

Universidade Estadual de Maringá

MODELAGEM E OTIMIZAÇÃO DE ENERGIA EM SÍNTESE DE PROCESSOS:

**DESENVOLVIMENTO DE MODELOS DE PROGRAMAÇÃO MATEMÁTICA PARA A
ÓTIMA INTEGRAÇÃO ENTRE CALOR E TRABALHO**

Viviani Caroline Onishi

2014

Universidade Estadual de Maringá
Centro de Tecnologia
Departamento de Engenharia Química
Programa de Pós-graduação em Engenharia Química

**MODELAGEM E OTIMIZAÇÃO DE ENERGIA EM SÍNTESE DE PROCESSOS:
DESENVOLVIMENTO DE MODELOS DE PROGRAMAÇÃO MATEMÁTICA
PARA A ÓTIMA INTEGRAÇÃO ENTRE CALOR E TRABALHO**

Viviani Caroline Onishi

Tese de Doutorado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Química da Universidade Estadual de Maringá, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Doutor em Engenharia Química, área de Desenvolvimento de Processos.

Orientador: Mauro A. S. S. Ravagnani, D. Sc.

Coorientador: José A. Caballero Suárez, D. Sc.

Maringá
Abril, 2014

**Dados Internacionais de Catalogação-na-Publicação (CIP)
(Biblioteca Central - UEM, Maringá – PR., Brasil)**

0589m Onishi, Viviani Caroline
Modelagem e otimização de energia em síntese de processos: desenvolvimento de modelos de programação matemática para a ótima integração entre calor e trabalho / Viviani Caroline Onishi. -- Maringá, 2014.
227 f. : il., figs., tabs.

Orientador: Prof. Dr. Mauro Antonio da Silva Sá Ravagnani.
Co-orientador: Prof. Dr. José Antonio Caballero Suárez.

Tese (doutorado) - Universidade Estadual de Maringá, Centro de Tecnologia, Departamento de Engenharia Química, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química, 2014.

1. Modelagem matemática. 2. Otimização de processos. 3. Integração de energia. 4. Síntese de processos. I. Ravagnani, Mauro Antônio da Silva Sá, coorient. II. Caballero Suárez, José Antonio, orient. III. Universidade Estadual de Maringá. Centro de Tecnologia. Departamento de Engenharia Química. Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química. IV. Título.

CDD 21.ed. 660.28449

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE MARINGÁ
CENTRO DE TECNOLOGIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

Esta é a versão final da Tese de Doutorado apresentada por Viviani Caroline Onishi perante a Comissão Julgadora do Curso de Doutorado em Engenharia Química em 28 de abril de 2014.


COMISSÃO JULGADORA


Prof. Mauro Antonio da Silva Sá Ravagnani
Orientador / Presidente


Prof. Dr. José Antonio Caballero Suárez
Coorientador


Prof. Dr. Argimiro Resende Secchi
Membro


Prof. Dr. Esdras Penêdo de Carvalho
Membro


Prof. Dr. Paulo Roberto Paraíso
Membro


Drª Aline Priscila da Silva Ribeiro
Membro

Aos meus pais, Julio e Rita
Aos meus irmãos, Pedro e Daniella
Ao meu amor, Luís

Agradecimentos

Os meus sinceros agradecimentos são endereçados a todos aqueles que direta ou indiretamente contribuíram para a concretização deste trabalho. Em particular, gostaria de expressar a minha mais profunda gratidão a algumas pessoas especiais, sem as quais, inequivocamente, a realização deste sonho não teria sido possível:

Ao meu orientador, Prof. *Mauro Ravagnani*, pelo incentivo para começar o doutorado e por acreditar na minha capacidade para realizar este trabalho. Estou profundamente agradecida pela forma como me norteou e motivou durante os últimos dois anos e meio, por permitir que eu pudesse viver a experiência inesquecível de estudar na Europa, e principalmente, por me ter honrado com o convite de prosseguir a nossa parceria no período de pós-doutorado.

Ao meu coorientador, Prof. *José Caballero*, por quem nutro a maior admiração dada a ética, dedicação e brio que demonstra ao realizar o seu trabalho. Sou extremamente grata por ter me acolhido tão gentilmente na Universidade de Alicante e por ter me ensinado tudo o que sei sobre otimização, modelagem, síntese de processos e programação em GAMS, mas principalmente, por ter despertado meu fascínio e entusiasmo por esta área de pesquisa. Agradeço os seus ensinamentos desinteressados, disponibilidade, leituras críticas e conselhos sem os quais, indubitavelmente, eu jamais teria conseguido concluir esta tese.

À agência brasileira de Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – CAPES, pelo apoio financeiro prestado através da concessão de bolsas de estudo no Brasil e na Espanha, que possibilitaram a realização deste trabalho e o período de estágio de doutorado sanduíche na Universidade de Alicante.

Aos meus pais, *Julio* e *Rita*, por sempre estarem presentes apoiando incondicionalmente as minhas decisões. Por acreditarem no meu esforço e empenho, pela motivação, afeto, compreensão e, sobretudo, por me ensinarem desde muito cedo o sentido de responsabilidade, dedicação e determinação necessários para enfrentar desafios e alcançar os meus objetivos.

Aos meus queridos irmãos, em especial à minha pequena *Daniella*, pelo seu carinho, amizade sincera e incentivo, e por ser capaz de me arrancar tantos sorrisos nos momentos mais difíceis.

Ao meu companheiro, *Luís*, por seu amor, paciência, dedicação e apoio incondicional. Por me mostrar que o amor é construído diariamente em pequenas etapas, e que a cada nova etapa é possível encontrar um nível ainda superior de carinho, ternura, confiança, lealdade e extrema compreensão.

Viviani C. Onishi

*“Não existe menor entre o pequeno
e nem maior entre o grande.
Mas sempre algo ainda menor
e algo ainda maior”*

Anaxágoras de Clazômenas (499 aC – 428 aC)

Resumo da Tese apresentada ao PEQ/UEM como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Doutor em Ciências (D.Sc.).

MODELAGEM E OTIMIZAÇÃO DE ENERGIA EM SÍNTESE DE PROCESSOS:
DESENVOLVIMENTO DE MODELOS DE PROGRAMAÇÃO MATEMÁTICA PARA A
ÓTIMA INTEGRAÇÃO ENTRE CALOR E TRABALHO

Viviani Caroline Onishi

Abril/2014

Orientador(es):

Mauro A. S. S. Ravagnani

José A. Caballero Suárez

Programa: Engenharia Química

A conservação e eficiência energética são fundamentais em plantas de processamento, sendo alcançadas por meio da gestão otimizada do uso de energia. Neste contexto, a ótima integração entre calor e trabalho pode reduzir significativamente o consumo de energia e, como consequência, o custo total do processo. Desta forma, quatro modelos de otimização baseados em superestruturas são desenvolvidos para a integração de energia em processos industriais. O primeiro modelo apresentado nesta tese, trata-se de um modelo de Programação Matemática para o projeto detalhado de trocadores de calor casco e tubo. A abordagem proposta segue rigorosamente as normas TEMA (sigla em inglês para: *Tubular Exchanger Manufacturers Association*), de forma que todas as características geométricas obtidas para o equipamento estejam padronizadas. O método de Bell-Delaware é usado para o projeto do lado casco do trocador de calor. Além disso, a superestrutura é formulada em programação disjuntiva generalizada (PDG) e programação não-linear mista inteira (PNLMI), para obtenção de um equipamento padrão com área de troca térmica e/ou custo total mínimo. A grande contribuição deste modelo reside na proposição de uma nova abordagem sequencial de otimização de objetivos parciais, na qual o conjunto total de equações de projeto é dividido em subconjuntos, com a atribuição de distintas funções objetivo baseadas no

conhecimento heurístico do processo. O segundo modelo de otimização desenvolvido, refere-se a um modelo para a síntese simultânea de redes de trocadores de calor (RTCs). A superestrutura proposta para descrever o processo é formulada em PDG e PNLMI, com o objetivo de minimizar o custo total anualizado do processo. Neste caso, a função objetivo é composta por despesas operacionais e custo de capital de investimento em equipamentos. Este modelo contribui significativamente para a área de síntese de processos, pois incorpora a possibilidade de ajuste de níveis de pressão de correntes de processo, com intuito de melhorar a recuperação de calor do sistema. Assim, a recuperação de pressão é realizada simultaneamente com a integração de calor, de modo que as condições de processo devem ser tratadas como variáveis de otimização. Em adição, o modelo inova ao permitir o uso de equipamentos para manipulação de pressão acoplados a eixos comuns, além da substituição de turbinas por válvulas, quando economicamente favoráveis para o processo. O terceiro modelo matemático proposto, aplica-se à síntese simultânea de redes de troca de trabalho (RTTs). Neste modelo, um conceito inovador e pouco explorado na literatura é desenvolvido, centrando-se na ótima integração entre trabalho e calor em processos industriais. Assim, a nova abordagem proposta é análoga ao problema de síntese de RTCs, no qual a integração de trabalho de correntes a alta-pressão e baixa-pressão ocorre em vários estágios de manipulação de pressão. O modelo de PNLMI permite a integração simultânea de calor na RTC, com o objetivo de melhorar a recuperação de pressão do processo. Além disso, o modelo considera o uso de várias unidades de eixos únicos de turbina e compressor do tipo SSTC (sigla em inglês para: *single-shaft-turbine-compressor*), bem como compressores, turbinas e válvulas autônomas com o objetivo de minimizar o custo total anualizado da rede. O último modelo de PNLMI proposto, trata-se de um modelo matemático para o *retrofit* de RTCs. A principal contribuição deste trabalho é a utilização da recuperação de pressão de correntes, para favorecer a recuperação de calor em redes existentes. Desta forma, a superestrutura proposta permite o incremento da área de troca térmica existente, bem como a utilização de novos equipamentos para manipulação de pressão e troca de calor. Em todos os modelos desenvolvidos, estudos de casos são conduzidos para verificar a acurácia das respectivas abordagens propostas, incluindo aplicações industriais reais para os modelos de síntese de processos. De modo geral, os resultados obtidos indicam que os modelos propostos descrevem com precisão os processos industriais a que se destinam.

Abstract of Thesis presented to the PEQ/UEM as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Doctor in Science (D.Sc.).

MODELING AND OPTIMIZATION OF ENERGY IN PROCESSES SYNTHESIS:
DEVELOPMENT OF MATHEMATICAL PROGRAMMING MODELS FOR THE
OPTIMAL INTEGRATION BETWEEN HEAT AND WORK

Viviani Caroline Onishi

April/2014

Advisors:

Mauro A. S. S. Ravagnani

José A. Caballero Suárez

Program: Chemical Engineering

Conservation and energy efficiency are critical in processing plants, being achieved through optimized management of energy use. In this context, the optimal integration between heat and work can significantly reduce energy consumption and, consequently, the total cost of the process. In this way, four optimization models based on superstructures are developed for the energy integration in industrial processes. The first model presented in this thesis is a mathematical programming model for the detailed design of shell-and-tube heat exchangers. The proposed approach strictly follows the standards of TEMA (Tubular Exchanger Manufacturers Association), so that all geometric characteristics obtained for the equipment are standardized. The Bell-Delaware method is used to design the shell-side of the heat exchanger. Moreover, the superstructure is formulated in generalized disjunctive programming (GDP), and mixed-integer nonlinear programming (MINLP) to obtain standard equipment with heat exchange area and/or minimum total cost. The major contribution of this model relies in proposing a new sequential approach of optimization of partial objectives, in which the full set of design equations is divided into subsets, with the proposition of different objective functions based on heuristic knowledge of the process. The second optimization model refers to a model for the simultaneous synthesis of heat exchanger networks (HENs).

The superstructure proposed to describe the process is formulated in GDP and MINLP, aiming to minimize the total annualized cost of the process. In this case, the objective function is composed by operating expenses and capital cost of investment in equipment. This model contributes significantly to the synthesis processes field because it incorporates the possibility of adjusting pressure levels of process streams, in order to improve the system heat recovery. Thus, the pressure recovery is performed in the simultaneously with the heat integration, so that the process conditions must be treated as optimization variables. Additionally, the model innovates by allowing the use of equipment for handling pressure coupled to the common axis, and the replacement of turbines by valves when thermoeconomically favorable for the process. The third mathematical model is applied to the simultaneous synthesis of work exchange networks (WENs). In this model, an innovative concept, poorly explored in the available literature, is developed, focusing on the optimal integration between work and heat in industrial processes. Thus, the proposed new approach is analogous to the problem of HENs synthesis, in which the work integration occurs between streams at high-pressure and low-pressure in several pressure manipulation stages. The MINLP-based model allows simultaneous heat integration in the HEN, aiming to improve the pressure recovery process. In addition, the model considers the use of multiple units of single-shaft-turbine-compressor (SSTC), as well as stand-alone compressors, turbines and valves in order to minimize the total annualized cost of the network. The last MINLP-based model proposed is a mathematical model for the retrofit of HENs. The main contribution of this work is the use of pressure recovery of streams, to improve the heat recovery in existing networks. Therefore, the proposed superstructure enables the increase of the existing thermal exchange area, as well as the use of new equipment for heat exchange and pressure manipulation. In all developed models, case studies are conducted to verify the accuracy of their proposed approaches, including real industrial applications for the process synthesis models. In general, the results indicate that the proposed models accurately describe industrial processes for their intended use.

Resumen de la Tesis presentada al PEQ/UEM, como parte de los requisitos para obtención del grado de Doctor en Ciencias (D.Sc.).

MODELACIÓN Y OPTIMIZACIÓN DE ENERGÍA EN SÍNTESIS DE PROCESOS:
DESARROLLO DE MODELOS DE PROGRAMACIÓN MATEMÁTICA PARA LA
INTEGRACIÓN ÓPTIMA ENTRE CALOR Y TRABAJO

Viviani Caroline Onishi

Abril/2014

Directores:

Mauro A. S. S. Ravagnani

José A. Caballero Suárez

Programa: Ingeniería Química

Conservación y eficiencia energética son esenciales en las plantas de procesamiento, siendo conseguidas mediante una gestión optimizada de la energía utilizada. En este contexto, la integración óptima entre el calor y el trabajo puede reducir considerablemente el consumo de energía y, en consecuencia, el coste global del proceso. Así, se han desarrollado cuatro modelos basados en superestructuras para la optimización de la integración de energía en procesos industriales. El primer modelo presentado en esta tesis, es un modelo de programación matemática para el diseño detallado de los cambiadores de calor de carcasa y tubos. El enfoque propuesto sigue estrictamente los estándares de TEMA (*Tubular Exchanger Manufacturers Association*), por lo que todas las características geométricas obtenidas para el equipo están estandarizadas. El método de Bell-Delaware es utilizado para diseñar el lado de la carcasa del cambiador de calor. Por otra parte, la superestructura es formulada en programación disyuntiva generalizada (PDG) y programación no lineal mixta entera (PNLME), para obtener un equipo estándar con el área de cambio de calor y/o el coste total mínimo. La principal contribución de este modelo es que se propone un nuevo enfoque secuencial para la optimización de objetivos parciales, en que el conjunto completo de ecuaciones de diseño es dividido en subgrupos, con la asignación de diferentes funciones

objetivo basadas en el conocimiento heurístico del proceso. El segundo modelo de optimización se refiere a un modelo para la síntesis simultánea de redes de cambiadores de calor (RCCs). La superestructura propuesta para describir el proceso es formulada en PDG y PNLME, con el objetivo de minimizar el coste total anualizado del proceso. En este caso, la función objetivo es compuesta por gastos de operación y coste de capital de inversión en equipos. Este modelo contribuye de manera significativa al campo de síntesis de procesos, ya que incorpora la posibilidad de ajustar los niveles de presión de las corrientes de proceso con el fin de mejorar la recuperación de calor del sistema. Por lo tanto, la recuperación de la presión se realiza de forma consecutiva con la integración de calor, de modo que las condiciones del proceso deben ser tratadas como variables de optimización. Además, el modelo es innovador pues permite el uso de equipos para la manipulación de presión acoplados al eje común, y la sustitución de las turbinas por válvulas cuando es económicamente favorable para el proceso. El tercer modelo matemático se aplica a la síntesis simultánea de las redes de cambio de trabajo (RCT). En este modelo, un concepto innovador y poco explorado en la literatura es desarrollado, con el objetivo de obtener la integración óptima entre el trabajo y calor en procesos industriales. Así, el nuevo enfoque propuesto es análogo al problema de la síntesis de RCCs, en que la integración de trabajo ocurre entre corrientes sometidas a alta presión y baja presión en varias etapas de manipulación de presión. El modelo de PNLME permite la integración simultánea de calor en la RCC, con el objetivo de mejorar la recuperación de presión del proceso. Además, el modelo considera el uso de múltiples unidades de ejes individuales de turbina y compresor del tipo SSTC (*single-shaft-turbine-compressor*), así como compresores, turbinas y válvulas autónomas con el fin de minimizar el coste total anualizado de la red. El último modelo de PNLME propuesto, es un modelo matemático para el rediseño de RCCs. La principal contribución de este trabajo es el uso de la recuperación de presión de corrientes, para mejorar la recuperación de calor en las redes existentes. Por lo tanto, la superestructura propuesta permite el aumento del área de cambio de calor existente, así como el uso de nuevos equipos para el manejo de presión y cambio de calor. En todos los modelos desarrollados, estudios de casos son realizados para verificar la exactitud de los enfoques propuestos, incluyendo aplicaciones industriales reales para los modelos de síntesis de procesos. En general, los resultados indican que los modelos propuestos describen con precisión los procesos industriales para que son previstos.

Sumário

CAPÍTULO 1	1
Introdução:	1
<i>Motivação, Objetivos e Estrutura da Tese</i>	1
1.1 Modelagem e Otimização de Energia	1
1.2 Motivação	3
1.3 Objetivos da Pesquisa	4
1.4 Estrutura da Tese	5
CAPÍTULO 2	7
Projeto de Trocadores de Calor Casco e Tubo:	7
<i>Modelo de Programação Matemática baseado em uma Abordagem Sequencial de Otimização de Objetivos Parciais</i>	7
2.1 Introdução	8
2.2 Definição do Problema	11
2.3 Modelo de Programação Matemática	12
2.3.1 Conjuntos de Equações de Projeto	12
2.4 Aspectos Computacionais	23
2.5 Estudos de Casos	24
2.6 Conclusões	35
Lista de Símbolos	37
Referências Bibliográficas	40

CAPÍTULO 3	43
Síntese Simultânea de Redes de Trocadores de Calor:	43
<i>Modelo de Programação Matemática para a Ótima Integração de Calor com Recuperação de Pressão de Correntes de Processo</i>	43
3.1 Introdução	44
3.2 Definição do Problema	47
3.3 Modelo de Programação Matemática	49
3.3.1 Operador para Manipulação de Pressão	53
3.3.2 Operador para o Acoplamento de Turbinas e Compressores	54
3.3.3 Operador para a Seleção de Válvulas ou Turbinas	55
3.3.4 Função Objetivo	57
3.4 Aspectos Computacionais	58
3.5 Estudos de Casos	60
3.6 Conclusões	81
Lista de Símbolos	84
Referências Bibliográficas	86
CAPÍTULO 4	91
Síntese Simultânea de Redes de Troca de Trabalho:	91
<i>Modelo de Programação Matemática para a Ótima Integração de Trabalho com Recuperação de Calor de Correntes de Processo</i>	91
4.1 Introdução	92
4.2 Definição do Problema	96
4.3 Superestrutura da RTT–RTC.....	97
4.4 Modelo de Programação Matemática	103
4.4.1 Definição de Índices	103
4.4.2 Restrições Lógicas.....	104
4.4.3 Estágios de Compressão e Expansão	108
4.4.4 Balanço de Energia Global para cada Eixo SSTC	116

4.4.5 <i>Integração Térmica – Síntese Simultânea da RTC</i>	116
4.4.6 <i>Função Objetivo</i>	118
4.5 Aspectos Computacionais	120
4.6 Estudos de Casos	121
4.7 Conclusões	145
Lista de Símbolos	148
Referências Bibliográficas	150
CAPÍTULO 5	155
<i>Retrofit</i> de Redes de Trocadores de Calor:.....	155
<i>Modelo de Programação Matemática para Ótima Integração entre Calor e Trabalho em Redes Existentes</i>	155
5.1 Introdução	156
5.2 Definição do Problema	159
5.3 Modelo de Programação Matemática	162
5.3.1 <i>Formulação Matemática para o Retrofit de RTCs</i>	163
5.3.2 <i>Formulação para o Acoplamento de Equipamentos</i>	165
5.3.3 <i>Função Objetivo</i>	167
5.4 Estudos de Casos	168
5.5 Conclusões	186
Lista de Símbolos	188
Referências Bibliográficas	190
CAPÍTULO 6	193
Conclusões Gerais:.....	193
<i>Principais Contribuições, Sugestões e Publicações Realizadas</i>	193
6.1 Principais Contribuições do Trabalho.....	193
6.2 Sugestões para Trabalhos Futuros	196
6.3 Publicações Realizadas	197

6.3.1 <i>Trabalhos Publicados em Revistas Indexadas</i>	197
6.3.2 <i>Trabalhos Publicados em Eventos Científicos</i>	197
6.3.3 <i>Trabalhos Aceitos para Publicação em Eventos Científicos</i>	198
6.3.4 <i>Trabalhos Submetidos à Publicação em Revistas Indexadas</i>	198
6.3.5 <i>Trabalhos Submetidos à Publicação em Eventos Científicos</i>	198
Apêndice	199
Apêndice A. Estudos Comparativos de Casos Adicionais para o Projeto de TCCTs	199
Apêndice B. Modelo para Síntese de RTCs de Yee & Grossmann (1990)	208
Apêndice C. Trabalhos Científicos Publicados ao Longo do Doutorado	214

Lista de Figuras

Figura 2.1 Esquema para otimização sequencial de TCCTs.....	22
Figura 3.1 Cadeia energética para o transporte e utilização de gás natural liquefeito (GNL)	46
Figura 3.2 Possível arranjo de correntes para o Exemplo 3.1.....	62
Figura 3.3 Configuração ótima da RTC obtida para o Exemplo 3.1 – Caso 1.	63
Figura 3.4 Configuração ótima da RTC obtida para o Exemplo 3.1 – Caso 2.	64
Figura 3.5 Configuração ótima da RTC obtida para o Exemplo 3.1 – Caso 3.	66
Figura 3.6 Possível arranjo de correntes para o Exemplo 3.2.....	68
Figura 3.7 Configuração ótima da RTC obtida para o Exemplo 3.2 –Caso 2.	70
Figura 3.8 Configuração ótima da RTC obtida para o Exemplo 3.2 – Caso 3.	71
Figura 3.9 Configuração ótima da RTC obtida para o Exemplo 3.2 – Caso 4.	72
Figura 3.10 Possível arranjo de correntes para o Exemplo 3.3.....	75
Figura 3.11 Configuração ótima da RTC obtida para o Exemplo 3.3 – Caso 1.	77
Figura 3.12 Configuração ótima da RTC obtida para o Exemplo 3.3 – Caso 2.	78
Figura 3.13 Configuração ótima da RTC obtida para o Exemplo 3.3 – Caso 3.	81
Figura 4.1 Superestrutura da RTT para o estágio s de compressão.	100
Figura 4.2 Superestrutura da RTT para o estágio s de expansão.	101
Figura 4.3 Superestrutura multi-estágio para duas correntes na síntese da RTT, na qual a RTC aparece em destaque.	103

Figura 4.4 Configuração ótima da RTT com integração de calor obtida para o Exemplo 4.1 – Caso 1.....	126
Figura 4.5 Configuração ótima da RTT com integração de calor obtida para o Exemplo 4.1 – Caso 2.....	128
Figura 4.6 Configuração ótima da RTT com integração de calor obtida para o Exemplo 4.2 – Caso 1.....	132
Figura 4.7 Configuração ótima da RTT com integração de calor obtida para o Exemplo 4.2 – Caso 2.....	135
Figura 4.8 Configuração ótima da RTT com integração de calor obtida para o Exemplo 4.3 – Caso 1.....	140
Figura 4.9 Configuração ótima da RTT com integração de calor obtida para o Exemplo 4.3 – Caso 2.....	142
Figura 5.1 Cadeia energética para o transporte e utilização de gás natural liquefeito (GNL)	150
Figura 5.2 Possível arranjo de correntes para o Exemplo 5.1.....	170
Figura 5.3 Configuração ótima obtida para o <i>retrofit</i> da RTC no Exemplo 5.1 – Caso 1....	172
Figura 5.4 Configuração ótima obtida para o <i>retrofit</i> da RTC no Exemplo 5.1 – Caso 2....	172
Figura 5.5 Configuração ótima obtida para o <i>retrofit</i> da RTC no Exemplo 5.2 – Caso 1....	177
Figura 5.6 Configuração ótima obtida para o <i>retrofit</i> da RTC no Exemplo 5.2 – Caso 2....	178
Figura 5.7 Diagrama de processo para produção na seção no mar de GNL.....	181
Figura 5.8 Configuração ótima obtida para o <i>retrofit</i> da RTC no Exemplo 5.3.....	184

Lista de Tabelas

Tabela 2.1 Tabela de contagem de tubos de acordo com as normas TEMA.....	14
Tabela 2.2 Dados de entrada do processo e propriedades físicas para os diferentes estudos de casos.....	26
Tabela 2.3 Configuração ótima de TCCT obtida para o Exemplo 2.1.....	27
Tabela 2.4 Configuração ótima de TCCT obtida para o Exemplo 2.2.....	30
Tabela 2.5 Configuração ótima de TCCT obtida para o Exemplo 2.3.....	34
Tabela 3.1 Dados das correntes de processo para o Exemplo 3.1.....	62
Tabela 3.2 Resultados obtidos para as variáveis de decisão no Exemplo 3.1.....	67
Tabela 3.3 Dados das correntes de processo para o Exemplo 3.2.....	68
Tabela 3.4 Resultados obtidos para as variáveis de decisão no Exemplo 3.2.....	73
Tabela 3.5 Dados das correntes de processo para o Exemplo 3.3.....	75
Tabela 3.6 Resultados obtidos para as variáveis de decisão no Exemplo 3.3.....	80
Tabela 4.1 Dados de entrada das correntes e propriedades físicas para os distintos exemplos estudados.....	125
Tabela 4.2 Configuração ótima da RTT com integração térmica obtida para o Exemplo 4.1.....	129
Tabela 4.3 Configuração ótima da RTT com integração térmica obtida para o Exemplo 4.2.....	136

Tabela 4.4 Configuração ótima da RTT com integração térmica obtida para o Exemplo 4.3	143
Tabela 5.1 Dados das correntes e RTC existente para o Exemplo 5.1.....	170
Tabela 5.2 Configurações e variáveis de decisão obtidas para o <i>retrofit</i> da RTC para o Exemplo 5.1.....	174
Tabela 5.3 Dados das correntes e RTC existente para o Exemplo 5.2.....	175
Tabela 5.4 Configurações e variáveis de decisão obtidas para o <i>retrofit</i> da RTC para o Exemplo 5.2.....	179
Tabela 5.5 Dados das correntes e RTC existente para o Exemplo 5.3.....	182
Tabela 5.6 Configuração e variáveis de decisão obtidas para o <i>retrofit</i> da RTC para o Exemplo 5.3.....	185
Tabela A.1 Dados de entrada do processo e propriedades físicas para os diferentes estudos de casos.....	199
Tabela A.2 Configuração ótima de TCCT obtida para o Exemplo 2.4.....	200
Tabela A.3 Configuração ótima de TCCT obtida para o Exemplo 2.5.....	202
Tabela A.4 Configuração ótima de TCCT obtida para o Exemplo 2.6.....	204
Tabela A.5 Configuração ótima de TCCT obtida para o Exemplo 2.7.....	206

Lista de Abreviaturas

AE	Aproximações Exteriores
AP	Alta Pressão
BB	<i>Branch and Bound</i> (ou, Ramificação e Bifurcação)
BP	Baixa Pressão
CEPCI	<i>Chemical Engineering Plant Cost Index</i> (ou, Índice de Custo de Fábrica de Engenharia Química)
CO ₂ L	Dióxido de Carbono Líquido
DBG	Decomposição de Benders Generalizada
ExPAnD	<i>Extended Pinch Analysis and Design</i> (ou, Análise Pinch Estendida e Projeto)
GAMS	<i>General Algebraic Modeling System</i> (ou, Sistema de Modelagem Algébrico Geral)
GN	Gás Natural
GNL	Gás Natural Liquefeito
NLI	Nitrogênio Líquido Inerte
PDG	Programação Disjuntiva Generalizada
PLMI	Programação Linear Mista Inteira
PMI	Pprogramação Mista Inteira
PNL	Pprogramação Não-Linear
PNLMI	Programação Não-Linear Mista Inteira
RTC	Rede de Trocadores de Calor
RTT	Rede de Troca de Trabalho
SSTC	<i>Single-Shaft-Turbine-Compressor</i> (ou, Eixo Único de Turbina e Compressor)
TCCT	Trocador de Calor Casco e Tubo
TEMA	<i>Tubular Exchanger Manufacturers Association</i> (ou, Associação de Fabricantes de Trocadores Tubulares)

CAPÍTULO 1

Introdução:

Motivação, Objetivos e Estrutura da Tese

Neste capítulo são apresentadas as principais motivações por trás da realização deste estudo, assim como os objetivos que norteiam o desenvolvimento do trabalho e estrutura organizacional da tese.

1.1 Modelagem e Otimização de Energia

Eficiência e conservação de energia são fundamentais em plantas de processamento. Em vista disso, a necessidade de gerenciamento energético em indústrias de processo deve satisfazer mais do que, simplesmente, a minimização do uso de energia. A gestão de energia deve visar a eficiência e conservação através do uso controlado de energia para tornar o processo mais eficiente e econômico possível, contribuindo adicionalmente para a diminuição de impactos ambientais relacionados ao alto consumo energético. Para alcançar estes importantes objetivos industriais, o uso de energia deve ser otimizado de forma tão rigorosa quanto a maneira com que se procura, por exemplo, obter maiores ganhos em produtividade. Ressalta-se que o contínuo aumento dos custos de insumos energéticos, bem como a redução da disponibilidade dos combustíveis fósseis e o incremento das restrições ambientais à emissão de poluentes, são alguns dos fatores que justificam o investimento em projetos industriais mais energeticamente sustentáveis.

A integração entre calor e trabalho em um processo pode reduzir significativamente o consumo de energia e, por conseguinte, o custo total de produção. Em particular, a redução

de custos está associada à diminuição das despesas operacionais relativas ao uso de serviços públicos para aquecimento e resfriamento de fluidos e eletricidade, comumente aplicados a sistemas de processamento. Contudo, a integração de energia em sistemas de processo exige abordagens sistemáticas para projetar e otimizar a recuperação de calor e pressão como, por exemplo, métodos simultâneos de Programação Matemática. Tais métodos são baseados no desenvolvimento de superestruturas de otimização, capazes de lidar de forma eficiente com casos industriais complexos. As superestruturas de otimização são representadas por modelos matemáticos apropriados. Claramente, o modelo matemático pode simular o comportamento de um sistema real de forma mais ou menos precisa. Quanto mais preciso for o modelo em relação ao comportamento real de um sistema, os resultados da otimização de energia podem melhorar significativamente a performance do sistema.

Otimizações de energia surgem em vários sistemas químicos e mecânicos de engenharia e síntese de processos—dimensionamento de equipamentos de troca térmica, redes de trocadores de calor, redes de troca de trabalho, etc.—para resolver problemas de energia, geralmente, associados com conversão, geração e transmissão de calor e, mais recentemente, recuperação de pressão. Estes problemas podem ser tratados por métodos matemáticos de otimização, incluindo programação disjuntiva generalizada e programação não-linear com variáveis contínuas e inteiras.

Os sistemas de energia podem ser otimizados para satisfazer diversas metas primárias, dentre elas pode-se citar a limitação de valores de algumas grandezas físicas relevantes, tais como energia ou exergia do sistema, ou mesmo a área de troca de calor ou queda de pressão em um equipamento (Capítulo 2 desta tese), etc. Outros objetivos incluem análises de custos envolvidos no processo para encontrar economicamente soluções ótimas (Capítulos 2 a 5), e o desenvolvimento de novas abordagens para obtenção de melhores soluções do problema, assegurando a ótima integração de energia do sistema (Capítulos 3 a 5).

1.2 Motivação

A integração de calor em processos através da síntese ótima de redes de trocadores de calor (RTCs), tornou-se um assunto de grande interesse tanto do ponto de vista industrial quanto acadêmico, a partir da grande crise de energia deflagrada na década de 1970. Devido à sua importante relação com outros setores do processo e ao fato de que, por meio de um projeto eficiente de rede de equipamentos de troca de calor, pode-se diminuir significativamente o consumo de utilidades térmicas, como vapor e água de resfriamento. Deve-se enfatizar que as RTCs são fundamentais em muitos processos industriais, incluindo indústrias alimentícias e químicas, destilação de petróleo bruto, sistemas de água de resfriamento e processos criogênicos. Estes setores são responsáveis pelo consumo de grandes quantidades de energia, no qual o processo de transferência de calor representa custos elevados.

Os primeiros trabalhos na área de síntese de RTCs foram, em sua maioria, baseados em técnicas de Programação Matemática ou em regras heurísticas evolucionárias. No entanto, estes métodos não apresentaram grande sucesso no âmbito da aplicação em processos industriais reais. Este resultado somente começou a ser alcançado a partir de meados da década de 1980, com o surgimento da análise *pinch*, alicerçada na utilização de Leis da Termodinâmica e regras heurísticas. A partir deste momento, um grande número de trabalhos científicos foram publicados na área e grandes avanços foram realizados inclusive na indústria. Contudo, nas últimas décadas, o desenvolvimento de computadores com maior capacidade de processamento permitiu que os métodos de Programação Matemática passassem a ocupar um lugar de destaque no campo industrial.

Atualmente, o interesse no projeto destes sistemas térmicos vem sendo renovado devido à tendência recente de gestão do uso de energia, visando o desenvolvimento de processos sustentáveis em termos de obtenção de maior eficiência e conservação de energia e, por consequência, redução de custos e impactos ambientais. Todavia, apesar do grande enfoque dado à resolução do problema da recuperação de calor através da síntese ótima de RTCs, a literatura a respeito de otimização de energia para integração entre calor e trabalho é pouco prolífera.

A manipulação de pressão de correntes de processo é responsável pelo consumo de quantidades significativas de energia, exercendo um papel especialmente importante em

refinarias de petróleo e processos criogênicos, tal como a produção de gás natural liquefeito. Em tais plantas, os processos de compressão e expansão de correntes sujeitas a pressões elevadas são extremamente dispendiosos. Além disso, os compressores e turbinas estão entre os equipamentos de maior custo em indústrias, superando inclusive o valor de equipamentos para troca de calor. Em razão da urgência em concretizar estes importantes objetivos industriais centrados na melhoria da eficiência energética e conservação de energia, a integração de trabalho e uma melhor relação entre trabalho e calor devem ser consideradas como alternativas viáveis. Evidentemente, é possível integrar trabalho e calor na mesma rede com a finalidade de otimizar o uso de energia.

O trabalho desenvolvido nesta tese é motivado essencialmente por quatro razões: (i) pela escassez de trabalhos científicos na área de síntese de processos para a ótima integração entre calor e trabalho; (ii) pela lacuna em otimização de energia referente à utilização de métodos de Programação Matemática para síntese de RTCs com recuperação de pressão de correntes; (iii) pela necessidade de desenvolver um conceito inovador de síntese de redes de troca de trabalho (RTTs) com recuperação de calor de correntes; (iv) pela necessidade de estender os conceitos desenvolvidos a processos existentes.

1.3 Objetivos da Pesquisa

O objetivo geral da presente pesquisa centra-se no desenvolvimento de distintos modelos de otimização, formulados em Programação Matemática, para a ótima integração de energia durante a síntese de processos industriais. O trabalho deve abranger aspectos relacionados desde o dimensionamento de equipamentos para troca de calor, passando pela proposição de superestruturas para a síntese de redes de troca de calor e trabalho, além do *retrofit* de redes existentes. Os objetivos específicos do trabalho são descritos como segue:

1. Desenvolvimento de um modelo de Programação Matemática para o dimensionamento termo-hidráulico detalhado de trocadores de calor casco e tubo, através da proposição de uma abordagem sequencial de otimização de metas parciais, visando evitar soluções prematuramente presas a mínimos locais.

2. Desenvolvimento de um modelo de Programação Matemática para a síntese simultânea de redes de trocadores de calor, permitindo-se o ajuste dos níveis de pressão de correntes de processo visando a ótima integração entre calor e trabalho.
3. Desenvolvimento de um modelo de Programação Matemática para a síntese simultânea de RTTs, considerando-se a recuperação de calor de correntes de processo visando a melhoria na recuperação de pressão no sistema.
4. Desenvolvimento de um modelo de Programação Matemática para o *retrofit* de redes de trocadores de calor existentes, considerando-se a recuperação de pressão de correntes de processo visando a melhoria na integração de calor do sistema.

Nesta perspectiva, e no âmbito da otimização de sistemas integrados de energia através da aplicação de métodos apropriados, pretende-se determinar soluções ótimas que correspondam à minimização de custos relacionados e que verifiquem todas as restrições envolvidas nos respectivos processos industriais.

1.4 Estrutura da Tese

Apesar dos conceitos fundamentais estarem interligados, a tese é construída de forma que todos os capítulos possam ser lidos de forma completamente independente e auto-suficiente. Os modelos propostos são apresentados na ordem cronológica a que foram desenvolvidos; contudo, o leitor é convidado a ler na ordem que melhor lhe for conveniente. A organização do conteúdo desta tese é a seguinte: no presente capítulo, o problema principal que norteia a pesquisa é delineado, apresentando-se a motivação para o desenvolvimento do estudo e objetivos a serem alcançados com a sua realização.

No Capítulo 2 é apresentado o modelo matemático proposto para o projeto detalhado de trocadores de calor casco e tubo. Inicialmente é realizada a revisão bibliográfica, onde busca-se apresentar o atual estado da arte das propostas encontradas na literatura para resolução do problema do dimensionamento termo-hidráulico deste tipo de equipamento. Em seguida, define-se o problema estudado e o modelo desenvolvido é apresentado por meio da formulação matemática e abordagem de otimização propostos. Ainda neste capítulo,

apresenta-se os principais aspectos computacionais envolvidos na resolução do modelo e casos estudados, nos quais são realizados a análise e discussão dos resultados obtidos. A última seção do capítulo destina-se às conclusões acerca da abordagem referida.

O Capítulo 3 aborda o problema da síntese simultânea de RTCs, em que o problema padrão é estendido para ótima integração entre calor e trabalho. Nas primeiras duas seções do capítulo são apresentados a revisão detalhada da literatura recente, versando o estado atual de arte e motivação para o desenvolvimento do novo modelo proposto, bem como o delineamento do problema abordado. Nas seções que sucedem, apresentam-se a descrição do modelo matemático desenvolvido baseado em superestrutura, aspectos computacionais da resolução e estudos de casos realizados. Uma abrangente análise, discussão e conclusões do trabalho são apresentados na última seção.

No Capítulo 4, um novo modelo de otimização matemático é desenvolvido para a síntese simultânea de RTTs, com integração térmica de correntes. A primeira seção é dedicada à revisão da literatura recente relacionada ao assunto, motivação e objetivos da temática proposta. Em seguida, o problema estudado é definido e a formulação matemática é apresentada detalhadamente. As seções seguintes são reservadas aos aspectos computacionais envolvidos na resolução da abordagem proposta, e estudos de casos relacionados. Por último, realiza-se a análise, discussão e conclusões dos resultados obtidos com a metodologia aplicada.

O Capítulo 5 é dedicado à resolução do problema de *retrofit* de RTCs existentes, no qual o problema padrão é estendido para a recuperação simultânea de pressão das correntes. Inicialmente, realiza-se a revisão da literatura, onde é apresentado o atual estado da arte, motivação para o desenvolvimento e objetivos do modelo. Segue-se com a definição e delineamento do problema abordado, descrição detalhada da formulação matemática proposta, e aspectos relacionados com a resolução computacional do modelo. Nas seções que sucedem, apresenta-se os estudos de casos realizados, bem como a análise, discussão e conclusões acerca do trabalho desenvolvido.

No Capítulo 6 são apresentadas as conclusões gerais dos modelos matemáticos propostos para a ótima integração de energia em processos industriais, desenvolvidos nesta tese. Adicionalmente, apresentam-se as propostas de trabalhos futuros e publicações científicas realizadas durante o desenvolvimento da pesquisa.

CAPÍTULO 2

Projeto de Trocadores de Calor Casco e Tubo:

Modelo de Programação Matemática baseado em uma Abordagem Sequencial de Otimização de Objetivos Parciais

A Programação Matemática pode ser utilizada para a otimização do projeto de trocadores de calor do tipo casco e tubo (TCCTs). Este capítulo apresenta um novo modelo matemático para o projeto detalhado de TCCTs, seguindo rigorosamente as normas da Associação de Fabricantes de Trocadores Tubulares (Tubular Exchanger Manufacturers Association - TEMA). O modelo de otimização proposto é formulado em programação disjuntiva generalizada (PDG), e reformulado em programação não-linear mista inteira (PNLMI). Em adição, o método de Bell-Delaware é usado para os cálculos de projeto do lado casco. Devido à natureza altamente não-linear e não convexa da formulação proposta, o modelo não pode ser resolvido para o ótimo global com o atual estado de arte do solvers disponíveis. Não obstante, uma nova abordagem sequencial de otimização centrada em objetivos parciais é desenvolvida para resolver o problema, através da divisão do modelo em conjuntos de equações relacionadas para facilitar a obtenção de soluções viáveis. Para cada um destes subproblemas é atribuída uma função objetivo heurística distinta, selecionada com base no comportamento físico do problema. Três estudos de casos são realizados para avaliar a acurácia do método desenvolvido quanto à obtenção de um projeto ótimo de TCCT. Os resultados mostram que, em todos os casos, os valores obtidos usando o modelo de PNLMI proposto contendo diversas funções objetivo são melhores que os resultados apresentados na literatura.

2.1 Introdução

A otimização da recuperação de calor é fundamental para resolver o problema do uso eficiente de energia e, por conseguinte, promover a redução das emissões gasosas e o consumo de combustíveis fósseis. Aproximadamente 80% do consumo total de energia está relacionado com a transferência de calor. Em vista disso, a melhoria no desempenho da recuperação de calor é de fundamental importância para a redução do consumo de energia em plantas de processamento (Cheng & Liang, 2012a, 2012b; Kaluri & Basak, 2011; Wang et al., 2011). Nesta perspectiva, os trocadores de calor são um dos tipos mais eficientes de equipamentos usados para recuperar energia de correntes de processo (Azad & Amidpour, 2011; Patel & Rao, 2010).

Trocadores de calor do tipo casco e tubo (TCCTs) são amplamente utilizados em processos químicos industriais, indústrias farmacêuticas e alimentícias, usinas de energia e refinarias de petróleo, devido à sua grande capacidade de adaptação a diferentes condições operacionais, resistência característica e flexibilidade de projeto. No entanto, o projeto de TCCTs incluindo análises termodinâmica e fluido-dinâmica, estimativa de custos e otimização, é um processo complexo que envolve a integração de regras de projeto e conhecimento empírico de várias áreas, especialmente para o lado casco que apresenta complexas características de transferência de calor e queda de pressão (Ravagnani & Caballero, 2007). Desta forma, a otimização do projeto de TCCTs abrange a determinação de um grande número de variáveis termo-hidráulicas e operativas, para a obtenção da configuração geométrica ótima que satisfaça a quantidade de calor necessária e o conjunto de restrições impostas pelo processo (Patel & Rao, 2010; Ravagnani & Caballero, 2007).

Nas últimas décadas, devido ao importante papel desenvolvido pelos TCCTs no âmbito industrial, um esforço de pesquisa considerável têm sido dedicado à solução do problema de otimização deste tipo de equipamento. Assim, diferentes técnicas de otimização—incluindo algoritmos genéticos (Allen et al., 2009; Guo et al., 2009; Ponce-Ortega et al., 2009; Rajasekaran & Kannadasan, 2010), otimização por enxame de partículas (Patel & Rao, 2010), e Programação Matemática (Mizutani et al., 2003; Pogiatis et al., 2012; Ponce-Ortega et al., 2006; Ravagnani & Caballero, 2007)—têm sido empregadas para melhorar o projeto de TCCTs, através da otimização de funções objetivo distintas como, por exemplo, o custo anual, composto por despesas de área de troca térmica e/ou custos de bombeamento (Allen et al., 2009; Mizutani et al., 2003; Patel & Rao, 2010; Pogiatis et al.,

2012; Ponce-Ortega et al., 2006; Ravagnani & Caballero, 2007), ou a geração de entropia do sistema (David et al., 2012; Guo et al., 2009; Li & Lai, 2013). Outros estudos têm sido dedicados à otimização de um único parâmetro geométrico, como o espaçamento de chicanas (Li & Kottke, 1998; Soltan et al., 2004), ou uma variedade de parâmetros geométricos e operacionais (Fesanghary et al., 2009).

Distintos métodos de projeto de trocadores de calor foram propostos na literatura. O primeiro método de projeto para a determinação dos parâmetros termo-hidráulicos, área de troca térmica, coeficientes de transferência de calor e queda de pressão foi publicado por Kern (1950). O método de Kern foi desenvolvido para a concepção de novos trocadores de calor, ou para avaliar equipamentos existentes em relação à queda de pressão e à incrustação. Contudo, algumas correlações foram propostas com base no diâmetro equivalente, superestimando os parâmetros de projeto para o lado casco (Ravagnani & Caballero, 2007). De acordo com Taborek (1983), o método de Bell-Delaware fornece resultados mais realistas e precisos para o lado casco em relação aos coeficientes de transferência de calor e queda de pressão, devido à consideração de cinco fluxos distintos (i.e., vazamentos entre tubos do feixe e chicanas, desvio do feixe de tubos sem fluxo cruzado, vazamentos entre casco e chicanas, vazamentos devido a mais de uma passagem nos tubos e desvio do fluxo principal devido ao fluxo cruzado no feixe de tubos), os quais não foram considerados no método de Kern (1950). Uma vez que esses desvios de fluxos não ocorrem em regiões bem definidas, ou seja, existe uma interação entre eles, a representação do escoamento real do lado casco exige um tratamento matemático complexo.

