A guide to appropriate use of correlation coefficient in medical research. *Malawi medical journal: the journal of Medical Association of Malawi*, 24(3), 69–71, 2012.

OSORIO, F., JOÃO, R., BITTENCOURT. Sistemas inteligentes baseados em redes neurais artificiais aplicados ao processamento de imagens. 2023.

PARENTE, E. J. S. J. E.; BRANCO, P. T. C. Análise comparativa entre etanol e metanol visando sua utilização como coadjuvante químico na produção de biodiesel. In: HOLANDA. Biodiesel e Inclusão Social. Brasília: Câmara dos Deputados, Série Cadernos de Altos Estudos nº1, 2003.

PYTHON SOFTWARE FOUNDATION. Python [Online]. Disponível em: <https://www.python.org/>. Acesso em: 21 jun. 2023.

RAMOS, L. P., KOTHE, V., OLIVEIRA, M. A. F. C., MUNIZ-WYPYCH, A. S., NAKAGAKI, S., KRIEGER, N., WYPYCH, F. Biodiesel: Matérias-Primas, Tecnologias de Produção e Propriedades Combustíveis. *Revista Virtual de Química*, v. 9, n. 1, p. 317-369, 2016.

RENON, H.; PRAUSNITZ, J. M. Local compositions in thermodynamic excess functions for liquid mixtures. *AIChE Journal*, v. 14, n. 1, p. 135-144, 1968.

SANTOS, G. K. S.; FLOR FILHO, C. A.; COSTA, L. F. S. A.; LIMA, A. G.; ALBUQUERQUE, A. A. Processo alternativo de produção de biodiesel etílico via colunas de destilação catalítica. In: anais do 24º congresso brasileiro de engenharia química, 2023, Salvador. Anais eletrônicos... Campinas, Galoá, 2023. Disponível em: <<https://proceedings.science/cobeq-2023/trabalhos/processo-alternativo-de-producao-de-biodiesel-etilico-via-colunas-de-destilacao?lang=pt-br>> Acesso em: 23 dez. 2023.

SÉ, R. A. G. Liquid-liquid equilibrium in polymeric aqueous biphasic systems containing electrolytes. Dissertação de Mestrado. Campinas: Universidade Estadual de Campinas, 2001. 112p.

SEIDER, W. D., SEADER, J. D., LEWIN, D. R., WIDAGDO, S. Product and Process Design Principles: Synthesis, Analysis, and Evaluation. 4. ed. John Wiley & Sons Incorporated, 2017.

sklearn.neural_network.MLPRegressor. Scikit-learn org, 2023. Disponível em: https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.neural_network.MLPRegressor.html. Acesso em: 27 set. 2023.

SOUZA, T. P. C. Simulação de uma planta piloto de biodiesel com estudo de viabilidade econômica preliminar utilizando o ASPEN/HYSYS. Recife, 2011.

VELIČKOVIĆ, A. V., AVRAMOVIĆ, J. M., STAMENKOVIĆ, O. S., VELJKOVIĆ, V. B. Kinetics of the sunflower oil ethanolysis using CaO as catalyst. *Chemical Industry & Chemical Engineering Quarterly*, v. 22, p. 409-418, 2016.

APÊNDICE A – Algoritmo de otimização do bloco de hidrólise

```

import pandas as pd
import matplotlib.pyplot as plt
import seaborn as sns
import numpy as np
import math as mt
from sklearn.neural_network import MLPRegressor
from sklearn.model_selection import train_test_split
from sklearn.preprocessing import StandardScaler

# IMPORTANDO OS DADOS OPERACIONAIS GERADOS NO ASPEN PLUS

operational_data = pd.read_excel('hydro_data.xlsx')
operational_df = pd.DataFrame(operational_data, columns=['Alimentação de água (kmol/h)', 'N° de tubos', 'Pressão de operação (bar)', 'Vazão de saída de ácido oleico (kg/h)', 'MFTRIO', 'ENERGY (KW)', 'CO2EMISS', 'UTILCOST']) #Dataframe operacional

# IMPORTANDO OS DADOS PARA OS CÁLCULOS ECONÔMICOS

economic_data_utilities = pd.read_excel('db_optimizer.xlsx')
economic_data_mps = pd.read_excel('db_optimizer2.xlsx')
economic_data_outros = pd.read_excel('db_optimizer3.xlsx')
economic_data_depreciacao = pd.read_excel('db_optimizer4.xlsx')
economic_data_eletricidade = pd.read_excel('db_optimizer5.xlsx')

# CALCULANDO OS INDICADORES ECONÔMICOS COM OS DADOS IMPORTADOS ANTERIORMENTE

preco_reator_tubular__metro = 9460 #Baseando-se nos trabalhos feitos por Albuquerque et al., 2019

COP = np.zeros(len(operational_df['N° de tubos'])) #Construindo o vetor COP para um posterior preenchimento
CTC = np.zeros(len(operational_df['N° de tubos'])) #Construindo o vetor CTC para um posterior preenchimento
TAC = np.zeros(len(operational_df['N° de tubos'])) #Construindo o vetor TAC para um posterior preenchimento
PBP = np.zeros(len(operational_df['N° de tubos'])) #Construindo o vetor PBP para um posterior preenchimento
CO2 = np.zeros(len(operational_df['N° de tubos'])) #Construindo o vetor CO2 para um posterior preenchimento

for i in range(len(operational_df['N° de tubos'])):

    ## AQUECEDOR (TROCADOR DE CALOR)

    Q = (operational_df['ENERGY (KW)'][i])*3412.14 #Cálculo da carga térmica
    design_pressure = 56*14.5 #Cálculo da pressão de projeto
    Cb = mt.exp(0.32325+0.766*(mt.log(Q))) #Cálculo da base de custos para um trocado de calor
    Fm = 1.7 #Adotando um reator revestido de aço inoxidável
    Fp = 0.986 - 0.0035*(design_pressure/500)+0.0175*(design_pressure/500)**2 #Cálculo do fator de pressão
    cost_he = Fp*Fm*Cb #Custo final do trocador de calor

    ## REATOR TUBULAR

    cost_reator = preco_reator_tubular__metro*(operational_df['N° de tubos'][i])*1.25 #Custo do reator tubular baseando-se no seu N° de tubos (80 cm por tubo)

    custo Equipamento = cost_he + cost_reator
    custo_mps = (operational_df['Alimentação de água (kmol/h)'][i])*(economic_data_mps['Me-
dia'][1])*18+(3978.362)*(economic_data_mps['Media'][2]) #Custo com matérias-primas, dada a alimentação de
OGRs de 3978.362 kg/h
    custo_etericidade_hora = (operational_df['ENERGY (KW)'][i])*(economic_data_eletricidade['Custos de ele-
tricidade ($/kWh)'][0])
    tempo_depreciacao_equipamento_anos = 12

```

```

tempo_depreciacao_catalisador_anos = 16
volume_catalisador_i = 0.125
custo_total_catalisador_i = (volume_catalisador_i*economic_data_mps['Media'][4])*4.6
custo_total_catalisador_hora_i = custo_total_catalisador_i/(tempo_depreciacao_catalisador_anos*365*24)
custo_instalacao = 0.39*custo_equipamento
custo_manutencao = 0.32*custo_equipamento
custo_logistica = 0.08*custo_equipamento
custo_mao_de_obra = 0.08*custo_equipamento
waste_treatment_cost = 0.0136*volume_catalisador_i #Custo de tratamento de resíduos
custo_utilidade_h = operational_df['UTILCOST'][i]

COP[i] = custo_mps+custo_etericidade_hora+custo_total_catalisador_hora_i+((((custo_manuten-
cao+custo_mao_de_obra)/tempo_depreciacao_equipamento_anos)/365)/24)
CTC[i] = custo_equipamento+((custo_mps+custo_etericidade_hora+custo_total_catalisa-
dor_hora_i)*tempo_depreciacao_equipamento_anos*365*24)+custo_instalacao+custo_manutencao+custo_lo-
gistica+custo_mao_de_obra #Ao longo da depreciação do equipamento
TAC[i] = custo_utilidade_h*365*24+((custo_equipamento+custo_instalacao+custo_manutencao)/3)+wa-
ste_treatment_cost*365*24
PBP[i] = (custo_equipamento)/(((1-0.15)*(operational_df['Vazão de saída de ácido oleico (kg/h)'][i]))*(econo-
mic_data_mps['Media'][3])+0.08*custo_equipamento)
CO2[i] = operational_df['CO2EMISS'][i]

operational_df.insert(5, "COP (US$)", COP) #Inserindo o COP no dataframe operacional
operational_df.insert(6, "CTC (US$)", CTC) #Inserindo o CTC no dataframe operacional
operational_df.insert(7, "TAC (US$)", TAC) #Inserindo o TAC no dataframe operacional
operational_df.insert(8, "PBP (anos)", PBP) #Inserindo o PBP no dataframe operacional
operational_df.insert(9, "Emissão de CO2 (kg/h)", CO2) #Inserindo a emissão de CO2 no dataframe operacional

# DIVISÃO DE DADOS DE TREINO E DE TESTE

operational_df_x = operational_df.iloc[:, :3]
operational_df_Y = operational_df.iloc[:, 3:]

X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(operational_df_x, operational_df_Y, test_size=0.2, ran-
dom_state=42)

# IDENTIFICANDO A INTENSIDADE DA CORRELAÇÃO ENTRE AS VARIÁVEIS DE PROJETO (HE-
ATMAP)

matrix_df = operational_df.iloc[:, [0,1,2,3,5,6,7,8,9]]

correlation_matrix = matrix_df.corr()

plt.figure(figsize=(10, 8))
heatmap = sns.heatmap(correlation_matrix, annot=True, fmt=".2f", cmap='RdBu_r', linewidths=.5, an-
not_kws={"size": 12, "weight": "bold"}, center=0, vmin=-1, vmax=1)
heatmap.set_xticklabels(heatmap.get_xticklabels(), size=11, family="serif", weight="bold")
heatmap.set_yticklabels(heatmap.get_yticklabels(), size=11, family="serif", weight="bold")
plt.show()

# IMPLEMENTANDO A RNA - VAZÃO DE OA

previsores = X_train
scaler = StandardScaler()
previsores = scaler.fit_transform(previsores)
test = scaler.transform(X_test)

oa_flow = y_train.iloc[:, 0].values

```

```
regressor = MLPRegressor(hidden_layer_sizes=(8,), max_iter=1500000, activation='relu', random_state=42,
solver = 'adam', batch_size = 50, verbose=1)
regressor.fit(previsores, oa_flow)
```

```
previsao_oa_flow = regressor.predict(test)
```

IMPLEMENTANDO A RNA - COP

```
cop_df = y_train.iloc[:, 2].values
```

```
regressor = MLPRegressor(hidden_layer_sizes=(8,), max_iter=1500000, activation='relu', random_state=42,
solver = 'adam', batch_size = 50, verbose=1)
regressor.fit(previsores, cop_df)
```

```
previsao_cop = regressor.predict(test)
```

IMPLEMENTANDO A RNA - CTC

```
ctc_df = y_train.iloc[:, 3].values
```

```
regressor = MLPRegressor(hidden_layer_sizes=(8,), max_iter=1500000, activation='relu', random_state=42,
solver = 'adam', batch_size = 50, verbose=1)
regressor.fit(previsores, ctc_df)
```

```
previsao_ctc = regressor.predict(test)
```

IMPLEMENTANDO A RNA - TAC

```
tac_df = y_train.iloc[:, 4].values
```

```
regressor = MLPRegressor(hidden_layer_sizes=(8,), max_iter=1500000, activation='relu', random_state=42,
solver = 'adam', batch_size = 50, verbose=1)
regressor.fit(previsores, tac_df)
```

```
previsao_tac = regressor.predict(test)
```

IMPLEMENTANDO A RNA - PBP

```
pbp_df = y_train.iloc[:, 5].values
```

```
regressor = MLPRegressor(hidden_layer_sizes=(8,), max_iter=1500000, activation='relu', random_state=42,
solver = 'adam', batch_size = 50, verbose=1)
regressor.fit(previsores, pbp_df)
```

```
previsao_pbp = regressor.predict(test)
```

IMPLEMENTANDO A RNA - EMISSÃO DE CO2

```
co2_df = y_train.iloc[:, 6].values
```

```
regressor = MLPRegressor(hidden_layer_sizes=(8,), max_iter=1500000, activation='relu', random_state=42,
solver = 'adam', batch_size = 50, verbose=1)
regressor.fit(previsores, co2_df)
```

```
previsao_co2 = regressor.predict(test)
```

CRIANDO O DATAFRAME DE PREDIÇÃO

```
predict_df = X_test
```

```
predict_df.insert(3, "OA_predict", previsao_oa_flow)
predict_df.insert(4, "COP_predict", previsao_cop)
predict_df.insert(5, "CTC_predict", previsao_ctc)
predict_df.insert(6, "TAC_predict", previsao_tac)
predict_df.insert(7, "PBP_predict", previsao_pbp)
predict_df.insert(8, "CO2_predict", previsao_co2)
predict_df.insert(9, "MFTRIO_predict", y_test['MFTRIO'])
```

ENCONTRANDO OS VALORES MÁXIMOS E MÍNIMOS DA PREDIÇÃO

VAZÃO DE ÁCIDO OLEICO

```
min_oa = min(previsao_oa_flow)
max_oa = max(previsao_oa_flow)
```