Em um estudo anterior, Mizutani et al. (2003) apresentaram uma abordagem de otimização para o projeto de TCCTs, utilizando o método de Bell-Delaware para o cálculo dos coeficientes de transferência de calor e queda de pressão para o lado casco. Os autores utilizaram programação disjuntiva generalizada (PDG) para a formulação do problema, e programação não-linear mista inteira (PNLMI) para a sua otimização. Neste trabalho, os autores não seguem rigorosamente as normas TEMA (*Tubular Exchanger Manufacturers Association*). Assim, algumas características como o número de tubos e diâmetro de feixe de tubos, que são calculadas e otimizadas, podem não estar de acordo com a padronização existente (TEMA, 2007). Em Ravagnani & Caballero (2007), o método de Bell-Delaware é usado para formular um modelo matemático envolvendo variáveis contínuas e discretas para a seleção de uma configuração ótima de TCCT. Analogamente a Mizutani et al. (2003), o modelo é formulado em PDG e é otimizado com uma reformulação em PNLMI. Contudo, o

modelo proposto por Ravagnani & Caballero (2007) segue rigorosamente as normas TEMA. Em consequência, todas as características geométricas do equipamento—tais como: diâmetro do casco, diâmetro do feixe de tubos, diâmetro externo dos tubos, tubo *pitch*¹, arranjo de tubos, número de passagens nos tubos e número de tubos—estão padronizadas (TEMA, 2007).

A utilização de um modelo de processo detalhado resulta em um problema de PNLMI altamente não-linear e não convexo. É importante ressaltar que o atual estado da arte dos *solvers* determinísticos disponíveis, não garante a obtenção da solução ótima global para este tipo de problema. Visto que a probabilidade da solução ficar presa em um mínimo local é muito grande, faz-se necessário o estudo e o desenvolvimento de outras estratégias de otimização para evitar que tal situação possa ocorrer. Este capítulo apresenta um modelo de otimização para o projeto termo-hidráulico detalhado de TCCTs. A abordagem proposta é baseada no modelo de Ravagnani & Caballero (2007), no qual o método de Bell-Delaware é usado para a determinação das características de projeto do lado casco. Além disso, o modelo segue rigorosamente as normas TEMA.

O modelo desenvolvido é formulado em PDG e otimizado em PNLMI, com o objetivo de obter uma configuração de equipamento ótima que apresente a área de troca térmica e/ou custo total mínimo. Para este efeito, uma nova abordagem sequencial de otimização é desenvolvida, através da utilização de diversas metas parciais objetivas. Com esta finalidade, o problema é dividido em conjuntos de equações de projeto de, teoricamente, mais fácil resolução. Em cada um desses subconjuntos, o conhecimento do comportamento físico do sistema permite a introdução de uma função objetivo que, provavelmente, irá produzir o melhor desempenho no projeto final. Três estudos de casos são realizados para testar a aplicabilidade do modelo proposto. Ainda que a solução ótima global não possa ser garantida, resultados melhores são obtidos em relação aos reportados na literatura.

¹ Distância do centro do tubo ao centro de tubos adjacentes

2.2 Definição do Problema

O projeto de TCCTs consiste em determinar a configuração ótima de um trocador, para a transferência de calor entre uma corrente quente e uma corrente fria. Desta forma, o projeto de TCCTs pode ser formulado como um problema de otimização, cujo principal objetivo é determinar as características geométricas do trocador de calor que apresentem uma área e/ou custo mínimo. Neste último caso, considerando-se as despesas relativas à área de troca térmica e custos de bombeamento associados à queda de pressão. Essas características devem seguir rigorosamente as normas TEMA, e o projeto final do equipamento deve estar de acordo com os limites de queda de pressão, incrustação e velocidade de fluido impostas pelo processo.

Os dados de entrada para os fluidos quentes e frios são: T_{in} (temperatura de entrada), T_{out} (temperatura de saída), m (vazão mássica), ρ (densidade), C_p (capacidade calorífica), μ (viscosidade), k (condutividade térmica), ΔP_{design} (queda de pressão), rd_{design} (fator de incrustação), e dados de custos associados ao processo. O índice h é usado para a corrente quente e o índice c para o fluido frio. As variáveis mecânicas para o lado tubo a serem otimizadas são: diâmetro interno (d_{in}), diâmetro externo (d_{ex}), arranjo geométrico (arr), tubo $pitch$ (pt), comprimento de tubos (L), número de passagens do fluido nos tubos (Ntp), e número de tubos (Nt). Para o lado casco, as variáveis a serem determinadas são: diâmetro externo do casco (Ds), diâmetro do feixe de tubos ($Dotl$), número de chicanas (Nb), corte das chicanas (lc), e espaçamento entre chicanas (ls).

Finalmente, as variáveis termo-hidráulicas a serem determinadas são: quantidade de calor trocada (Q), área de troca térmica (A), coeficientes individuais de transferência de calor para o lado tubo e lado casco (h^t e h^s), coeficientes globais de transferência de calor sujo² (ou de projeto) e limpo (Ud e Uc), queda de pressão do lado tubo e lado casco (ΔP^t e ΔP^s), fator de incrustação (rd), e localização ideal das correntes quentes e frias no interior do trocador de calor.

² Dimensionamento maior do que o inicial para que o equipamento cumpra a função desejada durante um certo tempo de serviço

2.3 Modelo de Programação Matemática

A descrição detalhada do modelo matemático é apresentada nas seções seguintes. Nesta nova abordagem proposta, um método de otimização sequencial é desenvolvido através da divisão do conjunto completo de equações de projeto e proposição de distintas funções objetivo baseadas em heurísticas de processo. As funções objetivo são embasadas no conhecimento empírico do projetista sobre o correto funcionamento de TCCTs. Deve-se destacar que o valor ótimo obtido para as variáveis em cada subconjunto é mantido fixo para as otimizações dos conjuntos subsequentes.

No modelo apresentado, o método de projeto de Bell-Delaware é utilizado para o cálculo dos coeficientes de transferência de calor e queda de pressão para o lado casco. Além disso, o modelo proposto é formulado como um problema de PDG e reformulado como um problema de PNLMI (Mizutani et al., 2003; Ravagnani & Caballero, 2007). Conforme mencionado anteriormente, as propriedades físicas dos fluidos (i.e., densidade, viscosidade, capacidade calorífica e condutividade térmica) são constantes conhecidas (temperatura constante).

2.3.1 Conjuntos de Equações de Projeto

1. O primeiro conjunto de equações consiste em um problema de PNLMI, com o objetivo de determinar a melhor localização das correntes quente e fria no trocador de calor, assim como a estimativa de alguns parâmetros geométricos, de acordo com as normas TEMA (ver os próximos parágrafos para uma lista completa de todos os parâmetros geométricos otimizados neste primeiro problema), e a definição do regime de fluxo e velocidade do fluido no lado casco.

Para a correta alocação das correntes de processo em TCCTs, alguns fatores importantes devem ser considerados. Dentre eles, destacam-se os materiais de construção, fator de incrustação, pressões operacionais, quedas de pressão, viscosidade, vazões mássicas e temperaturas dos fluidos. Geralmente, a decisão a respeito da localização de fluidos no trocador de calor é tomada a priori. No entanto, se o projetista tem todas essas informações

em mãos, porém não tem certeza de qual lado deve ser alocado cada corrente, uma abordagem matemática de PDG pode ser usada para defini-lo de forma otimizada. Obviamente, a decisão final pertence ao projetista. Assim, neste conjunto de equações, a escolha do lado de escoamento do fluido é realizada através das variáveis binárias y_1^f e y_2^f . Se $y_1^f = 1$, a corrente quente escoar no lado tubo. Isto implica que as propriedades físicas e a vazão mássica do fluido quente serão alocados no lado tubo. Por outro lado, se $y_1^f = 0$ o inverso deve ocorrer. A formulação de PDG é mostrado em Eq. (PDG-1)–(3) e a reformulação PNLMI em Eq. (2.1)–(2.36).

$$\left[\begin{array}{c} y_1^f \\ m^t = m^h \\ m^s = m^c \\ Cp^t = Cp^h \\ Cp^s = Cp^c \\ \mu^t = \mu^h \\ \mu^s = \mu^c \\ k^t = k^h \\ k^s = k^c \\ \rho^t = \rho^h \\ \rho^s = \rho^c \end{array} \right] \forall \left[\begin{array}{c} y_2^f \\ m^t = m^c \\ m^s = m^h \\ Cp^t = Cp^c \\ Cp^s = Cp^h \\ \mu^t = \mu^c \\ \mu^s = \mu^h \\ k^t = k^c \\ k^s = k^h \\ \rho^t = \rho^c \\ \rho^s = \rho^h \end{array} \right]$$

(PDG-1)

$$y_1^f + y_2^f = 1 \quad (2.1)$$

$$m^h = m_1^h + m_2^h \quad (2.2)$$

$$m^c = m_1^c + m_2^c \quad (2.3)$$

$$m^t = m_1^h + m_1^c \quad (2.4)$$

$$m^s = m_2^h + m_2^c \quad (2.5)$$

$$m_1^h \leq m^{\text{upper}} y_1^f \quad (2.6)$$

$$m_1^c \leq m^{\text{upper}} y_2^f \quad (2.7)$$

$$m_2^h \leq m^{\text{upper}} y_2^f \quad (2.8)$$

$$m_2^c \leq m^{upper} y_1^f \quad (2.9)$$

$$\mu^t = y_1^f \mu^h + y_2^f \mu^c \quad (2.10)$$

$$\mu^s = y_2^f \mu^h + y_1^f \mu^c \quad (2.11)$$

$$Cp^t = y_1^f Cp^h + y_2^f Cp^c \quad (2.12)$$

$$Cp^s = y_2^f Cp^h + y_1^f Cp^c \quad (2.13)$$

$$k^t = y_1^f k^h + y_2^f k^c \quad (2.14)$$

$$k^s = y_2^f k^h + y_1^f k^c \quad (2.15)$$

$$\rho^t = y_1^f \rho^h + y_2^f \rho^c \quad (2.16)$$

$$\rho^s = y_2^f \rho^h + y_1^f \rho^c \quad (2.17)$$

Para definir o diâmetro do casco (D_s), bem como o diâmetro de feixe de tubos ($Dotl$), diâmetro externo do tubo (dex), arranjo geométrico (arr), tubo $pitch$ (pt), número de passagens nos tubos (Ntp) e número de tubos (Nt), uma tabela contendo os respectivos valores foi construída em conformidade com as normas TEMA, como mostrado na Tabela 2.1.

Tabela 2.1

Tabela de contagem de tubos de acordo com as normas TEMA.

D_s (m)	$Dotl$ (m)	dex (m)	arr	pt (m)	Ntp	Nt
0,205	0,17325	0,01905	1	0,02379	1	38
0,205	0,17325	0,01905	1	0,02379	2	32
0,205	0,17325	0,01905	1	0,02379	4	26
0,205	0,17325	0,01905	1	0,02379	6	24
.
.
1,524	1,47300	0,02540	2	0,03175	6	1553
1,524	1,47300	0,02540	2	0,03175	8	1522

Para a construção desta tabela foram considerados dois tipos de diâmetros externos de tubos (25,4 e 19,05 mm), dois tipos de arranjo geométrico (triangulares e quadrados), três tipos de tubo *pitch* (23,79; 25,4 e 31,75 mm), cinco tipos de passagens nos tubos (1; 2; 4; 6 e 8), e 21 tipos diferentes de diâmetro de casco e diâmetro de feixe de tubos, que variam de 0,205 m e 0,173 m a 1,524 m e 1,473 m, respectivamente, com 565 linhas. Evidentemente, outros valores podem ser adicionados a esta tabela. A formulação de PDG proposta por Mizutani et al. (2003) foi usado para determinar estes parâmetros geométricos de acordo com Eq. (2.18)–(2.25).

$$\begin{bmatrix} y_1^{nt} \\ Ds = Ds_1 \\ Dotl = Dotl_1 \\ arr = arr_1 \\ pt = pt_1 \\ Ntp = Ntp_1 \\ Nt = Nt_1 \end{bmatrix} \vee \begin{bmatrix} y_2^{nt} \\ Ds = Ds_2 \\ Dotl = Dotl_2 \\ arr = arr_2 \\ pt = pt_2 \\ Ntp = Ntp_2 \\ Nt = Nt_2 \end{bmatrix} \vee \dots \vee \begin{bmatrix} y_{565}^{nt} \\ Ds = Ds_{565} \\ Dotl = Dotl_{565} \\ arr = arr_{565} \\ pt = pt_{565} \\ Ntp = Ntp_{565} \\ Nt = Nt_{565} \end{bmatrix}$$

(PDG-2)

$$Ds = \sum_{i=1}^{565} Ds_i y_i^{nt} \tag{2.18}$$

$$Dotl = \sum_{i=1}^{565} Dotl_i y_i^{nt} \tag{2.19}$$

$$dex = \sum_{i=1}^{565} dex_i y_i^{nt} \tag{2.20}$$

$$arr = \sum_{i=1}^{565} arr_i y_i^{nt} \tag{2.21}$$

$$pt = \sum_{i=1}^{565} pt_i y_i^{nt} \tag{2.22}$$

$$Ntp = \sum_{i=1}^{565} Ntp_i y_i^{nt} \tag{2.23}$$

$$Nt = \sum_{i=1}^{565} Nt_i y_i^{nt} \tag{2.24}$$

$$\sum_{i=1}^{565} y_i^{nt} = 1 \tag{2.25}$$

Cinco tipos de comprimento do tubo foram usados de acordo com as normas TEMA, como mostrado em Eq. (2.26) e Eq. (2.27).

$$N_L = \{2,438; 3,658; 4,877; 6,096; 6,706\}$$

$$L = 2,438y_1^L + 3,658y_2^L + 4,877y_3^L + 6,096y_4^L + 6,706y_5^L \quad (2.26)$$

$$\sum_{i=1}^5 y_i^L = 1 \quad (2.27)$$

De acordo com as normas TEMA, o espaçamento entre chicanas (ls) deve ser limitado entre os valores de Ds e $Ds/5$. Neste caso, foram considerados os valores obtidos através de Eq. (2.28) e Eq. (2.29).

$$ls \leq Ds \quad (2.28)$$

$$ls \geq Ds/5 \quad (2.29)$$

A velocidade de escoamento do fluido localizado no lado casco foi obtida pela Eq. (2.30). De acordo com Smith (2005), este valor deve ser restringido a $0,5 \leq v^s (m/s) \leq 2$.

$$v^s = (m^s / \rho^s) / [(Ds / pt)(pt - dex)ls] \quad (2.30)$$

Neste conjunto de equações de projeto, a maximização do número de Reynolds para o lado casco foi considerada como função objetivo, conforme a Eq. (2.31). A escolha desta função objetivo está relacionada com o fato de que no processo de transferência de calor, qualquer elevação da velocidade de fluxo do fluido implicará no aumento do coeficiente individual de transferência de calor por convecção e, portanto, no aumento do coeficiente global de transferência de calor. Isto implicará em uma área de troca térmica menor e, conseqüentemente, em um equipamento mais barato. Supõe-se que o lado casco é o mais

crítico nesta primeira etapa, e a otimização do lado tubo pode ser deixado para as próximas etapas.

$$Re^S = m^S dex / (\mu^S Sm) \quad (2.31)$$

Onde, Sm é o fluxo cruzado no/ou perto da linha central por uma seção transversal de fluxo. Sm pode ser calculado de acordo com a seguinte disjunção:

$$\left[\begin{array}{c} y_{tri}^{arr} \\ Sm = ls(Ds - Dotl + (pt - dex)(Dotl - dex) / pt) \end{array} \right] \vee \quad (PDG-3)$$

$$\left[\begin{array}{c} y_{sq}^{arr} \\ Sm = ls(Ds - Dotl + (pt - dex)(Dotl - dex) / pn) \end{array} \right]$$

Usando uma reformulação Big-M:

$$Sm \leq ls(Ds - Dotl + (pt - dex)(Dotl - dex) / pt) + M(1 - y_{tri}^{arr}) \quad (2.32)$$

$$Sm \geq ls(Ds - Dotl + (pt - dex)(Dotl - dex) / pt) - M(1 - y_{tri}^{arr}) \quad (2.33)$$

$$Sm \leq ls(Ds - Dotl + (pt - dex)(Dotl - dex) / pn) + M(1 - y_{tri}^{arr}) \quad (2.34)$$

$$Sm \geq ls(Ds - Dotl + (pt - dex)(Dotl - dex) / pn) - M(1 - y_{tri}^{arr}) \quad (2.35)$$

$$y_{tri}^{arr} + y_{sq}^{arr} = 1 \quad (2.36)$$

Onde M é um parâmetro suficientemente grande para tornar válida as equações Eq.(2.32)–(2.36). É importante salientar que se M é menor do que o limite superior para a função, soluções importantes podem ser cortadas da região viável do problema. Por outro lado, se M for demasiado grande, o modelo pode tornar-se difícil de resolver numericamente requerindo um elevado tempo de processamento. Assim, o valor do parâmetro M deve ser escolhido cuidadosamente.

2. No segundo conjunto de equações de projeto, o objetivo consiste em minimizar a queda de pressão do lado casco. A maximização do número de Reynolds na etapa 1, favorece a transferência de calor, mas implica também em uma maior velocidade de escoamento do fluido. Nesta etapa, todos os parâmetros geométricos restantes para o lado casco, são determinados de forma que uma alta velocidade de fluxo deva produzir uma queda de pressão mínima no casco. No parágrafo seguinte é apresentada uma lista completa de todos os parâmetros geométricos otimizados neste problema. Obviamente, todos os parâmetros físicos e geométricos otimizados na primeira etapa devem ser mantidos constantes para a otimização deste subproblema.

O segundo conjunto de equações é um problema de PNLMI como mostrado em Eq. (2.37)–(2.53). Nesta etapa são determinados os fatores de Fanning (fl^s) e de Colburn (ji), e parâmetros geométricos, tais como: número de chicanas (Nb), número de fileiras de tubos em fluxo cruzado ideal (Nc), fração do número total de tubos em fluxo cruzado (Fc), número de colunas de tubos efetivamente cruzados em cada janela (Ncw), cálculo do fator de correção para efeitos de configuração de chicanas (Jc), fator de correção para efeitos de vazamentos em chicanas (Jl), fator de correção para efeitos de *bypass* em chicanas (Jb), coeficiente de filme para o lado casco (h^s), e queda de pressão do lado casco (ΔP^s).

$$fl^s = b_1 1,064^b (Re^s)^{b_2} \quad (2.37)$$

$$ji = a_1 1,064^a (Re^s)^{a_2} \quad (2.38)$$

Em que a e b são obtidos a partir de correlações empíricas, e a_1 , a_2 , b_1 e b_2 são coeficientes que relacionam o número de Reynolds do lado casco com o arranjo de tubos, como apresentado em Ravagnani & Caballero (2007).

$$Nb = L/lc - 1 \quad (2.39)$$

$$Nc = Ds [1 - 2(lc/Ds)] / pp \quad (2.40)$$

Onde lc é o corte das chicanas dado por $lc = 0,25Ds$.

$$Fc = (1/\pi) \left[\pi + 2\lambda \sin(\arccos(\lambda)) - 2\arccos(\lambda) \right] \quad (2.41)$$

$$\text{Com } \lambda = (Ds - 2lc) / Dotl \quad (2.42)$$

$$Ncw = 0,8lc / pp \quad (2.43)$$

$$Jc = Fc + 0,54(1 - Fc)^{0,345} \quad (2.44)$$

$$Jl = \alpha + (1 - \alpha) \exp(-2,2(Ssb + Stb) / Sm) \quad (2.45)$$

$$\text{Com } \alpha = 0,44(1 - Ssb / (Ssb + Stb)) \quad (2.46)$$

$$Jb = \exp(-0,3833Fsbp) \quad (2.47)$$

$$h^s = h_0i \cdot Jc \cdot Jl \cdot Jb \quad (2.48)$$

$$\text{Onde, } h_0i = (ji \cdot Cp^s \cdot m^s / Sm) (k^s / Cp^s \mu^s)^{2/3} \quad (2.49)$$

$$\Delta P^s = 2\Delta P_{bi} (1 + Ncw / Nc) Rb + (Nb + 1) \Delta P_{bi} \cdot Rb + Nb \cdot \Delta P_{wi} \cdot Rl \quad (2.50)$$

$$\text{Onde, } \Delta P_{bi} = (2fl^s \cdot Nc (m^s)^2) / (\rho^s (Sm)^2) \quad (2.51)$$

$$\text{E, } \Delta P_{wi} = (2 + 0,6Ncw) (m^s)^2 / (2Sw \cdot \rho^s \cdot Sm) \quad (2.52)$$

Este valor deve respeitar o limite de queda de pressão fixa a priori no projeto:

$$\Delta P^s \leq \Delta P_{design} \quad (2.53)$$

3. O terceiro conjunto de equações é um problema de PNL para calcular a velocidade do fluido (v^f) e número de Reynolds (Re^f) no lado tubo. Neste caso, a maximização do número de Reynolds para o lado tubo é considerada como função objetivo. Claramente, todos os parâmetros físicos e geométricos otimizados nas etapas anteriores são mantidos constantes para a otimização deste conjunto. Este

subproblema compreende Eq. (2.54)–(2.56), bem como a restrição de velocidade limite de fluidos no lado tubo imposta pelo processo.

$$v^t = \text{Re}^t \cdot \mu^t / (\rho^t \cdot \text{din}) \quad (2.54)$$

$$\text{Onde, } 1 \leq v^t (m/s) \leq 3 \quad (2.55)$$

$$\text{Re}^t = 4m^t \cdot Ntp / (\pi \cdot \text{din} \cdot \mu^t \cdot Nt) \quad (2.56)$$

4. No quarto conjunto de equações de projeto, os valores para o fator de Fanning (f^t), número de Prandtl (Pr^t), número de Nusselt (Nu^t), coeficiente de transferência de calor (h^t), e queda de pressão (ΔP^t), são obtidos e otimizados para o lado tubo. Nesta etapa, a minimização de queda de pressão é considerada como função objetivo. Novamente, todos os parâmetros físicos e geométricos otimizados nas etapas anteriores são mantidos constantes neste subproblema. Este conjunto de equações é um problema de PNL composto por Eq. (2.57)–(2.62), bem como pela restrição para a queda de pressão limite para o lado tubo imposta pelo processo.

$$1/\sqrt{f^t} = -4 \log \left[(0,27\varepsilon / \text{dex}) + (7 / \text{Re}^t)^{0,9} \right] \quad (2.57)$$

Onde, ε é o fator de rugosidade do tubo em mm.

$$\text{Pr}^t = \mu^t Cp^t / \kappa^t \quad (2.58)$$

$$\text{Nu}^t = 0,027 (\text{Re}^t)^{0,8} (\text{Pr}^t)^{1/3} \quad (2.59)$$

$$h^t = (Nu^t \cdot \kappa^t / \text{din}) (\text{din} / \text{dex}) \quad (2.60)$$

$$\Delta P^t = (1/\rho^t) \left[\left(2f^t \cdot Ntp \cdot L(v^t)^2 / \text{din} \right) + 1,25 Ntp (v^t)^2 \right] \quad (2.61)$$

Com a restrição,

$$\Delta P^t \leq \Delta P_{\text{design}} \quad (2.62)$$

5. O último conjunto de equações de projeto é um problema de PNL, com o propósito de determinar a quantidade de calor trocada (Q), a média logarítmica da diferença de temperaturas ($MLDT$), o fator de correção para a $MLDT$ (Ft) calculado de acordo com Blackwell & Haydu (1981), o fator de incrustação (rd), a área de troca de calor (A), o coeficiente global de transferência de calor limpo (Uc), coeficiente global de transferência de calor sujo (Ud), e o custo total (C_{total}). A minimização da área de troca térmica é considerada como função objetivo, e se os parâmetros de custo estiverem disponíveis, a minimização do custo total considerando as despesas associadas com a área e/ou custos de bombeamento, também é considerada como função objetivo. Mais uma vez, todos os parâmetros físicos e geométricos otimizados nas etapas anteriores são mantidas constantes para a otimização desse subproblema. Este conjunto de equações é mostrado em Eq. (2.63)–(2.71).

$$Q = m^s \cdot Cp^s (T_{in}^h - T_{out}^h)^s \quad ou \quad Q = m^s \cdot Cp^s (T_{in}^c - T_{out}^c)^s \quad (2.63a)$$

$$Q = m^t \cdot Cp^t (T_{in}^h - T_{out}^h)^t \quad ou \quad Q = m^t \cdot Cp^t (T_{in}^c - T_{out}^c)^t \quad (2.63b)$$

$$MLDT = (\theta_1 - \theta_2) / \ln(\theta_1 / \theta_2) \quad (2.64)$$

Onde,

$$\theta_1 = T_{in}^h - T_{out}^c \quad e \quad \theta_2 = T_{out}^h - T_{in}^c \quad (2.65)$$

$$A = Nt \cdot \pi \cdot dex \cdot L \quad (2.66)$$

$$Ud = Q / (A \cdot MLDT \cdot Ft) \quad (2.67)$$

$$Uc = 1 / \left[\left(dex / din \cdot h^t \right) + \left(r_{in} \cdot dex / din \right) + \left(dex \cdot \ln(dex / din) / 2k^t \right) + r_{ex} + \left(1 / h^s \right) \right] \quad (2.68)$$

$$rd = (Uc - Ud) Uc \cdot Ud \quad (2.69)$$

Onde,

$$rd \geq rd_{design} \quad (2.70)$$

$$C_{total} = C_{area} + C_{pump} = a_c \left[Q / (U \cdot Ft \cdot MLDT) \right]^{b_c} + c_c \left[(\Delta P^t \cdot m^t / \rho^t) + (\Delta P^s \cdot m^s / \rho^s) \right] \quad (2.71)$$

Note que a função objetivo em cada subproblema é selecionada a fim de garantir um projeto viável—que tende a ser também um projeto ótimo do ponto de vista econômico—favorecendo o processo de transferência de calor ou limitando a queda de pressão. É fundamental entender, porém, que a abordagem sequencial desenvolvida não garante a obtenção do ótimo global, mesmo no caso em que cada subproblema é resolvido para otimização global. Contudo, um bom projeto de TCCT pode ser esperado, como demonstram os estudos de casos apresentados nas próximas seções.

2.4 Aspectos Computacionais

Duas estratégias amplamente utilizadas para o relaxamento de conjuntos disjuntivos são as formulações Big-M (Nemhauser & Wolsey, 1988) e envoltória convexa (Lee & Grossmann, 2000). O relaxamento Big-M de um conjunto disjuntivo implica em uma formulação inteira mista da decisão discreta, ao passo que o relaxamento da envoltória convexa está relacionada com uma formulação disjuntiva da mesma decisão discreta.

Nas formulações (PDG-1) e (PDG-2), a reformulação de envoltória convexa é utilizada, enquanto que em (PDG-3) a reformulação Big-M é usada. Na escolha entre as formulações de envoltória convexa e Big-M, alguns aspectos computacionais importantes devem ser considerados. De acordo com Vecchietti et al. (2003), a relaxação Big-M é mais conveniente quando o tamanho do problema não aumenta substancialmente quando comparado com o método de relaxação da envoltória convexa. Além disso, o modelo Big-M é competitivo quando bons limites podem ser fornecidos para as variáveis, e para problemas grandes em que é importante manter o número de equações e variáveis tão pequeno quanto possível (Yeomans & Grossmann, 1999).

Deve ser enfatizado que para disjunções adequadas em que as regiões viáveis têm alguma interseção, a função objetivo desempenha um papel importante. Assim, se a função objetivo está dentro da região viável do conjunto disjuntivo, tanto a relaxação Big-M quanto a relaxação da envoltória convexa podem produzir o mesmo valor de relaxamento. Caso contrário, a relaxação da envoltória convexa deve ser geralmente melhor. Contudo, as restrições da formulação Big-M podem ser competitivas desde que sejam fornecidos limites apropriados. Por outro lado, o limite inferior pela relaxação Big-M é geralmente mais fraco, o

que pode exigir um tempo de processamento superior ao exigido para a formulação da envoltória convexa (Vecchietti et al., 2003). Neste caso específico, a reformulação da envoltória convexa é usada para as disjunções que envolvem somente equações lineares, enquanto que a reformulação Big-M é aplicada para a disjunção que envolve equações não-lineares para diminuir o número de não-convexidades do modelo.

2.5 Estudos de Casos

Três estudos de casos apresentados na literatura, abrangendo-se diferentes situações, são estudados para avaliar a acurácia do modelo proposto quanto à obtenção do projeto ótimo de TCCTs.

Exemplo 2.1. O primeiro exemplo foi extraído de Shenoy (1995). Neste caso, os dados de custos relativos ao bombeamento de fluidos e à área de troca de calor não estão disponíveis. Assim, o objetivo final desse problema consiste na minimização da área de troca térmica do equipamento. As temperaturas de entrada e de saída das correntes quente e fria, assim como as suas propriedades físicas e fator de incrustação são mostrados na Tabela 2.2. Para este caso, foram considerados a condutividade térmica do tubo igual a 50 Wm/K e o fator de rugosidade $4,57e-5$. O fator de incrustação foi mantido em $1,5e-4$ m²K/W para ambos os lados casco e tubo. O projeto de um único casco foi considerado, visto que este é suficiente para satisfazer o balanço de energia para os fluidos considerados. Além disso, à estas temperaturas, o fator de correção para a MLDT é maior do que 0,75. As características de projeto para ambos os lados foram avaliadas em dois intervalos de pressão distintos, a fim de analisar o efeito da pressão sobre o projeto geométrico e termo-hidráulico do equipamento. Inicialmente, considerou-se as quedas de pressão limite de 10 kPa para o lado casco e 45 kPa para o lado do tubo, e, subsequentemente, uma queda de pressão de 60 kPa foi aplicada para ambos os lados casco e tubo.

Os resultados obtidos com o modelo proposto são mostrados na Tabela 2.3, onde também são apresentadas as configurações ótimas de TCCTs obtidas por Shenoy (1995) e Ravagnani & Caballero (2007). Em Ravagnani & Caballero (2007), o problema proposto em Shenoy (1995) foi resolvido considerando a padronização TEMA, o que não foi realizado

originalmente por Shenoy (1995). Shenoy (1995) obteve uma área de troca térmica de 28,40 m², enquanto que Ravagnani & Caballero (2007) obtiveram os valores para a área de 28,31 m², sem fixar a localização da corrente quente e 38,52 m² fixando este fluido no lado casco. Deve ser mencionado que a possibilidade de escolher a melhor localização do fluido no trocador, também foi desconsiderada no estudo de Shenoy (1995).

No entanto, utilizando-se o método de otimização sequencial com a adoção de múltiplas funções objetivo, proposto neste capítulo, foi possível obter valores para a área de troca de calor de 28,31 m² (sem a fixação de fluidos no TCCT), e 28,89 m² (considerando-se o fluido quente fixo no lado casco) para o primeiro caso, em que as pressões foram mantidas em 10 kPa (lado casco) e 45 kPa (lado tubo). Desta forma, apesar da área de troca térmica apresentar o mesmo valor quando não há a fixação da localização dos fluidos no trocador, no caso em que o fluido quente foi fixado no lado casco, a área de troca térmica sofreu uma redução de 25% em relação ao valor obtido por Ravagnani & Caballero (2007). Para o segundo caso, em que as pressões de ambos os lados casco e tubo foram mantidas em 60 kPa, os resultados para a área de troca térmica foram iguais a 26,41 m² sem a fixação do lado dos fluidos, e 27,73 m² considerando o fluido quente fixo no lado casco. Representando reduções na área de troca de calor de 7% e 28%, respectivamente, quando comparados aos resultados obtidos por Ravagnani & Caballero (2007).

Para verificar a exatidão do método proposto, uma simulação de projeto de equipamento usando o pacote computacional *Aspen Exchange Design & Rating* foi realizada através do *software* ASPEN PLUS. No primeiro caso ($\Delta P^s = 10$ kPa e $\Delta P^t = 45$ kPa para os lados casco e tubo, respectivamente), as áreas de troca térmica de 27,91 m² (sem a fixação de fluidos no TCCT) e 28,49 m² (fixando-se a localização do fluido quente no lado casco) foram obtidas para o trocador de calor. No segundo caso (ambos os lados casco e tubo submetidos a uma pressão máxima de 60 kPa), os resultados obtidos para a área de troca de calor foram iguais a 26,04 m² (sem a fixação de fluidos no TCCT), e 27,34 m² (fixando-se a localização do fluido quente no lado casco). É importante destacar que, nos dois casos estudados, os mesmos valores apresentados na Tabela 2.3 foram considerados na simulação, isto é, $Q = 4339,4$ kW, $MLDT = 60,78$, queda de pressão para o lado da corrente quente, e o respectivo coeficiente global de transferência de calor sujo. Os resultados obtidos com o modelo de PNLMI proposto, e os resultados obtidos com a abordagem de simulação em ASPEN PLUS são bastante aproximados, demonstrando a acurácia do método desenvolvido. As pequenas

diferenças encontradas entre os métodos podem ser atribuídos à padronização de equipamentos TEMA considerado no modelo proposto.

Normalmente, a média logartítmica da diferença de temperaturas (MLDT) é reformulada utilizando a aproximação de Chen (1987), como em Ravagnani & Caballero (2007), com o objetivo de evitar problemas numéricos que possam ocorrer quando a diferença de temperatura em ambas as extremidades do trocador de calor é a mesma. No entanto, como a probabilidade de erro é pequena, neste trabalho, a MLDT não foi obtida por meio de aproximações e assim um valor mais realista de 60,78 foi alcançado para esta média. Além disso, o fator de correção para a MLDT (F_t) foi calculado durante a otimização do modelo apresentando um valor de 0,985, ao contrário do modelo de Ravagnani & Caballero (2007) onde este valor foi mantido fixo como parâmetro de entrada. Assim, apesar da utilização destas equações no modelo aumentarem consideravelmente a não-convexidade e não-linearidade da formulação matemática, resultados melhores para a configuração do TCCT foram obtidos em comparação aos valores reportados na literatura.

Tabela 2.2

Dados de entrada do processo e propriedades físicas para os diferentes estudos de casos.

	T_{in} (K)	T_{out} (K)	m (kg/s)	μ (kg/ms)	ρ (kg/m ³)	C_p (J/kgK)	k (W/mK)	r_d (W/mK)
Exemplo 2.1								
Quente	371,15	338,15	14,90	2,3e-4	777	2684	0,110	1,5e-4
Frio	288,15	298,15	31,58	1,0e-3	998	4180	0,600	1,5e-4
Exemplo 2.2								
Quente	368,15	313,75	27,78	3,4e-4	750	2840	0,190	1,5e-4
Frio	298,15	313,15	68,88	8,0e-4	995	4200	0,590	1,5e-4
Exemplo 2.3								
Quente	483,15	377,59	19,15	1,2e-4	790	2428	0,106	3,5e-4
Frio	324,81	355,37	75,22	2,9e-4	820	2135	0,123	3,5e-4

Dados de custo: $a_c = 123$, $b_c = 0.59$ e $c_c = 1.31$

Tabela 2.3

Configuração ótima de TCCT obtida para o Exemplo 2.1.

	Shenoy (1995)	Ravagnani & Caballero (2007) ^a	Ravagnani & Caballero (2007) ^b	Modelo proposto <i>a, 1</i>	Modelo proposto <i>b, 1</i>	Modelo proposto <i>a, 2</i>	Modelo proposto <i>b, 2</i>
Conjunto 1							
<i>D_s</i> (m)	0,549	0,438	0,533	0,438	0,387	0,438	0,337
<i>Dotl</i> (m)	0,516	0,406	0,489	0,406	0,356	0,406	0,305
<i>N_t</i>	318	194	264	194	132	181	95
<i>l_s</i> (m)	0,192	0,105	0,122	0,438	0,383	0,213	0,163
<i>N_{tp}</i>	6	4	2	4	2	4	1
<i>dex</i> (mm)	19,10	19,05	19,05	19,05	19,05	19,05	19,05
<i>din</i> (mm)	15,40	17,00	17,00	17,00	17,00	17,00	17,00
<i>L</i> (m)	1,286	2,438	2,438	2,438	3,658	2,438	4,877
<i>v^s</i> (m/s)	-	0,935	1,162	0,827	0,517	1,355	1,400
<i>Arr</i>	quad.	triang.	quad.	triang.	quad.	triang.	quad.
<i>pt</i> (mm)	25,40	25,40	25,40	23,79	25,40	25,40	25,40
Corrente quente	casco	tubo	casco	tubo	casco	tubo	casco
<i>Re^s</i>	-	-	-	13260	60343	38134	100000
<i>N_b</i>	-	-	-	5	9	10	29
<i>fi^s</i>	-	-	-	0,108	0,109	0,108	0,109
<i>L_c</i>	-	-	-	0,110	0,097	0,110	0,084
<i>Pr^s</i>	-	-	-	6,967	5,612	6,967	5,612
<i>h^s</i> (W/m ² °C)	1364,5	3831,38	1308,36	5162,56	2095,99	7782,9	2969,83
ΔP^s (kPa)	3,60	7,00	7,00	10,00	10,00	59,987	60,00
<i>v^t</i> (m/s)	-	1,827	1,108	1,827	2,215	1,958	1,539
<i>Re^t</i>	-	-	-	102452	36700	109810	25497
<i>Pr^t</i>	-	-	-	5,612	6,967	5,612	6,967

Nu^t	-	-	-	489,2	231,3	517,1	172,8
h^t (W/m ² °C)	8649,6	2759,84	4087,06	2824,77	7283,92	2985,94	5442,78
ΔP^t (kPa)	42,00	26,92	7,706	33,00	43,04	37,83	13,31
Conjunto 5							
Q (kW)	1320	1320	1320	1320	1320	1320	1320
$MLDT$	88,60	88,56	88,56	60,78	60,78	60,78	60,78
Ud (W/m ² °C)	776,00	779,07	572,51	778,96	763,01	834,90	795,19
Uc (W/m ² °C)	1000,7	1017,88	7122,42	1054,49	1017,28	1161,20	1116,16
Ft	0,9	0,9	0,9	0,985	0,985	0,985	0,985
rd (m ² °C/W)	4,1e-3	3,01e-4	3,43e-4	3,35e-4	3,28e-4	3,37e-4	3,62e-4
A (m ²)	28,40	28,31	38,52	28,31	28,89	26,41	27,73

^a sem especificação da localização do fluido quente no TCCT

^b fixando-se o fluido quente no lado casco

¹ pressão no lado casco = 10 kPa e pressão no lado tubo = 45 kPa

² pressão em ambos os lados casco e tubo = 60 kPa

Exemplo 2.2. O segundo caso estudado foi extraído de Mizutani et al. (2003). Na Tabela 2.2 são apresentados os dados de custo, temperaturas de entrada e saída, vazões mássicas e propriedades físicas das correntes quente e fria para este exemplo. Em adição, os valores de 50 W/mK para condutividade térmica da parede de tubos, e 2,5 e 8 mm para vazamentos entre chicanas e tubos e entre chicanas e casco, respectivamente, também são fornecidos para o projeto. Neste caso, os limites de queda de pressão para ambos os lados casco e tubo devem ser fixados em 68,95 kPa como sugerido por Kern (1950), uma vez que ambos os fluidos estão em fase líquida. Um fator de incrustação de 1,5e-4 m²KW⁻¹ é considerado para cada lado do trocador de calor.

Como comentado anteriormente, o objetivo final do modelo pode ser a obtenção de uma área de troca de calor mínima ou, então, um custo total mínimo. Segundo Hall et al. (1990), alguns parâmetros rigorosos (geralmente constantes) podem ser agregados na equação de custo, considerando materiais mistos de construção, taxas de pressão e diferentes

tipos de trocadores. Neste exemplo, a função objetivo composta pela soma do custo relativo à área de troca térmica do equipamento, com as despesas com bombeamento de fluidos (C_{pump}) é considerada de acordo com as seguintes equações:

$$C_{pump} = c_c \left[(\Delta P^t \cdot m^t / \rho^t) + (\Delta P^s \cdot m^s / \rho^s) \right] \quad (2.72)$$

A função objetivo resultante a ser minimizada é o custo anual total do TCCT, dada pela equação:

$$C_{total} = a_c (A)^{b_c} + C_{pump} \quad (2.73)$$

No qual $a_c = 123$, $b_c = 0,59$ e $c_c = 1,31$.

A Tabela 2.4 apresenta a comparação entre os resultados obtidos por Mizutani et al. (2003), Ravagnani & Caballero (2007), e através do modelo proposto neste trabalho. Dois estudos de casos foram realizados neste exemplo. Inicialmente, o TCCT foi otimizado sem a especificação do lado para o fluido quente, enquanto que no segundo caso a localização para este fluido foi fixada no lado casco. Em ambos os casos, o custo anual total obtido é menor do que os valores reportados na literatura.

Mizutani et al. (2003) obteve um valor de 5250 US\$/ano para o custo total anual do TCCT sem considerar a fixação da localização dos fluidos no trocador de calor. Sob estas mesmas condições, Ravagnani & Caballero (2007) reportam o valor de 5020 US\$/ano, enquanto que com o modelo proposto foi possível obter o custo anual total de 4820 US\$/ano. Este valor representa um redução de custos de 8% em comparação ao trabalho de Mizutani et al. (2003), e 4% em relação ao valor obtido por Ravagnani & Caballero (2007).

Tabela 2.4

Configuração ótima de TCCT obtida para o Exemplo 2.2.

	Mizutani et al. (2003)	Ravagnani & Caballero (2007) ^a	Ravagnani & Caballero (2007) ^b	Modelo proposto ^a	Modelo proposto ^b
Conjunto 1					
D_s (m)	0,687	1,067	0,838	0,940	0,787
$Dotl$ (m)	0,672	1,022	0,796	0,895	0,746
Nt	832	680	713	544	616
l_s (m)	0,542	0,610	0,353	0,737	0,376
Ntp	2	8	2	6	2
d_{ex} (mm)	15,90	25,04	19,05	25,04	19,05
d_{in} (mm)	12,60	23,00	16,00	22,10	17,00
L (m)	4,88	4,88	6,71	6,096	6,706
v^s (m/s)	-	0,500	0,500	0,500	0,500
Arr	quad.	quad.	quad.	quad.	quad.
fluido quente	casco	Tubo	casco	tubo	casco
Re^s	-	-	-	8308,4	21013,8
Conjunto 2					
Nb	8	7	18	7	17
ft^s	-	-	-	0,108	0,108
Lc	-	-	-	0,235	0,197
Pr^s	-	-	-	5,695	5,082
h^s (W/m ² °C)	1829	3240	1516	2921	1880
ΔP^s (kPa)	7,494	4,431	6,445	4,486	10,609
Conjunto 3					
v^t (m/s)	-	1,058	1,003	1,027	1,039
Re^t	-	-	-	50997	21442
Conjunto 4					
Pr^t	-	-	-	5,082	5,695
Nu^t	-	-	-	270,9	140,7
h^t (W/m ² °C)	6480	1986	4186	2026	4356,7
ΔP^t (kPa)	22,676	23,312	13,404	22,829	15,921

Conjunto 5						
Q (kW)		4339	4339	4339	4339,4	4339,4
A (m ²)		202,0	264,6	286,6	264,62	247,22
$MLDT$		-	-	-	31,27	31,27
Ud (W/m ² °C)		-	655,298	606,019	637,38	682,23
Uc (W/m ² °C)		860	826,687	758,664	800,26	874,41
Ft		-	-	-	0,823	0,823
<i>Custo</i>	<i>área</i>					
(US\$/ano)		2826	3495	3663	3305	3176
<i>Custo bombeamento</i>						
(US\$/ano)		2424	1533	1528	1515	1959
<i>Custo total anual</i>						
(US\$/ano)		5250	5028	5191	4820	5134

^a sem especificação da localização do fluido quente no TCCT

^b fixando-se o fluido quente no lado casco

Os parâmetros geométricos do TCCT são determinados no primeiro conjunto de equações de projeto. Neste exemplo, um resultado ligeiramente maior do que o valor obtido em Ravagnani & Caballero (2007) foi determinado para o diâmetro interno do tubo (quando a localização fluido quente é fixada no lado casco), enquanto que o mesmo valor para o diâmetro externo do tubo (25,04 mm) foi obtido para os dois modelos. Além disso, os valores obtidos para o diâmetro do casco (D_s), diâmetro de feixe de tubos ($Dotl$) e número de tubos (Nt), são inferiores aos reportados em Ravagnani & Caballero (2007). Desse modo, um comprimento maior de tubo é exigido para satisfazer o balanço de energia. Todavia, deve-se notar que tubos mais longos favorecem a troca de calor, embora eles aumentem a queda de pressão. Além disso, como demonstrado por Kern (1950), é mais econômico construir trocadores de calor com diâmetro de casco inferior. Por outro lado, quedas de pressão mais elevadas geram despesas de bombeamento superiores, exigindo um equilíbrio de custo eficaz para apoiar o projeto do equipamento. Este equilíbrio foi alcançado durante otimização dos conjuntos subsequentes, através da minimização da queda de pressão em ambos os lados casco e tubo.

Usando o modelo de PNLMI proposto, o valor da função objetivo para o último conjunto de equações é menor do que o obtido em Ravagnani & Caballero (2007), mesmo no caso em que o fluido quente é fixado no lado casco. A análise de sensibilidade do custo anual total revela dois aspectos importantes que devem ser considerados: o custo da área de troca térmica e o custo de bombeamento de fluidos. No caso estudado, o modelo proposto apresenta valores iguais ou inferiores para as áreas de troca térmica—264,6 e 247,2 m² para o modelo contra 264,6 e 286,6 m² em Ravagnani & Caballero (2007)—em função dos valores dos parâmetros geométricos obtidos anteriormente. Em decorrência do custo de bombeamento inferior, o custo total obtido é inferior aos valores reportados por Mizutani et al. (2003) e por Ravagnani & Caballero (2007) (4820 US\$/ano e 5134 US\$/ano contra 5028 US\$/ano e 5191 US\$/ano, respectivamente).