COP

```
min_cop = min(previsao_cop)
max_cop = max(previsao_cop)
```

CTC

```
min_ctc = min(previsao_ctc)
max_ctc = max(previsao_ctc)
```

TAC

```
min_tac = min(previsao_tac)
max_tac = max(previsao_tac)
```

PBP

```
min_pbp = min(previsao_pbp)
max_pbp = max(previsao_pbp)
```

EMISSÃO DE CO2

```
min_co2 = min(previsao_co2)
max_co2 = max(previsao_co2)
```

IMPLEMENTANDO A FUNÇÃO DE DESEJABILIDADE

```
d_oa = np.zeros(len(predict_df['Nº de tubos'])) #Construindo o vetor de desejabilidade de produtividade de ácido
oleico para um posterior preenchimento
d_cop = np.zeros(len(predict_df['Nº de tubos'])) #Construindo o vetor de desejabilidade de COP para um poste-
rior preenchimento
d_ctc = np.zeros(len(predict_df['Nº de tubos'])) #Construindo o vetor de desejabilidade de CTC para um poste-
rior preenchimento
d_tac = np.zeros(len(predict_df['Nº de tubos'])) #Construindo o vetor de desejabilidade de TAC para um poste-
rior preenchimento
d_pbp = np.zeros(len(predict_df['Nº de tubos'])) #Construindo o vetor de desejabilidade de PBP para um poste-
rior preenchimento
d_co2 = np.zeros(len(predict_df['Nº de tubos'])) #Construindo o vetor de desejabilidade de emissão de CO2 para
um posterior preenchimento
desejabilidade = np.zeros(len(predict_df['Nº de tubos'])) #Construindo o vetor de desejabilidade total para um
posterior preenchimento
```

```

predict_df.insert(10, "DESEJABILIDADE OA", d_oa) #Inserindo a desejabilidade de produtividade de ácido
oleico no dataframe de predição
predict_df.insert(11, "DESEJABILIDADE COP", d_cop) #Inserindo a desejabilidade de COP no dataframe de
predição
predict_df.insert(12, "DESEJABILIDADE CTC", d_ctc) #Inserindo a desejabilidade de CTC no dataframe de
predição
predict_df.insert(13, "DESEJABILIDADE TAC", d_tac) #Inserindo a desejabilidade de TAC no dataframe de
predição
predict_df.insert(14, "DESEJABILIDADE PBP", d_pbp) #Inserindo a desejabilidade de PBP no dataframe de
predição
predict_df.insert(15, "DESEJABILIDADE CO2", d_co2) #Inserindo a desejabilidade de emissão de CO2 no da-
taframe de predição
predict_df.insert(16, "DESEJABILIDADE TOTAL", desejabilidade) #Inserindo a desejabilidade total no data-
frame de predição

```

CALCULANDO AS DESEJABILIDADES

```

for k in predict_df.index:
    predict_df['DESEJABILIDADE OA'][k] = ((predict_df['OA_predict'][k])-min_oa)/(max_oa-min_oa)
    predict_df['DESEJABILIDADE COP'][k] = (max_cop-(predict_df['COP_predict'][k]))/(max_cop-min_cop)
    predict_df['DESEJABILIDADE CTC'][k] = (max_ctc-(predict_df['CTC_predict'][k]))/(max_ctc-min_ctc)
    predict_df['DESEJABILIDADE TAC'][k] = (max_tac-(predict_df['TAC_predict'][k]))/(max_tac-min_tac)
    predict_df['DESEJABILIDADE PBP'][k] = (max_pbp-(predict_df['PBP_predict'][k]))/(max_pbp-min_pbp)
    predict_df['DESEJABILIDADE CO2'][k] = (max_co2-(predict_df['CO2_predict'][k]))/(max_co2-min_co2)
    predict_df['DESEJABILIDADE TOTAL'][k] = predict_df['DESEJABILIDADE OA'][k]*predict_df['DESE-
JABILIDADE COP'][k]*predict_df['DESEJABILIDADE CTC'][k]*predict_df['DESEJABILIDADE
TAC'][k]*predict_df['DESEJABILIDADE PBP'][k]

```

FILTRANDO OS DADOS DE MELHOR CONVERSÃO (Garantir uma fração mássica de trioleína residual igual ou inferior à do processo inicial)

```

filtro = predict_df["MFTRIO_predict"] <= 0.0012
predict_df = predict_df[filtro]

```

FILTRANDO A MAIOR DESEJABILIDADE CALCULADA

```

maior_desejabilidade = max(predict_df['DESEJABILIDADE TOTAL'])
melhor_resultado = predict_df.loc[predict_df['DESEJABILIDADE TOTAL'] == maior_desejabilidade]
print(melhor_resultado)
melhores_saidas = melhor_resultado.iloc[:, [3, 4, 5, 6, 7, 8]].values

```

```

melhor_oa_flow = melhores_saidas[0][0]
melhor_cop = melhores_saidas[0][1]
melhor_ctc = melhores_saidas[0][2]
melhor_tac = melhores_saidas[0][3]
melhor_pbp = melhores_saidas[0][4]
melhor_co2 = melhores_saidas[0][5]

```

COMPARANDO COM OS INDICADORES ANTERIORES À OTIMIZAÇÃO

VARIÁVEIS INICIAIS (Cálculos similares aos elaborados anteriormente)

```

n_tube_i = 10
flow_water_i = 120
cons_energy_i = 18.27349
flow_oa_i = 3826.04912926076
custo_utilidade_h_i = 0.649951494
custo Equipamento_i = preco_reator_tubular_metro*n_tube_i*1.25
custo_mps_i = flow_water_i*(economic_data_mps['Media'][1])*18+(3978.362)*(economic_data_mps['Me-
dia'][2])
custo_etericidade_hora_i = cons_energy_i*(economic_data_eletricidade['Custos de eletricidade ($/kWh)'][0])

```

```

custo_instalacao_i = 0.39*custo_equipamento_i
custo_manutencao_i = 0.32*custo_equipamento_i
custo_logistica_i = 0.08*custo_equipamento_i
custo_mao_de_obra_i = 0.08*custo_equipamento_i

cop_h_i = custo_mps_i+custo_etericidade_hora_i+custo_total_catalisador_hora_i+((((custo_manuten-
cao_i+custo_mao_de_obra_i)/tempo_depreciacao_equipamento_anos)/365)/24)
ctc_i = custo_equipamento_i+((custo_mps_i+custo_etericidade_hora_i+custo_total_catalisa-
dor_hora_i)*tempo_depreciacao_equipamento_anos*365*24)+custo_instalacao_i+custo_manuten-
cao_i+custo_logistica_i+custo_mao_de_obra_i #Ao longo da depreciação do equipamento
tac_i = custo_utilidade_h_i*365*24+(custo_equipamento_i+custo_instalacao_i+custo_manutencao_i)/3+wa-
ste_treatament_cost*365*24
pbp_i = (custo_equipamento_i)/(((1-0.15)*flow_oa_i*(economic_data_mps['Media'])*3))+0.08*custo_equipa-
mento_i)
co2_emiss_i = 4.32552392

## DATAFRAME COMPARATIVO (Processo inicial vs Processo otimizado)

variaveis = ['VAZÃO DE OA', 'COP', 'CTC', 'TAC', 'PBP', 'CO2']
dados_iniciais = [flow_oa_i, cop_h_i, ctc_i, tac_i, pbp_i, co2_emiss_i]
dados_ideais = [melhor_oa_flow, melhor_cop, melhor_ctc, melhor_tac, melhor_pbp, melhor_co2]
diferenca = np.zeros(len(dados_iniciais))
dif_percentual = np.zeros(len(dados_iniciais))
variacao = []

for j in range (len(dados_iniciais)):
    diferenca[j] = ((dados_iniciais[j]-dados_ideais[j])**2)**0.5
    dif_percentual[j] = ((diferenca[j])/(dados_iniciais[j]))*100
    if dados_iniciais[j] > dados_ideais[j]:
        variacao.append('-')
    else:
        variacao.append('+')

informacoes = list(zip(variaveis, dados_iniciais, dados_ideais, diferenca, dif_percentual, variacao))
dataframe_comparativo = pd.DataFrame(informacoes, columns=['VARIÁVEIS', 'DADOS INICIAIS', 'DADOS
OTIMIZADOS', 'DIFERENÇA', 'DIFERENÇA %', 'SALDO'])

```

APÊNDICE B – Algoritmo de otimização do bloco de esterificação

```

import pandas as pd
import matplotlib.pyplot as plt
import seaborn as sns
import numpy as np
import math as mt
from sklearn.neural_network import MLPRegressor
from sklearn.model_selection import train_test_split
from sklearn.preprocessing import StandardScaler

# IMPORTANDO OS DADOS OPERACIONAIS GERADOS NO ASPEN PLUS

operational_data = pd.read_excel('esterification_data.xlsx')
operational_df = pd.DataFrame(operational_data, columns=['Pressão de operação (bar)', 'Alimentação de etanol (kg/h)', 'Nº de estágios', 'Razão de refluxo', 'Vazão de produto de base (kg/h)', 'Volume de catalisador (L)', 'Produção de etil oleato (kg/h)', 'ETOH PRODUTO', 'REBDUTY (KW)', 'CONDUTY (KW)', 'BOTUTIL (KG/H)', 'DESTUTIL (KG/H)', 'TEMPOP (C°)', 'CO2EMISS (KG/H)', 'BOTPRESS (BAR)', 'tensao_mistura', 'flow_rate_l', 'density_l', 'molecular_weight_l', 'flow_rate_v', 'density_v', 'molecular_weight_v', 'MFOLEIC'])
#Dataframe operacional

# IMPORTANDO OS DADOS PARA OS CÁLCULOS ECONÔMICOS

economic_data_utilities = pd.read_excel('db_optimizer.xlsx')
economic_data_mps = pd.read_excel('db_optimizer2.xlsx')
economic_data_outros = pd.read_excel('db_optimizer3.xlsx')
economic_data_depreciacao = pd.read_excel('db_optimizer4.xlsx')
economic_data_eletricidade = pd.read_excel('db_optimizer5.xlsx')

# CALCULANDO OS INDICADORES ECONÔMICOS COM OS DADOS IMPORTADOS ANTERIORMENTE

vazao_oa = alimentacao_ao

COP = np.zeros(len(operational_df['Pressão de operação (bar)'])) #Construindo o vetor COP para um posterior preenchimento
CTC = np.zeros(len(operational_df['Pressão de operação (bar)'])) #Construindo o vetor CTC para um posterior preenchimento
TAC = np.zeros(len(operational_df['Pressão de operação (bar)'])) #Construindo o vetor TAC para um posterior preenchimento
PBP = np.zeros(len(operational_df['Pressão de operação (bar)'])) #Construindo o vetor PBP para um posterior preenchimento
CO2 = np.zeros(len(operational_df['Pressão de operação (bar)'])) #Construindo o vetor CO2 para um posterior preenchimento

custo_etericidade_hora = np.zeros(len(operational_df['Pressão de operação (bar)']))

for i in operational_df.index:

    ## LIQUID PHASE

    surface_tension = operational_df['tensao_mistura'][i] #Tensão superficial da alimentação na fase líquida
    flow_rate_l = 2.2*operational_df['flow_rate_l'][i] #Vazão de alimentação na fase líquida
    density_l = 0.062428*operational_df['density_l'][i] #Densidade da alimentação na fase líquida
    molecular_weight_l = operational_df['molecular_weight_l'][i] #Peso molecular da alimentação na fase líquida

    ## VAPOR PHASE

    flow_rate_v = 2.2*operational_df['flow_rate_v'][i] #Vazão de alimentação na fase vapor
    density_v = 0.062428*operational_df['density_v'][i] #Densidade da alimentação na fase vapor

```

```

molecular_weight_v = operational_df['molecular_weight_v'][i] #Peso molecular da alimentação na fase vapor

flow_ratio_parameter = (flow_rate_l/flow_rate_v)*((density_v/density_l)**0.5) #Taxa de fluxo de alimentação
csb_24in_m_s = 0.09 #Valor adotado da Correlação de Fair para um "Plate spacing" de 24 in
surface_tension_factor = (surface_tension/20)**0.2 #Fator de tensão superficial
FF = 1 #Fator espumante
FHA = 1 #Fator de área de orifício das placas
C = csb_24in_m_s*surface_tension_factor*FF*FHA #Parâmetro de capacidade
Uf = (C*((density_l-density_v)/density_v)**(1/2))*11.82 #Velocidade de inundação
f = 0.8 #Inundação de 80% do sistema
Ad_At = 0.1+((flow_ratio_parameter-0.1)/9) #Relação entre área descendente e a secção circular da coluna
diametro_interno = ((4*flow_rate_v)/(f*Uf*3.14*(1-Ad_At)*density_v))**(1/2)
dif_pressao = (operational_df['BOTPRESS (BAR)'][i]-1)*14.5038 #psia
pressao_projeto = mt.exp(0.60608+0.91615*(mt.log(dif_pressao)) + 0.0015655*(mt.log(dif_pressao))**2)
aco_carbono_stress_psi = 15
efic_soldagem = 1 #Eficiência de soldagem
pv_code = (pressao_projeto*diametro_interno)/(2*aco_carbono_stress_psi*efic_soldagem-1.2*pressao_pro-
jeto) #Espessura da parede da coluna
pv_code_add = (0.22*(diametro_interno+2.5+18)*(2.14*operational_df['Nº de estágios'][i])**2)/(aco_car-
bono_stress_psi*(diametro_interno+2.5)**2) #Espessura adicional da parede da coluna
pv_code_total = pv_code+pv_code_add #Espessura total da parede da coluna
pv_code_medio = (pv_code+pv_code_total)/2 #Espessura média da parede da coluna
pc_tol_corrosao = 1.125*pv_code_medio #Espessura da parede da coluna com uma tolerância à corrosão
weight = 3.14*(diametro_interno+pc_tol_corrosao)*(2.14*operational_df['Nº de estágios'][i] +0.8*dia-
tro_interno)*pc_tol_corrosao*0.284 #Peso da coluna, adotando 2,14 ft como a altura entre pratos
custo_vertical = mt.exp(7.2756+0.18255*(mt.log(weight))+0.02297*(mt.log(weight))**2) #Custo vertical da
coluna
custos_plataformas_escadas = 300.9*(diametro_interno**(0.63316))*((2.14*operational_df['Nº de está-
gios'][i])**0.80161)
custo_stages = 468*mt.exp(0.1739*diametro_interno*0.083333) #Custo de cada prato da coluna
custo_equipamento = custo_vertical+custos_plataformas_escadas+custo_stages*operational_df['Nº de está-
gios'][i]
custo_mps = (operational_df['Alimentação de etanol (kg/h)'][i])*(economic_data_mps['Media'][0]) #Custo
com matérias-primas
custo_utilidades = operational_df['BOTUTIL (KG/H)'][i]+ operational_df['DESTUTIL (KG/H)'][i]
custo_etericidade_hora[i] = (((operational_df['REBDUTY (KW)'][i])**2)**0.5 + ((operational_df['CON-
DUTY (KW)'][i])**2)**0.5)*(economic_data_eletricidade['Custos de eletricidade ($/kWh)'][0])
tempo_depreciacao_equipamento_anos = 12
tempo_depreciacao_catalisador_anos = 16
custo_total_catalisador = (operational_df['Volume de catalisador (L)'][i]*economic_data_mps['Me-
dia'][5])*0.75
custo_total_catalisador_hora = custo_total_catalisador/(tempo_depreciacao_catalisador_anos*365*24)
custo_instalacao = 0.39*custo_equipamento
custo_manutencao = 0.32*custo_equipamento
custo_logistica = 0.08*custo_equipamento
custo_mao_de_obra = 0.08*custo_equipamento
waste_treatment_cost = 0.0136*(operational_df['Volume de catalisador (L)'][i])*0.75 # Custo com trata-
mento de resíduos

COP[i] = custo_mps+custo_utilidades+custo_total_catalisador_hora+custo_etericidade_hora[i]+(((custo_ma-
nutencao+custo_mao_de_obra)/tempo_depreciacao_equipamento_anos)/365)/24)
CTC[i] = custo_equipamento+((custo_mps+custo_etericidade_hora[i]+custo_total_catalisa-
dor_hora)*tempo_depreciacao_equipamento_anos*365*24)+custo_instalacao+custo_manutencao+custo_logis-
tica+custo_mao_de_obra #Ao longo da depreciação do equipamento
TAC[i] = custo_utilidades*365*24+((custo_equipamento+custo_instalacao+custo_manutencao)/3)+wa-
ste_treatment_cost*365*24
PBP[i] = (custo_equipamento)/((1-0.15)*(operational_df['Produção de etil oleato (kg/h)'][i])*(econo-
mic_data_mps['Media'][7]))+0.08*custo_equipamento)
CO2[i] = operational_df['CO2EMISS (KG/H)'][i]