Exemplo 2.3. O terceiro exemplo foi extraído de Serna & Jiménez (2004). A Tabela 2.2 apresenta os dados das temperaturas de entrada e de saída, vazões mássicas, propriedades físicas e fatores de incrustação dos fluidos quente e frio. Supõe-se que a condutividade térmica do tubo é de 45 Wm/K. Neste caso, a pressão no lado casco é mantida a 83,69 kPa e 76,74 kPa para o lado tubo. Novamente, um único casco é o suficiente para satisfazer o balanço de calor, uma vez que o fator de correção para a MLDT é 0,917, i.e., maior do que 0,75 conforme sugerido na literatura (Kern, 1950).

Serna & Jiménez (2004) apresentaram um modelo de otimização eficiente e robusto para o projeto de TCCTs baseado no método de Bell-Delaware. O algoritmo faz pleno uso da pressão limite máxima, tanto para o lado casco quanto para o lado tubo, a fim de obter um trocador de calor submetido à queda de pressão extrema. Neste caso, como os dados de custo não estão disponíveis, os autores consideram como função objetivo a minimização da área de troca de calor do equipamento.

A Tabela 2.5 mostra três configurações de TCCT ótimos obtidos para este exemplo. A primeira coluna apresenta os resultados obtidos por Serna & Jiménez (2004). A segunda coluna mostra a configuração obtida por Ravagnani & Caballero (2007), utilizando-se um modelo de PNLMI com base no método de Bell-Delaware e seguindo-se os padrões TEMA. A última coluna mostra a configuração do TCCT obtido usando o modelo de otimização sequencial proposto neste trabalho. As áreas de troca de calor obtidos são 163,97 m², 148,56

m² e 139,12 m², respectivamente. Portanto, utilizado-se o modelo proposto baseado em uma abordagem sequencial de otimização de objetivos parciais, foi possível reduzir a área de troca térmica do equipamento em 15% em comparação com o valor obtido por Serna & Jiménez (2004), e em 6% em relação ao valor reportado em Ravagnani & Caballero (2007). Deve-se destacar que Serna & Jiménez (2004) não fizeram uso das normas TEMA, assim a configuração final do TCCT obtido contém valores para as características geométricas, como comprimento de tubos e diâmetros de casco e tubo fora das especificações padrão.

Conforme mencionado anteriormente, o modelo de PNLMI proposto segue estritamente os padrões TEMA, possibilitando-se obter detalhadamente as configurações geométricas e operacionais de um TCCT com uma área de troca térmica ou custo anual total mínimo. Os resultados melhores apresentados com esta abordagem sequencial provam que, provavelmente, os modelos anteriores apresentam soluções ótimas presas em mínimos locais, comprovando a eficiência da abordagem de otimização proposta. Adicionalmente, mais quatro exemplos foram estudados para comparação com outros métodos de otimização, e os resultados obtidos também foram melhores que os reportados originalmente (os casos adicionais são apresentados no Apêndice A). Todos os exemplos foram resolvidos com o *software* GAMS (versão 23.8.2), utilizando o *solver* SBB para os conjuntos de equações de PNLMI e o *solver* CONOPT3 para os problemas de PNL. Em todos os casos, o mesmo processador Intel Core 2 Duo 2,00 GHz funcionando em Windows 7 Ultimate foi utilizado, apresentando tempos de processamento inferiores a 20 s.

Deve-se notar que, devido à natureza altamente complexa do problema estudado, estes *solvers* determinísticos podem garantir apenas a obtenção de ótimos locais. No entanto, o tamanho reduzido dos subproblemas tende a evitar soluções prematuramente presas a mínimos locais, ou pelo menos, minimizar a incidência sobre a solução final. Destaca-se que em qualquer problema não convexo de otimização, os algoritmos baseados em gradiente (i.e., otimização determinística) só podem garantir ótimos locais. Embora os avanços em algoritmos determinísticos para a otimização global tenham sido realmente impressionantes nos últimos anos, em geral, eles ainda são restritos a problemas de pequeno ou médio porte. O desempenho destes algoritmos é altamente dependente da estrutura do modelo matemático, tipo de não-convexidades, etc. Em modelos de PNLMI a dificuldade aumenta porque, em adição à dificuldade inerente aos problemas contínuos de otimização global contínua, existe ainda a natureza discreta do problema.

O problema tratado neste estudo é um problema de PNLMI de tamanho médio/grande, com um elevado número de equações não convexas e não-lineares. Portanto, não pode ser assegurada uma solução ótima global. Contudo, a experiência mostra que soluções presas a mínimos locais não são incomuns em problemas de projeto baseados em Programação Matemática. É crucial observar que, para definir um bom ponto de partida para a resolução do problema, é necessário dar toda a flexibilidade possível nos limites das variáveis antes de resolver o modelo, i.e., é importante atribuir os limites inferiores e superiores para todas as variáveis críticas, tal como o número de Reynolds, por exemplo.

Tabela 2.5

Configuração ótima de TCCT obtida para o Exemplo 2.3.

	Serna & Jiménez (2004)	Ravagnani & Caballero (2007)	Modelo proposto
Conjunto 1			
D_s (m)	0,770	0,737	0,686
$Dotl$ (m)	0,715	0,659	0,645
Nt	528	509	286
l_s (m)	0,406	0,305	0,595
Ntp	6	6	8
dex (mm)	19,05	19,05	25,04
din (mm)	14,83	17,00	22,90
L (m)	5,28	4,88	6,096
v^s (m/s)	-	-	1,123
Arr	Triangular	triangular	triangular
Fluido quente	Tubo	tubo	tubo
Re^s	-	-	100000
Conjunto 2			
Nb	18	15	9
$f\ddot{t}^s$	-	-	0,109
Lc	-	-	0,171
Pr^s	-	-	5,034

h^s (W/m ² °C)	-	-	2848
ΔP^s (kPa)	83,630	43,690	43,690
v^t (m/s)	-	-	1,647
Re^t	-	-	248191
Pr^t	-	-	2,749
Nu^t	-	-	782,7
h^t (W/m ² °C)			3266
ΔP^t (kPa)	78,805	76,738	75,497
Q (kW)	4909,1	4909,1	4909,1
$LMTD$	-	-	84,83
Ud (W/m ² °C)	385,1	425,1	453,8
Uc (W/m ² °C)	-	-	685,79
Ft	-	0,9165	0,917
rd (m ² °C/W)	-	-	7,45e-4
A (m ²)	163,97	148,56	139,12

2.6 Conclusões

Um novo modelo de otimização é proposto para o projeto detalhado de trocadores de calor casco e tubo (TCCTs), através do desenvolvimento de uma abordagem sequencial de metas objetivas parciais. O modelo é formulado em programação disjuntiva generalizada (PDG) e reformulado como um problema de programação não-linear mista inteira (PNLMI), para obter as configurações geométricas e operacionais do TCCT ótimo para um determinado conjunto de temperaturas, vazões mássicas e propriedades físicas dos fluidos. O método de projeto de Bell-Delaware é usado para o cálculo dos coeficientes de transferência de calor e queda de pressão para o lado casco. Além disso, o modelo segue rigorosamente os padrões TEMA (*Tubular Exchanger Manufacturers Association*). Por conseguinte, todas as características geométricas do TCCT—tais como: diâmetro do casco, diâmetro do feixe de

tubos, arranjo de tubos, comprimento do tubo, tubo *pitch*, diâmetros internos e externos do tubo, número de chicanas, espaçamento de chicanas, número de passagens nos tubos, e número de tubos—estão de acordo com a padronização existente (TEMA, 2007), evitando o ajuste dos parâmetros do trocador de calor após o projeto do equipamento. Uma tabela de contagem de tubos foi proposta e o uso de uma formulação de PDG torna a tarefa mais simples, evitando não-linearidades no modelo.

A principal contribuição deste trabalho é a proposição de uma abordagem sequencial de otimização para evitar soluções prematuramente presas a mínimos locais. Para este efeito, as equações de projeto foram divididas em conjuntos com a proposição de diferentes funções objetivo para a otimização de cada subconjunto de equações. O problema foi resolvido com o *software* GAMS, utilizando o *solver* SBB para os problemas de PNLMI e o *solver* CONOPT3 para os problemas de PNL. Durante a resolução do modelo, o grande problema encontrado reside na inicialização dos limites inferiores e superiores das variáveis. Três exemplos extraídos da literatura foram estudados para avaliar a aplicabilidade do modelo proposto quanto à otimização do projeto de TCCTs. Em todos os casos, os resultados obtidos com este modelo são melhores do que os reportados na literatura, considerando-se as duas situações relativas à fixação ou não da localização do fluido quente no trocador de calor. Esta melhoria nos resultados é alcançada devido ao uso de múltiplas funções objetivo baseadas em regras heurísticas.

Lista de Símbolos

A	área de troca térmica
a_c	constante de custo
arr	arranjo de tubos
b_c	constante de custo
c_c	constante de custo de bombeamento
C_p	capacidade calorífica
d_{ex}	diâmetro externo do tubo
d_{in}	diâmetro interno do tubo
D_{otl}	diâmetro do feixe de tubos
D_s	diâmetro externo do casco
F_c	fração do total de tubos em fluxo cruzado
fl	fator de Fanning
F_{sbp}	fração da área de fluxo cruzado disponível para o <i>bypass</i>
F_t	fator de correção para MLDT
h_{0i}	coeficiente de transferência de calor do lado casco para um banco de tubos ideal
h^s	coeficiente de filme para o lado casco
h^t	coeficiente de filme para o lado tubo
J_b	fator de correção para efeitos de <i>bypass</i> no feixe de tubos
J_c	fator de correção para efeitos de configuração do feixe de tubos
j_i	fator de Colburn
J_l	fator de correção para efeitos de vazamento em chicanas
L	comprimento de todos
lc	corte de chicanas
$MLDT$	média logarítmica da diferença de temperaturas
ls	espaço entre chicanas
m	vazão mássica
N_b	número de chicanas

N_c	número de fileiras de tubos atravessados em uma seção transversal de escoamento
N_{cw}	número de colunas de tubos efetivamente cruzados em cada janela
N_s	número de cascos
N_t	número de tubos
N_{tp}	número de passagens do fluido nos tubos
Nu	número de Nusselt
C_{area}	custo de área
C_{pump}	custo de bombeamento
C_{total}	custo total
Pr	número de Prandtl
pn	tubo <i>pitch</i> normal ao escoamento
pp	tubo <i>pitch</i> paralelo ao escoamento
pt	tubo <i>pitch</i>
Q	quantidade de calor
R_b	fator de correção de queda de pressão para efeitos de <i>bypass</i> no feixe de tubos
Re	número de Reynolds
rd	fator de incrustação
Rl	fator de correção da queda de pressão para efeitos de vazamentos em chicanas
S_m	área de referência normal para o fluxo do lado casco
S_{sb}	área de vazamento entre casco e chicanas
S_{tb}	área de vazamento entre tubos e chicanas
S_w	área de fluxo através da janela do feixe de tubos
T	temperatura
U_c	coeficiente global de transferência de calor limpo
U_d	coeficiente global de transferência de calor sujo
v	velocidade do fluido
y^f	variável binária que define a alocação do fluido
y^L	variável binária que define o comprimento dos tubos
y^{arr}	variável binária que define o arranjo de tubos
y^{nt}	variável binária que define as variáveis na Tabela 2.1
ε	fator de rugosidade das paredes

ΔP	queda de pressão
ΔP_{bi}	queda de pressão para o fluxo cruzado ideal
ΔP_{wi}	queda de pressão para a janela
k	condutividade térmica
μ	viscosidade
ρ	densidade

Subscritos:

c	fluido frio
h	fluido quente
s	lado casco
t	lado tubo
in	entrada
out	saída

Referências Bibliográficas

- Allen, B., Savard-Goguen, M., Gosselin, L., 2009. Optimizing heat exchanger networks with genetic algorithms for designing each heat exchanger including condensers. *Appl. Therm. Eng.* 29, 3437–3444.
- Azad, A.V., Amidpour, M., 2011. Economic optimization of shell and tube heat exchanger based on constructal theory. *Energy* 36, 1087–1096.
- Blackwell, W.W., Haydu, L., 1981. Calculating the correct LMDT in shell-and-tube heat exchangers, *Chem. Eng.* 88, 101–106.
- Caputo, A.C., Pelagagge, P.M., Salini, P., 2008. Heat exchanger design based on economic optimization. *Appl. Therm. Eng.* 28, 1151–1159.
- Chen, J.J., 1987. Letter to the editor: Comments on improvement on a replacement for the logarithmic mean, *Chem. Eng. Sci.* 42 (1987) 2488.
- Cheng, X., Liang, X., 2012a. Computation of effectiveness of two-stream heat exchanger networks based on concepts of entropy generation, entransy dissipation and entransy-dissipation-based thermal resistance. *Energy Convers. Manag.* 58, 163–170.
- Cheng, X., Liang, X., 2012b. Optimization principles for two-stream heat exchangers and two-stream heat exchanger networks. *Energy* 46, 421–429.
- David, B., Ramousse, J., Luo, L., 2012. Optimization of thermoelectric heat pumps by operating condition management and heat exchanger design. *Energy Convers. Manag.* 60, 125–133.
- Kern, D.Q., 1950. *Process Heat Transfer*, McGraw-Hill, New York.
- Fesanghary, M., Damangir, E., Soleimani, I., 2009. Design optimization of shell and tube heat exchangers using global sensitivity analysis and harmony search algorithm. *Appl. Therm. Eng.* 29, 1026–1031.
- Guo, J., Cheng, L., Xu, M., 2009. Optimization design of shell-and-tube heat exchanger by entropy generation minimization and genetic algorithm. *Appl. Therm. Eng.* 29, 2954–2960.
- Hall, S.G., Ahmad, S., Smith, R., 1990. Capital cost targets for heat exchanger networks comprising mixed materials of construction, pressure ratings and exchanger types. *Comput. Chem. Eng.* 14, 319–335.

- Taborek, J., 1983. Shell-and-Tube Heat Exchangers. Newport: Hemisphere publishing.
- Kaluri, R.S., Basak, T., 2011. Entropy generation due to natural convection in discretely heated porous square cavities. *Energy* 36, 5065–5080.
- Lee, S., Grossmann, I.E., 2000. New algorithms for non-linear generalized disjunctive programming. *Comput. Chem. Eng.* 24, 2125–2141.
- Li, M., Lai, A.C.K., 2013. Thermodynamic optimization of ground heat exchangers with single U-tube by entropy generation minimization method. *Energy Convers. Manag.* 65, 133–139.
- Li, H., Kottke, V., 1998. Effect of baffle spacing on pressure drop and local heat transfer in shell-and-tube heat exchangers for staggered tube arrangement. *Int. J. Heat Mass Transf.* 41, 1303–1311.
- Mizutani, F.T., Pessoa, F.L.P., Queiroz, E.M., Hauan, S., Grossmann, I.E., 2003. Mathematical programming model for heat-exchanger network synthesis including detailed heat-exchanger designs. 1. Shell-and-tube heat-exchanger design. *Ind. Eng. Chem. Res.* 42, 4009–4018.
- Nemhauser, G.L., Wolsey, L.A., 1988. *Integer and Combinatorial Optimization*. Wiley.
- Patel, V.K., Rao, R.V., 2010. Design optimization of shell-and-tube heat exchanger using particle swarm optimization technique. *Appl. Therm. Eng.* 30, 1417–1425.
- Pogiatzis, T. A., Wilson, D.I., Vassiliadis, V.S., 2012. Scheduling the cleaning actions for a fouled heat exchanger subject to ageing: MINLP formulation. *Comput. Chem. Eng.* 39, 179–185.
- Ponce-Ortega, J.M., Serna-González, M., Jiménez-Gutiérrez, A., 2009. Use of genetic algorithms for the optimal design of shell-and-tube heat exchangers. *Appl. Therm. Eng.* 29, 203–209.
- Ponce-Ortega, J.M., Serna-González, M., Salcedo-Estrada, L.I., Jiménez-Gutiérrez, A., 2006. Minimum-investment design of multiple shell and tube heat exchangers using a MINLP formulation. *Chem. Eng. Res. Des.* 84, 905–910.
- Rajasekaran, S., Kannadasan, T., 2010. Optimization of shell and tube heat exchangers using modified genetic algorithm. *Int. J. Control Autom.* 3, 1–10.
- Ravagnani, M.A.S.S., Caballero, J.A., 2007. A MINLP model for the rigorous design of shell and tube heat exchangers using the TEMA standards. *Chem. Eng. Res. Des.* 85, 1–13.
- Serna, M., Jiménez, M.A., 2004. An efficient method for the design of shell and tube heat exchangers, *Heat Transfer Eng.* 25, 5–16.

- Serna, M., Jiménez, M.A., 2005. A compact formulation of the Bell–Delaware method for heat exchanger design and optimization, *Chem. Eng. Res. Des.* 83, 539–550.
- Smith, R., 2005. *Chemical Process Design and Integration*, second ed, Wiley.
- Soltan, B.K., Salffar-Avval, M., Damangir, E., 2004. Minimizing capital and operating costs of shell and tube condensers using optimum baffle spacing. *Appl. Them. Eng.* 24, 2801–2810.
- TEMA, 2007. *Standards of the Tubular Exchangers Manufactures Association*, ninth ed, Tubular Exchanger Manufacturers Association, New York.
- Shah, R.K., Sekulic, D.P., 2003. *Fundamentals of Heat Exchanger Design*, New York, Wiley.
- Shenoy, U.V., 1995. *Heat Exchanger Network Synthesis: Process Optimization by Energy and Resource Analysis*, Houston: Gulf Publishing Company.
- Vecchiotti, A., Lee, S., Grossmann, I.E., 2003. Modeling of discrete/continuous optimization problems: characterization and formulation of disjunctions and their relaxations. *Comput. Chem. Eng.* 27, 433–448.
- Wang, R.Z., Xia, Z.Z., Wang, L.W., Lu, Z.S., Li, S.L., Li, T.X., Wu, J.Y., He, S., 2011. Heat transfer design in adsorption refrigeration systems for efficient use of low-grade thermal energy. *Energy* 36, 5425–5439.
- Yeomans, H., Grossmann, I.E., 1999. Nonlinear disjunctive programming models for the synthesis of heat integrated distillation sequences. *Comput. Chem. Eng.* 23, 1135–1151.

CAPÍTULO 3

Síntese Simultânea de Redes de Trocadores de Calor:

Modelo de Programação Matemática para a Ótima Integração de Calor com Recuperação de Pressão de Correntes de Processo

A ótima integração entre calor e trabalho pode reduzir de forma significativa a demanda de energia do sistema e, conseqüentemente, o custo do processo. Este capítulo apresenta um novo modelo matemático para a síntese simultânea de redes de trocadores de calor (RTCs), em que os níveis de pressão das correntes de processo podem ser ajustados para melhorar a integração de calor. A superestrutura proposta para o projeto de RTCs com recuperação de pressão é desenvolvida através de programação disjuntiva generalizada (PDG), e reformulada em programação não-linear mista inteira (PNLMI). A recuperação de pressão de correntes de processo ocorre simultaneamente à síntese da RTC, de modo que as condições de processo (temperatura e pressão das correntes) são variáveis desconhecidas que devem ser otimizadas. Além disso, a abordagem de otimização permite o acoplamento de expansores e compressores, e a seleção entre turbinas e válvulas para minimizar o custo total anualizado. Neste caso, a função objetivo é composta por despesas operacionais associadas ao aquecimento e resfriamento de fluidos e eletricidade, e custo de capital de investimento nas várias unidades que compõem a rede. O modelo é testado quanto à sua acurácia em três estudos de casos, incluindo uma aplicação industrial real relacionada à produção de gás natural liquefeito (GNL). Os resultados obtidos indicam que a ótima integração de energia diminui consideravelmente a quantidade de utilidades quentes e frias necessárias no processo, reduzindo o custo total da rede.

3.1 Introdução

A aplicação de estratégias inovadoras para a conservação e eficiência de energia é fundamental para a redução do consumo energético em plantas de processamento. O aumento da demanda mundial de energia, aliado ao seu alto custo atual, devido ao rápido esgotamento das reservas de petróleo bruto, e rigorosas normas ambientais que regulam as emissões de CO₂, destinadas a atenuar o aquecimento global, estão entre as principais forças motrizes por trás da necessidade de conservação e eficiência energética em processos industriais (Gharaie et al., 2013; Hasan et al., 2010; Razib et al., 2012; Wechsung et al., 2011). Este importante objetivo é muitas vezes alcançado por meio da adoção de tecnologias de processamento mais eficientes ou, otimizando o uso de energia.

Calor e trabalho são duas formas de energia frequentemente disponíveis em plantas industriais. A recuperação efetiva de calor é fundamental para resolver o problema da eficiência energética e, por conseguinte, diminuir o custo do processo (Furman & Sahinidis, 2002; Morar & Agachi, 2010). Em consequência, a análise e a otimização da integração térmica são imprescindíveis, uma vez que um menor consumo de energia está diretamente associado à melhoria da transferência de calor (Cheng & Liang, 2012; Wang et al., 2011). A síntese de redes de trocadores de calor (RTCs) é responsável pela integração térmica. Devido à sua importância no âmbito do custo total e sua interdependência com outros setores do processo, a síntese de RTCs têm sido amplamente estudada nas últimas décadas (Furman & Sahinidis, 2002; Gundersen & Naess, 1998; Jezowski, 1994).

O problema da síntese ótima de RTCs começou a atrair a atenção da comunidade científica durante a crise do petróleo na década de 1970 (Furman & Sahinidis, 2002; Vaskan et al., 2012). Hwa (1965), usando o método de programação separável e Kesler & Parker (1969), usando programação linear, estão entre os primeiros autores a apresentar soluções para o problema de projeto de RTC. Desde então, vários estudos têm sido propostos utilizando métodos diferentes para resolver o problema (Al-mutairi, 2010). A tendência recente focada no desenvolvimento de processos mais sustentáveis tem renovado o interesse na concepção destes sistemas (Vaskan et al., 2012).

Gundersen & Naess (1998) e Furman & Sahinidis (2002) publicaram revisões detalhadas sobre a síntese de RTCs. Em adição, importantes linhas de pesquisa foram propostas, incluindo a análise *pinch* e métodos de Programação Matemática. A análise *pinch*

é baseada em conceitos termodinâmicos e heurísticos (Linnhoff, 1994, 1993; Linnhoff et al., 1979; Linnhoff & Flower, 1978). Em Programação Matemática, a síntese de RTCs é tratada como um problema de otimização. De acordo com Grossmann et al. (2000), a utilização de métodos de Programação Matemática evoluiu gradualmente desde abordagens sequenciais, nas quais se busca uma solução passo-a-passo para o problema (Cerdeira & Westerberg, 1983; Colberg & Morari, 1990; Floudas et al., 1986; Gundersen & Grossmann, 1990; Papulias & Grossmann, 1983), até trabalhos envolvendo a otimização simultânea, em que todas as variáveis são otimizadas concomitantemente (Bjork & Westerlund, 2002; Yee & Grossmann, 1990; Zamorat & Grossmann, 1998).

Em Yee & Grossmann (1990) é proposto um modelo robusto de Programação Matemática para a síntese de RTCs. Dentre os métodos encontrados na literatura, o modelo de Yee & Grossmann (1990) é um dos métodos simultâneos baseados em superestruturas de maior aceitação. Embora a função objetivo usada pelos autores seja altamente não-linear e não-convexa, o modelo apresenta boas soluções. A abordagem simultânea aplicada à síntese de RTCs resulta em um problema NP-difícil (ou NP-hard, sigla em inglês para *Non-deterministic Polynomial-time hard*), i.e., um problema muito difícil de resolver de forma eficiente. No entanto, mesmo que a estratégia simultânea seja mais difícil de implementar e resolver, geralmente conduz à maiores benefícios econômicos (Kamath et al., 2012). O problema de programação não-linear mista inteira (PNLMI) convencional é inteiramente baseado em problemas de otimização com variáveis discretas e contínuas. Em contrapartida, as abordagens que usam programação disjuntiva generalizada (PDG) combinam equações lógicas e algébricas para representar decisões distintas (Lee & Grossmann, 2000; Ravagnani & Caballero, 2007; Turkay & Grossmann, 1996).

Apesar das inúmeras tentativas para otimizar a recuperação de calor através da síntese de RTCs, a literatura a respeito de otimização de processos usando a recuperação de pressão para melhorar a integração de calor é muito limitada. A manipulação de pressão de correntes é especialmente importante em refinarias de petróleo e processos criogênicos, como a produção de gás natural liquefeito (GNL). Em tais plantas, a compressão e expansão de correntes de processo que estão sujeitos a pressões elevadas, consomem grandes quantidades de energia. Por exemplo, no processo de liquefação de gás natural (GN) representado na Figura 3.1, o GN submetido a alta pressão é pré-aquecido com dióxido de carbono líquido (CO₂L) através de um trocador de calor e, em seguida, expandido a uma pressão mais baixa para a troca de calor com nitrogênio líquido inerte (NLI). Então, o GN passa através de uma

turbina, que reduz ainda mais a sua pressão, para atingir a pressão desejada para armazenagem. O NLI à alta pressão passa através de dois trocadores de calor para resfriar o gás natural. Assim, além de trocadores de calor, no processo são utilizados um compressor e duas turbinas para o resfriamento do GN, que também são responsáveis pela produção de trabalho (Aspelund & Gundersen, 2009a, 2009b, 2009c; Aspelund et al., 2009; Razib et al., 2012; Wechsung et al., 2011). É evidente que uma ótima integração entre calor e trabalho pode diminuir significativamente a demanda de energia, reduzindo o custo total do processo.

Em Wechsung et al. (2011) é apresentado um modelo de otimização para a síntese de RTCs, com correntes em condições subambiente sujeitas à compressão e expansão. A formulação proposta combina análise *pinch*, análise de exergia e Programação Matemática—um modelo de PNLMI não convexo—para a síntese de RTCs através da minimização da irreversibilidade total do sistema. Neste trabalho, os autores estudam uma aplicação industrial relacionada com a produção de GNL para demonstrar que a correta manipulação da pressão de correntes de processo pode reduzir, significativamente, a irreversibilidade total em RTCs. Contudo, este estudo não apresenta nenhuma análise de custos envolvidos no processo, além de não considerar arranjos distintos de equipamentos, tais como a possibilidade de acoplar turbinas a compressores bem como a troca de turbinas por válvulas para economia de energia.

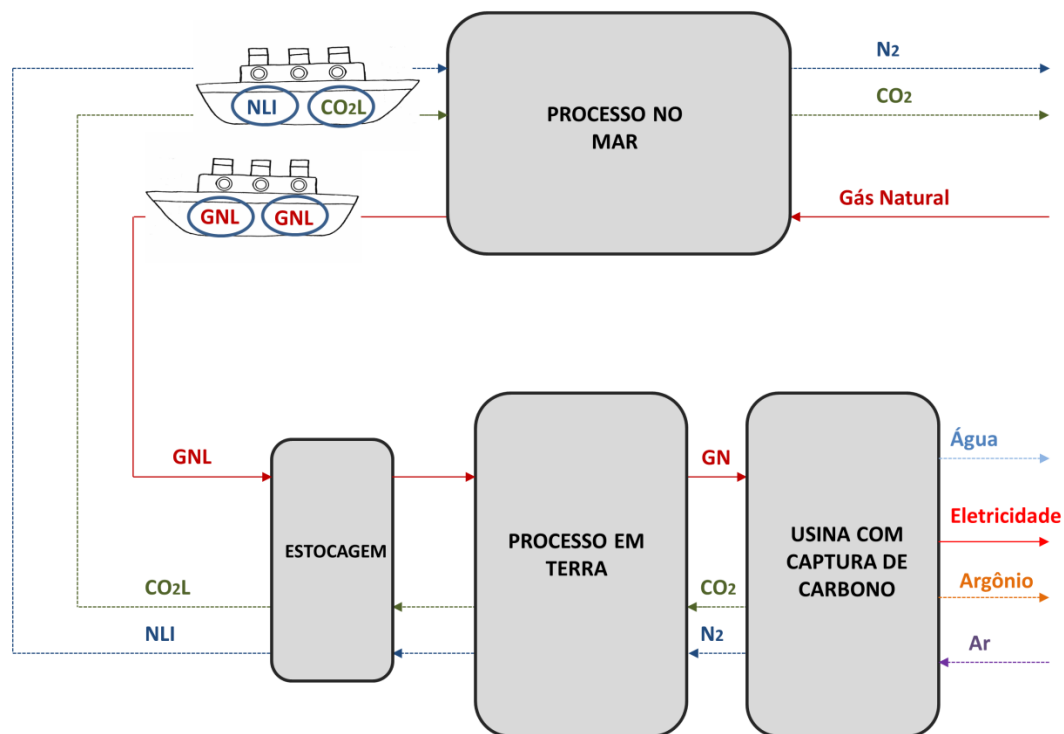


Figura 3.1. Cadeia energética para o transporte e utilização de gás natural liquefeito (GNL).

Fonte: Adaptado de Wechsung et al. (2011).

Este capítulo introduz um novo modelo matemático para a síntese simultânea de RTCs, em que os níveis de pressão das correntes de processo podem ser ajustados para melhorar a integração de calor. A formulação proposta envolve programação disjuntiva generalizada (PDG) e programação não-linear mista inteira (PNLMI). O modelo matemático é baseado na superestrutura de Yee & Grossmann (1990), permitindo divisões de correntes, e assumindo taxas de fluxo de capacidade calorífica³ constante e mistura isotérmica. A principal diferença entre o modelo proposto e a superestrutura de Yee & Grossmann (1990) reside na consideração da temperatura das correntes como uma variável desconhecida, além da inclusão de uma nova variável de otimização: a pressão das correntes de processo. Estes fatores convertem o modelo proposto em um problema consideravelmente maior e mais complexo que o modelo original de Yee & Grossmann (1990). Várias possibilidades de configuração de redes envolvendo compressores, turbinas e válvulas são estudados para obter um projeto ótimo de RTC, visando minimizar o custo total anualizado, composto pelo custo de capital de investimento em equipamentos e despesas operacionais. Três estudos de casos são realizados para verificar a aplicabilidade do modelo proposto. Nestes exemplos, a ótima integração entre o calor e trabalho é responsável pela diminuição da quantidade de utilidades necessárias na síntese da RTC. Em consequência, o custo total anualizado da rede é reduzido, devido ao decréscimo dos custos operacionais relacionados ao aquecimento e resfriamento das correntes de processo.

3.2 Definição do Problema

Este modelo utiliza um conjunto de correntes quentes e frias de processo com um estado de alimentação conhecido (temperatura, pressão e fase resultante), e um estado de destino em que algumas correntes gasosas têm pressões que diferem das condições de entrada. Em adição, para o projeto de RTCs são fornecidos energia para aquecimento e resfriamento, equipamentos para manipulação de pressão e troca de calor, com os seus respectivos custos. O principal objetivo do modelo é sintetizar uma RTC ótima, considerando a recuperação de pressão de correntes de forma que o custo total anualizado seja minimizado. Neste caso, a função objetivo é composta pelas despesas operacionais e custo de capital de investimento nas diversas unidades da rede.

³ Produto entre a capacidade calorífica e a vazão mássica de correntes de processo

Um modelo matemático para a síntese de RTCs baseado na bem-conhecida superestrutura de Yee & Grossmann (1990) é proposto para resolver o problema. A superestrutura desenvolvida é composta por várias etapas, nas quais pode ocorrer a troca de calor entre as correntes quentes e frias. A RTC é projetada para permitir a divisão de correntes, enquanto é assumido taxas de fluxo de capacidade de calor constante e mistura isotérmica. Além disso, aquecedores e resfriadores são colocados nas extremidades das correntes, para garantir que a temperatura final desejada seja atingida. Conforme recomendado por Yee & Grossmann (1990), o número de etapas na RTC deve ser igual ao número máximo de possíveis trocas entre as correntes quentes e frias. Devido à necessidade de expansão e compressão de algumas correntes de processo, equipamentos para manipulação de pressão—nomeadamente, compressores, turbinas e válvulas—também são utilizados na rede. Consequentemente, a pressão e a temperatura das correntes tornam-se variáveis desconhecidas na entrada e na saída da superestrutura da RTC.

Nesta abordagem, as correntes quentes e frias devem seguir uma rota específica para a manipulação de pressão, com um número máximo de possíveis expansões e compressões sendo n . Assim, se $n = 3$, uma corrente quente pode, potencialmente, ser resfriada, comprimida, resfriada, expandida, aquecida, comprimida e resfriada. Da mesma forma, uma corrente fria pode ser aquecida, expandida, aquecida, comprimida, resfriada, expandida, e aquecida (ver Figura 3.2). A seleção desta rota é baseada no trabalho de Wechsung et al. (2011) em que o princípio “*plus-minus*” (Linnhoff, 1984) foi utilizado para identificar a melhor direção para as alterações de pressão para reduzir a necessidade de energia do sistema. Esta definição é significativamente mais complexa do que o problema convencional de integração de calor na síntese de RTCs, como postulado por Yee & Grossmann (1990) e extensivamente estudado ao longo das últimas décadas. Principalmente, porque tanto a pressão quanto a temperatura das correntes devem ser tratadas como variáveis desconhecidas que requerem otimização.

As correntes que estão sujeitas à manipulação de pressão estão ligadas à RTC através de compressores e expansores. Assim, o estado de saída da corrente do equipamento de manipulação de pressão deve corresponder ao estado de entrada na superestrutura da RTC. Se a rota acima mencionada é considerada ($n = 3$), oito variáveis adicionais estão envolvidas no problema: três temperaturas intermediárias de entrada, três temperaturas intermediárias de saída e duas pressões intermediárias de saída. Além disso, a necessidade de um operador matemático para a manipulação de pressão das correntes aumenta consideravelmente a não-

linearidade e não-convexidade do modelo. Wechsung et al. (2011) observam que neste tipo de problema não existe uma clara distinção entre as correntes quentes e frias, e nem entre as correntes e as utilidades de processo. De fato, as correntes podem mudar de identidade e, desta forma, uma corrente fria pode comportar-se, temporariamente, como uma corrente quente, e vice-versa. Algumas correntes de processo também podem atuar como utilidades, servindo como fontes ou dissipadores de energia a uma temperatura fora do intervalo produzido pelas utilidades disponíveis. As propriedades dos fluidos, incluindo a fase, podem também ser modificadas através da manipulação da pressão. Além do grande número de variáveis e restrições do processo, uma formulação de PDG é necessária para auxiliar na seleção de equipamentos de expansão (i.e., válvulas ou turbinas), e considerar a possibilidade de acoplamento de um compressor a uma turbina, muitas vezes referida industrialmente como um “compansor”. Todos estes fatores, aliados à alta não-linearidade e não-convexidade das correlações de custo, conferem um grau ainda maior de complexidade ao modelo.

Como em Wechsung et al. (2011), neste trabalho a expansão e compressão das correntes são modeladas como processos isentrópicos. Por razões de simplificação, o modelo de gás ideal é usado para descrever o comportamento termodinâmico e as variações de pressão das correntes. Além disso, um fator de eficiência isentrópica é introduzido no modelo para ajustar inevitáveis perdas de eficiência de equipamentos inerentes a processos reais. Como mencionado anteriormente, quando a relação custo-benefício para o processo é satisfeita, a formulação proposta permite a troca de turbinas para válvulas. Neste caso, o processo de expansão é considerado isentálpico utilizando o apropriado coeficiente de Joule-Thompson.

3.3 Modelo de Programação Matemática

A formulação matemática do modelo é baseada na superestrutura para síntese de RTCs apresentado por Yee & Grossmann (1990). O modelo de PNLMI proposto pelos autores (Yee & Grossmann, 1990) permite a identificação da RTC ótima dentro da superestrutura que apresente um custo mínimo, através da determinação de quais trocadores de calor são efetivamente necessários, e a quantidade de calor e temperaturas de cada

corrente. Este é um dos modelos baseados em superestruturas disponíveis na literatura amplamente aceitos pela comunidade acadêmica (ver Apêndice B).

A superestrutura proposta neste trabalho é gerada de acordo com três idéias principais:

- I- *Representação em estágios de acordo com as temperaturas.* A superestrutura é constituída por N_s estágios. Em cada estágio, postula-se que cada corrente quente possa trocar calor com todas as correntes frias, e vice-versa (i.e., cada corrente fria pode trocar calor com todas as correntes quentes). No entanto, quando uma corrente passa por expansão ou compressão, a sua identidade pode mudar temporariamente. Desta forma, uma corrente quente após passar por expansão começa a comportar-se como uma corrente fria, ao passo que uma corrente fria após compressão passa a comporta-se como uma corrente quente (ver Figura 3.2). Neste caso, a troca de calor entre estas correntes de identidade temporariamente trocada deve ser proibida, uma vez que se trata, de fato, da mesma corrente. Além disso, a alocação de utilidades térmicas (aquecedores e resfriadores) entre os estágios de compressão e expansão também não deve ser permitido. No entanto, estas restrições de troca de calor podem ser facilmente removidas do modelo.
- II- *Suposição de mistura isotérmica de correntes.* Em cada estágio da superestrutura, as correntes quentes e frias são divididas em um número de subcorrentes igual ao número de possíveis trocas de calor, e a temperatura de saída depois de cada um dessas trocas deve ser a mesma. Assim, o balanço de energia no ponto de mistura pode ser eliminado.
- III- *As correntes quentes e frias devem seguir uma rota específica de manipulação de pressão.* Se esta rota de compressão e de expansão for corretamente escolhida—corrente quente: compressão, expansão e compressão; corrente fria: expansão, compressão e expansão—a manipulação da pressão pode ser usada para fornecer energia para as correntes através de aquecimento ou resfriamento, de modo a diminuir a necessidade de utilidades quentes ou frias, reduzindo-se assim o custo total do processo.

Os seguintes pressupostos são considerados para a formulação do problema:

- (i) Uma dada corrente de processo deve ser submetida a no máximo três mudanças de pressão ($n = 3$).
- (ii) Todas as turbinas e compressores são centrífugos.
- (iii) Todas as compressões e expansões, exceto expansões através das válvulas, são isentrópicas.
- (iv) Todas as expansões através das válvulas são isentálpicas (Joule-Thompson) com um coeficiente de Joule-Thompson constante.
- (v) As eficiências isentrópicas de todos os compressores e as turbinas são constantes conhecidas.
- (vi) Todas as correntes de processo têm capacidades caloríficas e coeficientes de transferência de calor constantes.
- (vii) Quedas de pressão e perdas de calor são negligenciados em todos os equipamentos térmicos.
- (viii) Todos os equipamentos da rede são construídos com aço carbono.

A superestrutura pode ser facilmente gerada utilizando o seguinte procedimento:

1. *Seleção do número de estágios, N_s .* Na superestrutura, o número de estágios é definido como sendo igual ao maior número entre as correntes quentes e frias:

$$N_s = \max \{N_H, N_C\}$$

Em que N_H e N_C são o número de correntes quentes e frias, respectivamente. O número de combinações possíveis é dado por $N_H \times N_C \times N_s$, o que significa que potencialmente uma corrente quente e uma corrente fria poderiam trocar calor em todas as etapas N_s . No entanto, a seleção de N_s pode ser arbitrária e com base na observação de que uma rede ótima geralmente não contém um grande número de equipamentos de troca de calor ou, em outras palavras, uma corrente geralmente não troca calor com muitas outras correntes. O modelo permite que este número possa ser facilmente alterado. Obviamente, um número maior de estágios aumenta o tamanho do problema, e a dificuldade em resolvê-lo. Um estudo

rigoroso sobre como escolher o número de estágios para reduzir o tamanho da superestrutura foi conduzido por Daichendt & Grossmann (1994).

2. *Definição de restrições de troca de calor.* Em cada estágio, as correntes são divididas em um número de subcorrentes igual ao número de possíveis trocas de calor. As subcorrentes de saída em um mesmo estágio devem estar na mesma temperatura—assumindo mistura isotérmica—e devem reunir-se no ponto de saída, que é considerado o ponto de entrada para o próximo estágio. A temperatura de saída de cada corrente em cada estágio é uma variável desconhecida que requer otimização. De acordo com a discussão anterior, as partes quentes e frias da mesma corrente, resultante dos estágios de compressão e expansão, não podem trocar calor entre si. Além disso, aquecedores e resfriadores não podem ser alocados nos extremos de tais correntes. As restrições, a seguir, escritas em função de variáveis binárias são necessárias para determinar a existência ou ausência de troca térmica (h, c) em cada estágio k , e os intercâmbios entre as correntes de processo e as utilidades.

$$\begin{aligned} Q_{h,c,k} &\leq y_{h,c,k} \cdot Q_{h,c,k}^{\max} \\ Q_{h,n} &\leq y_{h,n}^{\text{cooler}} \cdot Q_{h,n}^{\max} \\ Q_{m,c} &\leq y_{m,c}^{\text{heater}} \cdot Q_{m,c}^{\max} \end{aligned} \quad (3.1)$$

No qual $Q_{h,c,k}$ é a quantidade de calor trocada entre as correntes quentes e frias no estágio k da superestrutura, $Q_{h,n}$ representa a quantidade de calor trocada entre as correntes quentes e as utilidades frias, e $Q_{m,c}$ é a quantidade de calor trocada entre as correntes frias e as utilidades quentes. O termo $y_{h,c,k}$ é a variável binária que define a troca de calor entre uma corrente quente h e uma corrente fria c em um estágio k . De modo semelhante, $y_{h,n}^{\text{cooler}}$ e $y_{m,c}^{\text{heater}}$ são as variáveis binárias que definem a existência de um resfriador e um aquecedor, respectivamente, para as correntes quentes e frias (i.e., estas variáveis binárias definem a troca de calor entre as correntes de processo e as utilidades correspondentes).

As Eqs. (3.1) foram originalmente apresentadas no modelo de projeto de RTCs proposto por Yee & Grossmann (1990). Estas equações garantem que a variável binária assume o valor de $y = 1$, se existe a troca de calor (i.e., $Q > 0$). Para proibir uma dada troca de calor, a variável binária correspondente é fixada em zero, e, assim, a troca de calor será igual a zero, o que é equivalente a remover tal possibilidade da superestrutura.

3. *Manipulação de pressão de correntes.* Em cada corrente sujeita à manipulação de pressão, a possibilidade de utilização de expansores ou compressores é considerada de acordo com a discussão anterior sobre o melhor percurso para manipular a pressão de correntes para reduzir a utilização de utilidades térmicas. Neste caso, as temperaturas e pressões na saída da superestrutura da RTC são ligadas às temperaturas e pressões de entrada dos expansores e compressores. Portanto, as temperaturas e pressões das correntes devem ser tratadas como variáveis de otimização problema.

Os operadores para a manipulação de pressão, acoplamento de turbinas e compressores, seleção entre turbinas e válvulas, e função objetivo são apresentadas nas seções a seguir.

3.3.1 Operador para Manipulação de Pressão

Considerando-se uma corrente s com um conhecido estado s_{in} de alimentação e um estado de destino definido por s_{out} , em que (s_{in}, s_{out}) são os estados de entrada e de saída das correntes no respectivo equipamento de manipulação de pressão. Deve-se notar que o estado de entrada em um compressor/expansor deve corresponder ao estado de saída da corrente na superestrutura da RTC, e vice-versa. Portanto, o processo adiabático reversível de manipulação de pressão de um gás ideal pode ser formulado da seguinte forma (este operador de expansão e compressão é baseado em Wechsung et al. (2011)):

$$\begin{aligned}
 (\kappa - 1) \cdot (\ln p_{s,in} - \ln p_{s,out}) &= \kappa (\ln T_{s,in} - \ln \tilde{T}_{s,out}) \quad \forall (s_{in}, s_{out}) \in CO \cup EX \\
 \eta_v &= (\tilde{T}_{s,out} - T_{s,in}) / (T_{s,out} - T_{s,in}) \quad \forall (s_{in}, s_{out}) \in CO \\
 \eta_t &= (T_{s,in} - T_{s,out}) / (T_{s,in} - \tilde{T}_{s,out}) \quad \forall (s_{in}, s_{out}) \in EX \\
 WC_v &= F_s C_p (T_{s,out} - T_{s,in}) \quad \forall (s_{in}, s_{out}) \in CO \\
 WE_t &= F_s C_p (T_{s,in} - T_{s,out}) \quad \forall (s_{in}, s_{out}) \in EX
 \end{aligned} \tag{3.2}$$

Em que $\tilde{T}_{s,out}$ é a temperatura de saída da corrente para um processo reversível, κ é o expoente politrópico, η_v e η_t são as eficiências isentrópicas dos compressores e turbinas, respectivamente. Além disso, WC_v é o trabalho consumido pelos compressores e WE_t é o trabalho gerado pelas turbinas. Como sugerido por Couper et al. (2010), o trabalho de compressão deve ser limitado dentro do intervalo de $18 \leq WC_v(\text{kW}) \leq 950$. O trabalho de expansão produzido pelas turbinas é realizado entre $50 \leq WE_t(\text{kW}) \leq 1500$.

O estado descrito pelas Eqs. (3.2) está relacionado apenas com quantidades físicas positivas. Assim, todas as variáveis devem ser limitadas (i.e., através da atribuição de limites inferiores e superiores) para evitar que o logaritmo possa tornar-se indefinido. A formulação matemática pode ser facilmente modificada para o caso em que as propriedades termodinâmicas sejam descritas explicitamente pela equação de estado em termos de volume. Ambos os trabalhos de compressão e expansão são definidos como quantidades não negativas. Por conseguinte, o trabalho líquido produzido é igual à soma do trabalho de expansão menos a soma do trabalho de compressão. Nesta abordagem proposta, a queda de pressão em trocadores de calor não é considerada, apesar de que uma queda de pressão constante possa ser facilmente considerada no modelo.