```

```
operational_df.insert(22, "COP (US$)", COP) #Inserindo o COP no dataframe operacional
operational_df.insert(23, "CTC (US$)", CTC) #Inserindo o CTC no dataframe operacional
operational_df.insert(24, "TAC (US$)", TAC) #Inserindo o TAC no dataframe operacional
operational_df.insert(25, "PBP (US$)", PBP) #Inserindo o PBP no dataframe operacional
operational_df.insert(26, "Emissão de CO2 (kg/h)", CO2) #Inserindo a emissão de CO2 no dataframe operacional
```

DIVISÃO DE DADOS DE TREINO E DE TESTE

```
operational_df_x = operational_df.iloc[:, :6]
operational_df_Y = operational_df.iloc[:, 6:]
X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(operational_df_x, operational_df_Y, test_size=0.3, random_state=42)
```

IDENTIFICANDO A INTENSIDADE DA CORRELAÇÃO ENTRE AS VARIÁVEIS DE PROJETO

```
matrix_df = operational_df.iloc[:, [0,1,2,3,4,5,6,22,23,24,25,26]]
correlation_matrix = matrix_df.corr()
plt.figure(figsize=(10, 8))
heatmap = sns.heatmap(correlation_matrix, annot=True, fmt=".2f", cmap='RdBu_r', linewidths=.5, annot_kws={"size": 12, "weight": "bold"}, center=0, vmin=-1, vmax=1)
heatmap.set_xticklabels(heatmap.get_xticklabels(), size=11, family="serif", weight="bold")
heatmap.set_yticklabels(heatmap.get_yticklabels(), size=11, family="serif", weight="bold")
plt.show()
```

IMPLEMENTANDO A RNA - VAZÃO DE ETIL OLEATO

```
previsores = X_train.values
ethyl_flow = y_train.iloc[:, 0].values

scaler = StandardScaler()
previsores = scaler.fit_transform(previsores)
test = scaler.transform(X_test)

regressor = MLPRegressor(hidden_layer_sizes=(8,), max_iter=100000, activation='relu', random_state=42, solver='adam', batch_size=50, verbose=1)
regressor.fit(previsores, ethyl_flow)

previsao_ethyl_flow = regressor.predict(test)
```

IMPLEMENTANDO A RNA - COP

```
cop_df = y_train.iloc[:, 16].values

regressor = MLPRegressor(hidden_layer_sizes=(10,), max_iter=100000, activation='relu', random_state=42, solver='adam', batch_size=50, verbose=1)
regressor.fit(previsores, cop_df)

previsao_cop = regressor.predict(test)
```

IMPLEMENTANDO A RNA - CTC

```
ctc_df = y_train.iloc[:, 17].values

regressor = MLPRegressor(hidden_layer_sizes=(10,), max_iter=100000, activation='relu', random_state=42, solver='adam', batch_size=50, verbose=1)
regressor.fit(previsores, ctc_df)

previsao_ctc = regressor.predict(test)
```

IMPLEMENTANDO A RNA - TAC

```
tac_df = y_train.iloc[:, 18].values
```

```
regressor = MLPRegressor(hidden_layer_sizes=(10,), max_iter=100000, activation='relu', random_state=42,
solver = 'adam', batch_size = 50, verbose=1)
regressor.fit(previsores, tac_df)
```

```
previsao_tac = regressor.predict(test)
```

IMPLEMENTANDO A RNA - PBP

```
pbp_df = y_train.iloc[:, 19].values
```

```
regressor = MLPRegressor(hidden_layer_sizes=(10,), max_iter=100000, activation='relu', random_state=42,
solver = 'adam', batch_size = 50, verbose=1)
regressor.fit(previsores, pbp_df)
```

```
previsao_pbp = regressor.predict(test)
```

IMPLEMENTANDO A RNA - EMISSÃO DE CO2

```
co2_df = y_train.iloc[:, 20].values
```

```
regressor = MLPRegressor(hidden_layer_sizes=(10,), max_iter=100000, activation='relu', random_state=42,
solver = 'adam', batch_size = 50, verbose=1)
regressor.fit(previsores, co2_df)
```

```
previsao_co2 = regressor.predict(test)
```

CRIANDO O DATAFRAME DE PREDIÇÃO

```
predict_df = X_test.iloc[:, :6]
```

```
predict_df.insert(6, "ETHYL_predict", previsao_ethyl_flow)
predict_df.insert(7, "COP_predict", previsao_cop)
predict_df.insert(8, "CTC_predict", previsao_ctc)
predict_df.insert(9, "TAC_predict", previsao_tac)
predict_df.insert(10, "PBP_predict", previsao_pbp)
predict_df.insert(11, "CO2_predict", previsao_co2)
predict_df.insert(12, "ETOH PRODUTO", y_test['ETOH PRODUTO'])
predict_df.insert(13, "MFOLEIC", y_test['MFOLEIC'])
```

ENCONTRANDO OS VALORES MÁXIMOS E MÍNIMOS DA PREDIÇÃO

VAZÃO DE ETIL OLEATO

```
min_ethyl = min(previsao_ethyl_flow)
max_ethyl = max(previsao_ethyl_flow)
```

COP

```
min_cop = min(previsao_cop)
max_cop = max(previsao_cop)
```

CTC

```
min_ctc = min(previsao_ctc)
```

```

max_ctc = max(previsao_ctc)

## TAC

min_tac = min(previsao_tac)
max_tac = max(previsao_tac)

## PBP

min_pbp = min(previsao_pbp)
max_pbp = max(previsao_pbp)

## EMISSÃO DE CO2

min_co2 = min(previsao_co2)
max_co2 = max(previsao_co2)

# IMPLEMENTANDO A FUNÇÃO DE DESEJABILIDADE

d_ethyl = np.zeros(len(predict_df['Nº de estágios'])) #Construindo o vetor de desejabilidade de produtividade de
etil oleato para um posterior preenchimento
d_cop = np.zeros(len(predict_df['Nº de estágios'])) #Construindo o vetor de desejabilidade de COP para um pos-
terior preenchimento
d_ctc = np.zeros(len(predict_df['Nº de estágios'])) #Construindo o vetor de desejabilidade de CTC para um pos-
terior preenchimento
d_tac = np.zeros(len(predict_df['Nº de estágios'])) #Construindo o vetor de desejabilidade de TAC para um pos-
terior preenchimento
d_pbp = np.zeros(len(predict_df['Nº de estágios'])) #Construindo o vetor de desejabilidade de PBP para um pos-
terior preenchimento
d_co2 = np.zeros(len(predict_df['Nº de estágios'])) #Construindo o vetor de desejabilidade de emissão de CO2
para um posterior preenchimento
desejabilidade = np.zeros(len(predict_df['Nº de estágios'])) #Construindo o vetor de desejabilidade total para um
posterior preenchimento

predict_df.insert(14, "DESEJABILIDADE ETHYL", d_ethyl) #Inserindo a desejabilidade de produtividade de
etil oleato no dataframe de predição
predict_df.insert(15, "DESEJABILIDADE COP", d_cop) #Inserindo a desejabilidade de COP no dataframe de
predição
predict_df.insert(16, "DESEJABILIDADE CTC", d_ctc) #Inserindo a desejabilidade de CTC no dataframe de
predição
predict_df.insert(17, "DESEJABILIDADE TAC", d_tac) #Inserindo a desejabilidade de TAC no dataframe de
predição
predict_df.insert(18, "DESEJABILIDADE PBP", d_pbp) #Inserindo a desejabilidade de PBP no dataframe de
predição
predict_df.insert(19, "DESEJABILIDADE CO2", d_co2) #Inserindo a desejabilidade de emissão de CO2 no da-
taframe de predição
predict_df.insert(20, "DESEJABILIDADE TOTAL", desejabilidade) #Inserindo a desejabilidade total no data-
frame de predição

## CALCULANDO AS DESEJABILIDADES

for k in predict_df.index:
    predict_df['DESEJABILIDADE ETHYL'][k] = ((predict_df['ETHYL_predict'][k])-min_ethyl)/(max_ethyl-
min_ethyl)
    predict_df['DESEJABILIDADE COP'][k] = (max_cop-(predict_df['COP_predict'][k]))/(max_cop-min_cop)
    predict_df['DESEJABILIDADE CTC'][k] = (max_ctc-(predict_df['CTC_predict'][k]))/(max_ctc-min_ctc)
    predict_df['DESEJABILIDADE TAC'][k] = (max_tac-(predict_df['TAC_predict'][k]))/(max_tac-min_tac)
    predict_df['DESEJABILIDADE PBP'][k] = (max_pbp-(predict_df['PBP_predict'][k]))/(max_pbp-min_pbp)
    predict_df['DESEJABILIDADE CO2'][k] = (max_co2-(predict_df['CO2_predict'][k]))/(max_co2-min_co2)

```

```
predict_df['DESEJABILIDADE TOTAL'][k] = predict_df['DESEJABILIDADE ETHYL'][k]*predict_df['DESEJABILIDADE COP'][k]*predict_df['DESEJABILIDADE CTC'][k]*predict_df['DESEJABILIDADE TAC'][k]*predict_df['DESEJABILIDADE PBP'][k]*predict_df['DESEJABILIDADE CO2'][k]
```

FILTRANDO OS DADOS DE MENOR TEOR DE ETANOL NOS PRODUTOS (Garantir uma vazão mássica igual ou menor que a da simulação inicial na saída do bloco)

```
filtro1 = predict_df["ETOH PRODUTO"] <= vazao_limite
predict_df = predict_df[filtro1]
```

FILTRANDO A MAIOR DESEJABILIDADE CALCULADA

```
maior_desejabilidade = max(predict_df['DESEJABILIDADE TOTAL'])
melhor_resultado = predict_df.loc[predict_df['DESEJABILIDADE TOTAL'] == maior_desejabilidade]
print(melhor_resultado)
melhores_saidas = melhor_resultado.iloc[:, [6, 7, 8, 9, 10, 11]].values
```

```
melhor_ethyl_flow = melhores_saidas[0][0]
melhor_cop = melhores_saidas[0][1]
melhor_ctc = melhores_saidas[0][2]
melhor_tac = melhores_saidas[0][3]
melhor_pbp = melhores_saidas[0][4]
melhor_co2 = melhores_saidas[0][5]
```

COMPARANDO COM OS INDICADORES ANTERIORES À OTIMIZAÇÃO

VARIÁVEIS INICIAIS (Cálculos similares aos elaborados anteriormente)

LIQUID PHASE

```
surface_tension_i = tensao_superficial_inicial
flow_rate_l_i = 2.2*fluxo_liquido_inicial
density_l_i = 0.062428*densidade_liquida_inicial
molecular_weight_l_i = peso_molecular_liquido_inicial
```

VAPOR PHASE

```
flow_rate_v_i = 2.2*fluxo_vapor_inicial
density_v_i = 0.062428*densidade_vapor_inicial
molecular_weight_v_i = peso_molecular_liquido_inicial
```

```
flow_ratio_parameter_i = (flow_rate_l_i/flow_rate_v_i)*((density_v_i/density_l_i)**0.5)
csb_24in_m_s_i = 0.09
surface_tension_factor_i = (surface_tension_i/20)**0.2
FF_i = 1
FHA_i = 1
C_i = csb_24in_m_s_i*surface_tension_factor_i*FF_i*FHA_i
Uf_i = (C_i*((density_l_i-density_v_i)/density_v_i)**(1/2))*11.82
f_i = 0.8
Ad_At_i = 0.1+(flow_ratio_parameter_i-0.1)/9
diametro_interno_i = ((4*flow_rate_v_i)/(f_i*Uf_i*3.14*(1-Ad_At_i)*density_v_i))**(1/2)
```

```
bottom_pressure = pressão_base_inicial
flow_etoh = alimentação_etanol_inicial
cost_utility_bottom = custo_utilidade_base
cost_utility_destilate = custo_utilidade_destilado
eletricity = gasto_eletricidade
flow_ethyl_i = vazao_etil_oleato_inicial
vazao_oa_i = vazao_oa_inicial
co2_emission = emissao_co2_inicial
```

```

volume_catalisador_i = volume_catalisador_inicial

dif_pressao_i = (bottom_pressure-1)*14.5038 #psia
pressao_projeto_i = mt.exp(0.60608+0.91615*(mt.log(dif_pressao_i)) + 0.0015655*(mt.log(dif_pressao_i))**2)
pv_code_i = (pressao_projeto_i*diametro_interno_i)/(2*aco_carbono_stress_psi*efic_soldagem-1.2*pressao_projeto_i)
pv_code_add_i = (0.22*(diametro_interno_i+2.5+18)*(2.14*27**2))/(aco_carbono_stress_psi*(diametro_interno_i+2.5)**2)
pv_code_total_i = pv_code_i+pv_code_add_i
pv_code_medio_i = (pv_code_i+pv_code_total_i)/2
pc_tol_corrosao_i = 1.125*pv_code_medio_i
weight_i = 3.14*(diametro_interno_i+pc_tol_corrosao_i)*(2.14*27 +0.8*diametro_interno_i)*pc_tol_corrosao_i*0.284 #Peso da coluna, adotando 2,14 ft como a altura entre pratos
custo_vertical_i = mt.exp(7.2756+0.18255*(mt.log(weight_i))+0.02297*(mt.log(weight_i))**2)
custos_plataformas_escadas_i = 300.9*(diametro_interno_i**(0.63316))*((2.14*27)**0.80161)
custo_stages_i = 468*mt.exp(0.1739*diametro_interno_i*0.083333)
custo_equipamento_i = custo_vertical_i+custos_plataformas_escadas_i+custo_stages_i*27
custo_mps_i = (flow_ethyl)*(economic_data_mps['Media']][0])
custo_utilidades_i = cost_utility_bottom + cost_utility_destilate
custo_etericidade_hora_i = (eletricity)*(economic_data_eletricidade['Custos de eletricidade ($/kWh)']][0])
custo_total_catalisador_i = (volume_catalisador_i*economic_data_mps['Media']][5])*0.75
custo_total_catalisador_hora_i = custo_total_catalisador/(tempo_depreciacao_catalisador_anos*365*24)
custo_instalacao_i = 0.39*custo_equipamento_i
custo_manutencao_i = 0.32*custo_equipamento_i
custo_logistica_i = 0.08*custo_equipamento_i
custo_mao_deobra_i = 0.08*custo_equipamento_i
waste_treatment_cost_i = 0.0136*volume_catalisador_i*0.75

cop_i = custo_mps_i+custo_utilidades_i+custo_etericidade_hora_i+custo_total_catalisador_hora_i+(((custo_manutencao_i+custo_mao_deobra_i)/tempo_depreciacao_equipamento_anos)/365)/24)
ctc_i = custo_equipamento_i+((custo_mps_i+custo_etericidade_hora_i+custo_total_catalisador_hora_i)*tempo_depreciacao_equipamento_anos*365*24)+custo_instalacao_i+custo_manutencao_i+custo_logistica_i+custo_mao_deobra_i #AO LONGO DA DEPRECIACÃO DO EQUIPAMENTO
tac_i = custo_utilidades_i*365*24+((custo_equipamento_i+custo_instalacao_i+custo_manutencao_i)/3)+waste_treatment_cost_i*365*24
pbp_i = (custo_equipamento_i)/((1-0.15)*(flow_ethyl_i)*(economic_data_mps['Media']][7])+0.08*custo_equipamento_i)
co2_i = co2_emission

## DATAFRAME COMPARATIVO

variaveis = ['VAZÃO DE ETIL OLEATO', 'COP', 'CTC', 'TAC', 'PBP', 'EMIÇÃO DE CO2']
dados_iniciais = [flow_ethyl_i, cop_i, ctc_i, tac_i, pbp_i, co2_i]
dados_ideais = [melhor_ethyl_flow, melhor_cop, melhor_ctc, melhor_tac, melhor_pbp, melhor_co2]
diferenca = np.zeros(len(dados_iniciais))
dif_percentual = np.zeros(len(dados_iniciais))
variacao = []

for j in range(len(dados_iniciais)):
    diferenca[j] = ((dados_iniciais[j]-dados_ideais[j])**2)**0.5
    dif_percentual[j] = ((diferenca[j])/(dados_iniciais[j]))*100
    if dados_iniciais[j] > dados_ideais[j]:
        variacao.append('-')
    else:
        variacao.append('+')

informacoes = list(zip(variaveis, dados_iniciais, dados_ideais, diferenca, dif_percentual, variacao))

dataframe_comparativo = pd.DataFrame(informacoes, columns=['VARIÁVEIS', 'DADOS INICIAIS', 'DADOS OTIMIZADOS', 'DIFERENÇA', 'DIFERENÇA %', 'SALDO'])

```

APÊNDICE C – Algoritmo de otimização do bloco de extração

```

import pandas as pd
import matplotlib.pyplot as plt
import seaborn as sns
import numpy as np
from sklearn.neural_network import MLPRegressor
from sklearn.preprocessing import StandardScaler
from sklearn.model_selection import train_test_split

# IMPORTANDO OS DADOS OPERACIONAIS GERADOS NO ASPEN PLUS

operational_data = pd.read_excel('extraction_data.xlsx')
operational_df = pd.DataFrame(operational_data, columns=['Alimentação de água (kg/h)', 'Temperatura (°C)',
'Glicerina na fase éster (kg/h)', 'FLOW ETHYL (KG/H)', 'VOL ETHYL FLOW', 'VOL WATER FLOW']) #Dataframe operacional

# IMPORTANDO OS DADOS PARA OS CÁLCULOS ECONÔMICOS

economic_data_utilities = pd.read_excel('db_optimizer.xlsx')
economic_data_mps = pd.read_excel('db_optimizer2.xlsx')
economic_data_outros = pd.read_excel('db_optimizer3.xlsx')
economic_data_depreciacao = pd.read_excel('db_optimizer4.xlsx')
economic_data_eletricidade = pd.read_excel('db_optimizer5.xlsx')

# CALCULANDO OS INDICADORES ECONÔMICOS COM OS DADOS IMPORTADOS

vazao_mass_alimentacao = vazao_etil_oleato_alimentacao_inicial
vazao_vol_alimentacao = vazao_volumetrica_etil_oleato_alimentacao_inicial
vazao_mass_outros = vazao_outros_alimentacao_inicial
vazao_vol_outros = vazao_volumetrica_outros_alimentacao_inicial

COP = np.zeros(len(operational_df['Alimentação de água (kg/h)'])) #Construindo o vetor COP para um posterior
preenchimento
CTC = np.zeros(len(operational_df['Alimentação de água (kg/h)'])) #Construindo o vetor CTC para um posterior
preenchimento
TAC = np.zeros(len(operational_df['Alimentação de água (kg/h)'])) #Construindo o vetor TAC para um posterior
preenchimento
PBP = np.zeros(len(operational_df['Alimentação de água (kg/h)'])) #Construindo o vetor PBP para um posterior
preenchimento

for i in range(len(operational_df['Alimentação de água (kg/h)'))):
    vazao_entrada_total = (operational_df['VOL WATER FLOW'][i]) + vazao_vol_alimentacao + vazao_vol_outros
    vazao_max_RDC = 120 #Rendimento máximo adotado p/ o extrator
    area_transv_min_fluxo = vazao_entrada_total/vazao_max_RDC #Área mínima p/ fluxo
    area_real_transv_fluxo = area_transv_min_fluxo/0.6 #Área real de fluxo p/ 60% do valor máximo
    diameter = ((area_real_transv_fluxo*4)/3.14)**0.5 #Diâmetro do extrator
    total_tangent_to_tangent_height = 12 #Altura tangente-tangente adotada p/ o extrator
    size_factor = total_tangent_to_tangent_height*(diameter**1.5) #Fator de tamanho
    custo_equipamento = 320*(size_factor**0.84)
    custo_mps = (operational_df['Alimentação de água (kg/h)'][i])*(economic_data_mps['Media'][1])
    tempo_depreciacao_equipamento_anos = 12
    custo_instalacao = 0.39*custo_equipamento
    custo_manutencao = 0.32*custo_equipamento
    custo_logistica = 0.08*custo_equipamento
    custo_mao_de_obra = 0.08*custo_equipamento

```

```

COP[i] = custo_mps+((((custo_manutencao+custo_mao_de_obra)/tempo_depreciacao_equipa-
mento_anos)/365)/24)
CTC[i] = custo_equipamento+(custo_mps*tempo_depreciacao_equipamento_anos*365*24)+custo_instala-
cao+custo_manutencao+custo_logistica+custo_mao_de_obra #Ao longo da depreciação do equipamento
TAC[i] = (custo_equipamento+custo_instalacao+custo_manutencao)/3
PBP[i] = (custo_equipamento)/(((1-0.15)*(operational_df['FLOW ETHYL (KG/H)'][i]))*(econo-
mic_data_mps['Media'][7])+0.08*custo_equipamento)

operational_df.insert(6, "COP (US$)", COP) #Inserindo o COP no dataframe operacional
operational_df.insert(7, "CTC (US$)", CTC) #Inserindo o CTC no dataframe operacional
operational_df.insert(8, "TAC (US$)", TAC) #Inserindo o TAC no dataframe operacional
operational_df.insert(9, "PBP (US$)", PBP) #Inserindo o PBP no dataframe operacional

# DIVISÃO DE DADOS DE TREINO E DE TESTE

operational_df_x = operational_df.iloc[:, :2]
operational_df_Y = operational_df.iloc[:, 2:]
X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(operational_df_x, operational_df_Y, test_size=0.2, ran-
dom_state=42)

# IDENTIFICANDO A INTENSIDADE DA CORRELAÇÃO ENTRE AS VARIÁVEIS DE PROJETO

matrix_df = operational_df.iloc[:, [0,1,2,6,7,8,9]]
correlation_matrix = matrix_df.corr()
plt.figure(figsize=(10, 8))
heatmap = sns.heatmap(correlation_matrix, annot=True, fmt=".2f", cmap='RdBu_r', linewidths=.5, an-
not_kws={'size': 12, "weight": "bold"}, center=0, vmin=-1, vmax=1)
heatmap.set_xticklabels(heatmap.get_xticklabels(), size=11, family="serif", weight="bold")
heatmap.set_yticklabels(heatmap.get_yticklabels(), size=11, family="serif", weight="bold")
plt.show()

# IMPLEMENTANDO A RNA - VAZÃO DE GLICERINA RESIDUAL

previsores = X_train.values
glicerine_flow = y_train.iloc[:, 0].values

scaler = StandardScaler()
previsores = scaler.fit_transform(previsores)
test = scaler.transform(X_test)

regressor = MLPRegressor(hidden_layer_sizes=(8,), max_iter=100000, activation='relu', random_state=42,
solver = 'adam', batch_size = 100, verbose=1)
regressor.fit(previsores, glicerine_flow)

previsao_glicerine_flow = regressor.predict(test)

# IMPLEMENTANDO A RNA - VAZÃO DE ETIL OLEATO

ethyl_flow = y_train.iloc[:, 1].values

regressor = MLPRegressor(hidden_layer_sizes=(8,), max_iter=100000, activation='relu', random_state=42,
solver = 'adam', batch_size = 100, verbose=1)
regressor.fit(previsores, ethyl_flow)

previsao_ethyl_flow = regressor.predict(test)

# IMPLEMENTANDO A RNA - COP

cop_df = y_train.iloc[:, 4].values

```

```

regressor = MLPRegressor(hidden_layer_sizes=(8,), max_iter=100000, activation='relu', random_state=42,
solver = 'adam', batch_size = 100, verbose=1)
regressor.fit(previsores, cop_df)

previsao_cop = regressor.predict(test)

# IMPLEMENTANDO A RNA - CTC

ctc_df = y_train.iloc[:, 5].values

regressor = MLPRegressor(hidden_layer_sizes=(8,), max_iter=100000, activation='relu', random_state=42,
solver = 'adam', batch_size = 100, verbose=1)
regressor.fit(previsores, ctc_df)

previsao_ctc = regressor.predict(test)

# IMPLEMENTANDO A RNA - TAC

tac_df = y_train.iloc[:, 6].values

regressor = MLPRegressor(hidden_layer_sizes=(8,), max_iter=100000, activation='relu', random_state=42,
solver = 'adam', batch_size = 100, verbose=1)
regressor.fit(previsores, tac_df)
previsao_tac = regressor.predict(test)

# IMPLEMENTANDO A RNA - PBP

pbp_df = y_train.iloc[:, 7].values

regressor = MLPRegressor(hidden_layer_sizes=(8,), max_iter=100000, activation='relu', random_state=42,
solver = 'adam', batch_size = 100, verbose=1)
regressor.fit(previsores, pbp_df)

previsao_pbp = regressor.predict(test)

# CRIANDO O DATAFRAME DE PREDIÇÃO

predict_df = X_test

predict_df.insert(2, "glicerol_predict", previsao_glicerine_flow)
predict_df.insert(3, "ethyl_predict", previsao_ethyl_flow)
predict_df.insert(4, "COP_predict", previsao_cop)
predict_df.insert(5, "CTC_predict", previsao_ctc)
predict_df.insert(6, "TAC_predict", previsao_tac)
predict_df.insert(7, "PBP_predict", previsao_pbp)

# ENCONTRANDO OS VALORES MÁXIMOS E MÍNIMOS DA PREDIÇÃO

## VAZÃO DE GLICERINA RESIDUAL
min_gly = min(previsao_glicerine_flow)
max_gly = max(previsao_glicerine_flow)

## VAZÃO DE ETIL OLEATO
min_ethyl = min(previsao_ethyl_flow)
max_ethyl = max(previsao_ethyl_flow)

## COP
min_cop = min(previsao_cop)
max_cop = max(previsao_cop)