3.3.2 Operador para o Acoplamento de Turbinas e Compressores

O acoplamento de turbinas e compressores é, normalmente, considerado com a finalidade de economizar energia elétrica. Neste caso, o trabalho gerado pelo expansor é utilizado para girar o eixo do compressor, fornecendo a energia requerida por este equipamento. Neste caso, o acoplamento do compressor e turbina é considerado sem a necessidade de um motor auxiliar extra, de modo que a turbina possa satisfazer as exigências de energia do compressor. Outra vantagem da utilização de um compressor acoplado ao rotor da turbina em um único eixo, é a redução do espaço necessário para a instalação dos equipamentos.

Considerando-se a variável binária y^{CoEx} , de forma que $y^{CoEx} = 1$ determina o acoplamento de um compressor a uma turbina. Neste caso, o trabalho de compressão deve ser

igual ao trabalho de expansão, e o compressor não requer eletricidade. Se $y^{CoEx} = 0$, o oposto ocorre. O acoplamento do expensor ao compressor pode ser obtido a partir da seguinte formulação matemática:

$$\begin{bmatrix} y_{v,t}^{CoEx} \\ WC_v = WE_t \\ C_{ele} = 0 \end{bmatrix}$$

Utilizando a formulação Big-M, a disjunção pode ser expressa como segue:

$$\begin{aligned} WC_v - WE_t &\leq M_1 (1 - y_{v,t}^{CoEx}) \\ WC_v - WE_t &\geq -M_1 (1 - y_{v,t}^{CoEx}) \\ C_{ele} &\leq M_2 (1 - y_{v,t}^{CoEx}) \\ C_{ele} &\geq CE \cdot WC_v - M_2 \cdot y_{v,t}^{CoEx} \end{aligned} \tag{3.3}$$

Em que M_1 e M_2 são parâmetros positivos suficientemente grandes para validar a formulação das Eqs. (3.3). Claramente, este parâmetro deve ser tão pequeno quanto for possível. Neste caso, o parâmetro M_1 é calculado como a diferença entre o limite superior do trabalho de expansão (1.500 kW) e o limite inferior do trabalho de compressão (18 kW). Da mesma forma, o parâmetro M_2 é calculado como a diferença entre os limites superior (10e2 kUS\$/ano) e inferior (10 kUS\$/ano) do custo de energia elétrica.

3.3.3 Operador para a Seleção de Válvulas ou Turbinas

Em alguns casos, uma válvula pode substituir uma turbina desde que se cumpram os requisitos de pressão (expansão) do sistema. Sempre que isto acontece, a utilização de uma válvula deve ser considerada, devido ao custo de capital da válvula ser insignificante em

comparação com ao custo de uma turbina. Logicamente, nenhum acoplamento pode ocorrer entre o compressor e a válvula, e não é gerada eletricidade no sistema. A seguinte disjunção pode ser utilizada para promover a seleção entre válvulas e turbinas.

$$\left[\begin{array}{c} y_w^{val} \\ T_{s,in} = (T_{s,out} + \mu_s (p_{s,in} - p_{s,out})) \\ WE_t = 0 \\ C_t = 0 \\ C_w = CPO_w \cdot FBM_w \end{array} \right] \preceq \left[\begin{array}{c} y_t^{ex} \\ T_{s,in} = \exp((\kappa - 1 / \kappa) \cdot (\ln p_{s,in} - \ln p_{s,out})) + \ln \tilde{T}_{s,out} \\ T_{s,in} = (T_{s,in} - \tilde{T}_{s,out}) \eta_t + T_{s,out} \\ WE_t = F_s C_p (T_{s,in} - T_{s,out}) \\ C_t = CPO_t \cdot FBM_t \\ C_w = 0 \end{array} \right]$$

Ressalta-se que w e t indicam a posição das válvulas e turbinas, respectivamente, no processo. Se $y_w^{val} = 1$, uma válvula é escolhida em detrimento da turbina. Neste caso, a expansão é considerada isentálpica—expansão de Joule-Thompson, com um coeficiente μ_s constante—e o trabalho de expansão e custo de capital para as turbinas são considerados iguais a zero. Se $y_t^{ex} = 1$, uma turbina é selecionada, a expansão é considerada isentrópica assumindo-se uma eficiência isentrópica constante para esta turbina, e os custos relacionados à sua construção podem ser estimados. Obviamente, turbinas e válvulas não podem coexistir, assim, $y_w^{val} = 1$ implica em $y_t^{ex} = 0$, e vice-versa. A formulação Big-M, a seguir, é usada para garantir esta decisão:

$$\begin{aligned} y_w^{val} + y_t^{ex} &= 1 \quad \forall w = t \\ T_{s,in} &\leq [T_{s,out} + \mu_s (p_{s,in} - p_{s,out})] + M_3 (1 - y_w^{val}) \\ T_{s,in} &\geq [T_{s,out} + \mu_s (p_{s,in} - p_{s,out})] - M_3 (1 - y_w^{val}) \\ T_{s,in} &\leq [\exp((\kappa - 1 / \kappa) \cdot (\ln p_{s,in} - \ln p_{s,out})) + \ln \tilde{T}_{s,out}] + M_3 (1 - y_t^{ex}) \\ T_{s,in} &\geq [\exp((\kappa - 1 / \kappa) \cdot (\ln p_{s,in} - \ln p_{s,out})) + \ln \tilde{T}_{s,out}] - M_3 (1 - y_t^{ex}) \\ T_{s,in} &\leq [(T_{s,in} - \tilde{T}_{s,out}) \eta_t + T_{s,out}] + M_3 (1 - y_t^{ex}) \\ T_{s,in} &\geq [(T_{s,in} - \tilde{T}_{s,out}) \eta_t + T_{s,out}] - M_3 (1 - y_t^{ex}) \end{aligned} \tag{3.4}$$

$$WE_t \leq M_4 (1 - y_w^{val})$$

$$WE_t \geq F_s C_p (T_{s,in} - T_{s,out}) - M_4 \cdot y_w^{val}$$

$$C_t \leq M_5 (1 - y_w^{val})$$

$$C_t \geq [CPO_t \cdot FBM_t] - M_5 \cdot y_w^{val}$$

$$C_w \leq M_6 (1 - y_t^{ex})$$

$$C_w \geq [CPO_w \cdot FBM_w] - M_6 \cdot y_t^{ex}$$

Novamente, os parâmetros M_1 e M_2 devem ser positivos e grandes o suficiente para garantir que as Eqs. (3.4) sejam válidas. Assim, os parâmetros M_3 a M_6 são calculadas como a diferença entre os limites superior e inferior da temperatura (especificada de acordo com os estudos de casos), do trabalho de expansão (50–1500 KW), do custo das turbinas (10–10e2 kUS\$/ano) e do custo de válvulas, respectivamente.

3.3.4 Função Objetivo

O custo total anualizado (C_{total}) é composto pelas despesas operacionais ($C_{operational}$) e custo de capital ($C_{capital}$). Os custos operacionais incluem as despesas inerentes à utilização de serviços públicos e serviços de energia elétrica. Neste modelo, o trabalho de expansão produzido por turbinas é creditado a partir das despesas operacionais relacionadas à eletricidade apenas no caso em que ocorre o acoplamento de turbinas e compressores. As despesas de capital envolvem os custos de construção de todos os equipamentos necessários para a RTC e os equipamentos de manipulação de pressão (i.e., os compressores, turbinas e válvulas). Assim, a função objetivo pode ser expressa pelas Eqs. (3.5).

$$C_{total} = C_{capital} + C_{operational}$$

$$C_{operational} = \sum_h \sum_n CC \cdot Q_{h,n} + \sum_m \sum_c CH \cdot Q_{m,c} + \sum_v CE \cdot WC_v \quad (3.5)$$

$$C_{capital} = f \cdot \left[\sum_{Hex} CPO_{Hex} \cdot FBM_{Hex} + \sum_{Cooler} CPO_{Cooler} \cdot FBM_{Cooler} + \sum_{Heater} CPO_{Heater} \cdot FBM_{Heater} \right. \\ \left. + \sum_v CPO_v \cdot FBM_v + \sum_t CPO_t \cdot FBM_t + \sum_w CPO_w \cdot FBM_w \right]$$

Em que CC , CH e CE são os parâmetros de custo para as utilidades frias e quentes, bem como para a energia elétrica, respectivamente. O termo FBM é o fator de correlação para o custo do equipamento, e CPO indica o custo de uma unidade de equipamento (em US\$), obtido a partir das correlações de Turton et al. (2003) para trocadores de calor e válvulas, e de as correlações de Couper et al. (2010) para turbinas e compressores. Essas correlações foram corrigidas de acordo com o índice CEPCI (sigla em inglês para *Chemical Engineering Plant Cost Index*) para o ano de 2012. O termo f é o fator de anualização para o custo de capital definido por Smith (2005). Dado r como a taxa de juros por ano e ny como o número de anos, então:

$$f = \frac{(1+r)^{ny} - 1}{r} \quad (3.6)$$

3.4 Aspectos Computacionais

Antes de apresentar os estudos de casos, alguns aspectos computacionais importantes relacionados com a solução do modelo anterior devem ser discutidos. O modelo disjuntivo proposto é formulado como um problema de PNLMI usando a reformulação Big-M (Grossmann, 2002). Este tipo de relaxamento é conveniente desde que o tamanho do problema não aumente substancialmente quando comparado ao relaxamento da envoltória convexa (Vecchietti et al., 2003). A formulação Big-M é sempre competitiva quando podem ser proporcionados bons limites para as variáveis (Yeomans & Grossmann, 1999). No entanto, o limite inferior obtido pela formulação Big-M é, em geral, mais fraco, o que requer mais tempo de processamento em comparação com o método da envoltória convexa. Deve-se enfatizar que o valor do parâmetro M deve ser escolhido com muito cuidado: se M é menor do que o limite superior para a função, soluções válidas importantes podem ser eliminadas da região de busca. Por outro lado, se M for demasiado grande, o modelo pode tornar-se difícil

de resolver numericamente. Desse modo, neste modelo, o parâmetro do relaxamento Big-M deve ser determinado de acordo com os limites superior e inferior de cada uma das variáveis na equação correspondente.

O modelo é escrito em GAMS (versão 24.0.2) e pode ser resolvido utilizando qualquer *solver* para problemas padrão de PNLMI. Contudo, este tipo de modelo produz um grande número de soluções locais, devido às suas características de não-convexidade e não-linearidade que, muitas vezes, conduzem a soluções subótimas. Embora as técnicas de decomposição, como a decomposição de Benders generalizada (DBG) (Geoffrion, 1972) e aproximação exterior (AE) estejam disponíveis para a resolução de problemas de PNLMI, se o problema mestre é sensível a não-convexidades, partes importantes da região viável do problema podem ser eliminadas. Assim, os resultados muitas vezes permanecem presos em um ótimo local (Caballero & Grossmann, 2012). Tipicamente, o algoritmo *Branch and Bound* (BB), ou ramificação e bifurcação, é menos sensível a não-convexidades. Os valores iniciais para cada problema de programação não-linear (PNL) no algoritmo de BB são fornecidos pelo nó principal. Limites superior e inferior devem ser fornecidas para o nó inicial (problema de PNL relaxado) para cada uma das variáveis do modelo. Além disso, o grande número de soluções potencialmente inviáveis pode auxiliar na poda da árvore de busca, de alguma forma atenuando a natureza combinatória do problema (Ravagnani & Caballero, 2007). Portanto, a utilização de um *solver* baseado em um algoritmo BB simples, tal como o *solver* SBB sob GAMS, deve encontrar uma solução ótima perto da solução global. Embora *solvers* de otimização global determinísticos (i.e., o *solver* BARON) possam resolver o problema para a otimização global, o tempo de processamento necessário é excessivo. Por estas razões, o *solver* SBB foi escolhido para resolver o modelo.

Uma tentativa de resolver o modelo com o *solver* DICOPT foi realizada, ainda que o desempenho deste *solver* não supere o SBB. O *solver* DICOPT baseia-se no método de AE, e tipicamente requer um número menor de iterações maiores (i.e., entre os subproblemas de PNL e o problema mestre PLMI). Todavia, uma vez que o *solver* DICOPT é mais sensível a não-convexidades do modelo, especialmente no problema mestre (PLMI), ele repetidamente falhou em encontrar uma única solução viável. O *solver* BARON também foi utilizado; no entanto, este *solver* foi incapaz de retornar soluções viáveis à medida que a superestrutura se torna mais complexa e, por esta razão, só pode ser aplicado quando a superestrutura é avaliada sem a manipulação de pressão de correntes.

Todos os problemas estudados na próxima seção foram resolvidos utilizando um computador pessoal, com um processador Intel Core 2 Duo 2.40 GHz e 3,00 GB de RAM com o Windows 7 Ultimate. A tolerância da terminação em GAMS, OptCR, foi ajustado para 0,00 (somente quando o *solver* SBB foi usado), enquanto que a tolerância absoluta em GAMS, OptCA, não foi alterada do seu valor predefinido. Ressalta-se que para resolver o modelo, é essencial impor limites (i.e., os limites inferior e superior) para todas as variáveis. Assim, os limites das variáveis pressões e temperaturas são especificados individualmente em cada exemplo estudado.

3.5 Estudos de Casos

Três estudos de casos compreendendo diferentes situações são realizados para analisar o desempenho do modelo desenvolvido, quanto à obtenção de um projeto ótimo de RTCs com correntes de processo submetidas à manipulação de pressão.

Exemplo 3.1. Neste exemplo, a integração de calor ocorre entre uma corrente quente (H1) e uma corrente fria (C1). A corrente quente H1 é comprimida entre 0,1 e 0,5 MPa, e a corrente fria C1 é expandida de 0,5 a 0,1 MPa. Como mencionado anteriormente, a corrente H1 pode potencialmente ser comprimida, expandida e comprimida, enquanto que a rota de manipulação de pressão da corrente C1 inclui expansão, compressão e expansão. Resfriadores e aquecedores são alocados nos extremos destas correntes, ao final dos estágios de manipulação de pressão. Quando expandida, a corrente quente H1 se comporta temporariamente como uma corrente fria, enquanto que a corrente fria C1 se comporta como uma corrente quente após o processo de compressão. Assim, um total de oito correntes são consideradas no sistema: quatro correntes quentes (H1, H2, H3 e H4) e quatro correntes frias (C1, C2, C3 e C4). Neste caso, as taxas de fluxo de capacidade calorífica ($F.Cp$) de todas as correntes são constantes conhecidas. Os dados do problema são apresentados na Tabela 3.1 e a Figura 3.2 mostra o possível arranjo das correntes para este exemplo. Uma superestrutura com quatro estágios de troca de calor e possibilidade de divisão de correntes são considerados para a síntese da RTC. Além disso, são conhecidos: $\Delta T_{\min} = 5$ K, $T_U^h = 680$ K, $T_U^c = 300$ K, $\kappa = 1,352$, $\eta_t = 1$, $\eta_v = 1$ e $\mu_s = 1,961$ K/MPa. As temperaturas desconhecidas de entrada

das correntes podem variar entre 350 e 750 K, a pressão das correntes H2 e C2 é limitada entre 0,1–0,8 MPa, e a pressão das correntes C3 e H4 é limitada entre 0,1–0,7 MPa. Os coeficientes de transferência de calor individuais para todas as correntes são mantidas em 0,1 kW/m²K, o mesmo coeficiente para as utilidades térmicas é igual a 1,0 kW/m²K. O fator de custo de capital anualizado é assumido ser igual a $f = 0,18$ (i.e., correspondendo-se a uma taxa de juros de 10% ao ano em um período de 8 anos). Neste exemplo, três diferentes casos são estudados. Inicialmente, os níveis de pressão das correntes são ajustados para promover a integração entre o calor e trabalho. Em seguida, dois estudos de casos adicionais são apresentados considerando-se diferentes restrições e possíveis arranjos de equipamentos na RTC. Em todos os casos, a minimização do custo total anualizado—composto pelas despesas operacionais e custo de capital de investimento em equipamentos—é considerada como sendo a função objetivo do problema.

No Caso 1, a manipulação de pressão das correntes de processo é avaliada na síntese da RTC. Neste caso, a RTC ótima obtida é composta por quatro trocadores de calor e um refrigerador. As áreas de transferência de calor (e quantidade de calor) são iguais a 47,95 m² (170,92 kW), 227,31 m² (229,88 kW), 117,45 m² (162,51 kW), 196,91 m² (389,08 kW), e 47,57 m² (618,46 kW). Além disso, os resultados indicam que a rede ótima é obtida através dos seguintes passos: (i) compressão (através do compressor CO1) da corrente H1, seguindo-se de troca de calor na RTC, compressão (compressor CO2), troca de calor na RTC, e resfriamento (resfriador C); e (ii) troca de calor da corrente C1 na RTC, seguido por expansão (expansor EX3), e retorno para a rede para nova troca de calor, não sendo necessária nenhuma utilidade quente adicional. Desta forma, dois compressores e uma turbina são utilizados no processo para comprimir (e aquecer) e expandir (e resfriar), respectivamente, as correntes imediatamente antes da troca de calor na RTC. A Figura 3.3 apresenta a configuração ótima obtida para a RTC neste caso. Nos compressores, 730,85 kW (CO1 = 20,96 kW e CO2 = 709,89 kW) de energia são consumidos, e o custo da eletricidade é de cerca de 333 kUS\$/ano. O expansor produz 472,391 kW, que está disponível para atender às necessidades de energia do processo. O custo total anualizado da rede com esta configuração é 1207 kUS\$/ano, com um custo de capital para a construção de equipamentos de 813 kUS\$/ano e despesas operacionais de 394 kUS\$/ano, considerando-se os serviços frios e gastos de energia elétrica.

Tabela 3.1

Dados das correntes de processo para o Exemplo 3.1.

Corrente	h_s (kW/m ² K)	$F_s C_p$ (kW/K)	$T_{s,in}$ (K)	$T_{s,out}$ (K)	p_s (MPa)
H1	0,1	3,0	650	-	0,1
H2	0,1	3,0	-	-	-
C2	0,1	3,0	-	-	-
H3	0,1	3,0	-	370	0,5
C1	0,1	2,0	410	-	0,5
C3	0,1	2,0	-	-	-
H4	0,1	2,0	-	-	-
C4	0,1	2,0	-	650	0,1

Dados de custo: $CC = 100$ US\$/ano kW; $CE = 455,04$ US\$/ano kW; $CH = 337$ US\$/ano kW

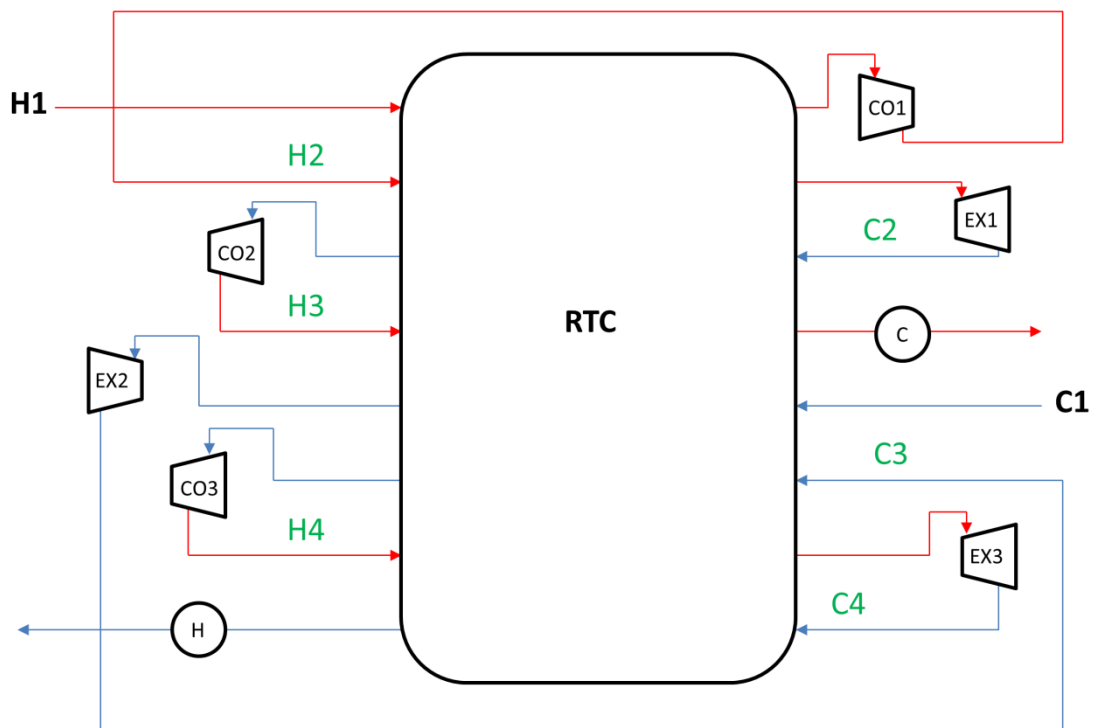


Figura 3.2. Possível arranjo de correntes para o Exemplo 3.1.

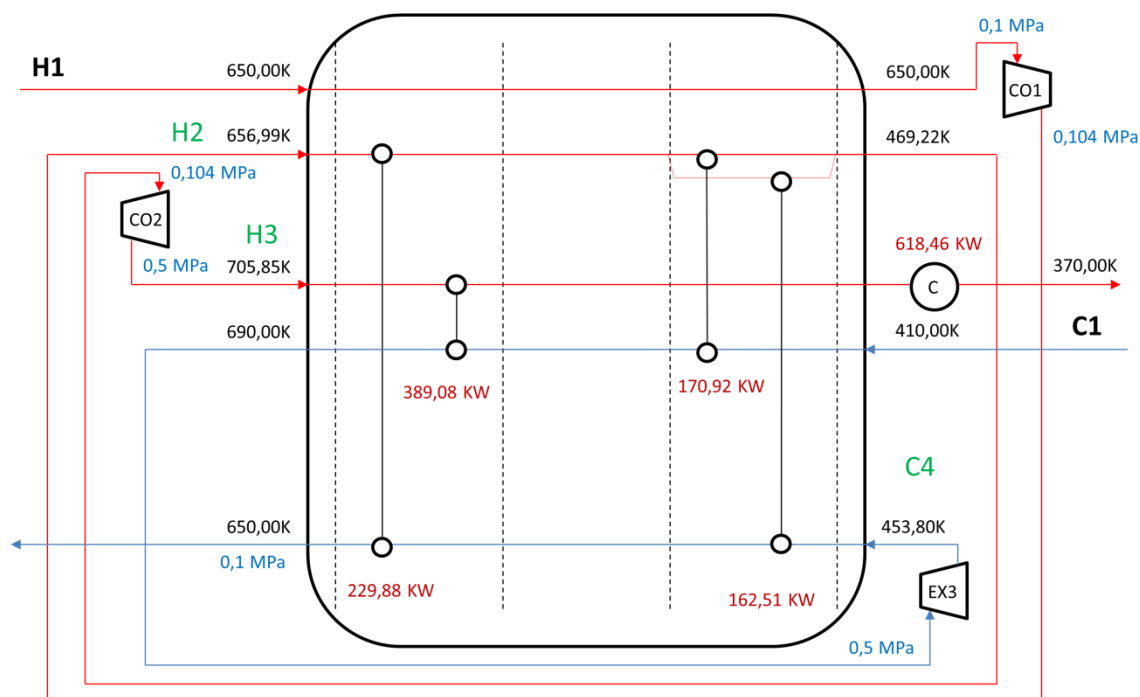


Figura 3.3. Configuração ótima da RTC obtida para o Exemplo 3.1 – Caso 1.

No Caso 2, a RTC é projetada para permitir o acoplamento das turbinas e compressores, com a finalidade de economizar eletricidade. A rede ótima é obtida com quatro trocadores de calor e um refrigerador. As áreas de troca de calor são iguais a 63,24, 171,69, 134,14, 80,88 e 48,26 m², que são responsáveis pelas seguintes quantidades de calor trocado: 265,03, 237,30, 322,70, 127,36 e 635,69 kW, respectivamente. Novamente, dois compressores (CO1 = 472,391 kW e CO2 = 275,689 kW) e um expander (EX2 = 472,391 kW) são necessários para manipular a pressão das correntes de processo. Contudo, a corrente H1 é comprimida em duas etapas, com trocas de calor intermediárias na RTC. Enquanto que a corrente C1 é expandida após a troca de calor, para retornar novamente para a RTC sem necessidade de qualquer utilidade quente no fim da sequência. A Figura 3.4 apresenta a configuração ótima da RTC obtida para este caso.

Além disso, este resultado indica o uso de um “compansor”, em que o primeiro compressor (CO1) é acoplado ao expander (EX2), de modo que todo o trabalho de compressão necessário (472,391 kW) é gerado pelo eixo rotor da turbina. Assim, o custo de eletricidade para este compressor (CO1) é reduzido a zero. O trabalho consumido pelo compressor CO2 é igual a 275,689 kW, correspondendo a um valor inferior ao obtido para o

mesmo compressor no Caso 1. Esses fatores refletem diretamente no custo total anualizado da rede, que neste caso é igual a 1081 kUS\$/ano, composto por $C_{capital} = 892$ kUS\$/ano e $C_{operational} = 189$ kUS\$/ano (o último valor deriva dos serviços frios e despesas de energia elétrica). O que representa uma economia de 10% no custo total da RTC em relação ao custo total obtido no caso anterior.

No Caso 3, a manipulação de pressão é avaliada assumindo-se a possibilidade de troca de turbinas por válvulas (i.e, o operador de acoplamento é substituído pelo operador de seleção para o tipo de expansor, sendo forçado o uso da válvula). A Figura 3.5 apresenta a configuração ótima da RTC obtida para este caso. A RTC ótima é obtida com dois trocadores de calor ($A = 358,96$ m² com $Q = 470,203$ kW, e $A = 7,736$ m² com $Q = 11,366$ kW) e um resfriador de área de 63,70 m² ($Q = 1.128,63$ kW). Neste caso, um único compressor ($CO_2 = 770,203$ kW) é necessário no processo, de modo que H1 é comprimida em uma única etapa com troca de calor intermediária na RTC. Após a compressão por CO_2 , a corrente H1 é resfriada usando a utilidade térmica C alocada no extremo da corrente H3. Adicionalmente, uma válvula de expansão substitui a turbina EX3.

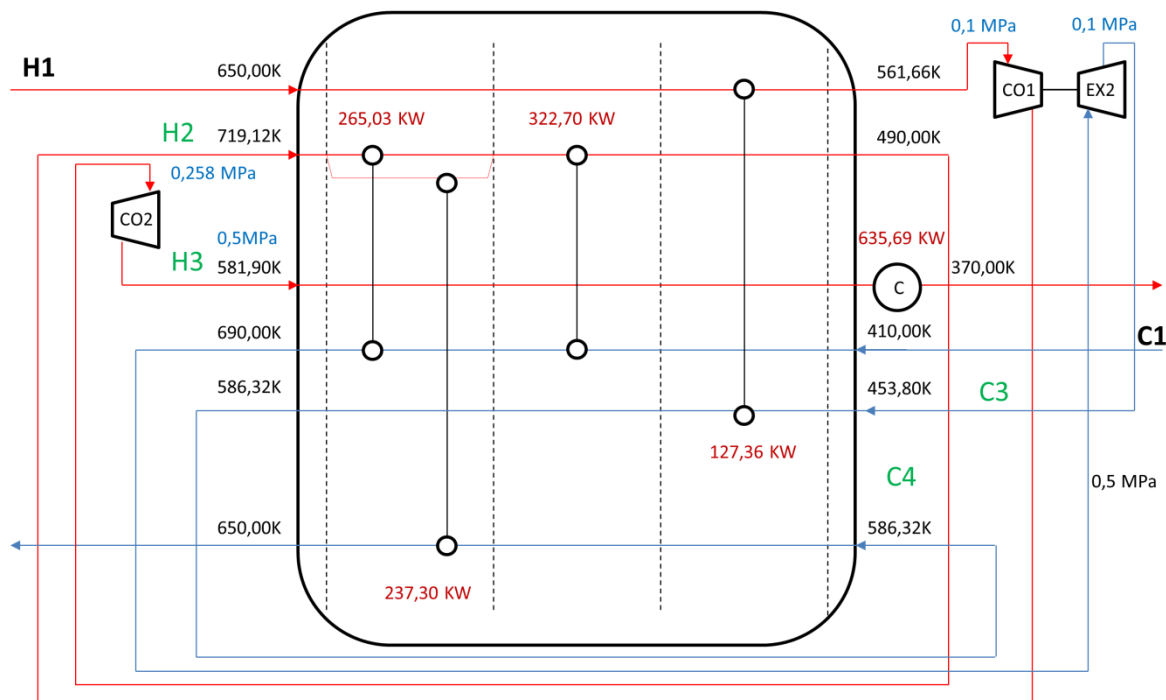


Figura 3.4. Configuração ótima da RTC obtida para o Exemplo 3.1 – Caso 2.

Desta forma, o custo de capital associado a construção dos equipamentos (i.e., trocadores de calor, resfriador, compressor e válvula) é igual a 690 kUS\$/ano, as despesas com eletricidade são iguais a 350 kUS\$/ano, e cerca de 113 kUS\$/ano são gastos em serviços de resfriamento de fluidos. Estes valores em conjunto implicam um custo total anualizado previsto de 1153 kUS\$/ano, o que corresponde a um aumento de 7% em relação ao valor obtido no caso anterior, em que somente o acoplamento é considerado na síntese da RTC.

Note-se que, apesar do custo de capital das válvulas ser negligenciável em comparação ao custo das turbinas, a natureza da expansão através de válvulas provoca apenas pequenas variações na temperatura dos fluidos. Este fato promove um aumento na quantidade de serviços de resfriamento requeridos para satisfazer as necessidades térmicas das correntes. Os resultados das variáveis de decisão e as configurações ótimas de RTC obtidas para os três casos estudados são apresentados na Tabela 3.2.

No Caso 1, o modelo matemático contém 466 variáveis contínuas, 32 variáveis discretas e 500 restrições com 1.690 elementos Jacobianos (não-zeros), dos quais 304 são não-lineares. No Caso 2, o modelo matemático contém 475 variáveis contínuas, 41 variáveis discretas e 530 restrições, com 1.804 elementos Jacobianos (não-zeros), dos quais 328 são não-lineares. No Caso 3, o modelo matemático contém 494 variáveis contínuas, 47 variáveis discretas e 859 restrições com 2.771 elementos Jacobianos (não-zeros), dos quais 308 são não-lineares. Em todos os casos, o tempo de processamento não excedeu 20 segundos com o *solver* SBB em GAMS.

Deve-se enfatizar que a quantidade de equipamentos de manipulação de pressão pode ser aumentada, a partir da consideração de etapas adicionais para as correntes H1 e C1. No entanto, o custo de capital de investimento pode aumentar de forma significativa, de modo que a inviabilidade econômica poderia superar quaisquer benefícios potenciais. Além disso, o acréscimo no número de estágios aumenta o tamanho do modelo e, por consequência, a dificuldade na resolução do mesmo. As perdas de eficiência de processos reais podem ser modeladas, por meio do ajuste das eficiências isentrópicas para valores menores do que 1. Outros fatores que afetam o custo total anualizado da RTC podem ser apreciados. A influência desses fatores sobre o custo total da rede é analisada no próximo exemplo.

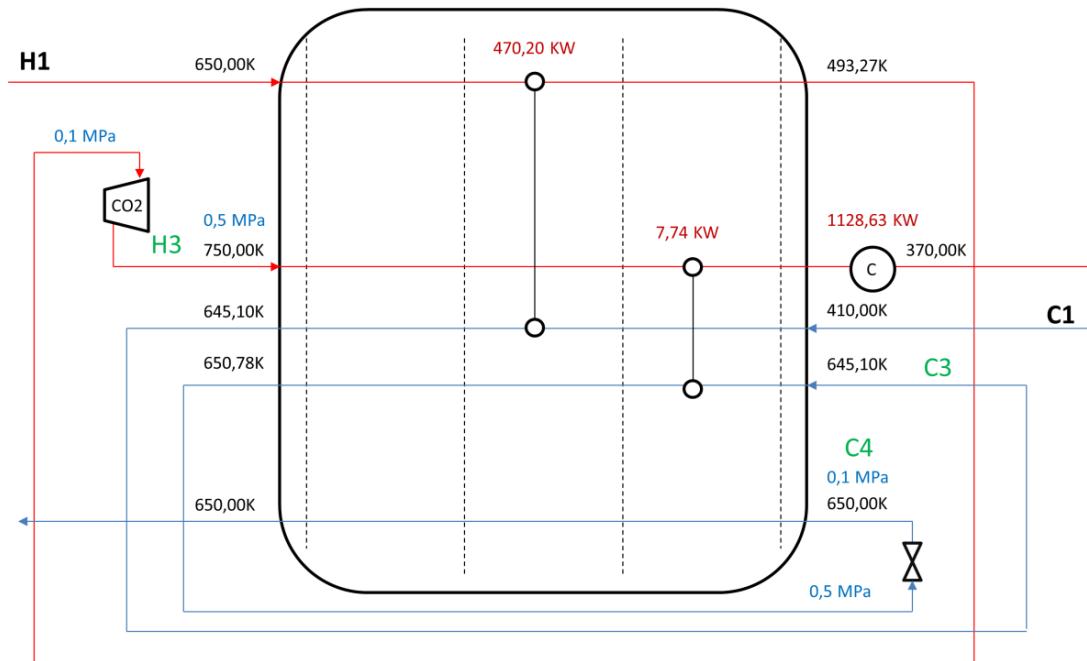


Figura 3.5. Configuração ótima da RTC obtida para o Exemplo 3.1 – Caso 3.

Exemplo 3.2. Este exemplo foi extraído de Wechsung et al. (2011). Neste exemplo, uma corrente quente H1 e uma corrente fria C1 são mantidas à pressão constante, enquanto que uma segunda corrente fria C2 é expandida de 0,4 a 0,1 MPa. Todas as correntes estão submetidas a condições subambientais. A rota de manipulação de pressão para a corrente C2 inclui expansão, compressão e expansão, e requer troca de calor na RTC entre cada um destes estágios. Desta forma, C2 comporta-se como C3 após a primeira expansão, como H2 após a compressão e, finalmente, como C4 após a última expansão. As taxas de fluxo de capacidade calorífica ($F.C_p$) de todas as correntes são constantes conhecidas. Os dados das correntes são apresentados na Tabela 3.3. A Figura 3.6 apresenta um possível arranjo das correntes para este exemplo. Uma superestrutura com quatro estágios de troca de calor e possibilidade de divisões corrente são considerados para a síntese da RTC. Neste exemplo, $\Delta T_{\min} = 4 \text{ K}$, $T_U^h = 383 \text{ K}$, $T_U^c = 93 \text{ K}$, $\kappa = 1,352$, $\eta_t = 1$, $\eta_v = 1$, e $\mu_s = 1,961 \text{ K/MPa}$. As temperaturas desconhecidas de entrada podem variar entre 103 e 373 K, a pressão da corrente C3 é restrita a 0,1–0,4 MPa, e a pressão da corrente H2 é restrita a 0,1–0,6 MPa. Os coeficientes de transferência de calor individuais para todas as correntes são iguais a $0,1 \text{ kW/m}^2\text{K}$, e este mesmo coeficiente para as utilidades quentes e frias é igual a $1,0 \text{ kW/m}^2\text{K}$. Um fator de custo de capital anualizado de $f = 0,18$ (taxa de juros de 10% ao ano em 8 anos) é assumido para a estimativa de custos envolvidos no processo.

Tabela 3.2

Resultados obtidos para as variáveis de decisão no Exemplo 3.1.

<i>Caso 1</i>				<i>Caso 2</i>				<i>Caso 3</i>			
Corrente	$T_{s,in}$ (K)	$T_{s,out}$ (K)	p_s (MPa)	Corrente	$T_{s,in}$ (K)	$T_{s,out}$ (K)	p_s (MPa)	Corrente	$T_{s,in}$ (K)	$T_{s,out}$ (K)	p_s (MPa)
H1	-	650,00	-	H1	-	561,66	-	H1	-	493,27	-
H2	656,99	469,22	0,104	H2	719,12	490,00	0,258	H2	493,27	493,27	0,100
C2	469,22	469,22	0,104	C2	490,00	490,00	0,258	C2	493,27	493,27	0,100
H3	705,85	-	-	H3	581,90	-	-	H3	750,00	-	-
C1	-	690,00	-	C1	-	690,00	-	C1	-	645,10	-
C3	690,00	690,00	0,500	C3	453,80	586,32	0,100	C3	645,10	650,78	0,500
H4	690,00	690,00	0,500	H4	586,32	586,32	0,100	H4	650,78	650,78	0,500
C4	453,80	-	-	C4	586,32	-	-	C4	650,00	-	-
RTC	Q (kW)	A (m ²)	W (kW)	RTC	Q (kW)	A (m ²)	W (kW)	RTC	Q (kW)	A (m ²)	W (kW)
H2.C4.k1	229,88	227,31	-	H2.C1.k1	237,30	171,69	-	H1.C1.k2	470,20	358,96	-
H3.C1.k1	389,08	196,91	-	H2.C4.k1	127,36	80,88	-	H3.C3.k3	11,37	7,74	-
H2.C1.k3	170,92	47,95	-	H2.C1.k2	322,70	134,14	-	H3	1128,63	63,70	-
H2.C4.k3	162,51	117,45	-	H1.C3.k3	265,03	63,24	-	CO2	-	-	770,20
H3	618,46	47,57	-	H3	635,69	48,26	-	válvula	-	-	-
CO1	-	-	20,96	CO1	-	-	472,39				
CO2	-	-	709,89	CO2	-	-	275,69				
EX3	-	-	472,39	EX2	-	-	472,39				
C_{total} (kUS\$/ano)			1.207	C_{total} (kUS\$/ano)			1.081	C_{total} (kUS\$/ano)			1.153

Tabela 3.3

Dados das correntes de processo para o Exemplo 3.2.

Corrente	h_s (kW/m ² K)	$F_s C p_s$ (kW/K)	$T_{s,in}$ (K)	$T_{s,out}$ (K)	p_s (MPa)
H1	0,1	3,0	288	123	0,1
C1	0,1	2,0	213	288	0,1
C2	0,1	1,7	113	-	0,4
C3	0,1	1,7	-	-	-
H2	0,1	1,7	-	-	-
C4	0,1	1,7	-	288	0,1

Dados de custo: $CC = 1.000$ US\$/ano kW; $CE = 455,04$ US\$/ano kW; $CH = 337$ US\$/ano kW

Diferentes casos são estudados para avaliar distintas possibilidades de configuração da RTC. Inicialmente, nenhum expansor e/ou compressor são usados no processo. Em seguida, os níveis de pressão das correntes são ajustados para promover a integração entre o calor e trabalho, e três casos adicionais são apresentados com diferentes restrições e possibilidades de arranjos de equipamentos. Em todos os casos estudados, a minimização do custo total anualizado, que consiste em despesas operacionais e custo de capital, é considerada como sendo a função objetivo.

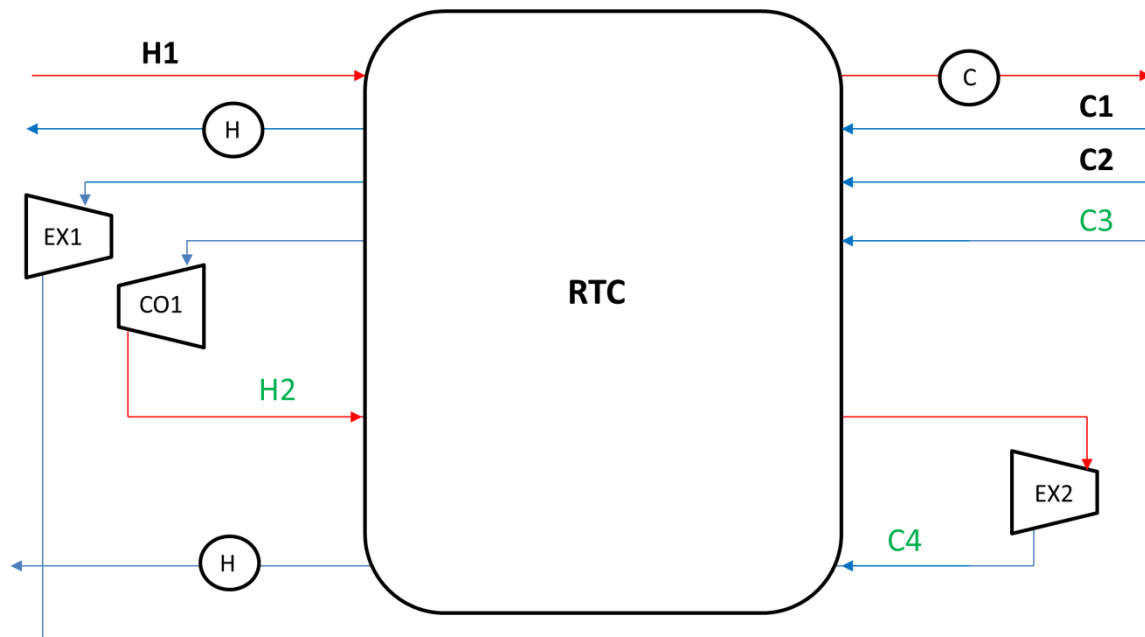


Figura 3.6. Possível arranjo de correntes para o Exemplo 3.2.

No Caso 1, a RTC é projetada sem a manipulação de pressão da corrente C2, de modo que todas as correntes são mantidas à pressão constante. A RTC ótima é obtida com três trocadores de calor ($A = 128,30 \text{ m}^2$, $Q = 102,54 \text{ kW}$; $A = 117,61 \text{ m}^2$, $Q = 91,98 \text{ kW}$, e $A = 126,47 \text{ m}^2$, $Q = 168,76 \text{ kW}$), dois aquecedores de mesma área de $A = 7,74 \text{ m}^2$ situados nas extremidades das correntes C1 e C2 ($Q = 47,46$ e $Q = 36,76 \text{ kW}$, respectivamente), e um resfriador alocado no extremo da corrente H1 ($A = 35,52 \text{ m}^2$, $Q = 131,72 \text{ kW}$). Obviamente, nenhum trabalho de compressão e/ou trabalho de expansão é consumido e/ou produzido na RTC. O custo total anualizado da RTC com essa configuração é igual a 331 kUS\$/ano, em que 160 kUS\$/ano deriva dos serviços de quentes e frios, e 171 kUS\$/ano está relacionado com o custo de capital investimento em equipamentos da rede.

No Caso 2 a possibilidade de manipulação da pressão da corrente C2 é avaliada na síntese da RTC. Assim, a corrente C2 é expandida entre 0,4 e 0,1 MPa. Novamente, a RTC ótima obtida é composta por três trocadores de calor, dois aquecedores e um resfriador. As respectivas áreas de transferência de calor (e troca de calor) são iguais a $108,97 \text{ m}^2$ (122,39 kW); $100,85 \text{ m}^2$ (96,17 kW); $155,47 \text{ m}^2$ (204,63 kW); $7,74 \text{ m}^2$ (27,61 kW), $7,86 \text{ m}^2$ (84,04 kW), e $24,74 \text{ m}^2$ (71,82 kW). Ademais, no processo é usado uma turbina (EX1) com capacidade de 87,34 kW. Como nenhum compressor é utilizado, não é consumido nenhum trabalho de compressão na rede, portanto, o custo de energia elétrica é zero. A configuração ótima da RTC obtida neste caso é apresentada na Figura 3.7. O custo total anualizado da rede com esta configuração é igual a 296 kUS\$/ano, com os custos de capital de investimento em equipamentos de 187 kUS\$/ano e as despesas operacionais de 109 kUS\$/ano. O custo total anualizado é 11% inferior ao custo total obtido pelo processo anterior (Caso 1), no qual a RTC é sintetizada sem qualquer compressão e/ou expansão da corrente C2. O decréscimo do custo total da RTC é devido à menor necessidade de serviços frios para o resfriamento da corrente quente H1.

Neste caso, o impacto do fator de custo anualizado f sobre o custo da RTC final é avaliada através da variação deste fator. Isto posto, os valores de $f = 0,30$ (taxa de juros de 25% aa ao longo de um período de 8 anos), e $f = 0,43$ (taxa de juros de 40% aa ao longo de 8 anos) são considerados para estimativa de custos. Em ambos os casos, a rede ótima obtida tem a mesma configuração que a encontrada anteriormente para $f = 0,18$. Contudo, o custo total anualizado da RTC sofre um aumento proporcional ao aumento do fator f . Os respectivos valores para o custo total anualizado da RTC são 424 kUS\$/ano e 550 kUS\$/ano.

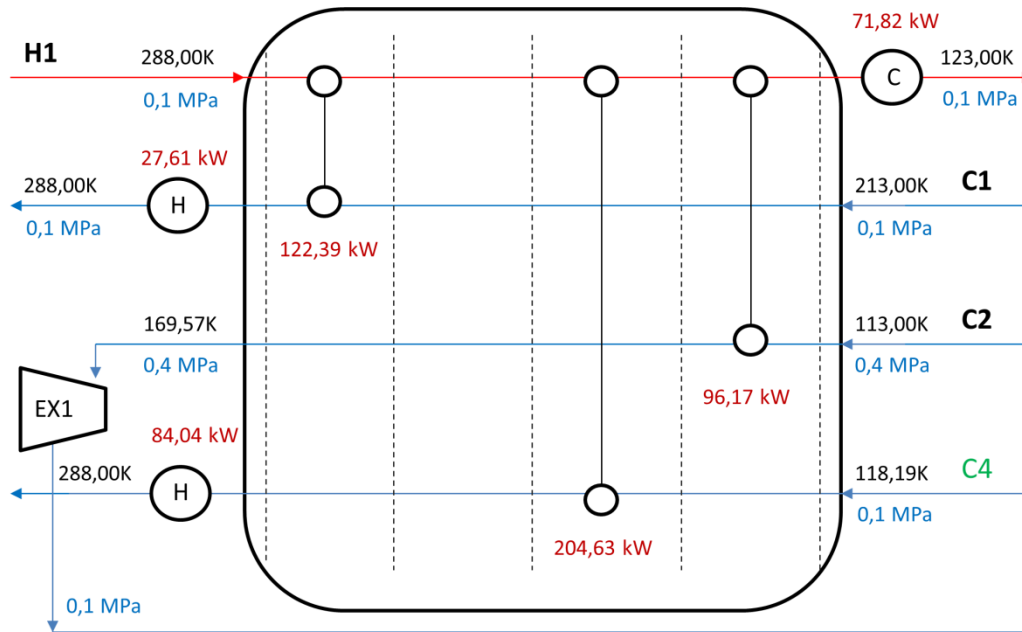


Figura 3.7. Configuração ótima da RTC obtida para o Exemplo 3.2 – Caso 2.

No Caso 3, na síntese da RTC considera-se a possibilidade de acoplamento de equipamentos, com uma eficiência $\eta = 0,7$ e $\kappa = 1,51$ para ambos turbina e compressor. Os resultados indicam que a RTC ótima é obtida com três trocadores de calor ($A = 116,43 \text{ m}^2$, $Q = 124,61 \text{ kW}$; $A = 95,46 \text{ m}^2$, $Q = 101,51 \text{ kW}$, e $A = 154,1 \text{ m}^2$, $Q = 188,44 \text{ kW}$), dois aquecedores com áreas de $A = 7,74$ e $7,89 \text{ m}^2$ situados nas extremidades das correntes C1 e C4 ($Q = 25,39$ e $Q = 84,40 \text{ kW}$, respectivamente), e um resfriador localizado no final da corrente H1 ($A = 26,58 \text{ m}^2$, $Q = 80,45 \text{ kW}$). Neste caso, apenas o segundo expansor (EX2) é utilizado, produzindo $76,84 \text{ kW}$. O custo total anualizado da RTC é igual a $303 \text{ kUS\$/ano}$ ($C_{operational} = 117 \text{ kUS\$/ano}$ e $C_{capital} = 186 \text{ kUS\$/ano}$).

Como não é necessário o uso de um compressor no processo, o custo da energia elétrica é igual a zero. O valor para o custo total anualizado apresenta uma redução de 8% em relação ao valor obtido para a síntese da RTC sem manipulação de pressão (Caso 1). Portanto, este resultado evidencia que mesmo quando perdas de eficiência são consideradas nos processos de expansão e compressão, o custo total da RTC é reduzido em relação ao custo da rede sem manipulação de pressão. A Figura 3.8 apresenta a configuração da RTC ótima obtida para este estudo de caso.

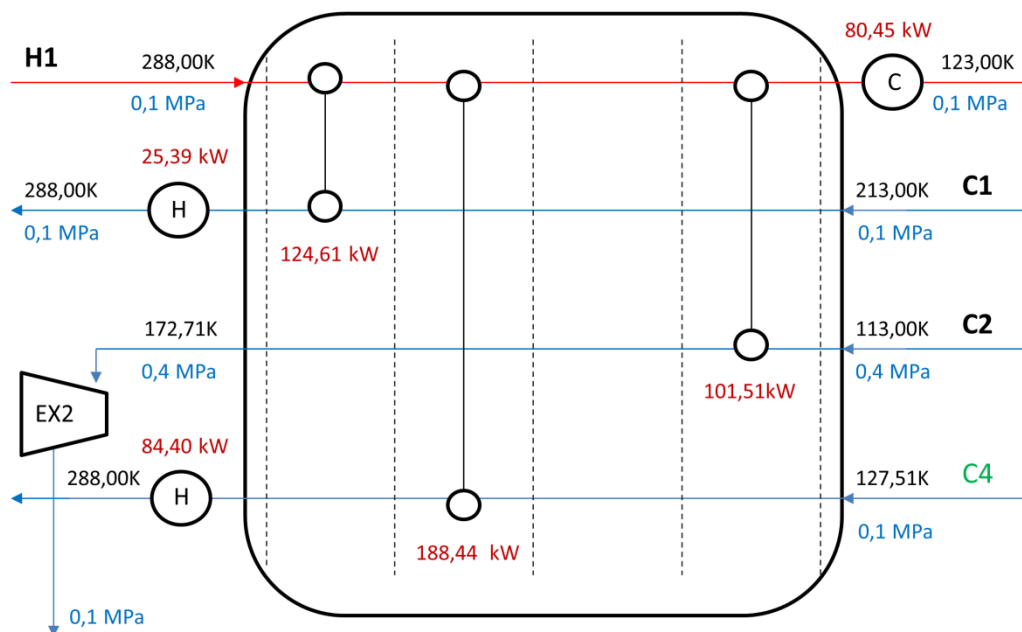


Figura 3.8. Configuração ótima da RTC obtida para o Exemplo 3.2 – Caso 3.

No Caso 4, na síntese da RTC permite-se a seleção entre válvulas e turbinas (i.e, o operador de acoplamento é substituído pelo operador de seleção para o tipo de expansor, sendo forçado o uso da válvula). Neste caso, a RTC ótima obtida é formada por três trocadores de calor, dois aquecedores e um resfriador. As áreas correspondentes de troca térmica (e troca de calor) são iguais a $128,27 \text{ m}^2$ (102,52 kW); $117,59 \text{ m}^2$ (92,03 kW); $126,71 \text{ m}^2$ (169,71 kW); $7,74 \text{ m}^2$ (47,48 kW), $7,74 \text{ m}^2$ (36,75 kW) e $35,38 \text{ m}^2$ (130,74 kW). A Figura 3.9 mostra a configuração ótima obtida para este estudo de caso. Em adição, o expansor (EX1) é substituído por uma válvula, e o compressor não é necessário na RTC. Consequentemente, o custo de electricidade é igual a zero. No entanto, devido ao uso da válvula para expandir a corrente C2, uma quantidade maior de serviços frios é necessária, aumentando-se os custos operacionais. O custo total anualizado da RTC com esta configuração é de 330 kUS\$/ano, com as despesas de capital para construção de equipamentos de 171 kUS\$/ano e despesas operacionais de 159 kUS\$/ano. Desta forma, o custo total da RTC é 0,3% inferior ao obtido no Caso 1. Ressalta-se que a expansão produzida pela válvula proporciona uma apenas uma pequena diferença nas temperaturas das correntes e, por conseguinte, na quantidade de calor disponível para reduzir os serviços térmicos necessários no processo. Devido à natureza da expansão produzida pela válvula

provocar uma diferença de temperatura inferior ao esperado de uma turbina, um aumento de 9% no custo total é obtido em relação ao Caso 3 .

Os resultados das variáveis de decisão e configurações da RTC obtidas para os Casos 1 a 4 são apresentados na Tabela 3.4. No Caso 1, o modelo matemático contém 65 variáveis contínuas, 7 variáveis discretas e 67 restrições com 208 elementos Jacobianos (não-zeros), dos quais 32 são não-lineares. No Caso 2, o modelo matemático tem 317 variáveis contínuas, 23 variáveis discretas e 450 restrições com 1.382 elementos Jacobianos (não-zeros), dos quais 200 são não-lineares. No Caso 3, o modelo matemático tem 322 variáveis contínuas, 25 variáveis discretas e 460 restrições com 1.411 elementos Jacobianos (não-zeros), dos quais 200 são não-lineares. No caso 4, o modelo matemático tem 331 variáveis contínuas, 29 variáveis discretas e 389 restrições com 1.264 elementos Jacobianos (não-zeros), dos quais 202 são não-lineares. O tempo de processamento para o Caso 1 é de 10 segundos (*solver* SBB) e 11 minutos (*solver* BARON) retornando a mesma solução em ambos os *solvers*. Os Casos 2 e 3 são resolvidos em 42 segundos (*solver* SBB), e o Caso 4 é resolvido em 11 minutos (*solver* SBB). O *solver* BARON não retornou soluções viáveis para os Casos 2–4.

A acurácia do modelo proposto é avaliada sob condições reais no seguinte exemplo, em que a superestrutura é utilizada para otimizar o processo de produção de GNL.

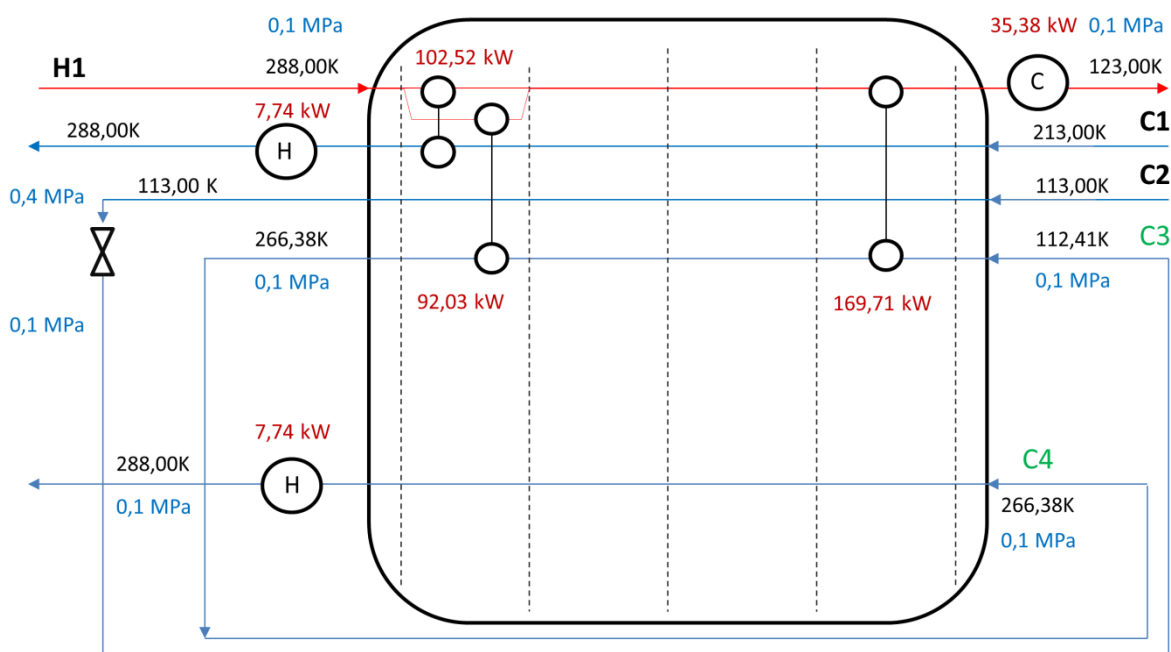


Figura 3.9. Configuração ótima da RTC obtida para o Exemplo 3.2 – Caso 4.

Tabela 3.4

Resultados obtidos para as variáveis de decisão no Exemplo 3.2.

<i>Caso 1</i>				<i>Caso 2</i>			
Corrente	$T_{s,in}$ (K)	$T_{s,out}$ (K)	p_s (MPa)	Corrente	$T_{s,in}$ (K)	$T_{s,out}$ (K)	p_s (MPa)
C2	-	-	-	C2	-	169,57	-
C3	-	-	-	C3	118,19	118,19	0,1
H2	-	-	-	H2	118,19	118,19	0,1
C4	-	-	-	C4	118,19	-	-
RTC	Q (kW)	A (m ²)	W (kW)	HEN	Q (kW)	A (m ²)	W (kW)
H1.C1.k1	102,54	128,30	-	H1.C1.k1	122,39	108,97	-
H1.C2.k1	91,98	117,61	-	H1.C4.k3	204,63	155,47	-
H1.C2.k2	168,76	126,47	-	H1.C2.k4	96,17	100,85	-
C1	47,46	7,74	-	C1	27,61	7,74	-
C2	36,76	7,74	-	C4	84,04	7,86	-
H1	131,72	35,52	-	H1	71,82	24,74	-
				EX1	-	-	87,34
C_{total} (kUS\$/ano)			331	C_{total} (kUS\$/ano)			296

<i>Caso 3</i>				<i>Caso 4</i>			
Corrente	$T_{s,in}$ (K)	$T_{s,out}$ (K)	p_s (MPa)	Corrente	$T_{s,in}$ (K)	$T_{s,out}$ (K)	p_s (MPa)
C2	-	172,71	-	C2	-	113,00	-
C3	172,71	172,71	0,4	C3	112,41	266,38	0,1
H2	172,71	172,71	0,4	H2	266,38	266,38	0,1
C4	127,51	-	-	C4	266,38	-	-
RTC	Q (kW)	A (m ²)	W (kW)	RTC	Q (kW)	A (m ²)	W (kW)
H1.C1.k1	124,61	116,43	-	H1.C1.k1	102,52	128,27	-
H1.C4.k2	188,44	154,10	-	H1.C3.k1	92,03	117,59	-
H1.C2.k4	101,51	95,46	-	H1.C3.k4	169,71	126,71	-
C1	25,39	7,74	-	C1	47,48	7,74	-
C4	84,40	7,89	-	C4	36,75	7,74	-
H1	80,45	26,58	-	H1	130,74	35,38	-
EX2	-	-	76,84	Valve	-	-	-
C_{total} (kUS\$/ano)			303	C_{total} (kUS\$/ano)			330

Exemplo 3.3. Este exemplo foi extraído de Wechsung et al. (2011). Na seção no mar da cadeia de energia para transporte e utilização de GNL, o gás natural (GN) é liquefeito para produzir GNL, enquanto o dióxido de carbono líquido (CO_2L) e nitrogênio líquido inerte (NLI) agem como correntes frias (ver Figura 3.10). O nitrogênio reaquecido é emitido para a atmosfera sob condições ambientes, enquanto que o CO_2 a alta pressão é transferido para um campo de petróleo no mar. Como este é um processo real, a capacidade calorífica das correntes não é constante. Deste modo, a corrente de GN é dividida em três correntes individuais (H1–H3), para produzir um ajuste razoável para a curva de resfriamento real. Da mesma forma, a corrente de dióxido de carbono líquido é dividida em duas correntes individuais (C1 e C2), e a corrente fria de nitrogênio é dividida em três correntes (C3–C5) para ajustar com maior precisão as capacidades caloríficas das correntes.

As temperaturas de entrada e de saída das correntes de GN e CO_2L , e a temperatura de entrada da corrente de NLI são fixas, tal como são as pressões das correntes de GN e CO_2L , e as pressões de entrada e de saída da corrente de NLI. As temperaturas e pressões intermediárias e a temperatura de saída da corrente de NLI são variáveis de otimização do problema. Todas as vazões das correntes são fixas, e os cálculos de projeto de processo são baseados em uma taxa de produção de 1,0 kg/s de GNL. Os dados das correntes para este exemplo são apresentados na Tabela 3.5.

A corrente de NLI a alta pressão (10 MPa), é expandida em conformidade com a Figura 3.10. Assim, três possíveis correntes frias e uma corrente quente resultam de dois ciclos de expansão e um ciclo de compressão, com aquecimento e resfriamento durante o ciclo intermediário. A rota de manipulação de pressão de C5 (NLI) é composta por expansão, compressão e expansão, resultando-se nas correntes C6, H4 e C7, respectivamente. Em geral, o processo é modelado usando quatro correntes quentes (H1–H4) e sete correntes frias (C1–C7), com três possíveis manipulações de pressão utilizando-se os equipamentos EX1 (turbina), CO1 (compressor) e EX2 (turbina). Mais detalhes a respeito do processo de produção do GNL podem ser obtidos nas referências Aspelund & Gundersen (2009a, 2009b, 2009c), Aspelund et al. (2009), Aspelund et al. (2010) e Wechsung et al. (2011). Dada a alta pressão e baixa temperatura da corrente de NLI, a expansão e compressão estão longe do comportamento ideal. Assim, um expoente politrópico não-ideal de 1,51 e um fator de eficiência de 0,7 são considerados para modelar este processo.

Tabela 3.5

Dados das correntes de processo para o Exemplo 3.3.

Corrente	h (kW/m ² K)	F_s (kg/s)	C_{p_s} (kJ/kg K)	$T_{s,in}$ (K)	$T_{s,out}$ (K)	p_s (MPa)
H1-GN	0,1	1,0	3,46	319,80	265,15	10,0
H2-GN	0,1	1,0	5,14	265,15	197,35	10,0
H3-GN	0,1	1,0	3,51	197,35	104,75	10,0
H4-NLI	0,1	-	1,15	-	-	-
C1-CO ₂ L	0,1	2,46	2,11	221,12	252,55	6,0
C2-CO ₂ L	0,1	2,46	2,48	252,55	293,15	6,0
C3-NLI	0,1	-	2,48	103,45	171,05	10,0
C4-NLI	0,1	-	1,80	171,05	218,75	10,0
C5-NLI	0,1	-	1,18	218,75	-	10,0
C6-NLI	0,1	-	1,07	-	-	-
C7-NLI	0,1	-	1,04	-	-	0,1

Dados de custo: $CC = 1,000$ US\$/ano kW; $CE = 455.04$ US\$/ano kW; $CH = 337$ US\$/ano kW

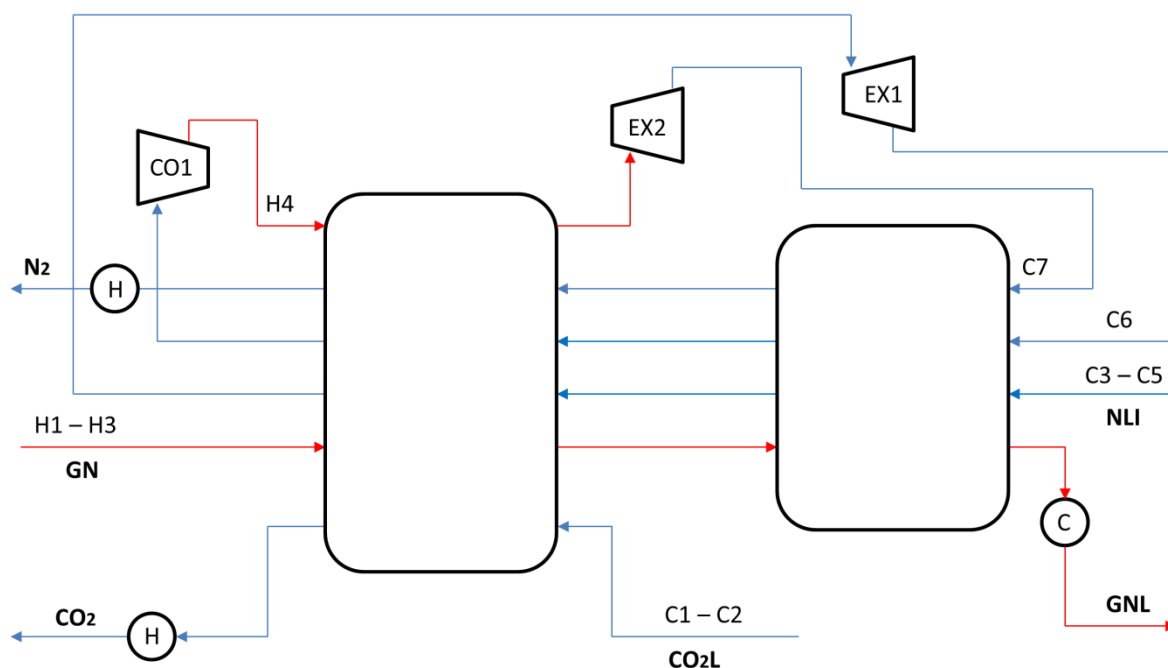


Figura 3.10. Possível arranjo de correntes para o Exemplo 3.3. Fonte: Adaptado de Wechsung et al. (2011)

Adicionalmente, são fornecidos $\Delta T_{\min} = 4 \text{ K}$ e $\mu_s = 1,961 \text{ K/MPa}$. Além disso, água a $383,15 \text{ K}$ é usada como a utilidade quente e nitrogênio líquido inerte, a uma pressão mais baixa é utilizado como a utilidade fria ($T_U^c = 93,15 \text{ K}$). As temperaturas desconhecidas de entrada podem variar de 95 a 380 K , a pressão da corrente H4 é limitada entre 1 e $3,5 \text{ MPa}$, e a pressão de C6 é restrita entre $0,3$ e 1 MPa . Assim, se o processo pode capturar 90% do dióxido de carbono gerado, a taxa de fluxo de CO_2L para o processo no mar é de $2,46 \text{ kg/s}$. Os coeficientes de transferência de calor individuais para todas as correntes são mantidas em $0,1 \text{ kW/m}^2\text{K}$, e para as utilidades quentes e frias em $1,0 \text{ kW/m}^2\text{K}$. O fator para o custo de capital anualizado $f = 0,18$ (taxa de juros de 10% ao longo de 8 anos) é usado para estimativa de custos. Para a síntese da RTC, uma superestrutura com 7 estágios de troca de calor e possibilidade de divisões de correntes são considerados.

Três casos diferentes são estudados neste exemplo. Inicialmente, os níveis de pressão das correntes são ajustadas para promover a integração entre o calor e trabalho, considerando a possibilidade de acoplamento de equipamentos (i.e., turbina e compressor), e seleção entre válvulas e turbinas. O custo total anualizado, que consiste nas despesas operacionais e custo de capital de investimento deve ser minimizado. A taxa de fluxo de NLI é fixado em $1,0 \text{ kg/s}$.

No Caso 1, a RTC ótima é obtida com cinco trocadores de calor de áreas (e quantidade de calor) iguais a $50,26 \text{ m}^2$ ($Q = 107,14 \text{ kW}$), $15,12 \text{ m}^2$ ($Q = 77,27 \text{ kW}$), $7,74 \text{ m}^2$ ($Q = 4,68 \text{ kW}$), $28,35 \text{ m}^2$ ($Q = 85,86 \text{ kW}$), e $88,12 \text{ m}^2$ ($Q = 162,97 \text{ kW}$), dois resfriadores ($A = 24,26 \text{ m}^2$ com $Q = 262,63 \text{ kW}$, e $A = 80,61 \text{ m}^2$ com $Q = 162,05 \text{ kW}$) e dois aquecedores ($A = 12,35 \text{ m}^2$ com $Q = 163,14 \text{ kW}$ e $A = 15,37 \text{ m}^2$ com $Q = 140,55 \text{ kW}$). Neste caso, apenas dois ciclos de expansão são necessários através das turbinas EX1 e EX2, e uma vez que o compressor não é requerido no processo, o custo de energia elétrica é zero. O trabalho produzido pela expansão através de EX1 é igual a $97,67 \text{ kW}$, e o trabalho produzido por EX2 é igual a $90,59 \text{ kW}$. O trabalho produzido pelas turbinas estão disponíveis para uso em outras etapas do processo. A Figura 3.11 apresenta a RTC ótima obtida para este caso. O custo total anualizado da RTC com essa configuração é $785 \text{ kUS\$/ano}$, dos quais $527 \text{ kUS\$/ano}$ correspondem a despesas com serviços de aquecimento ($102 \text{ kUS\$/ano}$) e resfriamento ($425 \text{ kUS\$/ano}$), e $258 \text{ kUS\$/ano}$ está relacionado com o custo de capital de investimento em equipamentos.

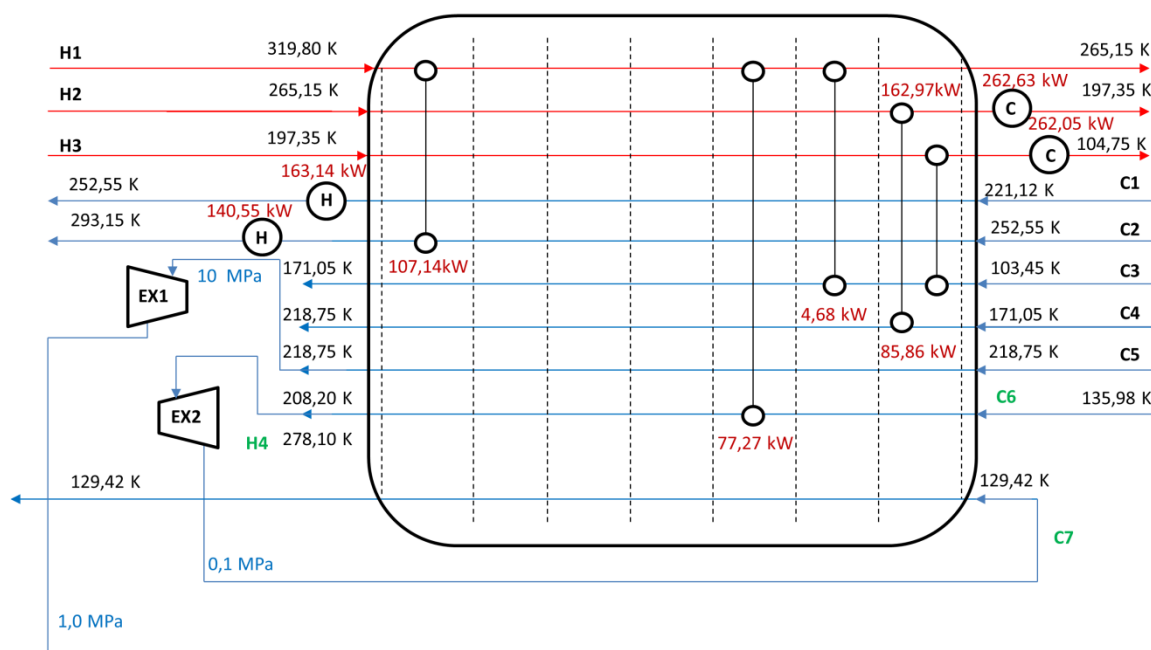


Figura 3.11. Configuração ótima da RTC obtida para o Exemplo 3.3 – Caso 1.

No Caso 2, a RTC é projetada para que ocorra o acoplamento entre turbina e compressor. Assim, a possibilidade de acoplamento de equipamento é fixada ($y^{CoEx} = 1$). A RTC ótima é obtida com oito trocadores de calor com áreas de $9,86 \text{ m}^2$ ($Q = 75,42 \text{ kW}$), $10,93 \text{ m}^2$ ($Q = 49,48 \text{ kW}$), $21,29 \text{ m}^2$ ($Q = 60,22 \text{ kW}$), $36,59 \text{ m}^2$ ($Q = 28,27 \text{ kW}$), $46,11 \text{ m}^2$ ($Q = 113,67 \text{ kW}$), $74,45 \text{ m}^2$ ($Q = 25,64 \text{ kW}$), $16,04 \text{ m}^2$ ($Q = 65,40 \text{ kW}$), e $39,58 \text{ m}^2$ ($Q = 92,23 \text{ kW}$). Além disso, na RTC são usados dois resfriadores ($A = 21,23 \text{ m}^2$ com $Q = 222,87 \text{ kW}$, e $A = 82,90 \text{ m}^2$ com $Q = 178,89 \text{ kW}$) e um aquecedor ($A = 25,09 \text{ m}^2$ com $Q = 247,69 \text{ kW}$). Logo, no processo são utilizadas duas turbinas e um compressor, no qual o expansor EX2 está acoplado a CO1 ($WC = WE = 178,87 \text{ kW}$). Devido ao acoplamento, o custo de eletricidade é igual a zero. O trabalho produzido por expansão através da turbina EX1 é igual a $101,67 \text{ kW}$, que torna-se disponível para uso em outras seções do processo. A Figura 3.12 apresenta a RTC ótima obtida para este caso. O custo total anualizado da RTC com essa configuração é $1.018 \text{ kUS\$/ano}$, dos quais $485 \text{ kUS\$/ano}$ deriva dos serviços de aquecimento ($83 \text{ kUS\$/ano}$) e resfriamento ($402 \text{ kUS\$/ano}$), e $533 \text{ kUS\$/ano}$ está relacionado com o custo de capital de investimento em equipamentos.

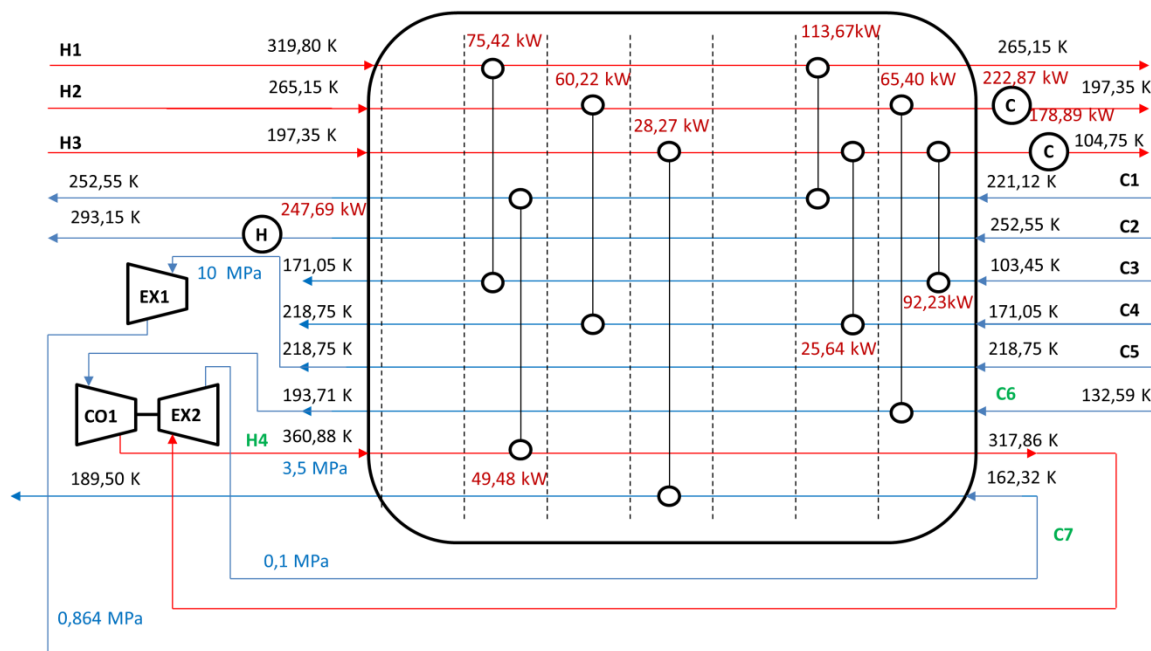


Figura 3.12. Configuração ótima da RTC obtida para o Exemplo 3.3 – Caso 2.

Neste caso, embora o custo total da RTC seja 23% maior em relação ao caso anterior, os custos relacionados com os serviços quente e frios decrescem em 5% e 18%, respectivamente. A diminuição das despesas com resfriamento e aquecimento de fluidos é devida ao uso do compressor. Assim, a adição de mais uma fase de manipulação de pressão pode fornecer energia—aquecimento ou resfriamento—para as correntes, de tal modo que a necessidade de utilidades quentes e frias seja significativamente reduzida.

O objetivo do Caso 3 é conceber um processo sem manipulação de pressão da corrente de NLI (i.e., o nitrogênio líquido está disponível apenas como uma utilidade fria), e determinar o ponto em que a manipulação de pressão da corrente de NLI torna-se economicamente viável. Neste caso, uma superestrutura com três estágios de troca de calor e a possibilidade de divisão de correntes é considerada para a síntese da RTC. Assim, somente a integração de calor entre as correntes de GN e CO₂L é permitida na rede. A RTC ótima obtida é composta por três trocadores de calor com áreas de 44,45 m² ($Q = 59,75$ kW), 69,21 m² ($Q = 129,33$ kW) e 86,11 m² ($Q = 103,39$ kW), dois resfriadores ($A = 22,95$ m² com $Q = 245,10$ kW e $A = 99,22$ m² com $Q = 325,03$ kW), e um aquecedor ($A = 13,16$ m² com $Q = 118,36$ kW). A Figura 3.13 ilustra a configuração ótima obtida para este caso.

O custo total anualizado da RTC com essa configuração é 766 kUS\$/ano, dos quais 610 kUS\$/ano são referentes ao aquecimento (40 kUS\$/ano) e resfriamento (570 kUS\$/ano) de fluidos, e 156 kUS\$/ano está relacionado com o custo de capital de investimento em equipamentos. Neste caso, o custo total anualizado da rede diminui em 2% em relação ao Caso 1. No entanto, as despesas relacionadas com os serviços de resfriamento de fluidos aumentam em 34% (extremamente caro neste processo) comparativamente ao Caso 1.

Em adição, os custos relacionados com a utilidade fria versus o custo total anualizado da rede é estudado neste exemplo. Assim, se o custo dos serviços frios for 5% maior (i.e., 1.050 US\$/ano kW), a rede obtida no Caso 1 apresenta um custo total de 807 kUS\$/ano, dos quais 446 kUS\$/ano derivam dos serviços frios, e a rede obtida no Caso 3 (sem manipulação de pressão) tem um custo total de 795 kUS\$/ano, dos quais as despesas relativas aos serviços de frios são 599 kUS\$/ano. Se o custo de utilidade fria aumentar em 10% (i.e., 1.100 US\$/ano kW), a RTC obtida no Caso 1 apresenta um custo total de 828 kUS\$/ano, dos quais 467 kUS\$/ano derivam dos serviços frios, e a rede obtida no Caso 3 (sem manipulação de pressão) tem um custo total de 823 kUS\$/ano, dos quais 627 kUS\$/ano derivam dos serviços frios.

Tendo em conta estes resultados, o custo total da rede sem a manipulação de pressão é inferior ao da RTC que utiliza os expansores e compressores. Contudo, se o custo dos serviços frios for aumentado em 15% (i.e., 1.150 US\$/ano kW), a rede obtida no Caso 1 passa a apresentar um custo total de 849 kUS\$/ano, dos quais 488 kUS\$/ano referem-se aos serviços frios, e a rede obtida no Caso 3 (sem manipulação de pressão) tem um custo total de 852 kUS\$/ano, dos quais 656 kUS\$/ano derivam dos serviços frios. Deste modo, um aumento de 15% no custo relacionado com a utilidade fria é o ponto em que a RTC com manipulação de pressão se torna economicamente viável para este processo.

As variáveis de decisão e as configurações da RTC ótimas obtidas para os três estudos de casos são apresentados na Tabela 3.6. Neste exemplo, o modelo matemático contém 1.439 variáveis contínuas, 173 variáveis discretas e 3.686 restrições, com 14.163 elementos Jacobianos (não-zeros), dos quais 1.199 são não-lineares. Os tempos de processamento não excederam os 20 minutos com o *solver* SBB em GAMS.

Tabela 3.6

Resultados obtidos para as variáveis de decisão no Exemplo 3.3.

<i>Caso 1</i>				<i>Caso 2</i>				<i>Caso 3</i>		
Corrente	$T_{s,in}$ (K)	$T_{s,out}$ (K)	p_s (MPa)	Corrente	$T_{s,in}$ (K)	$T_{s,out}$ (K)	p_s (MPa)	Corrente	$T_{s,in}$ (K)	$T_{s,out}$ (K)
C5	-	218,75	-	C5	-	218,75	-	C5	-	-
C6	135,98	208,20	1,0	C6	132,59	193,71	0,86	C6	-	-
H4	208,20	208,20	1,0	H4	360,88	317,86	3,50	H4	-	-
C7	129,42	129,42	-	C7	162,32	189,50	-	C7	-	-
RTC	Q (kW)	A (m ²)	W (kW)	RTC	Q (kW)	A (m ²)	W (kW)	RTC	Q (kW)	A (m ²)
H1.C2.k1	107,14	50,26	-	H1.C3.k2	75,42	9,86	-	H1.C2.k1	129,33	69,21
H1.C6.k5	77,27	15,12	-	H4.C1.k2	49,48	10,93	-	H1.C1.k2	59,75	44,45
H1.C3.k6	4,68	7,74	-	H2.C4.k3	60,22	21,29	-	H2.C2.k3	103,39	86,11
H2.C4.k7	85,86	28,35	-	H3.C7.k4	282,23	36,59	-	C2	118,36	13,16
H3.C3.k7	162,97	88,12	-	H1.C1.k6	113,67	46,11	-	H2	245,10	22,95
C1	163,14	12,35	-	H3.C4.k6	25,64	74,45	-	H3	325,03	99,22
C2	140,55	15,37	-	H2.C6.k7	65,40	16,04	-			
H2	262,63	24,26	-	H3.C3.k7	92,23	39,58	-			
H3	262,05	80,61	-	C2	247,69	25,09	-			
			-	H2	222,87	21,23	-			
EX1	-	-	97,67	H3	178,89	82,90	-			
EX2	-	-	90,59	CO1	-	-	178,87			
				EX1	-	-	101,67			
				EX2	-	-	178,87			
C_{total} (kUS\$/ano)			785	C_{total} (kUS\$/ano)			1.018	C_{total} (kUS\$/ano)		766

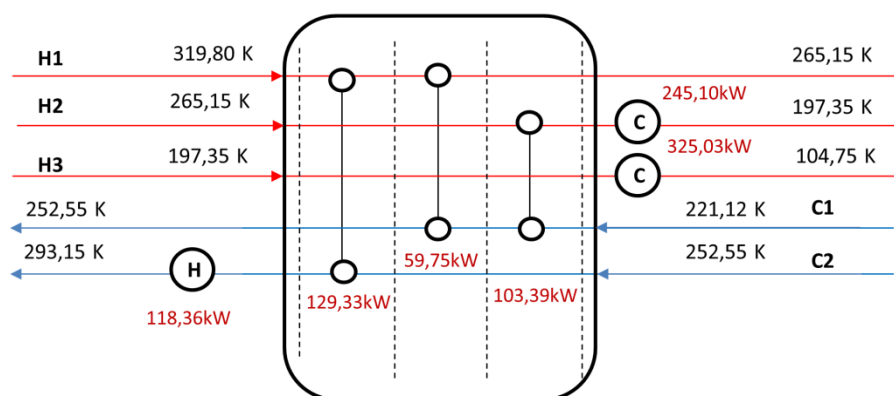


Figura 3.13. Configuração ótima da RTC obtida para o Exemplo 3.3 – Caso 3.

3.6 Conclusões

Um novo modelo matemático para a síntese de RTCs é proposto para otimizar a integração entre calor e trabalho, através da manipulação da pressão das correntes de processo. A abordagem desenvolvida, implementada em GAMS, combina programação disjuntiva generalizada (PDG) e programação não-linear mista inteira (PNLMI), e baseia-se no modelo para síntese de RTCs proposto por Yee & Grossmann (1990). A superestrutura desenvolvida é composta por várias etapas, nas quais pode ocorrer a troca de calor entre as correntes quentes e frias do processo. Além disso, no modelo considera-se a possibilidade de divisão de correntes e, assume-se taxas de fluxo de capacidade de calor constante e mistura isotérmica, e aquecedores e resfriadores podem ser alocados nos extremos de saída das correntes.

O problema de síntese de RTCs convencional é estendido para incluir correntes de processo que podem sofrer alterações de pressão através de expansores e compressores. Em consequência, as pressões e as temperaturas intermediárias das correntes devem ser consideradas variáveis desconhecidas que requerem otimização. As correntes de processo sujeitas à manipulação de pressão devem estar conectadas à RTC via compressores e expansores. Portanto, o estado de saída das correntes do equipamento de manipulação de pressão deve corresponder ao estado de entrada na superestrutura da RTC. As correntes quentes e frias devem seguir uma rota específica de manipulação pressão para reduzir os requisitos de energia do sistema.

Se esta rota envolvendo compressão e expansão é escolhida corretamente (i.e., corrente quente: compressão, expansão e compressão; corrente fria : expansão , compressão e expansão), energia pode ser fornecida para as correntes, o que deve reduzir a necessidade de utilidades quentes e frias no processo. Assim, o projeto resultante integra equipamentos para troca de calor e manipulação de pressão. Várias possibilidades de configuração de RTCs que envolvem compressores e expansores (turbinas e válvulas) são estudados para otimizar o projeto da RTC, minimizando-se o custo total anualizado composto pelas despesas operacionais e custo de capital de investimento para os vários componentes de rede.

A formulação matemática é significativamente mais complexa do que o problema de síntese de RTCs padrão, devido ao maior número de variáveis desconhecidas e restrições envolvidas no processo. Estes fatores aliados às condições de processo variáveis (temperatura e pressão) podem tornar o problema difícil de resolver em um tempo razoável. Além disso, neste tipo de problema não existe uma clara distinção entre as correntes quentes e frias, e entre as correntes de processo e utilidades. De fato, as correntes submetidas à manipulação de pressão podem mudar de identidade, como resultado a corrente fria pode comportar-se temporariamente como uma corrente quente, e vice-versa. Conseqüentemente, algumas correntes de processo podem atuar como utilidades, servindo como fontes ou dissipadores de energia a temperaturas fora do intervalo gerado pelas utilidades disponíveis. Além do grande número de variáveis e restrições, uma formulação baseada em PDG é necessária para garantir a seleção de equipamento (válvulas ou turbinas), bem como considerar a possibilidade de acoplamento entre compressor e turbina. O uso dos operadores disjuntivos aumentam ainda mais a não-convexidade do modelo matemático.

Três exemplos foram estudados para verificar a acurácia do modelo proposto, incluindo uma aplicação criogênica real. Os dois primeiros exemplos demonstram que a ótima integração entre calor e trabalho diminui de forma significativa a quantidade de utilidades térmicas necessárias no processo. Como consequência, o custo total anualizado é reduzido devido à diminuição das despesas operacionais relacionadas com aquecimento e resfriamento das correntes. Este fato ocorre mesmo quando são consideradas as perdas de eficiência dos compressores e turbinas inerentes aos processos reais. O custo total anualizado também é reduzido quando a turbina e o compressor são acoplados para permitir que o trabalho de expansão satisfaça a exigência de energia dos compressores, o que anula os custos de eletricidade. Em contraste, o uso de válvulas geralmente aumenta o custo do processo, apesar do baixo capital inicial de investimento, isso porque uma quantidade maior

de utilidades frias são necessários para promover o resfriamento dos fluidos. No Exemplo 3.3, a capacidade do modelo para sintetizar um RTC ótima com recuperação de pressão em condições reais é destacado pelos resultados obtidos para uma aplicação subambiente relacionada à produção de GNL. Neste exemplo, a expansão e compressão das correntes (NLI) reduzem significativamente as necessidades de utilidades quentes e frias do processo. Além disso, o estudo da relação entre as despesas relacionadas com utilidades frias e o custo total da rede demonstra que existe um ponto a partir do qual a implementação da RTC com a manipulação de pressão proporciona benefícios econômicos.

Em todos os exemplos estudados, um máximo de três manipulações de pressão são permitidos. Contudo, estágios adicionais de compressão e expansão podem ser facilmente considerados no modelo. Todavia, como pode ser observados nos resultados obtidos, a maior parte das correntes utiliza apenas uma ou duas etapas de manipulação de pressão, no qual a última etapa geralmente consiste em um simples *bypass*. Deve-se considerar que o efeito marginal do uso de equipamentos adicionais para manipulação de pressão não justifica o aumento do custo de capital de investimento em equipamentos.

Lista de Símbolos

A	área de troca térmica
C	custo
CC	parâmetro de custo para o resfriamento
CE	parâmetro de custo para eletricidade
CH	parâmetro de custo para o aquecimento
C_p	capacidade calorífica
CPO	custo unitário de equipamento
f	fator de anualização do custo de capital
F	vazão das correntes
FBM	fator de correlação para o custo de equipamento
κ	expoente politrópico
M	parâmetro para a formulação Big-M
N_C	número de correntes frias
N_H	número de correntes quentes
N_S	número de estágios na superestrutura da RTC
η	eficiência isentrópica
P	pressão
Q	quantidade de calor trocada
T	temperatura
\tilde{T}	temperatura do processo reversível
ΔT_{\min}	aproximação mínima de temperatura
WE	trabalho de expansão
WC	trabalho de compressão
y	variável binária que define a troca de calor entre as correntes quentes e frias
y^{CoEx}	variável binária que define o acoplamento entre compressor e turbina
y^{Ex}	variável binária que define a seleção de turbinas

y^{heater}	variável binária que define a troca de calor entre correntes frias e utilidades quentes
y^{val}	variável binária que define a seleção de válvulas
y^{cooler}	variável binária que define a troca de calor entre correntes quentes e utilidades frias
μ	coeficiente de Joule-Thompson

Subscritos:

c	fluido frio
ele	eletricidade
h	fluido quente
Hex	trocadores de calor
k	estágios da superestrutura
m	utilidade quente
n	utilidade fria
s	correntes de processo
t	turbinas
v	compressores
w	válvulas

Referências Bibliográficas

- Al-mutairi, E.M., 2010. Optimal design of heat exchanger network in oil refineries. *Chem. Eng. Trans.* 21, 955–960.
- Geoffrion, A.M., 1972. Generalized Benders decomposition. *J. Optim. Theory Appl.* 10, 237–259.
- Aspelund, A., Gundersen, T., Myklebust, J., Nowak, M.P., Tomasgard, A., 2010. An optimization-simulation model for a simple LNG process. *Comput. Chem. Eng.* 34, 1606–1617.
- Aspelund, A., Gundersen, T., 2009a. A liquefied energy chain for transport and utilization of natural gas for power production with CO₂ capture and storage – Part 2: The offshore and the onshore processes. *Appl. Energy* 86, 793–804.
- Aspelund, A., Gundersen, T., 2009b. A liquefied energy chain for transport and utilization of natural gas for power production with CO₂ capture and storage – Part 4: Sensitivity analysis of transport pressures and benchmarking with conventional technology for gas transport. *Appl. Energy* 86, 815–825.
- Aspelund, A., Gundersen, T., 2009c. A liquefied energy chain for transport and utilization of natural gas for power production with CO₂ capture and storage – Part 1. *Appl. Energy* 86, 781–792.
- Aspelund, A., Tveit, S.P., Gundersen, T., 2009. A liquefied energy chain for transport and utilization of natural gas for power production with CO₂ capture and storage – Part 3: The combined carrier and onshore storage. *Appl. Energy* 86, 805–814.
- Bjork, K., Westerlund, T., 2002. Global optimization fo heat exchanger network synthesis problems with and without the isothermal mixing assumption. *Comput. Chem. Eng.* 26, 1581–1593.
- Cerda, J., Westerberg, A.W., 1983. Synthesizing heat exchanger networks having restricted stream/stream matches using transportation problem formulation. *Chem. Eng. Sci.* 38, 1723.
- Chen, J.J., 1987. Letter to the Editor: Comments on improvement on a replacement for the logarithmic mean. *Chem. Eng. Sci.* 42, 2488.