```

```

## CTC
min_ctc = min(previsao_ctc)
max_ctc = max(previsao_ctc)

## TAC
min_tac = min(previsao_tac)
max_tac = max(previsao_tac)

## PBP
min_pbp = min(previsao_pbp)
max_pbp = max(previsao_pbp)

# IMPLEMENTANDO A FUNÇÃO DE DESEJABILIDADE

d_gly = np.zeros(len(predict_df['Alimentação de água (kg/h)'])) #Construindo o vetor de desejabilidade de glicerina residual para um posterior preenchimento
d_eth = np.zeros(len(predict_df['Alimentação de água (kg/h)'])) #Construindo o vetor de desejabilidade de vazão de etil oleato para um posterior preenchimento
d_cop = np.zeros(len(predict_df['Alimentação de água (kg/h)'])) #Construindo o vetor de desejabilidade de COP para um posterior preenchimento
d_ctc = np.zeros(len(predict_df['Alimentação de água (kg/h)'])) #Construindo o vetor de desejabilidade de CTC para um posterior preenchimento
d_tac = np.zeros(len(predict_df['Alimentação de água (kg/h)'])) #Construindo o vetor de desejabilidade de TAC para um posterior preenchimento
d_pbp = np.zeros(len(predict_df['Alimentação de água (kg/h)'])) #Construindo o vetor de desejabilidade de PBP para um posterior preenchimento
desejabilidade = np.zeros(len(predict_df['Alimentação de água (kg/h)'])) #Construindo o vetor de desejabilidade total para um posterior preenchimento

predict_df.insert(8, "DESEJABILIDADE GLY", d_gly) #Inserindo a desejabilidade de glicerina residual no dataframe de predição
predict_df.insert(9, "DESEJABILIDADE ETIL", d_eth) #Inserindo a desejabilidade de vazão de etil oleato no dataframe de predição
predict_df.insert(10, "DESEJABILIDADE COP", d_cop) #Inserindo a desejabilidade de COP no dataframe de predição
predict_df.insert(11, "DESEJABILIDADE CTC", d_ctc) #Inserindo a desejabilidade de CTC no dataframe de predição
predict_df.insert(12, "DESEJABILIDADE TAC", d_tac) #Inserindo a desejabilidade de TAC no dataframe de predição
predict_df.insert(13, "DESEJABILIDADE PBP", d_pbp) #Inserindo a desejabilidade de PBP no dataframe de predição
predict_df.insert(14, "DESEJABILIDADE TOTAL", desejabilidade) #Inserindo a desejabilidade total no dataframe de predição

for k in predict_df.index:
    predict_df['DESEJABILIDADE GLY'][k] = (max_gly-(predict_df['glicerol_predict'][k]))/(max_gly-min_gly)
    predict_df['DESEJABILIDADE ETIL'][k] = ((predict_df['ethyl_predict'][k])-min_ethyl)/(max_ethyl-min_ethyl)
    predict_df['DESEJABILIDADE COP'][k] = (max_cop-(predict_df['COP_predict'][k]))/(max_cop-min_cop)
    predict_df['DESEJABILIDADE CTC'][k] = (max_ctc-(predict_df['CTC_predict'][k]))/(max_ctc-min_ctc)
    predict_df['DESEJABILIDADE TAC'][k] = (max_tac-(predict_df['TAC_predict'][k]))/(max_tac-min_tac)
    predict_df['DESEJABILIDADE PBP'][k] = (max_pbp-(predict_df['PBP_predict'][k]))/(max_pbp-min_pbp)
    predict_df['DESEJABILIDADE TOTAL'][k] = predict_df['DESEJABILIDADE GLY'][k]*predict_df['DESEJABILIDADE ETIL'][k]*predict_df['DESEJABILIDADE COP'][k]*predict_df['DESEJABILIDADE CTC'][k]*predict_df['DESEJABILIDADE TAC'][k]*predict_df['DESEJABILIDADE PBP'][k]

# FILTRANDO A MAIOR DESEJABILIDADE CALCULADA

maior_desejabilidade = max(predict_df['DESEJABILIDADE TOTAL'])

```

```

melhor_resultado = predict_df.loc[predict_df['DESEJABILIDADE TOTAL'] == maior_desejabilidade]
print(melhor_resultado)
melhores_saidas = melhor_resultado.iloc[:, [2, 3, 4, 5, 6, 7]].values
melhor_gly_flow = melhores_saidas[0][0]
melhor_ethyl_flow = melhores_saidas[0][1]
melhor_cop = melhores_saidas[0][2]
melhor_ctc = melhores_saidas[0][3]
melhor_tac = melhores_saidas[0][4]
melhor_pbp = melhores_saidas[0][5]

# COMPARANDO COM OS INDICADORES ANTERIORES À OTIMIZAÇÃO
## VARIÁVEIS INICIAIS (Cálculos similares aos elaborados anteriormente)

flow_gly_i = vazao_glicerina_inicial
flow_water_i = vazao_agua_inicial
flow_vol_water_i = vazao_volumetrica_agua_inicial
vazao_vol_alimentacao_i = vazao_volumetrica_alimentacao_inicial
flow_extract_i = vazao_extraida_inicial
vazao_entrada_total_i = flow_vol_water_i + vazao_vol_alimentacao_i
area_transv_min_fluxo_i = vazao_entrada_total_i/vazao_max_RDC
area_real_transv_fluxo_i = area_transv_min_fluxo_i/0.6
diameter_i = ((area_real_transv_fluxo_i*4)/3.14)**0.5
size_factor_i = total_tangent_to_tangent_height*(diameter_i**1.5)
custo_equipamento_i = 320*(size_factor_i**0.84)
custo_mps_i = flow_water_i*(economic_data_mps['Media'][1])
custo_instalacao_i = 0.39*custo_equipamento_i
custo_manutencao_i = 0.32*custo_equipamento_i
custo_logistica_i = 0.08*custo_equipamento_i
custo_mao_de_obra_i = 0.08*custo_equipamento_i

cop_i = custo_mps_i+(((custo_manutencao_i+custo_mao_de_obra_i)/tempo_depreciacao_equipa-
mento_anos)/365)/24)
ctc_i = custo_equipamento_i+(custo_mps_i*tempo_depreciacao_equipamento_anos*365*24)+custo_instala-
cao_i+custo_manutencao_i+custo_logistica_i+custo_mao_de_obra_i #Ao longo da depreciação do equipamento
tac_i = (custo_equipamento_i+custo_instalacao_i+custo_manutencao_i)/3
pbp_i = (custo_equipamento_i)/((1-0.15)*flow_extract_i*(economic_data_mps['Media'][7])+0.08*custo_equipa-
mento_i)

## DATAFRAME COMPARATIVO

variaveis = ['VAZÃO DE GLICEROL', 'VAZÃO DE ETIL OLEATO', 'COP', 'CTC', 'TAC', 'PBP']
dados_iniciais = [flow_gly_i, flow_extract_i, cop_i, ctc_i, tac_i, pbp_i]
dados_ideais = [melhor_gly_flow, melhor_ethyl_flow, melhor_cop, melhor_ctc, melhor_tac, melhor_pbp]
diferenca = np.zeros(len(dados_iniciais))
dif_percentual = np.zeros(len(dados_iniciais))
variacao = []

for j in range(len(dados_iniciais)):
    diferenca[j] = ((dados_iniciais[j]-dados_ideais[j])**2)**0.5
    dif_percentual[j] = ((diferenca[j]/(dados_iniciais[j]))*100
    if dados_iniciais[j] > dados_ideais[j]:
        variacao.append('-')
    else:
        variacao.append('+')

informacoes = list(zip(variaveis, dados_iniciais, dados_ideais, diferenca, dif_percentual, variacao))

dataframe_comparativo = pd.DataFrame(informacoes, columns=['VARIÁVEIS', 'DADOS INICIAIS', 'DADOS
OTIMIZADOS', 'DIFERENÇA', 'DIFERENÇA %', 'SALDO'])

```

APÊNDICE D – Algoritmo de otimização do bloco de purificação de biodiesel

```

import numpy as np
import pandas as pd
import seaborn as sns
import matplotlib.pyplot as plt
import math as mt
from sklearn.neural_network import MLPRegressor
from sklearn.preprocessing import StandardScaler
from sklearn.model_selection import train_test_split

# IMPORTANDO OS DADOS OPERACIONAIS GERADOS NO ASPEN PLUS

operational_data = pd.read_excel('purification_data.xlsx')
operational_df = pd.DataFrame(operational_data, columns=['Pressão (bar)', 'Razão de refluxo', 'Vazão de produto de fundo (kg/h)', 'FLOWBIO (KG/H)', 'Vazão de água no biodiesel (kg/h)', 'Vazão de etanol no biodiesel (kg/h)', 'REBDUTY (KW)', 'CONDUTY (KW)', 'DESTUTIL (KG/H)', 'BOTUTIL (KG/H)', 'TEMBIO (C°)', 'CO2EMISS', 'BOTPRESS (BAR)', 'tensao_mistura', 'flow_rate_l', 'density_l', 'molecular_weight_l', 'flow_rate_v', 'density_v', 'molecular_weight_v'])

# FILTRO DE TEMPERATURA DO BIODIESEL (Evitar a degradação do mesmo)

filtro = operational_df['TEMBIO (C°)'] < 190
operational_df = operational_df[filtro]

# FILTRO DE PRESSÃO DE OPERAÇÃO (Assegurar a plena realização dos cálculos econômicos)

filtro2 = operational_df['Pressão (bar)'] < 1
operational_df = operational_df[filtro2]

# IMPORTANDO OS DADOS PARA OS CÁLCULOS ECONÔMICOS

economic_data_utilities = pd.read_excel('db_optimizer.xlsx')
economic_data_mps = pd.read_excel('db_optimizer2.xlsx')
economic_data_outros = pd.read_excel('db_optimizer3.xlsx')
economic_data_depreciacao = pd.read_excel('db_optimizer4.xlsx')
economic_data_eletricidade = pd.read_excel('db_optimizer5.xlsx')

# CALCULANDO OS INDICADORES ECONÔMICOS COM OS DADOS IMPORTADOS ANTERIORMENTE

vazao_ethyl = vazao_de_etil_oleato

COP = np.zeros(len(operational_df['Pressão (bar)'])) #Construindo o vetor COP para um posterior preenchimento
CTC = np.zeros(len(operational_df['Pressão (bar)'])) #Construindo o vetor CTC para um posterior preenchimento
TAC = np.zeros(len(operational_df['Pressão (bar)'])) #Construindo o vetor TAC para um posterior preenchimento
PBP = np.zeros(len(operational_df['Pressão (bar)'])) #Construindo o vetor PBP para um posterior preenchimento
CO2 = np.zeros(len(operational_df['Pressão (bar)'])) #Construindo o vetor CO2 para um posterior preenchimento

operational_df.insert(20, "COP (US$)", COP) #Inserindo o COP no dataframe operacional
operational_df.insert(21, "CTC (US$)", CTC) #Inserindo o CTC no dataframe operacional
operational_df.insert(22, "TAC (US$)", TAC) #Inserindo o TAC no dataframe operacional
operational_df.insert(23, "PBP (anos)", PBP) #Inserindo o PBP no dataframe operacional
operational_df.insert(24, "CO2 (kg/h)", CO2) #Inserindo o CO2 no dataframe operacional

for i in operational_df.index:

```

```

## LIQUID PHASE

surface_tension = operational_df['tensao_mistura'][i] #Tensão superficial da alimentação na fase líquida
flow_rate_l = 2.2*operational_df['flow_rate_l'][i] #Vazão de alimentação na fase líquida
density_l = 62.32*operational_df['density_l'][i] #Densidade da alimentação na fase líquida
molecular_weight_l = operational_df['molecular_weight_l'][i] #Peso molecular da alimentação na fase líquida

## VAPOR PHASE

flow_rate_v = 2.2*operational_df['flow_rate_v'][i] #Vazão de alimentação na fase vapor
density_v = 62.32*operational_df['density_v'][i] #Densidade da alimentação na fase vapor
molecular_weight_v = operational_df['molecular_weight_v'][i] #Peso molecular da alimentação na fase vapor

flow_ratio_parameter = (flow_rate_l/flow_rate_v)*((density_v/density_l)**0.5) #Taxa de fluxo de alimenta-
ção
csb_24in_m_s = 0.09 #Valor adotado da Correlação de Fair para um "Plate spacing" de 24 in
surface_tension_factor = (surface_tension/20)**0.2 #Fator de tensão superficial
FF = 1 #Fator espumante
FHA = 1 #Fator de área de orifício das placas
C = csb_24in_m_s*surface_tension_factor*FF*FHA #Parâmetro de capacidade
Uf = (C*((density_l-density_v)/density_v)**(1/2))*11.82 #Velocidade de inundação
f = 0.8 #Inundação de 80% do sistema
Ad_At = 0.1+((flow_ratio_parameter-0.1)/9) #Relação entre a área descendente e a área total da secção circu-
lar da coluna

diametro_interno = (((4*flow_rate_v)/(f*Uf*3.14*(1-Ad_At)*density_v))**(1/2))
dif_pressao = (((operational_df['BOTPRESS (BAR)'][i]-1)*14.5038)**2)**0.5 #psia
pressao_projeto = mt.exp(0.60608+0.91615*(mt.log(dif_pressao))) + 0.0015655*(mt.log(dif_pressao))**2)
aco_carbono_stress_psi = 15
efic_soldagem = 0.85 #Eficiência de soldagem
pv_code = (pressao_projeto*diametro_interno)/(2*aco_carbono_stress_psi*efic_soldagem-1.2*pressao_pro-
jeto) #Espessura da parede da coluna
pv_code_add = 0.889 #Espessura adicional adotada para a parede da coluna
pv_code_total = pv_code+pv_code_add #Espessura total da parede da coluna
pv_code_medio = (pv_code+pv_code_total)/2 #Espessura média da parede da coluna
pc_tol_corrosao = 1.125*pv_code_medio #Espessura da parede da coluna com uma tolerância à corrosão
weight = 3.14*(diametro_interno+pc_tol_corrosao)*(2.544 +0.8*diametro_interno)*pc_tol_corrosao*0.284
#Peso da coluna, adotando 2,14 ft como a altura entre pratos
custo_vertical = mt.exp(7.2756+0.18255*(mt.log(weight))+0.02297*(mt.log(weight))**2) #Custo vertical da
coluna
custos_plataformas_escadas = 300.9*(10**(0.63316))*(212**0.80161)
custo_stages = 468*mt.exp(0.1739*diametro_interno*0.083333) #Custo de cada prato da coluna
custo_equipamento = custo_vertical+custos_plataformas_escadas+custo_stages
custo_utilidades = operational_df['DESTUTIL (KG/H)'][i] + operational_df['BOTUTIL (KG/H)'][i]
custo_etericidade_hora = (((operational_df['REBDUTY (KW)'][i])**2)**0.5 + ((operational_df['CONDUTY
(KW)'][i])**2)**0.5)*(economic_data_eletricidade['Custos de eletricidade ($/kWh)'][0])
tempo_depreciacao_equipamento_anos = 12
custo_instalacao = 0.39*custo_equipamento
custo_manutencao = 0.32*custo_equipamento
custo_logistica = 0.08*custo_equipamento
custo_mao_deobra = 0.08*custo_equipamento

operational_df['COP (US$)'][i] = custo_utilidades+custo_etericidade_hora+((((custo_manuten-
cao+custo_mao_deobra)/tempo_depreciacao_equipamento_anos)/365)/24)
operational_df['CTC (US$)'][i] = custo_equipamento+((custo_utilidades+custo_etericidade_hora)*tempo_de-
preciacao_equipamento_anos*365*24)+custo_instalacao+custo_manutencao+custo_logis-
tica+custo_mao_deobra #Ao longo da depreciação do equipamento

```

```

operational_df['TAC (US$)'][i] = custo_utilidades*365*24 + (custo_equipamento+custo_instalacao+custo_manutencao)/3
operational_df['PBP (anos)'][i] = (custo_equipamento)/((1-0.15)*(operational_df['FLOWBIO (KG/H)'][i]))*(economic_data_mps['Lowest Cost ($/kg)'][7])+0.08*custo_equipamento)
operational_df['CO2 (kg/h)'][i] = operational_df['CO2EMISS'][i]

operational_df = operational_df.dropna(subset=['COP (US$)'], axis = 0) #Eliminar linhas que contêm valores nulos

# DIVISÃO DE DADOS DE TREINO E DE TESTE

operational_df_x = operational_df.iloc[:, :3]
operational_df_Y = operational_df.iloc[:, 3:]

X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(operational_df_x, operational_df_Y, test_size=0.2, random_state=42)

# IDENTIFICANDO A INTENSIDADE DA CORRELAÇÃO ENTRE AS VARIÁVEIS DE PROJETO

ht_matrix_df = operational_df.iloc[:, [0,1,2,4,5,20,21,22,23,24]]
correlation_matrix = ht_matrix_df.corr()

plt.figure(figsize=(10, 8))
heatmap = sns.heatmap(correlation_matrix, annot=True, fmt=".2f", cmap='RdBu_r', linewidths=.5, annot_kws={"size": 12, "weight": "bold"}, center=0, vmin=-1, vmax=1)
heatmap.set_xticklabels(heatmap.get_xticklabels(), size=11, family="serif", weight="bold")
heatmap.set_yticklabels(heatmap.get_yticklabels(), size=11, family="serif", weight="bold")
plt.show()

# IMPLEMENTANDO A RNA - VAZÃO DE ÁGUA

previsores = X_train.values
wt_flow = y_train.iloc[:, 1].values

scaler = StandardScaler()
previsores = scaler.fit_transform(previsores)
test = scaler.transform(X_test)

regressor = MLPRegressor(hidden_layer_sizes=(8,), max_iter=100000, activation='relu', random_state=42, solver = 'adam', batch_size = 100, verbose=1)
regressor.fit(previsores, wt_flow)

previsao_wt_flow = regressor.predict(test)

# IMPLEMENTANDO A RNA - VAZÃO DE ETANOL

etoh_flow = y_train.iloc[:, 2].values

regressor = MLPRegressor(hidden_layer_sizes=(8,), max_iter=100000, activation='relu', random_state=42, solver = 'adam', batch_size = 100, verbose=1)
regressor.fit(previsores, etoh_flow)

previsao_etoh_flow = regressor.predict(test)

# IMPLEMENTANDO A RNA - COP

cop_flow = y_train.iloc[:, 17].values

regressor = MLPRegressor(hidden_layer_sizes=(8,), max_iter=100000, activation='relu', random_state=42, solver = 'adam', batch_size = 100, verbose=1)

```

```

regressor.fit(previsores, cop_flow)

previsao_cop_flow = regressor.predict(test)

# IMPLEMENTANDO A RNA - CTC

ctc_flow = y_train.iloc[:, 18].values

regressor = MLPRegressor(hidden_layer_sizes=(8,), max_iter=100000, activation='relu', random_state=42,
solver = 'adam', batch_size = 100, verbose=1)
regressor.fit(previsores, ctc_flow)

previsao_ctc_flow = regressor.predict(test)

# IMPLEMENTANDO A RNA - TAC

tac_flow = y_train.iloc[:, 19].values

regressor = MLPRegressor(hidden_layer_sizes=(8,), max_iter=100000, activation='relu', random_state=42,
solver = 'adam', batch_size = 100, verbose=1)
regressor.fit(previsores, tac_flow)

previsao_tac_flow = regressor.predict(test)

# IMPLEMENTANDO A RNA - PBP

pbp_flow = y_train.iloc[:, 20].values

regressor = MLPRegressor(hidden_layer_sizes=(8,), max_iter=100000, activation='relu', random_state=42,
solver = 'adam', batch_size = 100, verbose=1)
regressor.fit(previsores, pbp_flow)

previsao_pbp_flow = regressor.predict(test)

# IMPLEMENTANDO A RNA - CO2

co2_flow = y_train.iloc[:, 21].values

regressor = MLPRegressor(hidden_layer_sizes=(8,), max_iter=100000, activation='relu', random_state=42,
solver = 'adam', batch_size = 100, verbose=1)
regressor.fit(previsores, co2_flow)

previsao_co2_flow = regressor.predict(test)

# CRIANDO O DATAFRAME DE PREDIÇÃO

predict_df = X_test

predict_df.insert(3, "BIODIESEL_predict", y_test['FLOWBIO (KG/H)'])
predict_df.insert(4, "WATER_predict", previsao_wt_flow)
predict_df.insert(5, "ETHANOL_predict", previsao_etoh_flow)
predict_df.insert(6, "COP_predict", previsao_cop_flow)
predict_df.insert(7, "CTC_predict", previsao_ctc_flow)
predict_df.insert(8, "TAC_predict", previsao_tac_flow)
predict_df.insert(9, "PBP_predict", previsao_pbp_flow)
predict_df.insert(10, "CO2_predict", previsao_co2_flow)

# ELIMINANDO DADOS INCOMPATÍVEIS COM AS NORMAS DA ANP (2014)

```

```

## VARIÁVEIS POUCO OSCILANTES

flow_triolein = vazao_de_trioleína
flow_oa_ = vazao_de_oa
flow_gly_ = vazao_de_glicerina

## ETIL OLEATO

filtro1 = ((predict_df['BIODIESEL_predict'])/(predict_df['BIODIESEL_predict']+predict_df['WATER_pre-
dict']+flow_gly_+predict_df['ETHANOL_predict']+flow_triolein+flow_oa_)) > 0.965
predict_df = predict_df[filtro1]

## ÁGUA

filtro2 = ((predict_df['WATER_predict'])/(predict_df['BIODIESEL_predict']+predict_df['WATER_pre-
dict']+flow_gly_+predict_df['ETHANOL_predict']+flow_triolein+flow_oa_)) < 0.0002
predict_df = predict_df[filtro2]

## ETANOL

filtro3 = ((predict_df['ETHANOL_predict'])/(predict_df['BIODIESEL_predict']+predict_df['WATER_pre-
dict']+flow_gly_+predict_df['ETHANOL_predict']+flow_triolein+flow_oa_)) < 0.002
predict_df = predict_df[filtro3]

# ENCONTRANDO OS VALORES MÁXIMOS E MÍNIMOS DA PREDIÇÃO

## VAZÃO DE ÁGUA

min_wt = min(previsao_wt_flow)
max_wt = max(previsao_wt_flow)

## VAZÃO DE ETANOL

min_etoh = min(previsao_etoh_flow)
max_etoh = max(previsao_etoh_flow)

## VAZÃO DE COP

min_cop = min(previsao_cop_flow)
max_cop = max(previsao_cop_flow)

## VAZÃO DE CTC

min_ctc = min(previsao_ctc_flow)
max_ctc = max(previsao_ctc_flow)

## VAZÃO DE TAC

min_tac = min(previsao_tac_flow)
max_tac = max(previsao_tac_flow)

## VAZÃO DE PBP

min_pbp = min(previsao_pbp_flow)
max_pbp = max(previsao_pbp_flow)

## VAZÃO DE CO2

min_co2 = min(previsao_co2_flow)
max_co2 = max(previsao_co2_flow)

```

IMPLEMENTANDO A FUNÇÃO DE DESEJABILIDADE

```
d_wt = np.zeros(len(predict_df['Pressão (bar)'])) #Construindo o vetor de desejabilidade de vazão de água para um posterior preenchimento
d_etoh = np.zeros(len(predict_df['Pressão (bar)'])) #Construindo o vetor de desejabilidade de vazão de etanol para um posterior preenchimento
d_cop = np.zeros(len(predict_df['Pressão (bar)'])) #Construindo o vetor de desejabilidade de COP para um posterior preenchimento
d_ctc = np.zeros(len(predict_df['Pressão (bar)'])) #Construindo o vetor de desejabilidade de CTC para um posterior preenchimento
d_tac = np.zeros(len(predict_df['Pressão (bar)'])) #Construindo o vetor de desejabilidade de TAC para um posterior preenchimento
d_pbp = np.zeros(len(predict_df['Pressão (bar)'])) #Construindo o vetor de desejabilidade de PBP para um posterior preenchimento
d_co2 = np.zeros(len(predict_df['Pressão (bar)'])) #Construindo o vetor de desejabilidade de CO2 para um posterior preenchimento
desejabilidade = np.zeros(len(predict_df['Pressão (bar)'])) #Construindo o vetor de desejabilidade total para um posterior preenchimento
```

```
predict_df.insert(11, "DESEJABILIDADE WATER", d_wt) #Inserindo a desejabilidade de vazão de água no dataframe de predição
predict_df.insert(12, "DESEJABILIDADE ETOH", d_etoh) #Inserindo a desejabilidade de vazão de etanol no dataframe de predição
predict_df.insert(13, "DESEJABILIDADE COP", d_cop) #Inserindo a desejabilidade de COP no dataframe de predição
predict_df.insert(14, "DESEJABILIDADE CTC", d_ctc) #Inserindo a desejabilidade de CTC no dataframe de predição
predict_df.insert(15, "DESEJABILIDADE TAC", d_tac) #Inserindo a desejabilidade de TAC no dataframe de predição
predict_df.insert(16, "DESEJABILIDADE PBP", d_pbp) #Inserindo a desejabilidade de PBP no dataframe de predição
predict_df.insert(17, "DESEJABILIDADE CO2", d_co2) #Inserindo a desejabilidade de CO2 no dataframe de predição
predict_df.insert(18, "DESEJABILIDADE TOTAL", desejabilidade) #Inserindo a desejabilidade total no dataframe de predição
```

```
for k in predict_df.index:
    predict_df['DESEJABILIDADE WATER'][k] = (max_wt-(predict_df['WATER_predict'][k]))/(max_wt-min_wt)
    predict_df['DESEJABILIDADE ETOH'][k] = (max_etoh-(predict_df['ETHANOL_predict'][k]))/(max_etoh-min_etoh)
    predict_df['DESEJABILIDADE COP'][k] = (max_cop-(predict_df['COP_predict'][k]))/(max_cop-min_cop)
    predict_df['DESEJABILIDADE CTC'][k] = (max_ctc-(predict_df['CTC_predict'][k]))/(max_ctc-min_ctc)
    predict_df['DESEJABILIDADE TAC'][k] = (max_tac-(predict_df['TAC_predict'][k]))/(max_tac-min_tac)
    predict_df['DESEJABILIDADE PBP'][k] = (max_pbp-(predict_df['PBP_predict'][k]))/(max_pbp-min_pbp)
    predict_df['DESEJABILIDADE CO2'][k] = (max_co2-(predict_df['CO2_predict'][k]))/(max_co2-min_co2)
    predict_df['DESEJABILIDADE TOTAL'][k] = predict_df['DESEJABILIDADE WATER'][k]*predict_df['DESEJABILIDADE ETOH'][k]*predict_df['DESEJABILIDADE COP'][k]*predict_df['DESEJABILIDADE CTC'][k]*predict_df['DESEJABILIDADE TAC'][k]*predict_df['DESEJABILIDADE PBP'][k]*predict_df['DESEJABILIDADE CO2'][k]
```

FILTRANDO A MAIOR DESEJABILIDADE CALCULADA

```
maior_desejabilidade = max(predict_df['DESEJABILIDADE TOTAL'])
melhor_resultado = predict_df.loc[predict_df['DESEJABILIDADE TOTAL'] == maior_desejabilidade]
print(melhor_resultado)
melhores_saidas = melhor_resultado.iloc[:, [4, 5, 6, 7, 8, 9, 10]].values
```

```

melhor_wt_flow = melhores_saidas[0][0]
melhor_etoh_flow = melhores_saidas[0][1]
melhor_cop_flow = melhores_saidas[0][2]
melhor_ctc_flow = melhores_saidas[0][3]
melhor_tac_flow = melhores_saidas[0][4]
melhor_pbp_flow = melhores_saidas[0][5]
melhor_co2_flow = melhores_saidas[0][6]

```

COMPARANDO COM OS INDICADORES ANTERIORES À OTIMIZAÇÃO

```
## VARIÁVEIS INICIAIS (Cálculos similares aos elaborados anteriormente)
```

```
## LIQUID PHASE
```

```

surface_tension_i = tensao_superficial_inicial
flow_rate_l_i = 2.2*fluxo_liquido_inicial
density_l_i = 0.062428*densidade_liquida_inicial
molecular_weight_l_i = peso_molecular_liquido_inicial

```

```
## VAPOR PHASE
```

```

flow_rate_v_i = 2.2* fluxo_vapor_inicial
density_v_i = 0.062428* densidade_vapor_inicial
molecular_weight_v_i = peso_molecular_liquido_inicial

```

```

flow_ratio_parameter_i = (flow_rate_l_i/flow_rate_v_i)*((density_v_i/density_l_i)**0.5)
csb_24in_m_s_i = 0.09
surface_tension_factor_i = (surface_tension_i/20)**0.2
FF_i = 1
FHA_i = 1
C_i = csb_24in_m_s_i*surface_tension_factor_i*FF_i*FHA_i
Uf_i = (C_i*((density_l_i-density_v_i)/density_v_i)**(1/2))*11.82
f_i = 0.8
Ad_At_i = 0.1+((flow_ratio_parameter_i-0.1)/9)
diametro_interno_i = ((4*flow_rate_v_i)/(f_i*Uf_i*3.14*(1-Ad_At_i)*density_v_i))**(1/2)

```

```

bottom_pressure = pressão_base_inicial
cost_utility = custo_utilidades
eletricidade = custo_eletricidade
flow_bio_i = vazao_saida_etil_oleato
flow_tri_i = vazao_saida_triroleina
flow_oa_i = vazao_saida_oa
flow_wt_i = vazao_saida_agua
flow_gli_i = vazao_saida_glicerina
flow_etoh_i = vazao_saida_etanol