- Cheng, X., Liang, X., 2012. Optimization principles for two-stream heat exchangers and two-stream heat exchanger networks. *Energy* 46, 421–429.
- Colberg, R.D., Morari, M., 1990. Area and capital cost targets for heat exchanger network synthesis with constrained matches and unequal heat transfer coefficients. *Comput. Chem. Eng.* 14, 1–22.
- Couper, J.R., Penney, W.R., Fair, J.R., Walas, S.M., 2010. *Chemical Process Equipment, Selection and Design*. 2nd ed. USA, Elsevier.
- Daichendt, M.M., Grossmann, I.E., 1994. Preliminary screening procedure for the MINLP synthesis of process systems II. Heat exchanger network. *Comput. Chem. Eng.* 18, 679.
- Floudas, C.A., Ciric, A.R., Grossmann, I.E., 1986. Automatic synthesis of optimum heat exchanger network configurations. *Aiche J.* 32, 276–290.
- Furman, K.C., Sahinidis, N.V., 2002. A critical review and annotated bibliography for heat exchanger network synthesis in the 20th century. *Ind. Eng. Chem. Res.* 41, 2335–2370.
- Gharaie, M., Zhang, N., Jobson, M., Smith, R., Panjeshahi, M.H., 2013. Simultaneous optimization of CO₂ emissions reduction strategies for effective carbon control in the process industries. *Chem. Eng. Res. Des.* 91, 1483–1498.
- Grossmann, I.E., Caballero, J.A., Yeomans, H., 2000. Advances in mathematical programming for the synthesis of process systems. *Lat. Am. Appl. Res.* 284, 263–284.
- Gundersen, T., Naess, L., 1998. The synthesis of cost optimal heat exchanger networks—An industrial review of the state of the art. *Comput. Chem. Eng.* 12, 503–530.
- Gundersen, T., Grossmann, I.E., 1990. Improved optimization strategies for automated heat exchanger network synthesis through physical insights. *Comput. Chem. Eng.* 14, 925–944.
- Hasan, M.M.F., Jayaraman, G., Karimi, I.A., 2010. Synthesis of heat exchanger networks with nonisothermal phase changes. *AIChE J.* 56, 930–945.
- Hwa, C.S., 1965. Mathematical formulation and optimization of heat exchanger networks using separable programming, in: *AIChE-I Chemical & Symposium*. pp. 101–106.
- Grossmann, I.E., 2002. Review of nonlinear mixed-integer and disjunctive programming techniques. *Optim. Eng.* 3, 227–252.
- Caballero, J.A., Grossmann, I.E., 2012. Synthesis of complex thermally coupled distillation systems including divided wall columns. *AIChE J.* 0, 1–21.
- Jezowski, J., 1994. Heat exchanger network grassroot and retrofit design. The review of the state-of-the-art: Part II. Heat exchanger network synthesis by mathematical methods and approaches for retrofit design. *Hungar J. Ind. Chem.* 22, 295–308.

- Kamath, R.S., Biegler, L.T., Grossmann, I.E., 2012. Modeling multistream heat exchangers with and without phase changes for simultaneous optimization and heat integration. *AIChE J.* 58, 190–204.
- Kesler, M. S., Parker, R.O., 1969. Optimal networks of heat exchanger. *Chem. Eng. Prog. Symp. Ser.* 65, 111–120.
- Lee, S., Grossmann, I.E., 2000. New algorithms for non-linear generalized disjunctive programming. *Comput. Chem. Eng.* 24, 2125–2141.
- Linnhoff, B., Vredeveld, D.R., 1984. Pinch technology has come of age. *Chem. Eng. Prog.* 80, 33–40.
- Linnhoff, B., 1993. Pinch analysis: A state-of-the-art overview. *Trans. IChemE* 71, 503–522.
- Linnhoff, B., 1994. Use Pinch analysis to knock down capital cost and emissions. *Chem. Eng. Prog.* 32–57.
- Linnhoff, B., Mason, D. R., Wardle, I., 1979. Understanding heat exchanger networks. *Comput. Chem. Eng.* 3, 295–302.
- Linnhoff, B., Flower, J.R., 1978. Synthesis of heat exchanger networks, Part I. systematic generation of energy optimal networks. *AIChE J.* 24, 633.
- Morar, M., Agachi, P.S., 2010. Review : Important contributions in development and improvement of the heat integration techniques. *Comput. Chem. Eng.* 34, 1171–1179.
- Papulias, S.A., Grossmann, I.E., 1983. A structural optimization approach in process synthesis. Part II. Heat recovery networks. *Comput. Chem. Eng.* 7, 707–721.
- Ravagnani, M.A.S.S., Caballero, J.A., 2007. A MINLP model for the rigorous design of shell and tube heat exchangers using the TEMA standards. *Chem. Eng. Res. Des.* 85, 1–13.
- Razib, M.S., Hasan, M.M.F., Karimi, I.A., 2012. Preliminary synthesis of work exchange networks. *Comput. Chem. Eng.* 37, 262–277.
- Smith R., 2005. *Chemical process design and integration*. 2nd ed. England, John Wiley and Sons Ltda.
- Turkay, M., Grossmann, I.E., 1996. Logic-based MINLP algorithms for the optimal synthesis of process networks. *Comput. Chem. Eng.* 20, 959–978.
- Turton, R., Bailei, R.C., Whiting, W.B., Shaeiwitz, J.A., 2003. *Analysis, synthesis and design of chemical processes*. 2nd ed. New York, McGraw-Hill.
- Vaskan, P., Guillén-Gosálbez, G., Jiménez, L., 2012. Multi-objective design of heat-exchanger networks considering several life cycle impacts using a rigorous MILP-based dimensionality reduction technique. *Appl. Energy* 98, 149–161.

- Vecchiotti, A., Lee, S., Grossmann, I.E., 2003. Modeling of discrete/continuous optimization problems: characterization and formulation of disjunctions and their relaxations. *Comput. Chem. Eng.* 27, 433–448.
- Wang, R.Z., Xia, Z.Z., Wang, L.W., Lu, Z.S., Li, S.L., Li, T.X., Wu, J.Y., He, S., 2011. Heat transfer design in adsorption refrigeration systems for efficient use of low-grade thermal energy. *Energy* 36, 5425–5439.
- Wechsung, A., Aspelund, A., Gundersen, T., Barton, P.I., 2011. Synthesis of heat exchanger networks at subambient conditions with compression and expansion of process streams. *Process Syst. Eng.* 57, 2090–2108.
- Yee, T.F., Grossmann, I.E., 1990. Simultaneous optimization models for heat integration. II. Heat exchanger network synthesis. *Comput. Chem. Eng.* 14, 1165–1184.
- Yeomans, H., Grossmann, I.E., 1999. Nonlinear disjunctive programming models for the synthesis of heat integrated distillation sequences. *Comput. Chem. Eng.* 23, 1135–1151.
- Zamorat, J.M., Grossmann, I.E., 1998. A global MINLP optimization algorithm for the synthesis of heat exchanger networks with no stream splits. *Comput. Chem. Eng.* 22, 367–384.

CAPÍTULO 4

Síntese Simultânea de Redes de Troca de Trabalho:

Modelo de Programação Matemática para a Ótima Integração de Trabalho com Recuperação de Calor de Correntes de Processo

A integração de trabalho e sua ótima interação com o calor pode representar grande economia de energia em plantas industriais. Este capítulo apresenta um novo modelo de otimização para a síntese simultânea de redes de troca de trabalho (RTTs), com integração de calor de correntes gasosas de processo. A abordagem proposta é análoga ao bem-conhecido problema de síntese de redes de trocadores de calor (RTCs). Desta forma, a integração de trabalho ocorre entre correntes a alta pressão (AP) e baixa pressão (BP) em diversos estágios de manipulação de pressão, através de equipamentos atuando em eixos comuns. O modelo permite o uso de várias unidades de eixos únicos de turbina e compressor (ou, single-shaft-turbine-compressor - SSTC), bem como compressores, turbinas e válvulas autônomas. Além disso, motores auxiliares e geradores são usados para responder a qualquer demanda ou excesso de energia nos eixos. Entre os estágios da RTT, as correntes são enviadas à RTC para promover a integração térmica, visando melhorar a recuperação de pressão. A superestrutura multi-estágio é formulada em programação não-linear mista inteira (PNLMI), com o objetivo de minimizar o custo total anualizado, composto por despesas operacionais e custo de capital. Três exemplos são estudados para verificar a acurácia do método proposto. Os resultados obtidos mostram que a integração de calor é essencial para melhorar a recuperação de pressão do sistema, reduzindo o custo total do processo.

4.1 Introdução

A eficiência energética é crucial em processos de transformação, visto que é responsável por uma grande parcela dos gastos e atua decisivamente sobre aspectos ambientais. Uma das principais razões para o desenvolvimento de técnicas para o uso eficiente e sustentável de energia é a crescente demanda mundial, aliada ao seu alto custo atual, devido à rápida diminuição na disponibilidade de combustíveis fósseis. Outras razões significativas incluem as barreiras tecnológicas e os preços ainda proibitivos de energia renovável, e as estritas regulamentações a respeito das emissões de gás carbônico, como uma tentativa de atenuar o efeito estufa e suas consequências (Gharaie et al., 2013; Hasan et al., 2010; Huang & Karimi, 2013; Razib et al., 2012; Wechsung et al., 2011). A minimização dos impactos ambientais pode ser alcançada através do aumento da eficiência energética em instalações industriais, nomeadamente através da redução do consumo de energia, adoção de estratégias inovadoras e desenvolvimento de técnicas de processamento mais eficientes (Lara et al., 2013; Morar & Agachi, 2010).

A otimização da recuperação de calor é fundamental para resolver o problema do uso eficiente de energia e, conseqüentemente, promover a redução de emissões gasosas e consumo de petróleo e gás natural, uma vez que a redução do consumo de energia está intimamente ligada à melhoria da transferência de calor (Cheng & Liang, 2012a; Kaluri & Basak, 2011; Onishi et al., 2013; Wang et al., 2011). Desta forma, o aproveitamento da energia de correntes do processo através da integração térmica entre trocadores de calor e sistemas de resfriamento e/ou aquecimento é uma das formas mais eficazes para reduzir custos. A síntese ótima de redes de trocadores de calor (RTCs) consiste em promover a integração de calor do sistema, por meio de um projeto de rede eficiente em termos econômicos e termodinâmicos, de forma que o número de trocadores de calor e o consumo de utilidades sejam mínimos. Este resultado pode ser obtido através da minimização da área de troca térmica (Gorji-Bandpy et al., 2011; Serna & Jiménez, 2004) e/ou o custo total da RTC—em relação ao custo de capital de investimento nas unidades da rede e despesas operacionais—(Al-mutairi, 2010; Björk & Nordman, 2005; Escobar & Trierweiler, 2013; Frausto-Hernández et al., 2003; Huang & Karimi, 2013; Ravagnani & Caballero, 2007; Serna-González & Ponce-Ortega, 2011; Sors & Kravanja, 2002; Vaskan et al., 2012) e/ou através da minimização de outros parâmetros, tais como a exergia ou entropia do sistema (Cheng & Liang, 2012b, 2012c; Wechsung et al., 2011).

A RTC é essencial em muitos processos industriais, incluindo indústrias farmacêuticas e de alimentos, indústrias químicas, destilação de petróleo bruto e sistemas de água de resfriamento. Estes setores são responsáveis pelo consumo de grandes quantidades de energia, nos quais o processo de transferência de calor é um dos mais dispendiosos (Allen et al., 2009; Vaklieva-Bancheva et al. 1996). Por esta razão, ao longo das últimas décadas, a pesquisa na área de síntese de RTCs tem recebido grande atenção da comunidade científica, e um progresso significativo tem sido realizado com impacto considerável sobre a indústria (Al-mutairi, 2010; Escobar & Trierweiler, 2013; Furman & Sahinidis, 2002; Huang & Karimi, 2013). Entre os primeiros trabalhos publicados, apresentado propostas para resolver o problema de síntese ótima de RTC, destacam-se Hwa (1965), usando métodos de programação separável e Kesler & Parker (1969), utilizando programação linear. Importantes revisões de literatura foram publicadas por Jezowski (1994a, 1994b), Gundersen & Naess (1988), Furman & Sahinidis (2002) e Morar & Agachi, 2010.

Apesar do esforço considerável para otimizar a integração de calor e os excelentes resultados já alcançados na síntese de RTCs, outras formas de energia estão frequentemente disponíveis em plantas de processamento como, por exemplo, o trabalho. O processo de manipulação de pressão é responsável por um consumo considerável de energia, desempenhando um papel especialmente importante em refinarias de petróleo, processos de síntese—como a síntese de metanol e amônia—e processos criogênicos, tal como a produção de gás natural liquefeito (GNL). Esta fonte de energia (i.e., o trabalho) têm sido pouco explorada em síntese de processos, ainda que apresente um custo mais elevado em comparação à energia térmica. De fato, os compressores e turbinas estão entre os equipamentos de maior custo em indústrias, superando inclusive o valor de equipamentos para troca de calor. Dada a urgência da concretização deste importante objetivo industrial focado em melhorar a eficiência energética, a integração de trabalho e uma maior interação entre o trabalho e o calor devem ser consideradas como alternativas viáveis. Claramente, é possível integrar o trabalho e calor na mesma rede com a finalidade da conservação de energia (Razib et al., 2012).

Aspelund et al. (2007) apresentaram um método gráfico heurístico baseado em projeto e análise *pinch* estendida (em inglês, *Extended Pinch Analysis and Design - ExPANd*) para minimizar os requisitos de energia em condições subambiente. Contudo, compressores e turbinas são usados apenas de forma autônoma, não sendo feita nenhuma menção ao uso de combinações destes equipamentos atuando sobre eixos comuns. Além disso, os aspectos

econômicos não foram examinados neste trabalho, sendo apenas avaliados os aspectos relativos à análise de exergia do sistema. Deve-se mencionar que este tipo de análise pode conduzir a processos que, por um lado, são altamente eficazes, mas, por outro lado, podem ser economicamente impraticáveis. Ademais, é preciso considerar que a própria natureza dos métodos heurísticos pode levar a soluções subótimas.

Wechsung et al. (2011) propuseram um modelo para a síntese de RTCs, em que as correntes de processo em condições subambiente estão sujeitos à manipulação de pressão. Os autores combinam análise *pinch*, análise exérgica e Programação Matemática para obter uma rede ótima com irreversibilidade mínima. Neste estudo, através de uma aplicação industrial relacionada com a produção de GNL, demonstra-se que uma via particular de compressão e expansão das correntes gasosas pode reduzir significativamente a irreversibilidade total na RTC. Em Onishi et al. (2014), uma superestrutura para a síntese simultânea de RTCs é apresentada, considerando-se o ajuste dos níveis de pressão de correntes de processo para melhorar a integração de calor. O modelo é formulado utilizando programação disjuntiva generalizada (PDG) e reformulado em programação não-linear mista inteira (PNLMI). Várias possibilidades de configuração de RTCs envolvendo compressores, turbinas e válvulas são estudadas, com o objetivo de minimizar o custo total anualizado da rede. Os autores demonstram que a integração ideal entre calor e trabalho pode reduzir a quantidade de utilidades necessárias, diminuindo os custos envolvidos no processo. No entanto, nestes dois trabalhos, os equipamentos de manipulação de pressão foram consideradas de forma independente, i.e, como equipamentos autônomos, ou simplesmente permitindo-se o acoplamento entre um compressor e uma turbina em um único eixo comum, como em Onishi et al. (2014).

Huang & Fan (1996) definem a RTT como uma rede de troca de trabalho entre duas ou mais unidades de transferência, e propõem os princípios operacionais básicos para a troca de trabalho entre duas correntes. Razib et al. (2012) apresentam a terminologia RTT para denotar o problema de síntese de redes de troca de trabalho, de forma análoga ao bem-conhecido problema de síntese de RTC. Neste trabalho, um modelo de otimização preliminar é proposto para a síntese de RTTs, através da formulação de uma superestrutura em Programação Matemática. O objetivo final é a minimização do custo total anual para um único eixo de turbina e compressor (ou, em inglês, *single-shaft-turbine-compressor* - SSTC) sob rotação à uma velocidade constante. Curvas operacionais de turbinas e compressores são usadas para identificar os fluxos de alta e baixa pressão para a troca de trabalho, por meio de

estágios de expansão e compressão em equipamentos localizados em uma única unidade de eixo. No entanto, os autores não consideram a possibilidade de integração térmica, de modo que a troca de calor entre correntes não é permitida na rede. Assim, aquecedores e resfriadores são apenas dispostos na extremidade de cada uma das correntes. Além disso, não foi avaliada a possibilidade de utilização de vários eixos, o modelo é limitado a uma velocidade de rotação fixa do eixo, e todos os custos são consideradas como funções lineares, não sendo capazes de traduzir de forma realista os custos do processo.

O presente capítulo apresenta um novo modelo para a síntese de redes de troca de trabalho (RTTs), com a integração de calor de correntes gasosas por meio da síntese simultânea da RTC. A síntese de RTTs consiste na ótima integração de trabalho entre correntes à alta pressão (AP) e baixa pressão (BP), utilizando-se equipamentos de manipulação de pressão atuando sobre um eixo comum do tipo SSTC (*single-shaft-turbine-compressor*). A expansão e compressão de correntes são realizados em uma superestrutura multi-estágio, utilizando-se várias unidades de eixos SSTC. O modelo permite o uso de equipamentos autônomos para minimizar o custo total anualizado. A função objetivo é composta por custos de capital associados às diversas unidades da rede, e por despesas operacionais. Geradores e motores auxiliares são usados, respectivamente, para converter o excesso de trabalho em eletricidade e fornecer energia nos eixos SSTC. Entre os estágios de manipulação de pressão da RTT, as correntes são enviadas à RTC para promover a integração de calor. A formulação da RTC é baseada no modelo de Yee & Grossmann (1990), no qual assume-se mistura isotérmica e coeficientes de transferência de calor constantes, bem como é considerada a possibilidade de divisão de correntes.

A principal diferença da abordagem proposta para o modelo de Razib et al. (2012), reside na integração das correntes térmicas, que ocorre em simultâneo com a integração de trabalho. Como consequência, as temperaturas de entrada e saída da RTC são dependentes da síntese da RTT, por esta razão devem ser considerados como variáveis de otimização do processo. A superestrutura da RTT com integração de calor é formulada em programação não-linear mista inteira (PNLMI), e resolvida com o *software* GAMS. Três estudos de casos são realizados para verificar a acurácia do modelo proposto. Em todos os casos, a integração de calor entre os estágios da RTT é essencial para melhorar a recuperação de pressão. A recuperação térmica é igualmente responsável pela redução do custo total anualizado, como resultado da utilização de uma menor quantidade de utilidades quentes e frias.

4.2 Definição do Problema

Considerando-se um conjunto de correntes gasosas à alta pressão (AP) e baixa pressão (BP) com vazões mássicas conhecidas, capacidades caloríficas, estado de alimentação (pressão e temperatura de entrada), e estado de destino (pressão e temperatura de saída). Além disso, serviços térmicos para aquecimento e resfriamento, eletricidade, equipamentos para manipulação de pressão e troca de calor, e seus respectivos custos. O principal objetivo é sintetizar uma RTT ótima através da recuperação de pressão das correntes AP e BP, utilizando-se compressores e turbinas que atuam em um eixo comum do tipo SSTC. A recuperação de calor é realizada simultaneamente na RTC, de modo a que o custo total anualizado previsto da rede seja minimizado. As contribuições de despesas operacionais e custos de capital das diversas unidades que compõem a rede são consideradas na função objetivo, incluindo a receita de geração de eletricidade.

A síntese da RTT com a integração de calor de correntes é um processo complexo que visa obter uma configuração ótima da rede, utilizando-se a menor quantidade possível de equipamentos tanto para a manipulação de pressão quanto para troca de calor, e que apresente um consumo mínimo de eletricidade e utilidades térmicas para aquecimento e resfriamento de fluidos.

Para a integração de trabalho na RTT, considera-se a utilização dos seguintes equipamentos:

- (i) Turbinas e compressores atuando em um eixo comum (SSTC).
- (ii) Turbinas autônomas para geração de energia elétrica (turbinas utilitárias).
- (iii) Compressores autônomos que consomem energia elétrica (compressores utilitários).
- (iv) Válvulas de expansão de correntes através de expansão isentálpica de Joule-Thompson.
- (v) Turbinas geradoras para produzir eletricidade a partir de energia excedente no eixo (geradores de energia).
- (vi) Motores auxiliares para preencher a escassez de energia elétrica no eixo.
- (vii) Misturadores (mixers) e divisores de correntes (splitters).

Para a integração de calor na RTC, considera-se a utilização dos seguintes equipamentos:

- (viii) Trocadores de calor (contracorrente ou multi-corrente).
- (ix) Aquecedores que utilizem aquecimento a vapor.
- (x) Resfriadores que utilizem água de resfriamento.
- (xi) Misturadores (mixers) e divisores de correntes (splitters).

4.3 Superestrutura da RTT–RTC

O modelo proposto para a síntese da RTT com integração de calor é formulado em programação não-linear mista inteira (PNLMI). O desenvolvimento da superestrutura é baseado nas seguintes ideias-chave:

- I. A superestrutura da RTT deve conter s estágios de compressão e de expansão, nos quais a troca de trabalho ocorre entre as correntes AP e BP. A recuperação de pressão é realizada por meio de equipamentos dispostos em série e em paralelo, nomeadamente compressores e turbinas associados a um eixo comum (SSTC). Várias unidades de eixos SSTC podem ser utilizadas no processo. Contudo, o balanço de energia global em cada unidade SSTC deve ser respeitado, i.e., a soma do trabalho de expansão deve ser igual a soma do trabalho de compressão. Para tanto, motores auxiliares e geradores (turbinas) de energia alocados nos eixos, ou mesmo compressores e turbinas autônomos e/ou válvulas, denominados utilidades da RTT, podem ser utilizados no projeto.
- II. Em cada estágio s de compressão e expansão, a vazão mássica total das correntes é dividida entre várias subcorrentes através dos equipamentos de manipulação de pressão que compõem cada uma destas etapas. No final de cada estágio, as subcorrentes devem passar através de um misturador para

reformular as correntes principais. Embora a pressão de saída seja a mesma em todos os equipamentos em cada estágio de expansão, a temperatura na saída de cada dispositivo é diferente. Por esta razão, os balanços de energia e de massa devem ser realizados nos pontos de mistura.

- III. Entre os estágios de manipulação de pressão na RTT, as correntes devem ser enviadas à RTC para recuperação de calor. A integração térmica é realizada para melhorar a recuperação de pressão, uma vez que a temperatura das correntes atua de forma decisiva nos processos de compressão e expansão. Deve-se ressaltar que altas temperaturas favorecem o processo de expansão, enquanto temperaturas mais baixas favorecem o processo de compressão de correntes.

Para simplificar a formulação matemática, as seguintes suposições são consideradas na síntese da RTT:

- (i) Todas as unidades de eixos SSTC operam a qualquer velocidade.
- (ii) Efeitos de afluência (*surging*) e engasgos (*choking*) são desconsiderados. Em outras palavras, presume-se que cada compressor/turbina é concebido para funcionar adequadamente a uma determinada velocidade de rotação, com a taxa de fluxo otimizada fornecida pelo modelo.
- (iii) Todas as compressões e expansões (exceto através de válvulas) são isentrópicas.
- (iv) Todas as expansões por meio de válvulas são isentálpicas, com coeficiente de Joule-Thompson constante.
- (v) Todas as correntes gasosas comportam-se de maneira ideal.
- (vi) Todas as turbinas e compressores são centrífugos e construídos com aço carbono.
- (vii) A energia de arranque necessário para qualquer compressor ou turbina é negligenciada.
- (viii) Temperaturas através de válvulas estão sempre abaixo da temperatura de inversão.

- (ix) Todos os compressores e turbinas no eixo SSTC são de estágio único. Muito embora, compressores (turbinas) multi-estágio, com resfriamento (aquecimento) intermediário aparecem naturalmente como uma sequência de compressores (turbinas) de estágio único e trocadores de calor.
- (x) Todas as capacidades caloríficas das correntes são constantes.
- (xi) Todos os coeficientes de transferência de calor são constantes.
- (xii) Quedas de pressão e perdas de calor em todos os equipamentos térmicos são negligenciados.
- (xiii) Custos de capital de misturadores e divisores são insignificantes e podem ser desprezados no modelo.

Como anteriormente mencionado, a superestrutura da RTT é composta por vários estágios de compressão ou expansão para cada corrente. Consequentemente, cada corrente AP é submetida a s estágios de expansão e, de forma análoga, cada corrente BP é submetida a s estágios de compressão. Antes de cada um desses estágios, bem como após a saída do último estágio da RTT, as correntes são conduzidas à RTC para a integração de calor. Como resultado, trocadores de calor e resfriadores ou aquecedores são alocados no início de cada estágio e, no final da última etapa de manipulação de pressão. Além disso, divisores são utilizados depois de cada trocador de calor, ao passo que um misturador é colocado ao fim de cada estágio. O divisor na entrada de cada estágio s dá origem a k subcorrentes que passam através de k unidades paralelas de turbinas/compressores pertencentes ao eixo SSTC, uma subcorrente que passa através de uma turbina/compressor utilitário, uma subcorrente para o *bypass* e, no caso de uma corrente AP, dá origem adicionalmente a uma subcorrente que passa por uma válvula. A Figura 4.1 mostra o estágio de compressão s das correntes BP, e a Figura 4.2 apresenta o estágio de expansão s das correntes AP. A Figura 4.3 apresenta a superestrutura multi-estágio para cada corrente, em que a RTC aparece em destaque.

A idéia principal da síntese de RTT é promover a troca de trabalho entre as correntes AP e BP, utilizando equipamentos para manipulação pressão—nomeadamente, turbinas e compressores—em execução em um eixo comum denominado de eixo único de turbina e compressor ou, simplesmente, SSTC (sigla em inglês para: *single-shaft-turbine-compressor*). O eixo SSTC é uma extensão direta do acoplamento entre turbinas e compressores sobre um eixo comum, com a diferença de que no SSTC as correntes AP substituem o vapor/gás que acionam as turbinas (Razib et al., 2012). Além disso, o eixo SSTC permite a troca de trabalho

entre as diferentes correntes de processo em vários estágios de expansão e de compressão por meio de unidades de estágio único, e a utilização de motores auxiliares e turbinas geradoras para responder, respectivamente, a qualquer falta ou o excesso de energia no eixo. Compressores e turbinas autônomos, e/ou válvulas também são utilizados para compôr a RTT. Como utilidades da RTT, vapor ou eletricidade podem ser usados para mover os compressores autônomos e motores auxiliares.

Quando a possibilidade de integração térmica é considerada, a RTT é sintetizada simultaneamente à RTC, através da recuperação de calor a partir de correntes de processo. Assim, enquanto a RTC envolve somente a integração de calor de correntes de processo—via trocadores de calor, aquecedores e resfriadores— a RTT envolve a integração de pressão ou a integração de pressão e temperatura das correntes, utilizando-se equipamentos alocados em eixos SSTC, turbinas e compressores autônomos, válvulas, motores auxiliares e geradores de energia e, quando necessário, trocadores de calor, aquecedores e resfriadores.

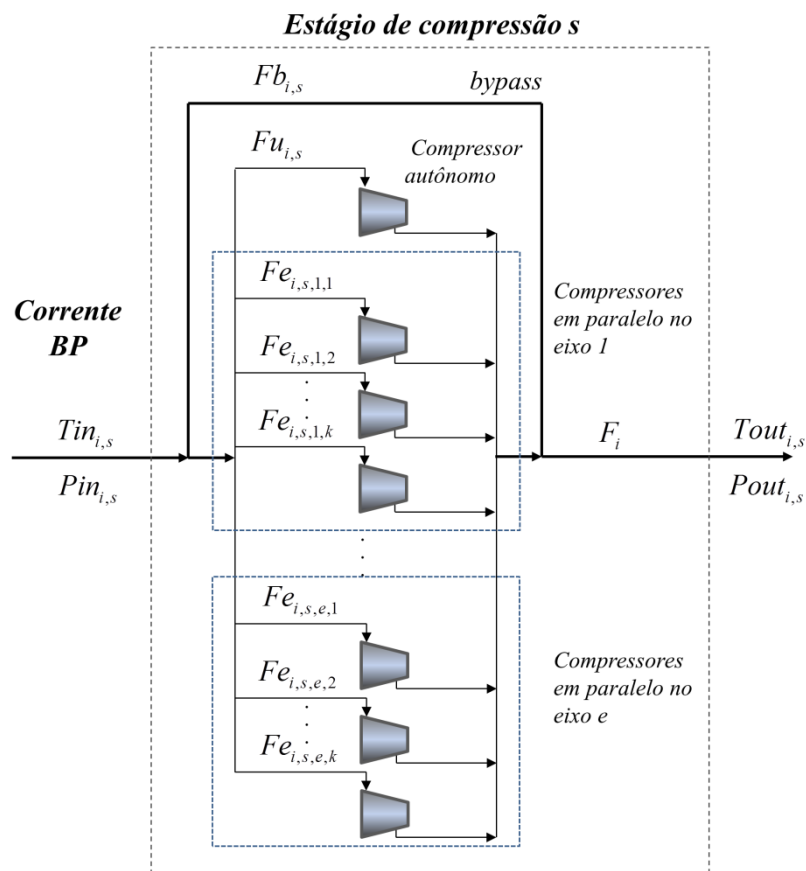


Figura 4.1. Superestrutura da RTT para o estágio s de compressão.

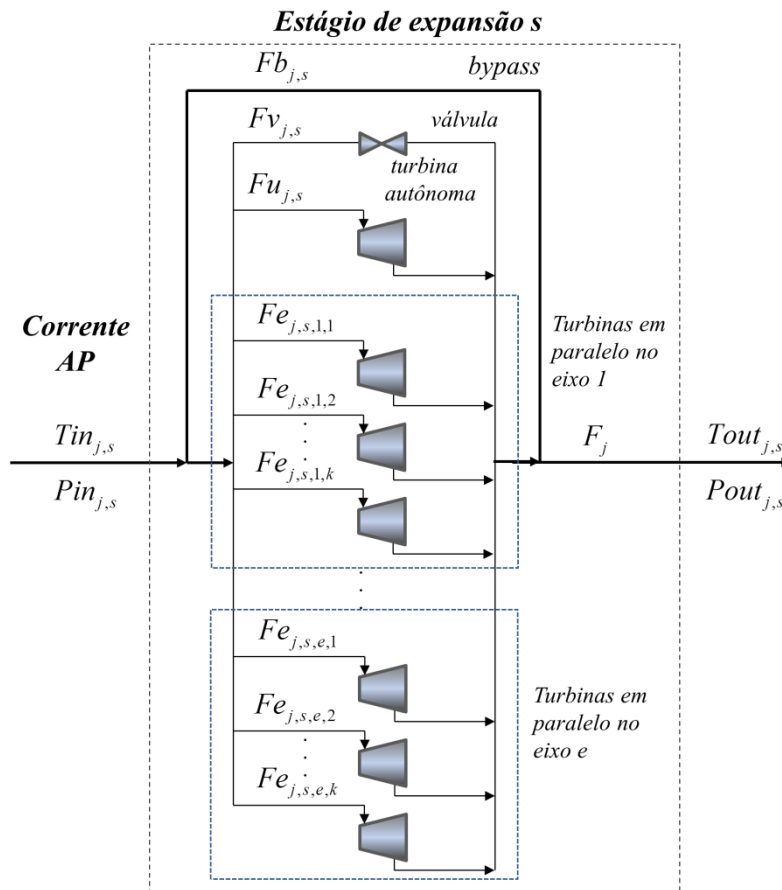


Figura 4.2. Superestrutura da RTT para o estágio s de expansão.

Neste trabalho, a integração térmica é obtida através da síntese simultânea da RTC, baseada na superestrutura de Yee & Grossmann (1990), considerando-se a troca de calor entre correntes quentes e frias em vários estágios e a possibilidade de divisão de correntes, e assumindo-se coeficientes de transferência de calor constantes e mistura isotérmica. Adicionalmente, aquecedores e resfriadores são alocados nos extremos de saída das correntes da RTC. No entanto, as correntes quentes e frias estão ligados à RTT, de tal forma que a troca de calor ocorra entre os estágios de compressão e expansão. Em consequência, as temperaturas de entrada e de saída das correntes da RTC são variáveis desconhecidas que devem ser otimizadas. Este fato confere um maior grau de complexidade ao modelo.

O processo de integração de calor é inteiramente governado pela diferença de temperatura das correntes que compõem a RTC, enquanto que nenhuma força motriz atua sobre a RTT. Deve-se enfatizar que na síntese de RTTs com recuperação de calor, as

temperaturas bem como as pressões das correntes desempenham um papel crítico durante o projeto da rede. Como o trabalho de compressão e, portanto, a eficiência são favorecidos por baixas temperaturas de entrada, o resfriamento das correntes ocorre entre os estágios de compressão. Em outras palavras, as correntes BP são consideradas como correntes quentes para a integração de calor na RTC. Do mesmo modo, o trabalho de expansão e, conseqüentemente, a eficiência é favorecida por altas temperaturas de entrada, de modo que o aquecimento de correntes ocorre entre duas etapas sucessivas de expansão. Desse modo, as correntes AP são tratadas como correntes frias na síntese da RTC.

A síntese simultânea de RTTs com a integração de calor, resulta em um modelo altamente complexo devido à exigência para otimizar todos os parâmetros relacionados com a duas redes—RTT e RTC—de forma síncrona. No que diz respeito ao projeto da RTT, as dificuldades estão relacionadas à garantia a igualdade de pressão de saída de todas as subcorrentes nos estágios de compressão e expansão. Pela razão de que as correntes com diferentes pressões não podem ser misturadas, ao contrário do que acontece na RTC, na qual pode ser assumido a mistura isotérmica. Além disso, os compressores e turbinas de estágio único em paralelo partilham o mesmo eixo SSTC e, portanto, devem funcionar corretamente para garantir vazões iguais.

Este é um processo extremamente difícil, visto que as operações com equipamentos de manipulação de pressão resultam em funções altamente não-lineares da temperatura, pressão, capacidade calorífica e eficiência do processo. É importante ressaltar que o trabalho mecânico é uma função não-linear da pressão de fluxo, embora seja uma função linear da diferença de temperatura. Ademais, as novas variáveis desconhecidas para a síntese da RTC—em que as temperaturas de saída da rede de calor (RTC) devem satisfazer as temperaturas de entrada da RTT nas etapas de expansão e de compressão, e vice-versa—a não-linearidade inerente no cálculo da temperatura de aproximação, e as funções para estimativa de custos são outros fatores que aumentam ainda mais a complexidade do modelo. Por simplificação, o modelo do gás ideal é usado para descrever o comportamento termodinâmico dos gases reais. Além disso, um fator de eficiência isentrópico é considerado para ajustar inevitáveis perdas de eficiência de equipamentos inerentes a processos reais.

O modelo de PNLMI proposto para síntese de RTTs com integração de calor de correntes é apresentado na próxima seção.

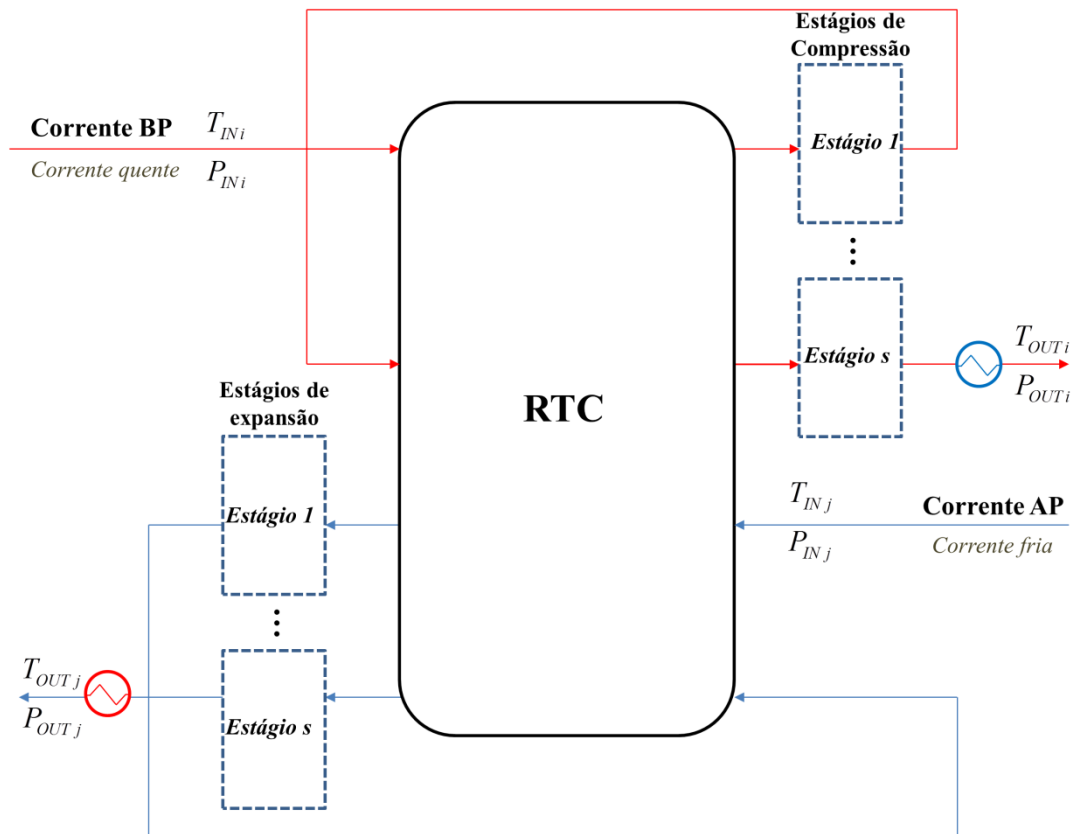


Figura 4.3. Superestrutura multi-estágio para duas correntes na síntese da RTT, na qual a RTC aparece em destaque.

4.4 Modelo de Programação Matemática

O modelo matemático é apresentado nas seções a seguir, em que a superestrutura da RTT é gerada de acordo com os seguintes passos:

4.4.1 Definição de Índices

A definição dos seguintes índices é necessária para o desenvolvimento do modelo:

$$\begin{aligned}
 AP &= \{j / j = 1, 2, \dots, AP \text{ são correntes à alta pressão}\} \\
 BP &= \{i / i = 1, 2, \dots, BP \text{ são correntes à baixa pressão}\} \\
 E &= \{e / e = 1, 2, \dots, E \text{ são o número de eixos SSTC}\} \\
 S &= \{s / s = 1, 2, \dots, S \text{ são o número de estágios na RTT}\} \\
 K &= \{k / k = 1, 2, \dots, K \text{ são o número de divisões de correntes na RTT}\}
 \end{aligned}$$

A escolha do número e de unidades de eixos SSTC, bem como do número de estágios s de compressão e expansão na RTT é arbitrária. No entanto, o número de estágios deve ser escolhido de modo que a taxa de compressão máxima permita atingir a temperatura de saída desejada. Deve-se enfatizar que, quanto maior for o número de eixos e o número de estágios, maior será o problema a ser resolvido. Recomenda-se a utilização de um máximo de três equipamentos em paralelo em cada estágio (i.e., $k = 3$), a fim de evitar equipamentos muito pequenos.

4.4.2 Restrições Lógicas

A seguinte definição de variáveis binárias é necessária para promover a seleção entre os equipamentos que irão compor a RTT:

$$\begin{aligned}
 y_{i,s,e,k} &= \begin{cases} 1 & \text{se a corrente } i \text{ usa o compressor do eixo } e \text{ no estágio } s \text{ na divisão } k \\ 0 & \text{caso contrário} \end{cases} \\
 & i \in BP, s \in S, e \in E, k \in K \\
 y_{j,s,e,k} &= \begin{cases} 1 & \text{se a corrente } j \text{ usa a turbina do eixo } e \text{ no estágio } s \text{ na divisão } k \\ 0 & \text{caso contrário} \end{cases} \\
 & j \in AP, s \in S, e \in E, k \in K \\
 y_{i,s}^U &= \begin{cases} 1 & \text{se a corrente } i \text{ usa o compressor utilitário no estágio } s \\ 0 & \text{caso contrário} \end{cases} \quad i \in BP, s \in S \\
 y_{j,s}^U &= \begin{cases} 1 & \text{se a corrente } j \text{ usa a turbina utilitária no estágio } s \\ 0 & \text{caso contrário} \end{cases} \quad j \in AP, s \in S \\
 y_{j,s}^V &= \begin{cases} 1 & \text{se a corrente } j \text{ usa a válvula no estágio } s \\ 0 & \text{caso contrário} \end{cases} \quad \forall j \in AP, s \in S
 \end{aligned}$$

Para simplificar o modelo, as variáveis binárias auxiliares $y_{i,s,e}^a$ e $y_{j,s,e}^a$ são definidas para promover a seleção de compressores e turbinas, respectivamente, no eixo SSTC independente da divisão k :

$$y_{i,s,e}^a = \begin{cases} 1 & \text{se a corrente } i \text{ usa o compressor no eixo } e \text{ no estágio } s \\ 0 & \text{caso contrário} \end{cases} \quad i \in BP, s \in S, e \in E$$

$$y_{j,s,e}^a = \begin{cases} 1 & \text{se a corrente } j \text{ usa a turbina no eixo } e \text{ no estágio } s \\ 0 & \text{caso contrário} \end{cases} \quad j \in AP, s \in S, e \in E$$

É conveniente introduzir algumas relações lógicas para garantir apenas as alternativas viáveis e, ao mesmo tempo, restringir o espaço de busca para evitar soluções subótimas ou soluções sem significado físico:

As variáveis binárias $y_{i,s,e,k}$ ($y_{j,s,e,k}$) e $y_{i,s,e}^a$ ($y_{j,s,e}^a$) estão relacionadas de modo que se uma variável existe, a outra também deverá existir (Eq. (4.1)–(4.4)). Em outras palavras, se houver pelo menos um compressor (turbina) no eixo e na divisão k , em um estágio s , então existirá pelo menos um compressor (turbina) sobre o mesmo eixo e no estágio s . Ou ainda, se $y_{i,s,e,k} = 1$ (e/ou $y_{j,s,e,k} = 1$) então $y_{i,s,e}^a = 1$ (e/ou $y_{j,s,e}^a = 1$).

$$1 - y_{i,s,e,k} + y_{i,s,e}^a \geq 1 \quad i \in BP, s \in S, e \in E, k \in K \quad (4.1)$$

$$1 - y_{i,s,e}^a + \sum_{k=1}^K y_{i,s,e,k} \geq 1 \quad i \in BP, s \in S, e \in E, 1 \leq k \leq K \quad (4.2)$$

$$1 - y_{j,s,e,k} + y_{j,s,e}^a \geq 1 \quad j \in AP, s \in S, e \in E, k \in K \quad (4.3)$$

$$1 - y_{j,s,e}^a + \sum_{k=1}^K y_{j,s,e,k} \geq 1 \quad j \in AP, s \in S, e \in E, 1 \leq k \leq K \quad (4.4)$$

Em cada estágio de manipulação de pressão, compressores e turbinas autônomos (utilitários) podem ser utilizados. Este tipo de equipamento pode operar em multi-estágio ou em estágio único. Nas etapas de expansão, válvulas também podem ser usadas para substituir turbinas. É importante notar que devido à capacidade das turbinas de recuperar mais energia

em comparação com a expansão através de válvulas, esses dois tipos de expansores não podem coexistir no mesmo estágio. Assim, em um estágio de expansão podem existir uma turbina de estágio único (recomendado no máximo três em paralelo) associada ao eixo SSTC, e/ou uma turbina autônoma, ou uma válvula, ou o *bypass*. De forma análoga, em um estágio de compressão pode existir um compressor de fase única (recomendado no máximo três em paralelo) associado ao eixo SSTC, e/ou um compressor independente (autônomo), ou o *bypass*. Para permitir a seleção do *bypass* em um estágio, as seguintes variáveis binárias são definidas:

$$y_{i,s}^B = \begin{cases} 1 & \text{se a corrente } i \text{ passa por } \textit{bypass} \text{ no estágio } s \\ 0 & \text{caso contrário} \end{cases} \quad i \in BP, s \in S$$

$$y_{j,s}^B = \begin{cases} 1 & \text{se a corrente } j \text{ passa por } \textit{bypass} \text{ no estágio } s \\ 0 & \text{caso contrário} \end{cases} \quad j \in AP, s \in S$$

Obviamente, se a corrente AP ou a corrente BP passar por um *bypass* no estágio s , então nenhum equipamento poderá ser atribuído a este estágio. Como todas as subcorrentes devem ter a mesma pressão no final de um estágio, um *bypass* parcial não poderá existir.

Para cada corrente BP, as próximas relações lógicas são usadas para promover a seleção entre o *bypass* e o compressor utilitário (Eq. (4.5)), e para definir a existência ou não de compressores no eixo SSTC caso não exista o *bypass* (Eq. (4.6)). Assim, a Eq. (4.5) indica que para cada corrente i (BP) em cada etapa s , o *bypass* ou compressor utilitário, ou nenhum deles, devem ser selecionados.

$$y_{i,s}^B + y_{i,s}^U \leq 1 \quad i \in BP, s \in S \quad (4.5)$$

$$1 - y_{i,s}^B + 1 - y_{i,s,e}^a \geq 1 \quad i \in BP, s \in S, e \in E \quad (4.6)$$

Da mesma forma, para cada corrente AP, as relações lógicas a seguir são usadas para garantir a seleção entre o *bypass*, a turbina utilitária, e a válvula (Eq. (4.7)). A Eq. (4.8) define a existência ou não de turbinas associadas ao eixo SSTC caso não exista o *bypass*.

$$y_{j,s}^B + y_{j,s}^U + y_{j,s}^V \leq 1 \quad j \in AP, s \in S \quad (4.7)$$

$$1 - y_{j,s}^B + 1 - y_{j,s,e}^a \geq 1 \quad j \in AP, s \in S, e \in E \quad (4.8)$$

Claramente, se o *bypass* ocorrer em um estágio s , também ocorrerá em todas as etapas subsequentes conforme Eq. (4.9) e Eq. (4.10). Este fato garante que o *bypass* ocorra somente se a corrente já atingiu a correspondente pressão de saída desejada no processo.

$$1 - y_{i,s}^B + y_{i,s+1}^B \geq 1 \quad i \in BP, s \in S \quad (4.9)$$

$$1 - y_{j,s}^B + y_{j,s+1}^B \geq 1 \quad j \in AP, s \in S \quad (4.10)$$

O modelo permite a alocação de até k compressores e/ou turbinas em paralelo em cada eixo SSTC. Neste caso, se a divisão k é selecionada então a divisão $k-1$ deverá ser selecionada também, ou seja:

$$1 - y_{i,s,e,k} + y_{i,s,e,k-1} \geq 1 \quad i \in BP, s \in S, e \in E, k \in K \quad (4.11)$$

$$1 - y_{j,s,e,k} + y_{j,s,e,k-1} \geq 1 \quad j \in AP, s \in S, e \in E, k \in K \quad (4.12)$$

A superestrutura da RTT permite o uso de e unidades de eixos SSTC. Assim, a possibilidade de múltiplas soluções iguais (i.e., selecionar apenas o eixo 1 ou somente o eixo 2, com apenas a mesma atribuição de compressores e turbinas) devem ser evitadas.

Portanto, considerando-se o conjunto ordenado e , o eixo e só deverá ser selecionado se o eixo anterior $e-1$ já foi anteriormente escolhido, ou seja:

$$1 - y_{i,s,e}^a + \sum_{i=1}^{BP} \sum_{s=1}^S y_{i,s,e-1}^a + \sum_{j=1}^{AP} \sum_{s=1}^S y_{j,s,e-1}^a \geq 1 \quad 1 \leq i \leq BP, 1 \leq j \leq AP, s \in S, e \in E \quad (4.13)$$

$$1 - y_{j,s,e}^a + \sum_{i=1}^{BP} \sum_{s=1}^S y_{i,s,e-1}^a + \sum_{j=1}^{AP} \sum_{s=1}^S y_{j,s,e-1}^a \geq 1 \quad 1 \leq i \leq BP, 1 \leq j \leq AP, s \in S, e \in E \quad (4.14)$$

Finalmente, cada estágio s de compressão e expansão deverá ser selecionado apenas uma vez:

$$y_{i,s}^B + y_{i,s}^U + \sum_{e=1}^E y_{i,s,e}^a = 1 \quad i \in BP, s \in S, 1 \leq e \leq E \quad (4.15)$$

$$y_{j,s}^B + y_{j,s}^V + y_{j,s}^U + \sum_{e=1}^E y_{j,s,e}^a = 1 \quad j \in AP, s \in S, 1 \leq e \leq E \quad (4.16)$$

4.4.3 Estágios de Compressão e Expansão

Entre os estágios de compressão e expansão, a pressão das correntes é mantida inalterada devido à suposição de que não há perdas de pressão nos trocadores de calor. Em cada um dos estágios da RTT, as pressões de entrada e de saída de todas as correntes estão limitadas entre o valor máximo e mínimo das pressões de entrada e saída na superestrutura da RTT. Além disso, a pressão de entrada no primeiro estágio é sempre igual à pressão de entrada na RTT. Da mesma maneira, a pressão de saída no último estágio é sempre igual à pressão na saída da RTT.

Considerando-se P_{IN} ($\forall i \in BP, j \in AP$) e P_{OUT} ($\forall i \in BP, j \in AP$), como as pressões de entrada e saída, respectivamente, das correntes BP e AP na RTT. E, P_{in} ($\forall i \in BP, j \in AP, s \in S$) e P_{out} ($\forall i \in BP, j \in AP, s \in S$), respectivamente, como as pressões de entrada e de saída das correntes em cada um dos estágios de manipulação de pressão. A associação das pressões de entrada e de saída das correntes na RTT é assegurada pelas equações Eq. (4.17)–(4.20).

$$P_{INi} = Pin_{i,1} \quad i \in BP, s = 1 \quad (4.17)$$

$$Pout_{i,S} = P_{OUTi} \quad i \in BP, s = S \quad (4.18)$$

$$P_{INj} = Pin_{j,1} \quad j \in AP, s = 1 \quad (4.19)$$

$$Pout_{j,S} = P_{OUTj} \quad j \in AP, s = S \quad (4.20)$$

No qual,

$$MIN[P_{IN}, P_{OUT}] \leq Pin \leq MAX[P_{IN}, P_{OUT}] \quad \forall i \in BP, j \in AP, s \in S$$

$$MIN[P_{IN}, P_{OUT}] \leq Pout \leq MAX[P_{IN}, P_{OUT}] \quad \forall i \in BP, j \in AP, s \in S$$

As pressões das correntes na RTT são conectadas de modo que, para cada corrente AP (BP), a pressão de saída de cada estágio de expansão (compressão) é igual à pressão de entrada no estágio seguinte:

$$Pout_{i,s} = Pin_{i,s+1} \quad i \in BP, 1 \leq s < S \quad (4.21)$$

$$Pout_{j,s} = Pin_{j,s+1} \quad j \in AP, 1 \leq s < S \quad (4.22)$$

À entrada de cada estágio da RTT, as correntes são divididas em subcorrentes que devem passar através dos distintos equipamentos que compõem o estágio em questão. As correntes são reformadas para o seu estado original, por meio de misturadores no final de cada estágio. Assim, F_i e F_j são as vazões totais das correntes BP e AP, respectivamente, na RTT. Os balanços de massa nos pontos de mistura da entrada e/ou saída de um estágio são tais que:

$$F_i = Fu_{i,s} + Fb_{i,s} + \sum_{e=1}^E \sum_{k=1}^K Fe_{i,s,e,k} \quad i \in BP, s \in S, 1 \leq e \leq E, 1 \leq k \leq K \quad (4.23)$$

$$F_j = Fv_{j,s} + Fu_{j,s} + Fb_{j,s} + \sum_{e=1}^E \sum_{k=1}^K Fe_{j,s,e,k} \quad j \in AP, s \in S, 1 \leq e \leq E, 1 \leq k \leq K \quad (4.24)$$

No qual, Fu e Fb correspondem às vazões das subcorrentes AP e BP, através dos utilitários (i.e., compressores autônomos para estágios de compressão, e turbinas autônomas para estágios de expansão), e o fluxo através do *bypass*, respectivamente. Fv é a taxa de fluxo através de válvulas para as fases de expansão, e Fe é a taxa de fluxo através de compressores/turbinas associados à uma unidade de eixo SSTC. Todas estas vazões devem estar limitadas a um valor máximo igual ao fluxo de entrada da corrente AP ou BP na RTT, i.e., $Fv_{j,s} \leq F_j$, $Fu_{j,s} \leq F_j$, $Fe_{j,s,e,k} \leq F_j$, $Fb_{j,s} \leq F_j$, $Fu_{i,s} \leq F_i$, $Fe_{i,s,e,k} \leq F_i$, e $Fb_{i,s} \leq F_i$.

A temperatura das correntes é um fator especialmente crítico em processos de compressão e expansão. Em adição aos fatores físicos que limitam a temperatura em compressores e turbinas—como a seleção dos materiais de construção para evitar danos—a recuperação de pressão é fortemente dependente da temperatura das correntes. Em consequência, a eficiência de uma turbina aumenta enquanto a eficiência do compressor diminui com o aumento da temperatura operacional. Com essas considerações, a operação de turbinas e compressores dentro de uma faixa limitada de temperatura é considerada neste modelo.

Além do balanço de massa, o balanço de energia através dos misturadores é necessário, devido as divisões das correntes em cada etapa. No entanto, este balanço energético é desnecessário em etapas de compressão, se eficiência for a mesma para todos os equipamentos em um dado estágio. Em contraste, nas fases de expansão, mesmo que a pressão de saída seja a mesma para todos os equipamentos, as temperaturas de saída são distintas, o que deve ser levado em consideração (i.e., a expansão através de uma válvula e da turbina com a mesma pressão de saída geram diferentes temperaturas).

Considerando-se $Tval_{j,s}$ como a temperatura de saída da válvula, $Tturb_{j,s}$ como a temperatura de saída da utilidade ou turbina do eixo SSTC, e $Tin_{j,s}$ como a temperatura em caso de *bypass*, Tin ($\forall i \in BP, j \in AP, s \in S$) e $Tout$ ($\forall i \in BP, j \in AP, s \in S$) são definidos como as temperaturas de entrada e de saída das correntes, respectivamente, de cada estágio da RTT. Como o valor da capacidade calorífica Cp é a mesmo para todas as correntes, este fator pode ser eliminado da equação.

$$F_j \cdot Tout_{j,s} = Fb_{j,s} \cdot Tin_{j,s} + Fv_{j,s} \cdot Tval_{j,s} + \left(Fu_{j,s} + \sum_{e=1}^E \sum_{k=1}^K Fe_{j,s,e,k} \right) \cdot Tturb_{j,s} \quad j \in AP, s \in S, 1 \leq e \leq E, 1 \leq k \leq K \quad (4.25)$$

No qual,

$$T_{\min} \leq Tin_{j,s} \leq T_{\max}, T_{\min} \leq Tout_{j,s} \leq T_{\max}, T_{\min} \leq Tval_{j,s} \leq T_{\max}, \text{ e } T_{\min} \leq Tturb_{j,s} \leq T_{\max}.$$

Em estágios de compressão, espera-se o aumento das pressões e temperaturas das correntes:

$$Pout_{i,s} \geq Pin_{i,s} \quad i \in BP, s \in S \quad (4.26)$$

$$Tout_{i,s} \geq Tin_{i,s} \quad i \in BP, s \in S \quad (4.27)$$

Em fases de expansão, as pressões e as temperaturas das correntes devem diminuir:

$$Pout_{j,s} \leq Pin_{j,s} \quad j \in AP, s \in S \quad (4.28)$$

$$Tout_{j,s} \leq Tin_{j,s} \quad j \in AP, s \in S \quad (4.29)$$

Em cada estágio da superestrutura da RTT, a pressão de saída da corrente é limitada a uma razão de compressão máxima, ou seja:

$$Pout_{i,s} \leq CR_{\max} Pin_{i,s} \quad i \in BP, s \in S \quad (4.30)$$

Os equipamentos para a compressão e expansão são responsáveis pelas variações de pressão e de temperatura das correntes, mesmo se apenas uma pequena variação na temperatura for gerada, como no caso de válvulas isentálpicas. Em um estágio de

compressão, a temperatura de saída é igual para todos os compressores. Neste caso, um *bypass* pode ser considerado como um compressor em que o trabalho seja igual a zero. Considerando-se uma operação de compressão adiabática de um gás ideal, na qual η_i é a eficiência isentrópica e γ é a razão de capacidade calorífica:

$$T_{out_{i,s}} = T_{in_{i,s}} \left[1 + \eta_i \left\{ \left(P_{out_{i,s}} / P_{in_{i,s}} \right)^{(\gamma-1/\gamma)} - 1 \right\} \right] \quad i \in BP, s \in S \quad (4.31)$$

Da mesma forma, em um processo adiabático, a temperatura de saída é a mesma para todas as turbinas de um estágio de expansão.

$$T_{turb_{j,s}} = T_{in_{j,s}} \left[1 + \eta_j \left\{ \left(P_{out_{j,s}} / P_{in_{j,s}} \right)^{(\gamma-1/\gamma)} - 1 \right\} \right] \quad j \in AP, s \in S \quad (4.32)$$

Para modelar a expansão de correntes AP através de válvulas, o processo isentálpico é considerado em que μ_j é o coeficiente de expansão de Joule-Thompson.

$$T_{val_{j,s}} = T_{in_{j,s}} + \mu_j (P_{out_{j,s}} - P_{in_{j,s}}) \quad j \in AP, s \in S \quad (4.33)$$

Considerando-se $Wu_{i,s}$ como o trabalho de compressão das correntes BP consumido pelos compressores independentes no estágio s , e $We_{i,s,e,k}$ como o trabalho de compressão da corrente BP consumido em um eixo SSTC no estágio s , e divisão k . Para um processo adiabático, a energia requerida pelos compressores utilitários, e a energia requerida pelos compressores alocados nos eixos SSTC são funções lineares da temperatura de entrada e de saída em cada etapa de compressão:

$$Wu_{i,s} = Fu_{i,s} Cp_i (T_{out_{i,s}} - T_{in_{i,s}}) \quad i \in BP, s \in S \quad (4.34)$$

$$We_{i,s,e,k} = Fe_{i,s,e,k} Cp_i (Tout_{i,s} - Tin_{i,s}) \quad i \in BP, s \in S, e \in E, k \in K \quad (4.35)$$

Analogamente, $Wu_{j,s}$ e $We_{j,s,e,k}$ podem ser definidos como a energia gerada por turbinas utilitárias e a energia gerada por turbinas associadas aos eixos SSTC, respectivamente, para correntes AP em um estágio s de expansão da RTT:

$$Wu_{j,s} = Fu_{j,s} Cp_j (Tin_{j,s} - Tturb_{j,s}) \quad j \in AP, s \in S \quad (4.36)$$

$$We_{j,s,e,k} = Fe_{j,s,e,k} Cp_j (Tin_{j,s} - Tturb_{j,s}) \quad j \in AP, s \in S \quad (4.37)$$

Como sugerido por Couper et al. (2010), o trabalho de compressão e o trabalho de expansão devem ser restringidos entre um limite inferior e um limite superior: $100 \leq Wu_{j,s} \text{ (kW)} \leq 1500$, $100 \leq We_{j,s} \text{ (kW)} \leq 1500$, $18 \leq Wu_{i,s} \text{ (kW)} \leq 950$ e $18 \leq We_{i,s} \text{ (kW)} \leq 950$.

Se o *bypass* existe em um estágio, então as temperaturas e pressões de entrada e de saída das correntes devem ser iguais. Para garantir isso, a seguinte formulação em programação disjuntiva generalizada (PDG), e reformulação Big-M são consideradas.

Portanto, para cada estágio de compressão a seguinte de disjunção é usada:

$$\left[\begin{array}{c} y_{i,s}^B \\ Tout_{i,s} = Tin_{i,s} \\ Pout_{i,s} = Pin_{i,s} \end{array} \right]$$

$$Tin_{i,s} - Tout_{i,s} \leq M_{1i,s} (1 - y_{i,s}^B) \quad (4.38)$$

$$Tin_{i,s} - Tout_{i,s} \geq -M_{1i,s} (1 - y_{i,s}^B) \quad (4.39)$$

$$Pin_{i,s} - Pout_{i,s} \leq M_{2i,s} (1 - y_{i,s}^B) \quad (4.40)$$

$$Pin_{i,s} - Pout_{i,s} \geq -M_{2i,s} (1 - y_{i,s}^B) \quad (4.41)$$

No qual, $M_{1i,s} = Tin_{i,s}^{UP} - Tout_{i,s}^{LO}$ e $M_{2i,s} = Pin_{i,s}^{UP} - Pout_{i,s}^{LO}$.

Note-se que M é um parâmetro positivo suficientemente grande para validar a formulação (Eq. (4.38)–(4.41)). Contudo, este parâmetro deve ser tão pequeno quanto possível. Neste caso, o parâmetro M_1 é calculado como a diferença entre o limite superior para a temperatura de entrada no estágio e o limite inferior para a temperatura de saída do estágio. Da mesma forma, o parâmetro M_2 é calculado como a diferença entre o limite superior para a pressão de entrada no estágio e o limite inferior para a pressão de saída no estágio. As disjunções para estágios de expansão e consequentes reformulações Big-M são análogas ao equacionamento para os estágios de compressão, por essa razão, elas serão omitidas neste trabalho.

Claramente, se o *bypass* não existir em um estágio de compressão e/ou expansão, o fluxo das correntes através do *bypass* deve ser zero:

$$Fb_{i,s} \leq Fb_{i,s}^{UP} \cdot y_{i,s}^B \quad i \in BP, s \in S \quad (4.42)$$

$$Fb_{j,s} \leq Fb_{j,s}^{UP} \cdot y_{j,s}^B \quad j \in AP, s \in S \quad (4.43)$$

Do mesmo modo, se não houver nenhuma válvula em um estágio de expansão, a vazão através da válvula deve ser zero:

$$Fv_{j,s} \leq Fv_{j,s}^{UP} \cdot y_{j,s}^V \quad j \in AP, s \in S \quad (4.44)$$

Caso contrário, deve-se definir uma queda mínima de pressão e uma vazão mínima, para evitar equipamentos com capacidades muito pequenas.

$$Pin_{j,s} - Pout_{j,s} \geq P_{\min} - (Pin_{j,s}^{UP} - Pout_{j,s}^{LO}) \cdot (1 - y_{j,s}^V) \quad j \in AP, s \in S \quad (4.45)$$

$$Fv_{j,s} \geq F_{\min j} - F_j (1 - y_{j,s}^V) \quad j \in AP, s \in S \quad (4.46)$$

Pela mesma razão, se existirem em um estágio, os compressores e turbinas autônomos são forçados a realizar um trabalho mínimo.

$$Wu_{i,s} \geq W_{\min} - Wu_{i,s}^{UP} (1 - y_{i,s}^U) \quad i \in BP, s \in S \quad (4.47)$$

$$Wu_{j,s} \geq W_{\min} - Wu_{j,s}^{UP} (1 - y_{j,s}^U) \quad j \in AP, s \in S \quad (4.48)$$

Se estas turbinas e compressores independentes não existirem em seus respectivos estágios de compressão e expansão, o fluxo através destes equipamento e o trabalho realizado ou consumido devem ser zero:

$$Fu_{i,s} \leq Fu_{i,s}^{UP} \cdot y_{i,s}^U \quad i \in BP, s \in S \quad (4.49)$$

$$Wu_{i,s} \leq Wu_{i,s}^{UP} \cdot y_{i,s}^U \quad i \in BP, s \in S \quad (4.50)$$

$$Fu_{j,s} \leq Fu_{j,s}^{UP} \cdot y_{j,s}^U \quad j \in AP, s \in S \quad (4.51)$$

$$Wu_{j,s} \leq Wu_{j,s}^{UP} \cdot y_{j,s}^U \quad j \in AP, s \in S \quad (4.52)$$

O mesmo ocorre com os compressores e turbinas associados aos eixos SSTC. Se o equipamento de manipulação de pressão existir em um estágio, este deverá realizar um trabalho mínimo de compressão ou expansão:

$$We_{i,s,e,k} \geq W_{\min} - We_{i,s,e,k}^{UP} (1 - y_{i,s,e,k}) \quad i \in BP, s \in S, e \in E, k \in K \quad (4.53)$$

$$We_{j,s,e,k} \geq W_{\min} - We_{j,s,e,k}^{UP} (1 - y_{j,s,e,k}) \quad j \in AP, s \in S, e \in E, k \in K \quad (4.54)$$

Caso contrário, se não existirem compressores e expansores em um estágio, as vazões através destes equipamentos e o trabalho realizado devem ser nulos:

$$Fe_{i,s,e,k} \leq Fe_{i,s,e,k}^{UP} \cdot y_{i,s,e,k} \quad i \in BP, s \in S, e \in E, k \in K \quad (4.55)$$

$$Fe_{j,s,e,k} \leq Fe_{j,s,e,k}^{UP} \cdot y_{j,s,e,k} \quad j \in AP, s \in S, e \in E, k \in K \quad (4.56)$$

$$We_{i,s,e,k} \leq We_{i,s,e,k}^{UP} \cdot y_{i,s,e,k} \quad i \in BP, s \in S, e \in E, k \in K \quad (4.57)$$

$$We_{j,s,e,k} \leq We_{j,s,e,k}^{UP} \cdot y_{j,s,e,k} \quad j \in AP, s \in S, e \in E, k \in K \quad (4.58)$$

4.4.4 Balanço de Energia Global para cada Eixo SSTC

As turbinas associados aos eixos SSTC produzem energia, enquanto que os compressores alocados nos eixos SSTC consomem energia. O motor auxiliar é alocado no eixo para suprir qualquer eventual escassez de energia (eletricidade), e o gerador é colocado para converter qualquer excesso de energia em eletricidade, que pode ser usado em outras partes da planta, proporcionando economia de energia para o processo.

O trabalho total de expansão produzido em uma unidade de eixo SSTC deve ser igual ao trabalho total de compressão consumido em cada eixo unitário. Neste contexto, o balanço de energia global em cada unidade de eixo SSTC é expressa pela Eq. (4.59).

$$Wg_e + \sum_{i=1}^{BP} \sum_{s=1}^S \sum_{k=1}^K We_{i,s,e,k} = Wm_e + \sum_{j=1}^{AP} \sum_{s=1}^S \sum_{k=1}^K We_{j,s,e,k} \quad e \in E \quad (4.59)$$

4.4.5 Integração Térmica – Síntese Simultânea da RTC

Para promover a integração de calor das correntes de processo entre cada etapa de compressão e expansão, a síntese da RTC é realizada simultaneamente com o projeto da

RTT. A formulação é baseada na superestrutura de síntese de RTCs desenvolvido por Yee & Grossmann (1990), e o modelo de PNLMI proposto pelos mesmos autores (consulte o Apêndice B).

A formulação matemática para a síntese da RTC é centrada nas ideias-chave a seguir:

- I. A superestrutura da RTC apresenta t estágios de troca de calor divididos de acordo com a temperatura no ponto de mistura. Em cada um desses estágios, postula-se a possibilidade de troca de calor entre todas as correntes quentes e todas as correntes frias. Para este efeito, as correntes à alta pressão (AP) são considerados como correntes frias, e as correntes à baixa pressão (BP) são tratadas como correntes quentes na RTC. Uma vez que o processo de expansão é favorecido por temperaturas mais elevadas, enquanto que o processo de compressão é favorecido pela redução da temperatura das correntes.
- II. O balanço de energia nos pontos de mistura, ao final de cada estágio, pode ser eliminado da RTC, como resultado da consideração de mistura isotérmica das correntes de processo. Em cada um dos estágios de troca de calor, as correntes são divididas de acordo com o número máximo de possíveis trocas térmicas (i.e., o maior número entre as correntes quentes e frias), porém a temperatura de saída deve ser a mesma para cada subcorrente.
- III. A troca de calor ocorre entre os estágios de expansão e compressão. Consequentemente, as temperaturas de entrada e saída da RTC devem estar conectadas com as temperaturas oriundas de cada estágio da RTT. Desta forma, as temperaturas de entrada das correntes na RTC correspondem às temperaturas de saída dos estágios da RTT e, por outro lado, as temperaturas de saída da RTC correspondem às temperaturas de entrada dos estágios da RTT (ver Figura 4.3). Devido a este fato, todas as temperaturas intermediárias das correntes na entrada e saída da RTC são variáveis desconhecidas que devem ser otimizados.

- IV. Para garantir que as temperaturas alvo desejadas no processo possam ser alcançadas, aquecedores são colocados nos extremos das correntes frias e resfriadores são alocados no extremo de correntes quentes.

- V. Devido à conexão entre as temperaturas da RTT e RTC, cada corrente proveniente de um estágio de compressão e expansão deve ser considerada como uma nova corrente na RTC. Consequentemente, o número de correntes frias na RTC é sempre igual ao número de correntes AP multiplicado pelo número de estágios de expansão, somado a duas correntes que correspondem a correntes de entrada—também é considerada a troca de calor antes da primeira etapa da RTC—e a corrente de saída do último estágio da RTT, que deve passar por um aquecedor. Desta forma, duas correntes AP em quatro estágios de expansão da RTT, por exemplo, originam dez correntes frias na RTC. O número de correntes quentes pode ser calculada de forma análoga.

Por simplificação, o número de estágios na RTC é considerado igual ao número de estágios na RTT. Claramente, a seleção do número de estágios é arbitrária e deve ser baseada no fato de que, em geral, uma rede ideal não precisa de uma grande quantidade de equipamentos. Note-se que um número muito grande de estágios aumenta a complexidade do modelo. As equações de projeto da RTC são apresentados no Apêndice B.

4.4.6 Função Objetivo

O custo total da RTT com integração térmica consiste na soma entre o custo total da RTT e o custo total da RTC. O custo total anualizado de ambas as redes, RTT e RTC, é composto pelo custo de capital de investimento em todas as unidades das respectivas redes, bem como por despesas operacionais. Desta forma, o cálculo do custo de capital total inclui o custo de válvulas, compressores do eixo SSTC, compressores autônomos, turbinas do eixo SSTC, turbinas autônomas, motores auxiliares e geradores de energia para a RTT, bem como trocadores de calor, aquecedores e resfriadores para a RTC.

O cálculo das despesas operacionais abrange as despesas com utilidades térmicas (aquecimento e resfriamento) e serviços elétricos. Considera-se, ainda, a venda de energia elétrica gerada por turbinas autônomas e geradores para outros setores do processo. A função objetivo é expressa pela equação Eq. (4.60).

$$C_{total} = C_{total}^{RTT} + C_{total}^{RTC} = C_{capital}^{RTT} + C_{operational}^{RTT} + C_{capital}^{RTC} + C_{operational}^{RTC} \quad (4.60)$$

No qual,

$$C_{capital}^{RTT} = f \cdot \left[\begin{aligned} &F_{BM}^V \cdot \sum_{j=1}^{AP} \sum_{s=1}^S C_{po}^V \cdot y_{j,s}^V + F_{BM}^{TU} \cdot \sum_{j=1}^{AP} \sum_{s=1}^S C_{po}^{TU} + F_{BM}^{CU} \cdot \sum_{i=1}^{BP} \sum_{s=1}^S C_{po}^{CU} + \\ &1.2F_{BM}^{TA} \cdot \sum_{j=1}^{AP} \sum_{s=1}^S \sum_{e=1}^E \sum_{k=1}^K C_{po}^{TA} + 1.2F_{BM}^{CA} \cdot \sum_{i=1}^{BP} \sum_{s=1}^S \sum_{e=1}^E \sum_{k=1}^K C_{po}^{CA} + \\ &F_{BM}^{HM} \cdot \sum_{e=1}^E C_{po}^{HM} + F_{BM}^{GE} \cdot \sum_{e=1}^E C_{po}^{GE} \end{aligned} \right] \quad (4.60a)$$

$$C_{operational}^{RTT} = CE \cdot \left[\sum_{i=1}^{BP} \sum_{s=1}^S Wu_{i,s} + \sum_{e=1}^E Wm_e \right] - CV \cdot \left[\sum_{j=1}^{AP} \sum_{s=1}^S Wu_{j,s} + \sum_{e=1}^E Wg_e \right] \quad (4.60b)$$

$$C_{capital}^{RTC} = f \cdot \left[F_{BM}^{HE} \cdot \sum_{h=1}^H \sum_{c=1}^C \sum_{t=1}^T C_{po}^{HE} + F_{BM}^{Cooler} \cdot \sum_{h=1}^H \sum_{n=1}^N C_{po}^{HE} + F_{BM}^{Heater} \cdot \sum_{m=1}^M \sum_{c=1}^C C_{po}^{HE} \right] \quad (4.60c)$$

$$C_{operational}^{RTC} = CW \cdot \sum_{h=1}^H \sum_{n=1}^N Q_{h,n} + CS \cdot \sum_{m=1}^M \sum_{j=1}^J Q_{m,j} \quad (4.60d)$$

Onde, CE , CV , CW e CS são os parâmetros de custo, respectivamente, para eletricidade, venda de energia elétrica, resfriamento e aquecimento. f é o fator de anualização para o custo de capital definido por Smith (2005). Dado r como a taxa de juros por ano e ny como o número de anos, então:

$$f = \frac{(1+r)^{ny} - 1}{r} \quad (4.61)$$

Nas equações Eq. (4.60a) e Eq. (4.60c), F_{BM} é o fator de correlação para o custo unitário básico do equipamento, em que considera-se os materiais de construção e a pressão operacional do equipamento. C_{po} é o custo básico de uma unidade de equipamento (em US\$) com a pressão de operação próxima às condições ambientais. C_{po} é calculado de acordo com as correlações de Turton et al. (2003) para trocadores de calor, aquecedores, resfriadores e válvulas. Para a estimativa de custos de compressores, turbinas, geradores e motores auxiliares, as correlações de Couper et al. (2010) são utilizadas. Os custos de compressores e turbinas associados aos eixos SSTC são considerados 20% mais elevados do que o mesmo equipamento fora do eixo. Todas as correlações de custos devem ser corrigidas para o ano em questão utilizado-se o índice CEPCI (*Chemical Engineering Plant Cost Index*).

4.5 Aspectos Computacionais

Alguns aspectos computacionais importantes estão relacionados com a solução do modelo apresentado acima. Como mencionado anteriormente, a superestrutura proposta para a síntese de RTT é otimizado com uma formulação de PNLMI. Devido ao seu caráter altamente não-linear e não-convexo, este tipo de problema gera um grande número de soluções locais que, como resultado, podem levar à obtenção de soluções subótimas. Entre os principais métodos desenvolvidos para resolver problemas de PNLMI, destacam-se o algoritmo *Branch and Bound* (BB), ou ramificação e bifurcação, em que subproblemas de PNL são resolvidos em cada nó, e técnicas de decomposição tais como os algoritmos iterativos de decomposição de Benders generalizada (DBG) e método das aproximações exteriores (AE), através da qual subproblemas alternativos de PNL com variáveis binárias fixas, e o problema mestre de PLMI são resolvidos sequencialmente (Grossmann et al., 2000). De acordo com Caballero & Grossmann (2013), todos estes métodos são baseados na resolução de um certo número de subproblemas de mais fácil resolução, obtidos a partir da formulação geral do problema. Além disso, a convexidade das funções é considerada para garantir a convergência para o ótimo global, ou pelo menos, para soluções muito próximas a este valor.

Segundo Grossmann (2002), o método de BB é geralmente atraente quando os subproblemas de PNL são relativamente pequenos, ou quando apenas alguns deles precisam

ser resolvidos. Desta forma, a dificuldade de obtenção de soluções com este método é ampliada com o aumento da complexidade do problema. Como resultado, a superestrutura da RTT proposta neste trabalho é escrita em GAMS (versão 24.0.2) e é resolvida com o *solver* DICOPT. Este *solver* é baseado em extensões do método de AE para resolver problemas de PNLMI, através de estratégias de relaxação do problema mestre. Portanto, o modelo de PNLMI é resolvido por decomposição em subproblemas de PNL e PMI. Qualquer *solver* disponível em GAMS pode ser usado como sub-*solver* para resolver os subproblemas de PNL e PMI. Neste caso, no entanto, os *solvers* CONOPT e CPLEX são escolhidos, respectivamente, para cada um desses problemas.

É importante ressaltar que, embora o algoritmo do *solver* DICOPT contenha provisões para lidar com não-convexidades, a alta não-linearidade do modelo nem sempre garante a solução ótima global para este tipo de problema. Todavia, alguns experimentos numéricos com este modelo mostraram que o acréscimo do número de iterações maiores (i.e., 15), seguido de resolução de problemas de viabilidade que podem surgir a partir de problemas de PNL, permitiram obter boas soluções.

Todos os casos estudados foram resolvidos através de um computador pessoal com um processador Intel Core 2 Duo 2.40 GHz com 3.00 GB RAM em Windows 7 Ultimate. Enfatiza-se que, para a solução do modelo, é essencial que os limites superior e inferior de todas as variáveis estejam bem estabelecidos. Os limites inferior e superior para a pressão, temperatura, vazão mássica, e trabalho são fundamentais para o projeto da RTT, assim como os limites aplicados às variáveis temperaturas, e quotas de troca de calor entre correntes são cruciais para a síntese da RTC.

4.6 Estudos de Casos

Três exemplos foram estudados, considerando-se distintas situações para verificar a acurácia da abordagem proposta quanto à síntese simultânea de RTTs com integração de calor.

Exemplo 4.1. Neste exemplo, a RTT é projetada para permitir que a integração de trabalho ocorra entre duas correntes de alta pressão (HP1 e HP2), e duas correntes de baixa pressão (LP1 e LP2). As correntes HP1 e HP2 são expandidas, respectivamente, a partir de 850 kPa a 100 kPa e 980 kPa a 180 kPa. Enquanto as correntes LP1 e LP2 são submetidas à compressão a partir de um estado inicial de 100 kPa, a um estado final de 520 kPa e 850 kPa, respectivamente. Para a síntese da RTT, considera-se um número máximo de quatro estágios de compressão e quatro estágios de expansão das correntes. A integração térmica entre as correntes de alta e baixa pressão é permitida na RTT, de forma que as correntes de processo são enviadas à RTC para promover a recuperação de calor. Conforme a discussão anterior, como a troca de calor ocorre na entrada e saída da superestrutura da RTT, bem como entre todas os estágios manipulação de pressão, as correntes de saída de cada estágio da RTT estão ligadas às correntes de entrada na RTC. Além disso, todas as temperaturas intermediárias da RTC são variáveis desconhecidas que requerem otimização.

As correntes à alta pressão HP1 e HP2 são consideradas como correntes frias, enquanto que as correntes à baixa pressão LP1 e LP2 são tratadas como correntes quentes para a síntese da RTC. A corrente HP1 origina cinco novas correntes frias (C1–C5), e similarmente, a corrente HP2 dá origem a cinco novas correntes frias (C6–C10) na RTC. A corrente LP1 origina as correntes quentes H1 a H5, e a corrente LP2 dá origem as correntes quentes H6 a H10. Como consequência, a integração de calor ocorre entre dez correntes frias e dez correntes quentes. Para a síntese da RTC, consideram-se quatro estágios de troca de calor e possibilidade de divisão de correntes. As taxas de fluxo e capacidades caloríficas de todas as correntes são constantes conhecidas. Os dados do problema são apresentados na Tabela 4.1. As utilidades quentes e frias estão disponíveis, respectivamente, a 500 K e 288 K. Os coeficientes individuais de transferência de calor (h) para todas as correntes são iguais a 0,1 kW/m²K, e para as utilidades quentes e frias este coeficiente é igual a 1,0 kW/m²K. Ademais, todas as temperaturas intermediárias desconhecidas das correntes são restritas entre 288 K e 600 K. Para calcular o custo de todos os equipamentos, considera-se um fator de custo anualizado $f = 0,18$, o qual corresponde a uma taxa de juros de 10% ao ano durante um período de oito anos.

Neste primeiro exemplo, dois estudos de casos são realizadas com o objetivo de identificar a configuração ótima para a RTT com integração de calor. Em todos os casos, a minimização da função objetivo composta pelo custo total anualizado é avaliada para o projeto da rede.

No caso 1, a RTT é projetada com apenas uma unidade de eixo SSTC. Neste caso, a RTT ótima obtida é composta por duas válvulas, duas turbinas independentes, quatro compressores autônomos, quatro turbinas associadas ao eixo SSTC, e três compressores alocados ao eixo SSTC. Assim, a corrente HP1 passa por três estágios de expansão através de duas turbinas no eixo SSTC (1480,1 kW e 100 kW) dispostas em paralelo, uma válvula, e uma turbina utilitária independente do eixo (848,4 kW). A corrente HP2 é submetida a quatro estágios de expansão através de uma válvula, duas turbinas subsequentes (950 kW e 100 kW) associadas ao eixo SSTC e operando em único estágio, além de uma turbina autônoma (698,3 kW). Ambas as correntes LP1 e LP2 passam por três estágios de compressão. Inicialmente, a corrente LP1 passa por dois compressores independentes (282 kW e 950 kW) e, em seguida, é comprimida por compressor (950 kW) alocado no eixo SSTC em estágio único. A corrente LP2 passa por um compressor autônomo (950 kW), dois compressores paralelos (950 kW e 730,1 kW) associados ao eixo SSTC, e um compressor independente (950 kW). O trabalho total de expansão (compressão) realizado (consumido) pelas turbinas (compressores) associados ao eixo unitário SSTC é igual a 2630,1 kW.

No projeto da RTC, são necessários quatro trocadores de calor com áreas de troca de calor (A) de 390,5 m² (H1.C2.t3- Q = 603,6 kW), 432,7 m² (H1.C5.t1- Q = 742,1 kW), 581,3 m² (H7.C5.t2- Q = 1083,7 kW) e 918,2 m² (H7.C10.t1- Q = 1748,6 kW). Além disso, dois resfriadores (A = 424,1 m² com Q = 836,2 kW, e A = 462,7 m² com Q = 747,9 kW) atribuídos, respectivamente, às correntes H1 e H7 são usados para a recuperação de calor. A Figura 4.4 apresenta a configuração ótima para a RTT com integração de calor obtida para este caso.

No caso 2, o uso de dois eixos SSTC é forçado na síntese da RTT. Neste caso, a configuração ótima obtida para a RTT é composta pelos mesmos equipamentos utilizados no caso anterior, no entanto, dispostos em dois eixos diferentes. Assim, a rede é composta por duas válvulas, duas turbinas independentes, quatro compressores autônomos, quatro turbinas associadas aos eixos SSTC, e três compressores alocados no eixos SSTC. A correntes HP1 é submetida a três estágios de expansão, através de duas turbinas localizadas no eixo 2 (1480,1 kW e 100 kW) dispostas em paralelo, uma válvula, e uma turbina autônoma (848,4 kW). A corrente HP2 é submetida a quatro estágios de expansão através de uma válvula, duas turbinas de único estágio associadas, respectivamente, aos eixos 1 e 2 (950 kW e 100 kW), e uma turbina utilitária (698,3 kW). Ambas as correntes LP1 e LP2 passam por três estágios de compressão. Inicialmente, a corrente LP1 passa através de dois compressores independentes

(282 kW e 950 kW), e depois é comprimida por um compressor de estágio único associado ao eixo 1 (950 kW). A corrente LP2 passa por um compressor utilitário (950 kW), dois compressores paralelos (950 kW e 730,1 kW) associados ao eixo 2, e um compressor independente (950 kW). O trabalho total de expansão (compressão) realizado (consumido) pelas turbinas (compressores) é igual a 950 kW para o eixo 1 e 1680,1 kW para o eixo 2.

No projeto da RTC, os mesmos equipamentos térmicos obtidos para o Caso 1 são novamente necessários. Logo, quatro trocadores de calor (H1.C2.t3 com $A = 390,5 \text{ m}^2$ e $Q = 603,6 \text{ kW}$, H1.C5.t1 com $A = 432,7 \text{ m}^2$ e $Q = 742,1 \text{ kW}$, H7.C5.t2 com $A = 581,3 \text{ m}^2$ e $Q = 1083,7 \text{ kW}$, e H7.C10.t1 com $A = 918,2 \text{ m}^2$ e $Q = 1748,6 \text{ kW}$) são utilizados na RTC. Além disso, dois resfriadores ($A = 424,1 \text{ m}^2$ com $Q = 836,2 \text{ kW}$, e $A = 462,7 \text{ m}^2$ com $Q = 747,9 \text{ kW}$) atribuídos, respectivamente, às correntes H1 e H7 são usados para recuperação de calor. A Figura 4.5 apresenta a configuração ótima para a RTT com integração de calor obtida para este caso.

Tabela 4.1

Dados de entrada das correntes e propriedades físicas para os distintos exemplos estudados.

Corrente	F (kg/s)	C_p (kJ/kg K)	h (kW/m ² K)	T_{IN} (K)	T_{OUT} (K)	P_{IN} (kPa)	P_{OUT} (kPa)
Exemplo 4.1							
HP1	15	1,432	0,1	380	380	850	100
HP2	18	0,982	0,1	400	400	980	180
LP1	15	1,432	0,1	400	400	100	520
LP2	18	1,432	0,1	400	400	100	850
HP1	15	2,454	0,1	350	350	900	100
HP2	15	0,982	0,1	350	350	850	150
HP3	15	1,432	0,1	400	400	700	200
LP1	18	1,432	0,1	390	390	100	700
LP2	15	2,454	0,1	420	420	100	900
HP1	12	2,454	0,1	410	600	900	100
HP2	18	0,982	0,1	355	500	850	150
LP1	15	1,432	0,1	600	350	100	700
LP2	18	2,454	0,1	600	360	100	900

Dados adicionais:

$$\Delta T_{\min} = 5 \text{ K} \quad \eta = 0,7 \quad \mu = 1,961e^{-3} \text{ K/kPa} \quad RC_{\max} = 3 \quad f = 0,18$$

$$CV = 400,00$$

$$CS = 337,00$$

$$CW = 100,00$$

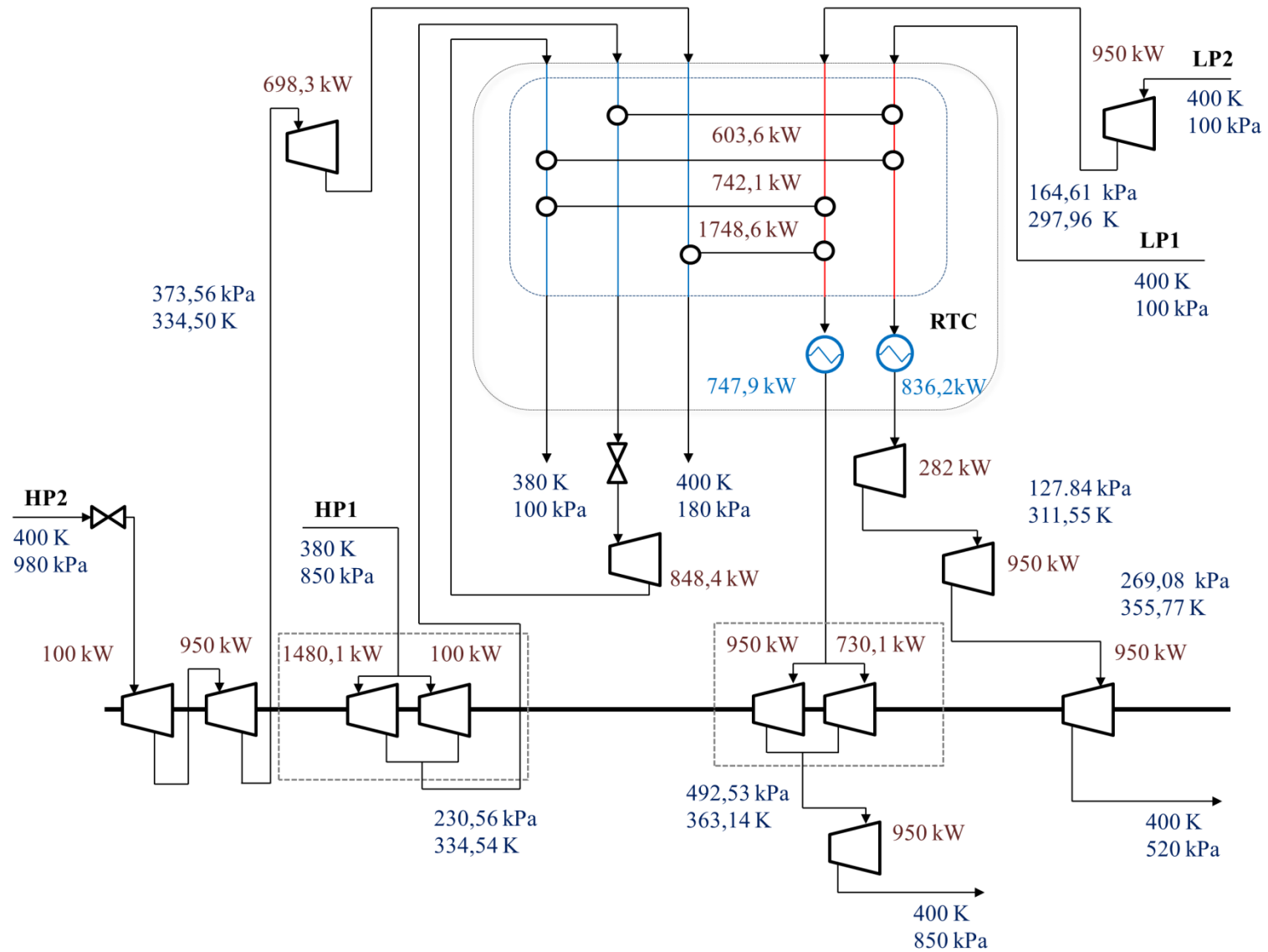


Figura 4.4. Configuração ótima da RTT com integração de calor obtida para o Exemplo 4.1 – Caso 1.

Nos Casos 1 e 2, como não existem falta ou excesso de energia nos eixos, nenhum motor auxiliar ou gerador são necessários para satisfazer o balanço energético nos eixos SSTC. No entanto, duas turbinas independentes são usados nas duas configurações de rede obtidas. Consequentemente, 1546,7 kW de energia são produzidos na RTT, que podem ser utilizados em outras etapas do processo e/ou para venda de energia. Os resultados obtidos em cada um dos casos são mostrados na Tabela 4.2. Claramente, as redes obtidas em ambos os casos diferem apenas pelo número de eixos SSTC utilizados, como resultado, ambas devem apresentar o mesmo custo total. Assim, o custo total anualizado estimado é de 6279 kUS\$/ano, nos quais 5314 kUS\$/ano representam os custos de capital de investimento em equipamentos, 158 kUS\$/ano corresponde às despesas totais com aquecimento e resfriamento de correntes, e 807 kUS\$/ano correspondem ao custo anual de energia elétrica, já descontados a receita gerada por turbinas utilitárias (619 kUS\$/ano). Além disso, se o uso de três unidades de eixos SSTC é forçado, a função objetivo aumenta representando uma solução subótima.

No Caso 1, o modelo matemático contém 3476 variáveis contínuas, 104 variáveis binárias, 4363 restrições com 15010 elementos Jacobianos (não-zeros), dos quais 2046 são não-lineares. No Caso 2, o modelo matemático contém 3900 variáveis contínuas, 232 variáveis binárias, 5105 restrições com 17710 elementos Jacobianos (não-zeros), dos quais 2482 são não-lineares. Os tempos de processamento são iguais a 1,11 min para o Caso 1, e 6,46 min para o Caso 2, as soluções ótimas são encontradas na quinta e sexta iterações maiores, respectivamente.