```

```

dif_pressao_i = (1-bottom_pressure)*14.5038 #psia
pressao_projeto_i = mt.exp(0.60608+0.91615*(mt.log(dif_pressao_i)) + 0.0015655*(mt.log(dif_pressao_i))**2)
pv_code_i = (pressao_projeto_i*diametro_interno_i)/(2*aco_carbono_stress_psi*efic_soldagem-1.2*pressao_projeto_i)
pv_code_add_i = 0.889
pv_code_total_i = pv_code_i+pv_code_add_i
pv_code_medio_i = (pv_code_i+pv_code_total_i)/2
pc_tol_corrosao_i = 1.125*pv_code_medio_i
weight_i = 3.14*(diametro_interno_i+pc_tol_corrosao_i)*(2.544 +0.8*diametro_interno_i)*pc_tol_corrosao_i*0.284
custo_vertical_i = mt.exp(7.2756+0.18255*(mt.log(weight_i))+0.02297*(mt.log(weight_i))**2)
custos_plataformas_escadas_i = 300.9*(10**(0.63316))*(212**0.80161)
custo_stages_i = 468*mt.exp(0.1739*diametro_interno_i*0.083333)

```

```

custo_equipamento_i = custo_vertical_i+custos_plataformas_escadas_i+custo_stages_i
custo_utilidades_i = cost_utility
custo_etericidade_hora_i = (eletricity)*(economic_data_eletricidade['Custos de eletricidade ($/kWh)'][0])
custo_instalacao_i = 0.39*custo_equipamento_i
custo_manutencao_i = 0.32*custo_equipamento_i
custo_logistica_i = 0.08*custo_equipamento_i
custo_mao_de_obra_i = 0.08*custo_equipamento_i

cop_i = custo_utilidades_i+custo_etericidade_hora_i+(((custo_manuten-
cao_i+custo_mao_de_obra_i)/tempo_depreciacao_equipamento_anos)/365)/24)
ctc_i = custo_equipamento_i+((custo_utilidades_i+custo_etericidade_hora_i)*tempo_depreciacao_equipa-
mento_anos*365*24)+custo_instalacao_i+custo_manutencao_i+custo_logistica_i+custo_mao_de_obra_i #Ao
longo da depreciação do equipamnto
tac_i = custo_utilidades_i*365*24 + (custo_equipamento_i+custo_instalacao_i+custo_manutencao_i)/3
pbp_i = (custo_equipamento_i)/((1-0.15)*(flow_bio_i)*(economic_data_mps['Lowest Cost
($/kg)'][7])+0.08*custo_equipamento_i)
co2_i = emissao_co2_inicial

## DATAFRAME COMPARATIVO

variaveis = ['VAZÃO DE ÁGUA', 'VAZÃO DE ETANOL', 'COP', 'CTC', 'TAC', 'PBP', 'CO2']
dados_iniciais = [flow_wt_i, flow_etoh_i, cop_i, ctc_i, tac_i, pbp_i, co2_i]
dados_ideais = [melhor_wt_flow, melhor_etoh_flow, melhor_cop_flow, melhor_ctc_flow, melhor_tac_flow,
melhor_pbp_flow, melhor_co2_flow]
diferenca = np.zeros(len(dados_iniciais))
dif_percentual = np.zeros(len(dados_iniciais))
variacao = []

for j in range(len(dados_iniciais)):

    diferenca[j] = ((dados_iniciais[j]-dados_ideais[j])**2)**0.5
    dif_percentual[j] = ((diferenca[j])/(dados_iniciais[j]))*100
    if dados_iniciais[j] > dados_ideais[j]:
        variacao.append('-')
    else:
        variacao.append('+')

informacoes = list(zip(variaveis, dados_iniciais, dados_ideais, diferenca, dif_percentual, variacao))

dataframe_comparativo = pd.DataFrame(informacoes, columns=['VARIÁVEIS', 'DADOS INICIAIS', 'DADOS
OTIMIZADOS', 'DIFERENÇA', 'DIFERENÇA %', 'SALDO'])

```

APÊNDICE E – Algoritmo de otimização do bloco de transesterificação

```

import pandas as pd
import matplotlib.pyplot as plt
import seaborn as sns
import numpy as np
import math as mt
from sklearn.neural_network import MLPRegressor
from sklearn.model_selection import train_test_split
from sklearn.preprocessing import StandardScaler

# IMPORTANDO OS DADOS OPERACIONAIS GERADOS NO ASPEN PLUS

operational_data = pd.read_excel('transesterification_data.xlsx')
operational_df = pd.DataFrame(operational_data, columns=['Pressão de operação (bar)', 'Alimentação de etanol (kg/h)', 'Nº de estágios', 'Razão de refluxo', 'Volume de catalisador (L)', 'Produção de etil oleato (kg/h)', 'ETOH PRODUTO', 'REBDUTY (KW)', 'CONDUTY (KW)', 'BOTUTIL (KG/H)', 'DESTUTIL (KG/H)', 'TEMPOP (C°)', 'CO2EMISS (KG/H)', 'BOTPRESS (BAR)', 'tensao_mistura', 'flow_rate_l', 'density_l', 'molecular_weight_l', 'flow_rate_v', 'density_v', 'molecular_weight_v'])

# IMPORTANDO OS DADOS PARA OS CÁLCULOS ECONÔMICOS

economic_data_utilities = pd.read_excel('db_optimizer.xlsx')
economic_data_mps = pd.read_excel('db_optimizer2.xlsx')
economic_data_outros = pd.read_excel('db_optimizer3.xlsx')
economic_data_depreciacao = pd.read_excel('db_optimizer4.xlsx')
economic_data_eletricidade = pd.read_excel('db_optimizer5.xlsx')

# CALCULANDO OS INDICADORES ECONÔMICOS COM OS DADOS IMPORTADOS ANTERIORMENTE

vazao_ogr = 3382.44

COP = np.zeros(len(operational_df['Pressão de operação (bar)'])) #Construindo o vetor COP para um posterior preenchimento
CTC = np.zeros(len(operational_df['Pressão de operação (bar)'])) #Construindo o vetor CTC para um posterior preenchimento
TAC = np.zeros(len(operational_df['Pressão de operação (bar)'])) #Construindo o vetor TAC para um posterior preenchimento
PBP = np.zeros(len(operational_df['Pressão de operação (bar)'])) #Construindo o vetor PBP para um posterior preenchimento
CO2 = np.zeros(len(operational_df['Pressão de operação (bar)'])) #Construindo o vetor CO2 para um posterior preenchimento

custo_eletricidade_hora = np.zeros(len(operational_df['Pressão de operação (bar)']))
for i in operational_df.index:

    ## LIQUID PHASE

    surface_tension = operational_df['tensao_mistura'][i] #Tensão superficial da alimentação na fase líquida
    flow_rate_l = 2.2*operational_df['flow_rate_l'][i] #Vazão de alimentação na fase líquida
    density_l = 0.062428*operational_df['density_l'][i] #Densidade da alimentação na fase líquida
    molecular_weight_l = operational_df['molecular_weight_l'][i] #Peso molecular da alimentação na fase líquida

    ## VAPOR PHASE

    flow_rate_v = 2.2*operational_df['flow_rate_v'][i] #Vazão de alimentação na fase vapor
    density_v = 0.062428*operational_df['density_v'][i] #Densidade da alimentação na fase vapor
    molecular_weight_v = operational_df['molecular_weight_v'][i] #Peso molecular da alimentação na fase vapor

```

```

flow_ratio_parameter = (flow_rate_l/flow_rate_v)*((density_v/density_l)**0.5) #Taxa de fluxo de alimenta-
ção
csb_24in_m_s = 0.09 #Valor adotado da Correlação de Fair para um "Plate spacing" de 24 in
surface_tension_factor = (surface_tension/20)**0.2 #Fator de tensão superficial
FF = 1 #Fator espumante
FHA = 1 #Fator de área de orifício das placas
C = csb_24in_m_s*surface_tension_factor*FF*FHA #Parâmetro de capacidade
Uf = (C*((density_l-density_v)/density_v)**(1/2))*11.82 #Velocidade de inundação
f = 0.8 #Inundação de 80% do sistema
Ad_At = 0.1+((flow_ratio_parameter-0.1)/9) #Relação entre a área descendente e a área total da secção circu-
lar
diametro_interno = ((4*flow_rate_v)/(f*Uf*3.14*(1-Ad_At)*density_v))**(1/2)
dif_pressao = (((operational_df['BOTPRESS (BAR)'][i]-1)**2)**0.5)*14.5038 #psia
pressao_projeto = mt.exp(0.60608+0.91615*(mt.log(dif_pressao)) + 0.0015655*(mt.log(dif_pressao))**2)
aco_carbono_stress_psi = 15
efic_soldagem = 1 #Eficiência de soldagem
pv_code = (pressao_projeto*diametro_interno)/(2*aco_carbono_stress_psi*efic_soldagem-1.2*pressao_pro-
jeto) #Espessura da parede da coluna
pv_code_add = (0.22*(diametro_interno+2.5+18)*(2.14*operational_df['Nº de estágios'][i])**2)/(aco_car-
bono_stress_psi*(diametro_interno+2.5)**2) #Espessura adicional da parede da coluna
pv_code_total = pv_code+pv_code_add #Espessura total da parede da coluna
pv_code_medio = (pv_code+pv_code_total)/2 #Espessura média da parede da coluna
pc_tol_corrosao = 1.125*pv_code_medio #Espessura da parede da coluna com uma tolerância à corrosão
weight = 3.14*(diametro_interno+pc_tol_corrosao)*(2.14*operational_df['Nº de estágios'][i] +0.8*dia-
tro_interno)*pc_tol_corrosao*0.284 #Peso da coluna, adotando 2,14 ft como a altura entre pratos
custo_vertical = mt.exp(7.2756+0.18255*(mt.log(weight))+0.02297*(mt.log(weight))**2) #Custo vertical da
coluna
custos_plataformas_escadas = 300.9*(diametro_interno**(0.63316))*((2.14*operational_df['Nº de está-
gios'][i])**0.80161)
custo_stages = 468*mt.exp(0.1739*diametro_interno*0.083333) #Custo de cada prato da coluna
custo_equipamento = custo_vertical+custos_plataformas_escadas+custo_stages*operational_df['Nº de está-
gios'][i]
custo_mps = (operational_df['Alimentação de etanol (kg/h)'][i])*(economic_data_mps['Media'][0]) + va-
zao_ogr*(economic_data_mps['Media'][2]) #Custo com matérias-primas
custo_utilidades = operational_df['BOTUTIL (KG/H)'][i] + operational_df['DESTUTIL (KG/H)'][i]
custo_etericidade_hora[i] = (((operational_df['REBDUTY (KW)'][i])**2)**0.5 + ((operational_df['CON-
DUTY (KW)'][i])**2)**0.5)*(economic_data_eletricidade['Custos de eletricidade ($/kWh)'][0])
tempo_depreciacao_equipamento_anos = 12
tempo_depreciacao_catalisador_anos = 16
custo_total_catalisador = (operational_df['Volume de catalisador (L)'][i]*economic_data_mps['Me-
dia'][6])*3.34*1000
custo_total_catalisador_hora = custo_total_catalisador/(tempo_depreciacao_catalisador_anos*365*24)
custo_instalacao = 0.39*custo_equipamento
custo_manutencao = 0.32*custo_equipamento
custo_logistica = 0.08*custo_equipamento
custo_mao_de_obra = 0.08*custo_equipamento
waste_treatment_cost = 0.0136*(operational_df['Volume de catalisador (L)'][i])*3.34*1000 #Custo com tra-
tamento de resíduos

COP[i] = custo_mps+custo_utilidades+custo_etericidade_hora[i]+custo_total_catalisador_hora+(((custo_ma-
nutencao+custo_mao_de_obra)/tempo_depreciacao_equipamento_anos)/365)/24)
CTC[i] = custo_equipamento+((custo_mps+custo_etericidade_hora[i]+custo_total_catalisa-
dor_hora)*tempo_depreciacao_equipamento_anos*365*24)+custo_instalacao+custo_manutencao+custo_logis-
tica+custo_mao_de_obra #Ao longo da depreciação do equipamento
TAC[i] = custo_utilidades*365*24+((custo_equipamento+custo_instalacao+custo_manutencao)/3)+wa-
ste_treatment_cost*365*24
PBP[i] = (custo_equipamento)/((1-0.15)*(operational_df['Produção de etil oleato (kg/h)'][i])*(econo-
mic_data_mps['Media'][7]))+0.08*custo_equipamento)
CO2[i] = operational_df['CO2EMISS (KG/H)'][i]

```

```

operational_df.insert(21, "COP (US$)", COP) #Inserindo o COP no dataframe operacional
operational_df.insert(22, "CTC (US$)", CTC) #Inserindo o CTC no dataframe operacional
operational_df.insert(23, "TAC (US$)", TAC) #Inserindo o TAC no dataframe operacional
operational_df.insert(24, "PBP (anos)", PBP) #Inserindo o PBP no dataframe operacional
operational_df.insert(25, "CO2 EMISSION (kg/h)", CO2) #Inserindo o CO2 no dataframe operacional

operational_df = operational_df[np.isfinite(operational_df).all(1)]

# DIVISÃO DE DADOS DE TREINO E DE TESTE

operational_df_x = operational_df.iloc[:, :5]
operational_df_Y = operational_df.iloc[:, 5:]

X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(operational_df_x, operational_df_Y, test_size=0.3, random_state=42)

# IDENTIFICANDO A INTENSIDADE DA CORRELAÇÃO ENTRE AS VARIÁVEIS DE PROJETO

matrix_df = operational_df.iloc[:, [0,1,2,3,4,5,21,22,23,24,25]]
correlation_matrix = matrix_df.corr()

plt.figure(figsize=(10, 8))
heatmap = sns.heatmap(correlation_matrix, annot=True, fmt=".2f", cmap='RdBu_r', linewidths=.5, annot_kws={"size": 12, "weight": "bold"}, center=0, vmin=-1, vmax=1)
heatmap.set_xticklabels(heatmap.get_xticklabels(), size=11, family="serif", weight="bold")
heatmap.set_yticklabels(heatmap.get_yticklabels(), size=11, family="serif", weight="bold")
plt.show()

# IMPLEMENTAÇÃO DA RNA - VAZÃO DE ETIL OLEATO

previsores = X_train.values
ethyl_flow = y_train.iloc[:, 0].values

scaler = StandardScaler()
previsores = scaler.fit_transform(previsores)
test = scaler.transform(X_test)

regressor = MLPRegressor(hidden_layer_sizes=(14,12,), max_iter=3000000, activation='relu', random_state=42, solver='adam', batch_size = 100, verbose=1)
regressor.fit(previsores, ethyl_flow)

previsao_ethyl_flow = regressor.predict(test)

# IMPLEMENTAÇÃO DA RNA - COP

cop_df = y_train.iloc[:, 16].values

regressor = MLPRegressor(hidden_layer_sizes=(14,12,), max_iter=3000000, activation='relu', random_state=42, solver='adam', batch_size = 100, verbose=1)
regressor.fit(previsores, cop_df)

previsao_cop = regressor.predict(test)

# IMPLEMENTAÇÃO DA RNA - CTC

ctc_df = y_train.iloc[:, 17].values

regressor = MLPRegressor(hidden_layer_sizes=(14,12,), max_iter=3000000, activation='relu', random_state=42, solver='adam', batch_size = 100, verbose=1)

```

```

regressor.fit(previsores, ctc_df)

previsao_ctc = regressor.predict(test)

# IMPLEMENTAÇÃO DA RNA - TAC

tac_df = y_train.iloc[:, 18].values

regressor = MLPRegressor(hidden_layer_sizes=(14,12,), max_iter=3000000, activation='relu', random_state=42,
solver = 'adam', batch_size = 100, verbose=1)
regressor.fit(previsores, tac_df)

previsao_tac = regressor.predict(test)

# IMPLEMENTAÇÃO DA RNA - PBP

pbp_df = y_train.iloc[:, 19].values

regressor = MLPRegressor(hidden_layer_sizes=(14,12,), max_iter=3000000, activation='relu', random_state=42,
solver = 'adam', batch_size = 100, verbose=1)
regressor.fit(previsores, pbp_df)

previsao_pbp = regressor.predict(test)

# IMPLEMENTAÇÃO DA RNA - EMISSÃO DE CO2

co2_df = y_train.iloc[:, 20].values

regressor = MLPRegressor(hidden_layer_sizes=(14,12,), max_iter=3000000, activation='relu', random_state=42,
solver = 'adam', batch_size = 100, verbose=1)
regressor.fit(previsores, co2_df)

previsao_co2 = regressor.predict(test)

# CRIANDO O DATAFRAME DE PREDIÇÃO

predict_df = X_test.iloc[:, :5]

predict_df.insert(5, "ETHYL_predict", previsao_ethyl_flow)
predict_df.insert(6, "COP_predict", previsao_cop)
predict_df.insert(7, "CTC_predict", previsao_ctc)
predict_df.insert(8, "TAC_predict", previsao_tac)
predict_df.insert(9, "PBP_predict", previsao_pbp)
predict_df.insert(10, "CO2_predict", previsao_co2)
predict_df.insert(11, "ETOH PRODUTO", y_test['ETOH PRODUTO'])

# ENCONTRANDO OS VALORES MÁXIMOS E MÍNIMOS DA PREDIÇÃO

## VAZÃO DE ETIL OLEATO
min_ethyl = min(previsao_ethyl_flow)
max_ethyl = max(previsao_ethyl_flow)

## COP
min_cop = min(previsao_cop)
max_cop = max(previsao_cop)

## CTC
min_ctc = min(previsao_ctc)
max_ctc = max(previsao_ctc)

```

```

## TAC
min_tac = min(previsao_tac)
max_tac = max(previsao_tac)

## PBP
min_pbp = min(previsao_pbp)
max_pbp = max(previsao_pbp)

## EMISSÃO DE CO2
min_co2 = min(previsao_co2)
max_co2 = max(previsao_co2)

# IMPLEMENTANDO A FUNÇÃO DE DESEJABILIDADE

d_ethyl = np.zeros(len(predict_df['Nº de estágios'])) #Construindo o vetor de desejabilidade de vazão de etil oleato para um posterior preenchimento
d_cop = np.zeros(len(predict_df['Nº de estágios'])) #Construindo o vetor de desejabilidade de COP para um posterior preenchimento
d_ctc = np.zeros(len(predict_df['Nº de estágios'])) #Construindo o vetor de desejabilidade de CTC para um posterior preenchimento
d_tac = np.zeros(len(predict_df['Nº de estágios'])) #Construindo o vetor de desejabilidade de TAC para um posterior preenchimento
d_pbp = np.zeros(len(predict_df['Nº de estágios'])) #Construindo o vetor de desejabilidade de PBP para um posterior preenchimento
d_co2 = np.zeros(len(predict_df['Nº de estágios'])) #Construindo o vetor de desejabilidade de CO2 para um posterior preenchimento
desejabilidade = np.zeros(len(predict_df['Nº de estágios'])) #Construindo o vetor de desejabilidade total para um posterior preenchimento

predict_df.insert(12, "DESEJABILIDADE ETHYL", d_ethyl) #Inserindo a desejabilidade de vazão de etil oleato no dataframe de predição
predict_df.insert(13, "DESEJABILIDADE COP", d_cop) #Inserindo a desejabilidade de COP no dataframe de predição
predict_df.insert(14, "DESEJABILIDADE CTC", d_ctc) #Inserindo a desejabilidade de CTC no dataframe de predição
predict_df.insert(15, "DESEJABILIDADE TAC", d_tac) #Inserindo a desejabilidade de TAC no dataframe de predição
predict_df.insert(16, "DESEJABILIDADE PBP", d_pbp) #Inserindo a desejabilidade de PBP no dataframe de predição
predict_df.insert(17, "DESEJABILIDADE CO2", d_co2) #Inserindo a desejabilidade de CO2 no dataframe de predição
predict_df.insert(18, "DESEJABILIDADE TOTAL", desejabilidade) #Inserindo a desejabilidade total no dataframe de predição

for k in predict_df.index:
    predict_df['DESEJABILIDADE ETHYL'][k] = ((predict_df['ETHYL_predict'][k])-min_ethyl)/(max_ethyl-min_ethyl)
    predict_df['DESEJABILIDADE COP'][k] = (max_cop-(predict_df['COP_predict'][k]))/(max_cop-min_cop)
    predict_df['DESEJABILIDADE CTC'][k] = (max_ctc-(predict_df['CTC_predict'][k]))/(max_ctc-min_ctc)
    predict_df['DESEJABILIDADE TAC'][k] = (max_tac-(predict_df['TAC_predict'][k]))/(max_tac-min_tac)
    predict_df['DESEJABILIDADE PBP'][k] = (max_pbp-(predict_df['PBP_predict'][k]))/(max_pbp-min_pbp)
    predict_df['DESEJABILIDADE CO2'][k] = (max_co2-(predict_df['CO2_predict'][k]))/(max_co2-min_co2)
    predict_df['DESEJABILIDADE TOTAL'][k] = predict_df['DESEJABILIDADE ETHYL'][k]*predict_df['DESEJABILIDADE COP'][k]*predict_df['DESEJABILIDADE CTC'][k]*predict_df['DESEJABILIDADE TAC'][k]*predict_df['DESEJABILIDADE PBP'][k]*predict_df['DESEJABILIDADE CO2'][k]

# FILTRANDO OS DADOS DE MENOR TEOR DE ETANOL NOS PRODUTOS (Garantir uma vazão mássica igual ou menor que a da simulação inicial na saída do bloco)

```

```

filtro = predict_df["ETOH PRODUTO"] <= valor_limite
predict_df = predict_df[filtro]

# FILTRANDO A MAIOR DESEJABILIDADE CALCULADA

maior_desejabilidade = max(predict_df['DESEJABILIDADE TOTAL'])
melhor_resultado = predict_df.loc[predict_df['DESEJABILIDADE TOTAL'] == maior_desejabilidade]
print(melhor_resultado)

melhores_saidas = melhor_resultado.iloc[:, [5, 6, 7, 8, 9, 10]].values

melhor_ethyl_flow = melhores_saidas[0][0]
melhor_cop = melhores_saidas[0][1]
melhor_ctc = melhores_saidas[0][2]
melhor_tac = melhores_saidas[0][3]
melhor_pbp = melhores_saidas[0][4]
melhor_co2 = melhores_saidas[0][5]

# COMPARANDO COM OS INDICADORES ANTERIORES À OTIMIZAÇÃO

## VARIÁVEIS INICIAIS

## LIQUID PHASE

surface_tension_i = 21.85
flow_rate_l_i = 2.2*84894.6312
density_l_i = 0.062428*706.517126
molecular_weight_l_i = 48.2068979

## VAPOR PHASE

flow_rate_v_i = 2.2*79126.3103
density_v_i = 0.062428*1.57717914
molecular_weight_v_i = 46.0693228

flow_ratio_parameter_i = (flow_rate_l_i/flow_rate_v_i)*((density_v_i/density_l_i)**0.5)
csb_24in_m_s_i = 0.09
surface_tension_factor_i = (surface_tension_i/20)**0.2
FF_i = 1
FHA_i = 1
C_i = csb_24in_m_s_i*surface_tension_factor_i*FF_i*FHA_i
Uf_i = (C_i*((density_l_i-density_v_i)/density_v_i)**(1/2))*11.82
f_i = 0.8
Ad_At_i = 0.1+(flow_ratio_parameter_i-0.1)/9
diametro_interno_i = ((4*flow_rate_v_i)/(f_i*Uf_i*3.14*(1-Ad_At_i)*density_v_i))**(1/2)
bottom_pressure = 1.01
flow_etoh = 590
cost_utility_bottom = 504.741
cost_utility_destilate = 106.684
eletricity = 28079.002 + 18021.3057
flow_ethyl_i = 4213.74
co2_emission = 4265.82927 + 484.584
volume_catalisador_i = 1.21
dif_pressao_i = (bottom_pressure-1)*14.5038 #psia
pressao_projeto_i = mt.exp(0.60608+0.91615*(mt.log(dif_pressao_i)) + 0.0015655*(mt.log(dif_pressao_i))**2)
pv_code_i = (pressao_projeto_i*diametro_interno_i)/(2*aco_carbono_stress_psi*efic_soldagem-1.2*pressao_projeto_i)
pv_code_add_i = (0.22*(diametro_interno_i+2.5+18)*(2.14*27**2))/(aco_carbono_stress_psi*(diametro_interno_i+2.5)**2)

```

```

pv_code_total_i = pv_code_i+pv_code_add_i
pv_code_medio_i = (pv_code_i+pv_code_total_i)/2
pc_tol_corrosao_i = 1.125*pv_code_medio_i
weight_i = 3.14*(dimetro_interno_i+pc_tol_corrosao_i)*(2.14*27 +0.8*dimetro_interno_i)*pc_tol_corrosao_i*0.284 #Peso da coluna, adotando 2,14 ft como a altura entre pratos
custos_plataformas_escadas_i = 300.9*(dimetro_interno_i**(0.63316))*((2.14*operational_df['Nº de estágios'][i])**0.80161)
custo_stages_i = 468*mt.exp(0.1739*dimetro_interno_i*0.083333)
custo_vertical_i = mt.exp(7.2756+0.18255*(mt.log(weight_i))+0.02297*(mt.log(weight_i)**2) #Custo vertical
custo_equipamento_i = custo_vertical_i+custos_plataformas_escadas_i+custo_stages_i*25
custo_mps_i = (flow_etoh)*(economic_data_mps['Media'][0]) + vazao_ogr*(economic_data_mps['Media'][2])
custo_utilidades_i = cost_utility_bottom + cost_utility_destilate
custo_etericidade_hora_i = (eletricity)*(economic_data_eletricidade['Custos de eletricidade ($/kWh)'][0])
custo_total_catalisador_i = (volume_catalisador_i*economic_data_mps['Media'][6])*3.34*1000
custo_total_catalisador_hora_i = custo_total_catalisador/(tempo_depreciacao_catalisador_anos*365*24)
custo_instalacao_i = 0.39*custo_equipamento_i
custo_manutencao_i = 0.32*custo_equipamento_i
custo_logistica_i = 0.08*custo_equipamento_i
custo_mao_de_obra_i = 0.08*custo_equipamento_i
waste_treatment_cost_i = 0.0136*volume_catalisador_i*3.34*1000 #Custo com tratamento de resíduos

cop_i = custo_mps_i+custo_utilidades_i+custo_etericidade_hora_i+custo_total_catalisador_hora_i+(((custo_manutencao_i+custo_mao_de_obra_i)/tempo_depreciacao_equipamento_anos)/365)/24)
ctc_i = custo_equipamento_i+((custo_mps_i+custo_etericidade_hora_i+custo_total_catalisador_hora_i)*tempo_depreciacao_equipamento_anos*365*24)+custo_instalacao_i+custo_manutencao_i+custo_logistica_i+custo_mao_de_obra_i #Ao longo da depreciação do equipamento
tac_i = custo_utilidades_i*365*24+((custo_equipamento_i+custo_instalacao_i+custo_manutencao_i)/3)+waste_treatment_cost_i*365*24
pbp_i = (custo_equipamento_i)/((1-0.15)*(flow_ethyl_i)*(economic_data_mps['Media'][7])+0.08*custo_equipamento_i)
co2_i = co2_emission

## DATAFRAME COMPARATIVO

variaveis = ['VAZÃO DE ETIL OLEATO', 'COP', 'CTC', 'TAC', 'PBP', 'EMIÇÃO DE CO2']
dados_iniciais = [flow_ethyl_i, cop_i, ctc_i, tac_i, pbp_i, co2_i]
dados_ideais = [melhor_ethyl_flow, melhor_cop, melhor_ctc, melhor_tac, melhor_pbp, melhor_co2]
diferenca = np.zeros(len(dados_iniciais))
dif_percentual = np.zeros(len(dados_iniciais))
variacao = []

for j in range(len(dados_iniciais)):
    diferenca[j] = ((dados_iniciais[j]-dados_ideais[j])**2)**0.5
    dif_percentual[j] = ((diferenca[j])/(dados_iniciais[j]))*100
    if dados_iniciais[j] > dados_ideais[j]:
        variacao.append('-')
    else:
        variacao.append('+')

informacoes = list(zip(variaveis, dados_iniciais, dados_ideais, diferenca, dif_percentual, variacao))

dataframe_comparativo = pd.DataFrame(informacoes, columns=['VARIÁVEIS', 'DADOS INICIAIS', 'DADOS OTIMIZADOS', 'DIFERENÇA', 'DIFERENÇA %', 'SALDO'])

```