Neste exemplo, a mesma RTT com a integração de calor pode ser projetada com o uso de um ou dois eixos unitários SSTC. Além do fator econômico, o espaço disponível na planta de processamento para o arranjo dos eixos (unidades SSTC) e equipamentos devem ser considerados para escolher o melhor projeto da RTT. Ressalta-se que quanto maior for o número de equipamentos atuando na mesma unidade SSTC, maior será a dificuldade em mantê-los sob as mesmas condições de funcionamento, uma vez que todos devem atuar sob a mesma velocidade de rotação. Em contraste, a utilização de um maior número de eixos requer um espaço maior para a atribuição dos equipamentos da rede. Em processos, como a seção no mar da produção de GNL, onde o espaço é um fator muito crítico, este fato pode representar um grande problema.

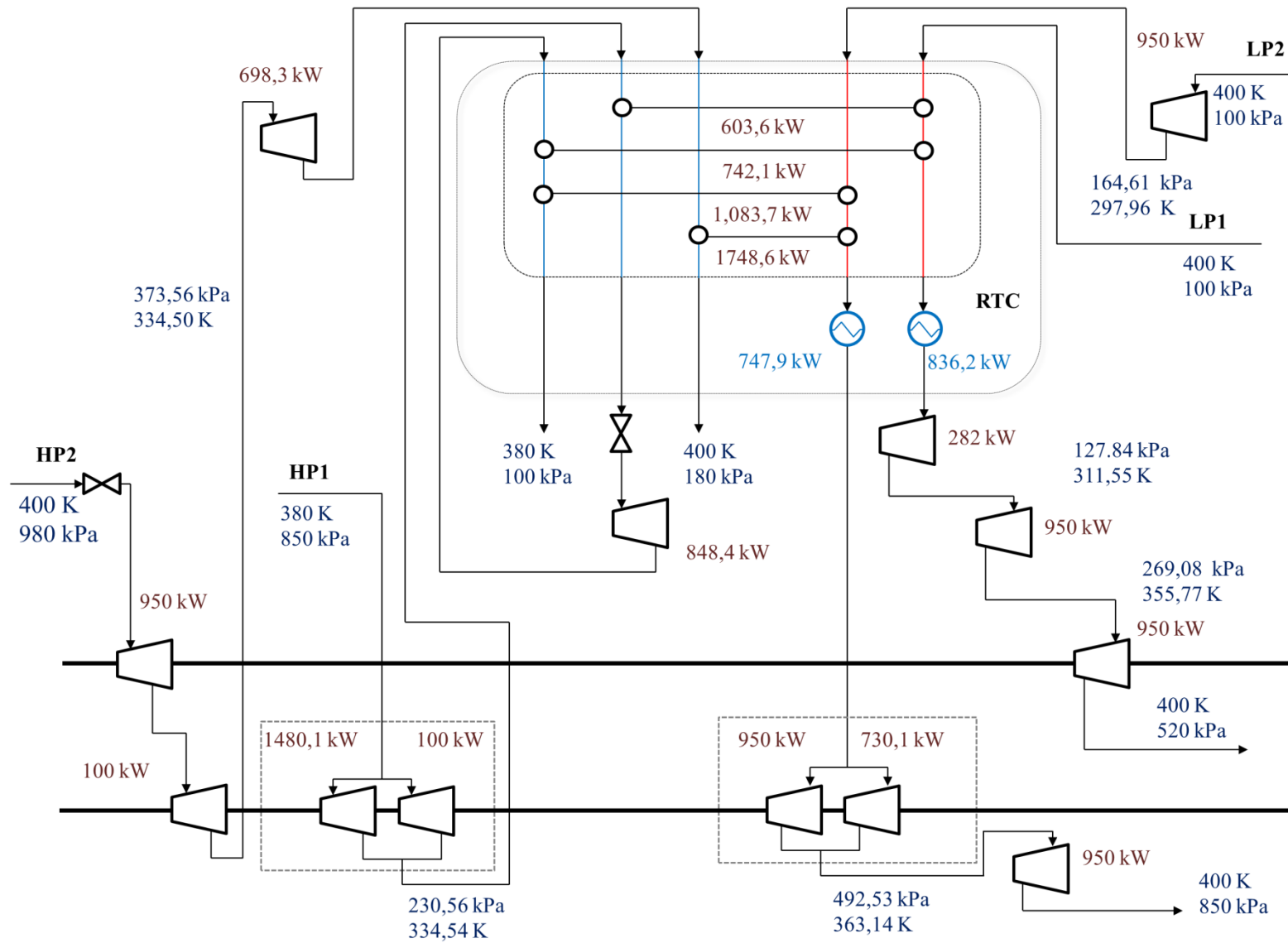


Figura 4.5. Configuração ótima da RTT com integração de calor obtida para o Exemplo 4.1 – Caso 2.

Tabela 4.2

Configuração ótima da RTT com integração térmica obtida para o Exemplo 4.1.

<i>Caso 1</i>			<i>Caso 2</i>		
RTT	Corrente. estágio	W (kW)	RTT	Corrente .estágio	W (kW)
Turbinas	HP1.s4	848,4	Turbinas	HP1.s4	848,4
autônomas	HP2.s4	698,3	autônomas	HP2.s4	698,3
Turbinas associadas aos eixos SSTC	HP1.s1	100,0	Turbinas associadas aos eixos SSTC	HP1.s1	100,0
	HP1.s1	1480,1		HP1.s1	1480,1
	HP2.s2	950,0		HP2.s2	950,0
	HP2.s3	100,0		HP2.s3	100,0
Compressores autônomos	LP1.s1	282,0	Compressores autônomos	LP1.s1	282,0
	LP1.s2	950,0		LP1.s2	950,0
	LP2.s1	950,0		LP2.s1	950,0
Compressores associados aos eixos SSTC	LP2.s3	950,0	Compressores associados aos eixos SSTC	LP2.s3	950,0
	LP1.s3	950,0		LP1.s3	950,0
	LP2.s2	950,0		LP2.s2	950,0
Válvulas	LP2.s2	730,1	Válvulas	LP2.s2	730,1
	HP1.s2	-		HP1.s2	-
Eixo 1	HP2.s1	-	Eixo 1	HP2.s1	-
	-	2630,1		-	950,0
Eixo 2	-	-	Eixo 2	-	1680,1
RTC	Q (kW)	A (m ²)	RTC	Q (kW)	A (m ²)
H1.C2.t3	603,6	390,5	H1.C2.t3	603,6	390,5
H1.C5.t1	742,1	432,7	H1.C5.t1	742,1	432,7
H7.C5.t2	1083,7	581,3	H7.C5.t2	1083,7	581,3
H7.C10.t1	1748,6	918,2	H7.C10.t1	1748,6	918,2
H1	836,2	424,1	H1	836,2	424,1
H7	747,9	462,7	H7	747,9	462,7
C_{total} (kUS\$/ano)		6.279	C_{total} (kUS\$/ano)		6.279

Exemplo 4.2. Neste exemplo, a síntese da RTT é realizada com o objetivo de obter a integração de trabalho entre três correntes à alta pressão (HP1, HP2 e HP3), e duas correntes à baixa pressão (LP1 e LP2). A corrente HP1 é expandida a partir de uma pressão inicial de 900 kPa a uma pressão final de 100 kPa, a corrente HP2 é expandida a partir de 850 kPa a 150 kPa, e a corrente HP3 é expandida de 700 kPa a 200 kPa. Em contraste, as correntes LP1 e LP2 são ambas comprimidas a partir da pressão de entrada de 100 kPa a 700 kPa e 900 kPa, respectivamente. A recuperação da pressão na RTT ocorre em, no máximo, quatro estágios de expansão e quatro estágios de compressão. As temperaturas de todas as correntes são iguais na entrada e saída da RTT. A rede é projetada para obter o máximo aproveitamento da energia disponível no sistema, através da integração ótima entre trabalho e calor. Assim, a integração térmica das correntes na RTC ocorre entre todos os estágios de compressão e expansão. Desde que o projeto da RTC é realizado simultaneamente com a síntese da RTT, todas as temperaturas de entrada das correntes na RTC são dependentes da RTT, conseqüentemente, elas são variáveis desconhecidas que devem ser otimizadas. Para o projeto da RTC, as correntes HP1–HP3 são consideradas correntes frias, enquanto que as correntes LP1 e LP2 são tratadas como correntes quentes.

As correntes de saída de cada etapa de manipulação de pressão na RTT estão ligadas às correntes de entrada na RTC. Por esta razão, a corrente HP1 origina as correntes frias C1–C5, a corrente HP2 dá origem as correntes C6–C10, a corrente HP3 origina as correntes frias C11–C15, e de forma semelhante, LP1 origina H1–H5 e LP2 dá origem as correntes quentes H6–H10. Como consequência, a RTC é sintetizada para a troca de calor entre 15 correntes frias e 10 correntes quentes. Além disso, a possibilidade de divisão de correntes é considerada, e aquecedores e resfriadores podem ser usados para atender às necessidades térmicas das correntes. Os dados das correntes são mostrados na Tabela 4.1. Para simplificação, quatro estágios de troca de calor são considerados na RTC. Ademais, as taxas de fluxo e capacidades caloríficas das correntes são constantes conhecidas.

Neste exemplo, dois estudos de casos são realizados para obter o melhor projeto de RTT com a integração de calor. Em todos os casos, a minimização do custo total anualizado é considerado. As temperaturas intermediárias de entrada das correntes na RTC são limitadas entre 288 K a 600 K. As utilidades quentes e frias estão disponíveis a 500 K e 288 K, respectivamente.

No Caso 1, a RTT é projetada com uma única unidade de eixo SSTC. A RTT ótima obtida é composta por quatro estágios de expansão para a corrente HP1, três estágios de expansão para a corrente HP2, dois estágios de expansão para a corrente HP3, bem como três estágios de compressão para ambas as correntes LP1 e LP2. Neste caso, a corrente HP1 é expandida através de uma turbina autônoma (1170,8 kW), seguido por uma turbina associada ao eixo SSTC (200 kW) de estágio único, duas turbinas associadas ao eixo SSTC dispostas paralelamente (200 kW e 1500 kW), seguido por uma turbina de estágio único alocada no eixo SSTC (1473 kW). A corrente HP2 é expandida através de uma válvula, seguida por expansão por meio de uma turbina (837,7 kW) de único estágio no eixo SSTC, mais uma válvula e, finalmente, por uma turbina de fase única (454,4 kW) associada ao eixo SSTC.

A corrente HP3 passa através de dois estágios de expansão através de uma válvula e de uma turbina de estágio único alocada no eixo SSTC (1500 kW). A corrente LP1 é comprimida através de dois compressores autônomos subsequentes (950 kW e 421,6 kW), seguido por dois compressores paralelos associados ao eixo SSTC (950 kW e 750 kW). A corrente LP2 é comprimida em três estágios através de dois compressores paralelos no eixo SSTC (950 kW e 733,9 kW), seguido por um compressor independente (950 kW), e três compressores paralelos (950 kW, 950 kW e 881,16 kW) associados ao eixo SSTC.

A Figura 4.6 apresenta a configuração ótima para a RTT com integração de calor obtida para este caso. O trabalho total produzido (consumido) pelas turbinas (compressores) no eixo é igual a 6165,1 kW. Como não existe falta ou excesso de energia no eixo SSTC, nenhum motor auxiliar ou gerador de energia é necessário para satisfazer o balanço energético. No entanto, uma turbina independente é usada na rede. Consequentemente, 1170,3 kW de energia são produzidas na RTT, e podem ser utilizados em outras etapas do processo e/ou para venda de energia.

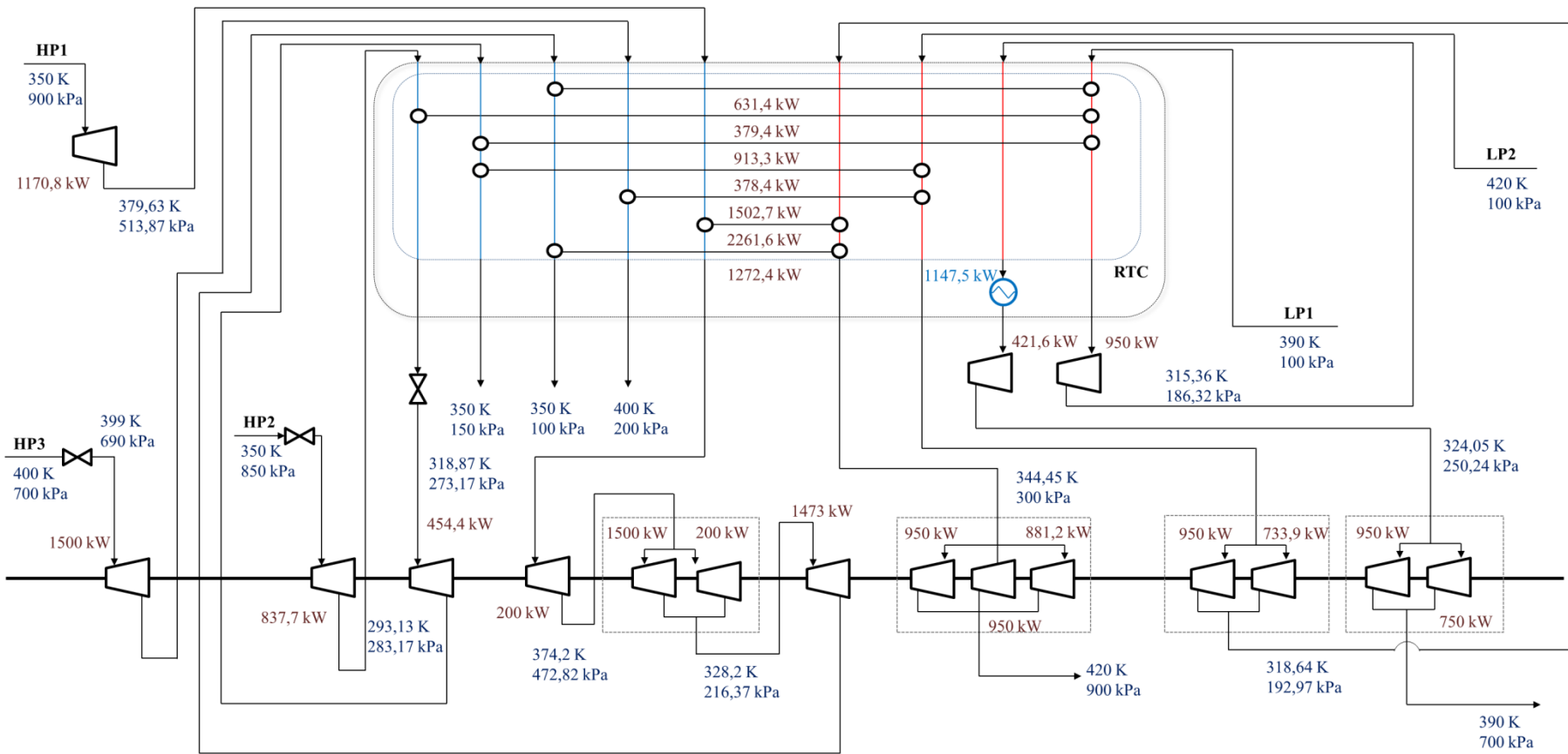


Figura 4.6. Configuração ótima da RTT com integração de calor obtida para o Exemplo 4.2 – Caso 1.

A integração térmica das correntes de processo é realizada após o primeiro e o último estágios de expansão para a corrente HP1 ($H1.C5.t1-Q = 631,4$ kW, $H6.C5.t3-Q = 378,4$ kW, $H7.C2.t3-Q = 2261,6$ kW e $H7.C5.t4-Q = 1272,4$ kW), após o segundo e último estágio de expansão para a corrente HP2 ($H1.C8.t2-Q = 379,4$ kW e $H1.C10.t2-Q = 913,3$ kW), e antes do último estágio de expansão para a corrente HP3 ($H6.C15.t4-Q = 1502,7$ kW). A recuperação de calor das correntes LP1 e LP2 ocorre antes e após o primeiro estágio de compressão. Logo, são usados sete trocadores de calor ($Q = 631,4$ kW com $A = 348,81$ m²; $Q = 378,4$ kW com $A = 163,3$ m²; $Q = 2261,6$ kW com $A = 1291,9$ m²; $Q = 1272,4$ kW com $A = 830,6$ m²; $Q = 379,4$ kW com $A = 230,4$ m²; $Q = 913,3$ kW com $A = 875,3$ m²; e $Q = 1502,7$ kW com $A = 927,9$ m²) no processo. Além disso, um resfriador atribuído à corrente H2 ($Q = 1147,5$ kW com $A = 352,3$ m²) é necessário para atender a demanda térmica desta corrente. O custo total anualizado da rede é 9099 kUS\$/ano, composto pelo custo de capital de investimento em equipamentos (8396 kUS\$/ano) e pelas despesas operacionais com energia elétrica (588 kUS\$/ano) e utilidades térmicas (115 kUS\$/ano).

No Caso 2, a RTT é projetada com duas unidades de eixos SSTC. Neste caso, a RTT ótima obtida é composta pelos mesmos equipamentos utilizados no Caso 1. Como resultado, a RTT ótima obtida também é composta por quatro estágios de expansão para a corrente HP1, três etapas de expansão para a corrente HP2, e duas etapas de expansão para a corrente HP3, bem como por três estágios de compressão para ambas as correntes LP1 e LP2. A corrente HP1 é expandida através de uma turbina autônoma (1170,8 kW), seguido por uma turbina de único estágio (200 kW) atribuída ao eixo 2, duas turbinas paralelas (200 kW e 1500 kW) alocadas no eixo 1 e, finalmente, por uma turbina de único estágio (1473 kW) alocada no eixo 1. A corrente HP2 é expandida através de uma válvula, seguida por expansão por meio de uma turbina de único estágio (837,7 kW) localizada sobre o eixo 1, seguido por uma válvula e, finalmente, por uma turbina de estágio único (454,4 kW) associada ao eixo 1. A corrente HP3 atravessa duas etapas de expansão através de uma válvula, e uma turbina de estágio único (1500 kW) associada ao eixo 2. Enquanto que a corrente LP1 é comprimida através de dois compressores autônomos subsequentes (950 kW e 421,6 kW), seguido por dois compressores paralelos (950 kW e 750 kW), localizados no eixo 2.

A corrente LP2 é comprimida em três etapas através de dois compressores paralelos (950 kW e 733,9 kW) localizados no eixo 1, seguido por um compressor independente (950 kW), e três compressores paralelos (950 kW, 950 kW e 881,16 kW) associados ao eixo 1. A Figura 4.7 mostra a configuração ótima para a RTT com integração térmica obtida para este

caso. O trabalho total produzido (consumido) pelas turbinas (compressores) em cada eixo é igual a 4465,1 kW para o eixo 1 e 1700 kW para o eixo 2. Novamente, como não há escassez ou excesso de energia nos eixos, o uso de motores auxiliares e geradores não é necessário para satisfazer o balanço energético dos eixos. No entanto, uma turbina independente é usada na rede. Portanto, 1170,3 kW de energia são produzidos na RTT, que estão disponíveis para utilização em outras etapas do processo e/ou para venda de energia.

No projeto da RTC, utilizam-se os mesmos equipamentos de troca de calor obtidos no caso anterior. Logo, são usados sete trocadores de calor ($Q = 631,4$ kW com $A = 348,81$ m²; $Q = 378,4$ kW com $A = 163,3$ m²; $Q = 2261,6$ kW com $A = 1291,9$ m²; $Q = 1272,4$ kW com $A = 830,6$ m²; $Q = 379,4$ kW com $A = 230,4$ m²; $Q = 913,3$ kW com $A = 875,3$ m²; e $Q = 1502,7$ kW com $A = 927,9$ m²) na RTC. Além disso, um resfriador atribuído à corrente H2 ($Q = 1147,5$ kW com $A = 352,3$ m²) é necessário para atender a demanda térmica da corrente.

Os resultados obtidos para os Casos 1 e 2 são apresentados na Tabela 4.3. As redes obtidas em ambos os casos diferem apenas no número de eixos SSTC utilizados. Como resultado, ambas apresentam o mesmo custo total. Portanto, neste caso, o custo total anualizado da RTT também é igual a 9099 kUS\$/ano, composto pelo custo de capital de investimento em equipamentos (8396 kUS\$/ano) e pelas despesas operacionais com energia elétrica (588 kUS\$/ano), e utilidades térmicas (115 kUS\$/ano). Tal como no Exemplo 4.1, se a utilização de três eixos é forçada, a função de objetivo conduz à soluções subótimas.

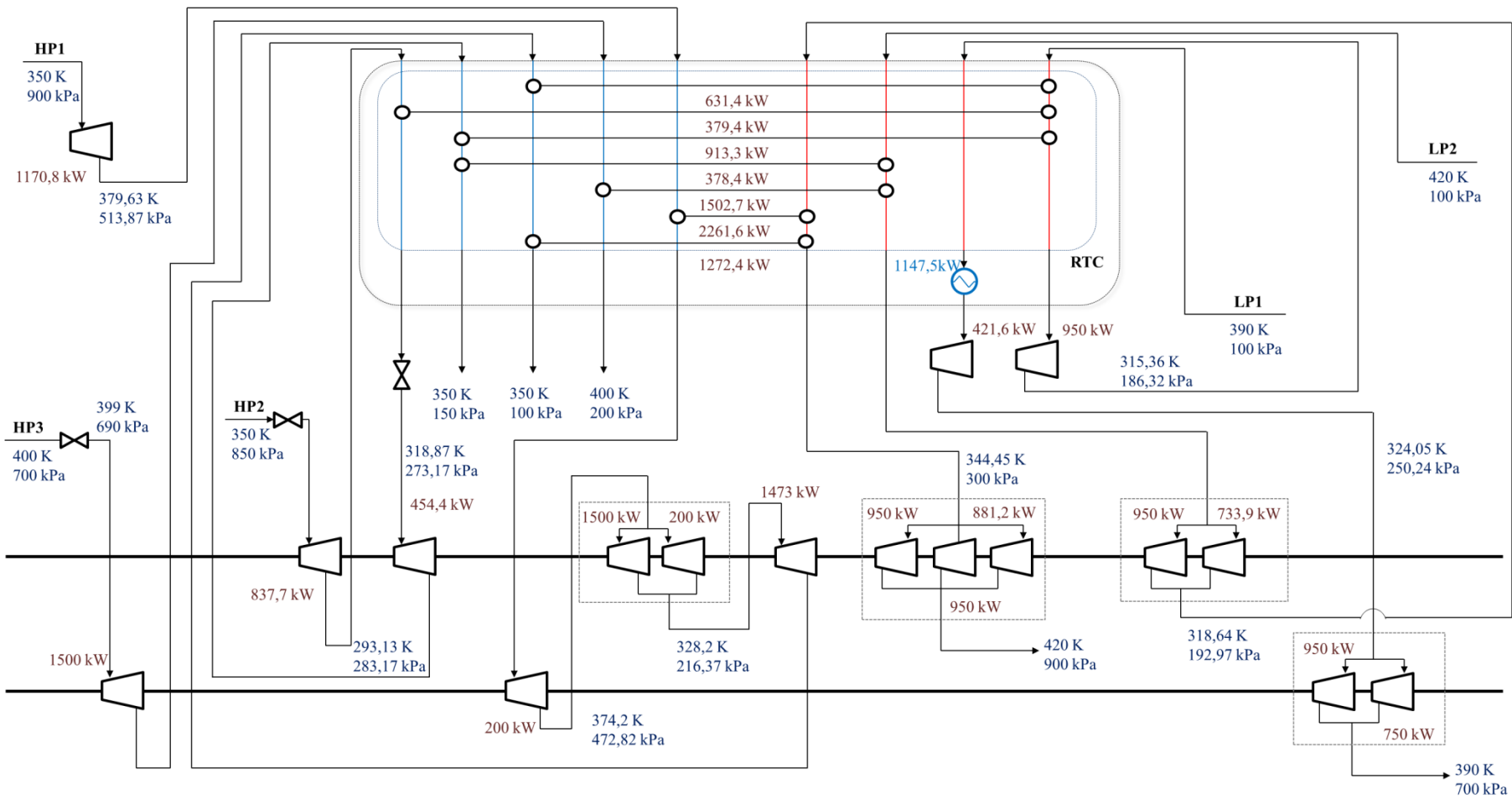


Figura 4.7. Configuração ótima da RTT com integração de calor obtida para o Exemplo 4.2 – Caso 2.

Tabela 4.3

Configuração ótima da RTT com integração térmica obtida para o Exemplo 4.2.

<i>Caso 1</i>			<i>Caso 2</i>		
RTT	Corrente. estágio	W (kW)	RTT	Corrente .estágio	W (kW)
Turbinas autônomas	HP1.s1	1170,8	Turbinas autônomas	HP1.s1	1170,8
	HP1.s2	200,0		HP1.s2	200,0
	HP1.s3	1500,0		HP1.s3	1500,0
Turbinas associadas aos eixos SSTC	HP1.s3	200,0	Turbinas associadas aos eixos SSTC	HP1.s3	200,0
	HP1.s4	1473,0		HP1.s4	1473,0
	HP2.s1	837,7		HP2.s1	837,7
	HP2.s4	454,4		HP2.s4	454,4
	HP3.s4	1500,0		HP3.s4	1500,0
Compressores autônomos	LP1.s1	950,0	Compressores autônomos	LP1.s1	950,0
	LP1.s2	421,6		LP1.s2	421,6
	LP2.s2	950,0		LP2.s2	950,0
	LP1.s3	950,0		LP1.s3	950,0
	LP1.s3	750,0		LP1.s3	750,0
Compressores associados aos eixos SSTC	LP2.s1	950,0	Compressores associados aos eixos SSTC	LP2.s1	950,0
	LP2.s1	733,9		LP2.s1	733,9
	LP2.s3	950,0		LP2.s3	950,0
	LP2.s3	950,0		LP2.s3	950,0
	LP2.s3	881,2		LP2.s3	881,2
Válvulas	HP2.s1	-	Válvulas	HP2.s1	-
	HP2.s3	-		HP2.s3	-
	HP3.s1	-		HP3.s1	-
Eixo 1	-	6165,1	Eixo 1	-	4465,1
Eixo 2	-	-	Eixo 2	-	1700,0
RTC	Q (kW)	A (m ²)	RTC	Q (kW)	A (m ²)
H1.C5.t1	631,4	348,8	H1.C5.t1	631,4	348,8

H6.C5.t3	378,4	163,3	H6.C5.t3	378,4	163,3
H7.C7.t3	2261,6	1291,9	H7.C7.t3	2261,6	1291,9
H7.C5.t4	1272,4	830,6	H7.C5.t4	1272,4	830,6
H1.C8.t2	379,4	230,4	H1.C8.t2	379,4	230,4
H1.C10.t2	913,3	875,3	H1.C10.t2	913,3	875,3
H6.C15.t4	1502,7	927,9	H6.C15.t4	1502,7	927,9
H2	1147,5	352,3	H2	1147,5	352,3
C_{total} (kUS\$/ano)	9.099		C_{total} (kUS\$/ano)	9.099	

No Caso 1, o modelo matemático contém 5053 variáveis contínuas, 132 variáveis binárias, 6287 restrições com 21837 elementos Jacobianos (não-zeros), dos quais 2975 são não-lineares. No Caso 2, o modelo matemático contém 5581 variáveis contínuas, 292 variáveis binárias, 7213 restrições com 25377 elementos Jacobianos (não-zeros), dos quais 3531 são não-lineares. Os tempos de processamento com o *solver* DICOPT são 3,45 min para o Caso 1, e 8,15 min para o Caso 2, as soluções ótimas são encontradas na sexta e nona iterações maiores, respectivamente.

Neste exemplo, mostra-se novamente que a mesma RTT com integração de calor pode ser projetada com o uso de uma ou duas unidades de eixos SSTC. Assim, além do fator econômico, o espaço disponível na planta de processamento para o arranjo dos eixos (SSTC) e equipamentos devem ser considerados para escolher o melhor projeto da RTT.

O modelo proposto provou ser adequado para a síntese da RTT, na qual a integração de trabalho entre cinco correntes de processo de trabalho é avaliada [três correntes à alta pressão (HP1-HP3) e duas correntes à baixa pressão (LP1 e LP2)]. No entanto, o modelo pode ser utilizado para a recuperação da pressão de um maior número de correntes de processo. Além disso, um maior número de estágios de compressão e expansão na RTT, assim como um maior número de estágios de troca de calor de RTC, e restrições que proíbem troca de calor entre correntes pode ser facilmente implementados no modelo. Contudo, um número maior de estágios na superestrutura da RTT deve ser evitado, de modo a não aumentar a complexidade do problema a tal ponto em que somente seja possível obter soluções inviáveis.

Exemplo 4.3. Neste exemplo, a síntese da RTT é realizada para promover a de integração de trabalho entre correntes que necessitam alcançar um estado de destino distinto do estado inicial. Assim, a recuperação de pressão é realizada entre duas correntes à alta pressão (HP1 e HP2), e duas correntes à baixa pressão (LP1 e LP2). A corrente HP1 possui o estado inicial de 410 K e 900 kPa, e precisa atingir o estado final de 600 K e 100 kPa. A corrente HP2 possui o estado inicial de 355 K e 850 kPa, e precisa atingir o estado final de 500 K e 150 kPa. Da mesma forma, as correntes LP1 e LP2 entram no processo com o estado inicial de 100 kPa e 600 K, e necessitam atingir o estado final de 700 kPa e 350 K, e 900 kPa e 360 K, respectivamente. Os dados das correntes para este exemplo são mostrados na Tabela 4.1. Novamente, a RTT é projetada para permitir até quatro estágios de compressão e expansão, entre os quais ocorre a integração térmica das correntes na RTC. A corrente HP1 dá origem a cinco correntes frias C1–C5, e HP2 origina as correntes frias C6–C10 de entrada na RTC. Da mesma forma, LP1 dá origem a H1–H5, e LP2 origina H6–H10. Assim, a recuperação de calor é realizada entre dez correntes frias e dez correntes quentes, e postula-se que todas as correntes frias possam trocar calor com todas as correntes quentes, e vice-versa.

Neste exemplo, as temperaturas intermediárias de entrada das correntes na RTC são limitadas entre 288 K a 700 K. As utilidades quentes estão disponíveis a 700 K, e os serviços frios a 288 K. A possibilidade de divisão de correntes é permitida na RTC, e aquecedores e resfriadores podem ser usados para atender às necessidades de calor dos fluxos de processo. Para simplificação, são considerados quatro estágios de troca de calor na RTC. Além disso, as taxas de fluxo e capacidades caloríficas de todas as correntes são constantes conhecidas. O projeto da RTT permite o uso de uma unidade de eixo SSTC (Caso 1) e três unidades de eixos SSTC (Caso 2) para obter uma rede ótima, através da minimização do custo total anualizado. Neste caso, a função objetivo é composta por despesas operacionais e custo do capital de investimento em equipamentos.

No Caso 1, a RTT é projetada com apenas uma unidade de eixo SSTC. Neste caso, a RTT ótima obtida é composta por quatro estágios de expansão e três estágios de compressão. Assim, a corrente HP1 é submetida a quatro estágios de expansão através de uma turbina de único estágio (1276,1 kW) associada ao eixo, seguida por uma turbina autônoma (1026,3 kW), duas turbinas paralelas (1500 kW e 130,6 kW) associadas ao eixo SSTC, e uma válvula. A corrente HP2 é submetida a quatro estágios de expansão através de uma turbina de único estágio (243,3 kW) associada ao eixo, uma válvula, e duas turbinas subsequentes de estágio único (100 kW e 1500 kW) associadas ao eixo SSTC. A corrente LP1 passa por três

compressores independentes subsequentes (489,6 kW, 950 kW e 950 kW). A corrente LP1 ignora o último estágio de compressão. Da mesma forma, a corrente LP2 passa através de três estágios de compressão por meio de um compressor autônomo (950 kW) na primeira etapa, três compressores paralelos (950 kW cada), seguidos por dois compressores paralelos (950 kW cada) associados com ao eixo SSTC. A última etapa de compressão para LP2 é uma corrente de *bypass*. A Figura 4.8 apresenta a configuração ótima obtida para a RTT com integração de calor. O trabalho total produzido (consumido) pelas turbinas (compressores) é igual a 4750 kW no eixo SSTC. Como não existem escassez ou excesso de energia no eixo, não são necessários motores auxiliares e geradores de energia no eixo. Contudo, uma turbina independente é usada na rede. Logo, 1026,3 kW de energia são produzidas na RTT, que podem ser utilizados em outras etapas do processo e/ou para venda de energia.

A integração térmica das correntes à alta pressão ocorre após a primeira e a última etapa de expansão para a corrente HP1, e antes do primeiro e depois do último estágio para a corrente HP2. A recuperação de calor para as correntes à baixa pressão ocorre antes de todas as etapas de compressão para ambas as correntes LP1 e LP2. Neste caso, cinco trocadores de calor para recuperação térmica entre as correntes H6.C2.t2 ($Q = 1518,1$ kW com $A = 469,6$ m²), H1.C5.t1 ($Q = 4835,5$ kW com $A = 1778,2$ m²), H6.C5.t1 ($Q = 2293,5$ kW com $A = 1000$ m²), H6.C6.t4 ($Q = 1163,8$ kW com $A = 654,6$ m²) e H6.C10.t1 ($Q = 3242,9$ kW com $A = 511,3$ m²) são necessários na RTC. Um aquecedor ($Q = 881,6$ kW com $A = 84,8$ m²) e seis resfriadores ($Q = 1572,8$ kW com $A = 459,3$ m², $Q = 575,8$ kW com $A = 344,1$ m², $Q = 775,5$ kW com $A = 277,8$ m², $Q = 4791,1$ kW com $A = 1000$ m², $Q = 1427,6$ kW com $A = 943,5$ m², e $Q = 1864,3$ kW com $A = 455,4$ m²) localizados nas correntes C5, H1–H3, e H6–H8, respectivamente, também são necessários. O custo total anualizado da RTT com esta configuração é 10695 kUS\$/ano, dos quais 1398 kUS\$/ano correspondem aos custos operacionais associados com os serviços térmicos, e 1109 kUS\$/ano são gastos relacionados à eletricidade. O custo de capital de investimento em equipamentos é igual a 8188 kUS\$/ano.

No caso 2, a RTT é projetada para permitir o uso de três unidades de eixos SSTC. Neste caso, o projeto ótimo da RTT é composto por quatro estágios de expansão e três estágios de compressão. Assim, são necessários três unidades de eixos SSTC na configuração ótima da RTT. A corrente HP1 é submetida a quatro estágios de expansão através de duas turbinas em paralelo (1500 kW e 1364,8 kW), seguido por três turbinas subsequentes de estágio único (100 kW, 588,3 kW e 705,3 kW) associados aos eixos 1, 3 e 2, respectivamente.

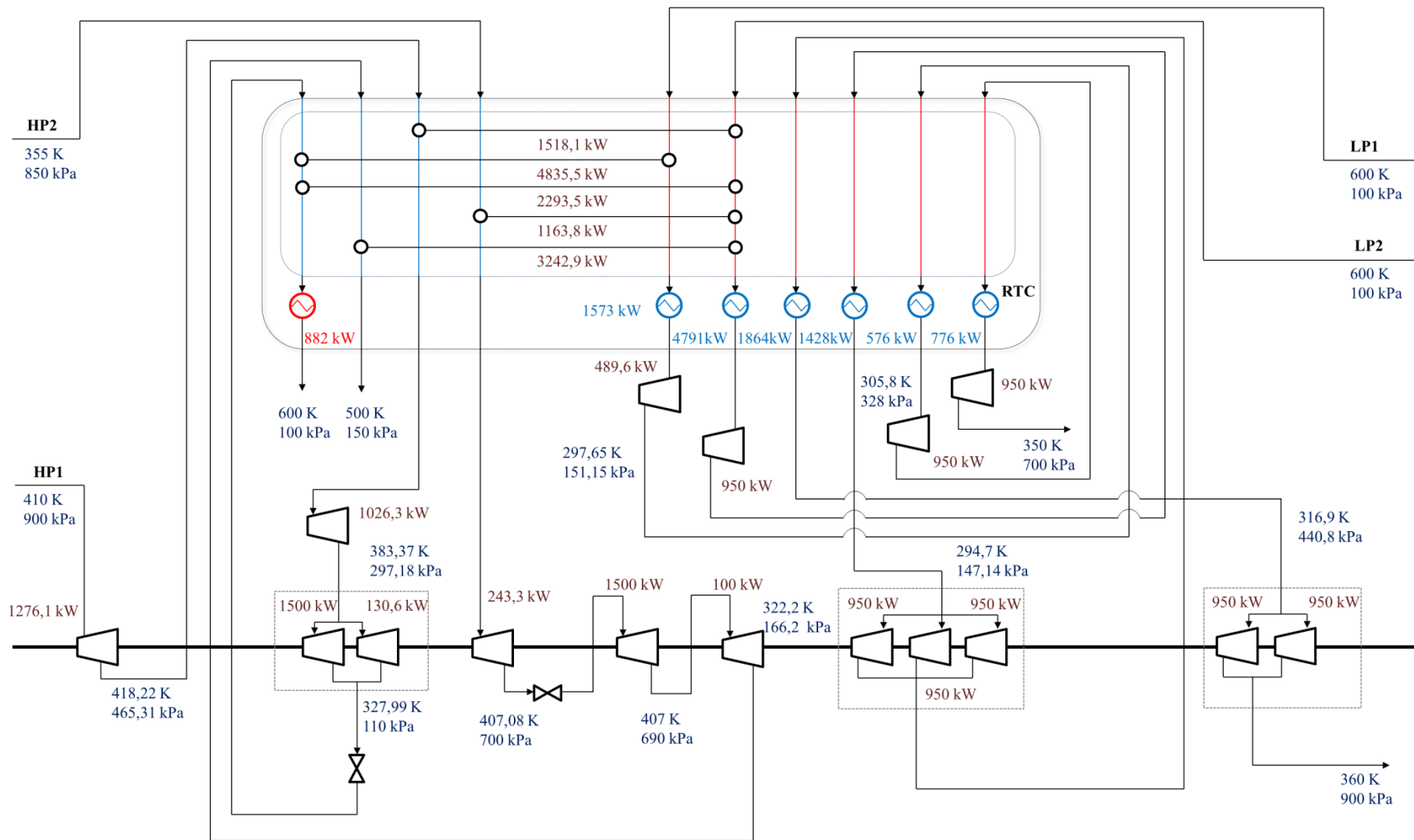


Figura 4.8. Configuração ótima da RTT com integração de calor obtida para o Exemplo 4.3 – Caso 1.

A corrente HP2 passa por quatro estágios de expansão através de quatro turbinas de único estágio (1211,8 kW, 100 kW, 100 kW e 649,6 kW) associadas aos eixos 2, 1 e 2, respectivamente. A corrente LP1 é submetida à compressão através de um compressor autônomo (844,4 kW), seguido por um compressor de estágio único (588,3 kW) associado ao eixo 3, e um compressor autônomo (950 kW). A corrente LP1 ignora o último estágio de compressão. Da mesma forma, a corrente LP2 passa por três estágios de compressão por meio de um compressor autônomo (465,5 kW) na primeira etapa, três compressores paralelos (950 kW cada) associados com o eixo 2, seguido por três compressores paralelos (950 kW, 950 kW e 781,5 kW) atribuídos ao eixo 2. A última etapa de compressão para LP2 é uma corrente de *bypass*. A Figura 4.9 apresenta a configuração ótima obtida para a RTT com integração de calor. O trabalho total produzido (consumido) pelas turbinas (compressores) é igual a 200 kW para o eixo 1, 5531,5 kW para o eixo 2, e 588,3 kW para o eixo 3. Nenhuma turbina utilitária é usada na rede, porém, um gerador de energia (200 kW) é necessário para satisfazer o balanço de energia no eixo 1.

A integração térmica das correntes à alta pressão ocorre após a primeira e a última etapa de expansão para HP1, e antes do primeiro e depois do último estágio para HP2. A recuperação de calor para as correntes à baixa pressão ocorre antes de todas as etapas de compressão para LP1, bem como antes das etapas 2 e 3 para LP2. Neste caso, cinco trocadores de calor para recuperar calor das correntes H1.C2.t3 ($Q = 2245,6$ kW com $A = 748,2$ m²), H1.C6.t4 ($Q = 1851,1$ kW com $A = 692,2$ m²), H7.C2.t3 ($Q = 4558,4$ kW com $A = 1446,1$ m²), H7.C5.t2 ($Q = 2336,4$ kW com $A = 1000$ m²) e H7.C10.t3 ($Q = 2773,4$ kW com $A = 993,7$ m²) são necessários na RTC. Um aquecedor ($Q = 713,1$ kW com $A = 70,2$ m²) e cinco resfriadores ($Q = 2363,4$ kW com $A = 594,9$ m², $Q = 851,3$ kW com $A = 387,9$ m², $Q = 441,3$ kW com $A = 196,2$ m², $Q = 3936,6$ kW com $A = 1000$ m² e $Q = 2993,4$ kW com $A = 1000$ m²), localizados nas correntes C5, H1–H3, H7 e H8, respectivamente, são também necessários.

O custo total anualizado da RTT é igual a 11322 kUS\$/ano, dos quais 1299 kUS\$/ano correspondem aos custos operacionais associados com os serviços térmicos e 948 kUS\$/ano são gastos relacionados à eletricidade. O custo de capital de investimento em equipamentos é igual 9075 kUS\$/ano. Os resultados obtidos em cada um dos casos são mostrados na Tabela 4.4.

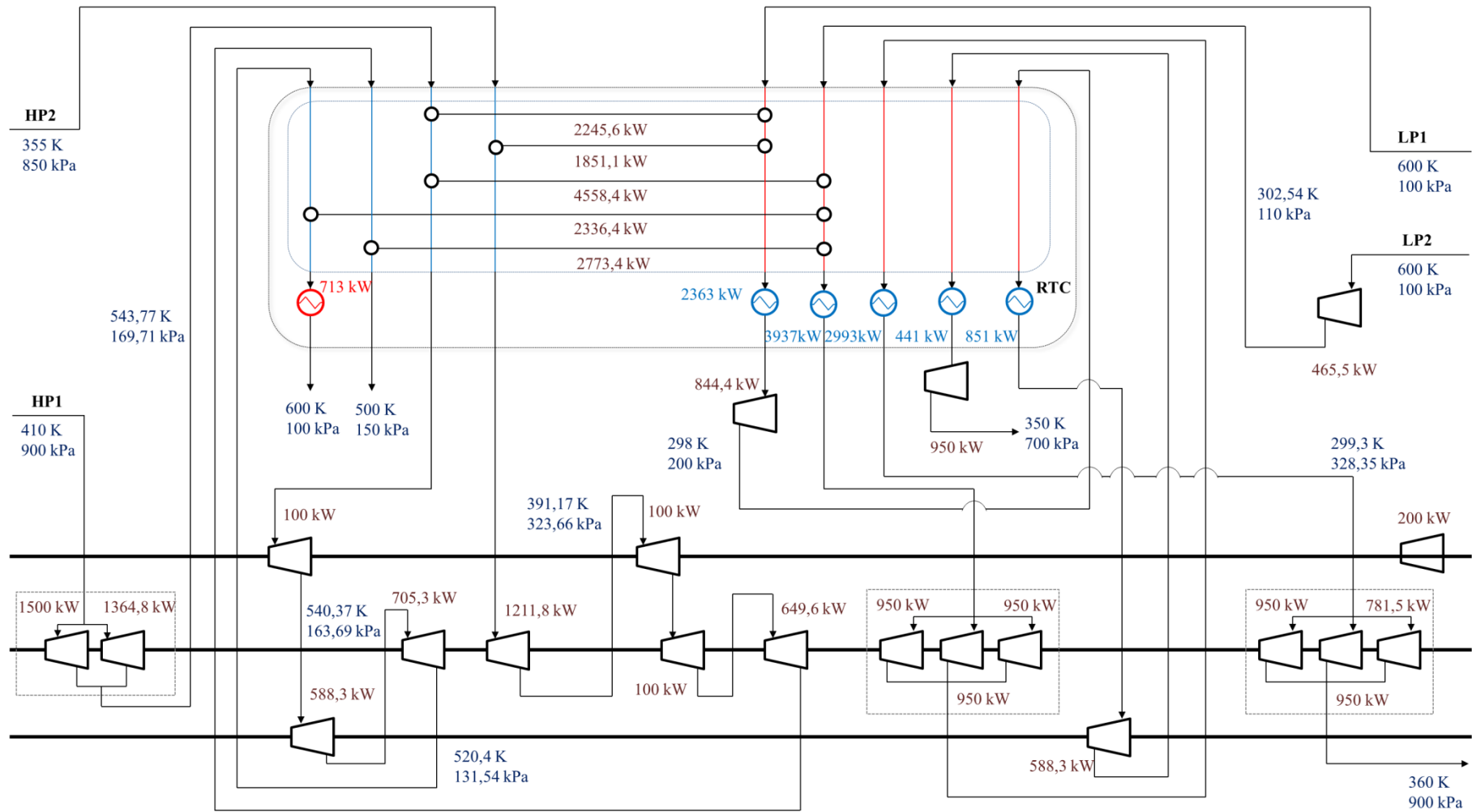


Figura 4.9. Configuração ótima da RTT com integração de calor obtida para o Exemplo 4.3 – Caso 2.

Tabela 4.4

Configuração ótima da RTT com integração térmica obtida para o Exemplo 4.3.

<i>Caso 1</i>			<i>Caso 2</i>		
RTT	Corrente. estágio	W (kW)	RTT	Corrente .estágio	W (kW)
Turbinas autônomas	HP1.s2	1026,3		HP1.s1	1364,8
	HP1.s1	1276,1		HP1.s1	1500,0
	HP1.s3	130,6		HP1.s2	100,0
Turbinas associadas aos eixos SSTC	HP1.s3	1500,0	Turbinas associadas aos eixos SSTC	HP1.s3	588,3
	HP2.s1	243,3		HP1.s4	705,3
	HP2.s3	1500,0		HP2.s1	1211,8
	HP2.s4	100,0		HP2.s2	100,0
Compressores autônomos	LP1.s1	489,6		HP2.s3	100,0
	LP1.s2	950,0		HP2.s4	649,64
	LP1.s3	950,0	Compressores autônomos	LP1.s1	844,4
	LP2.s1	950,0		LP1.s3	950,0
Compressores associados aos eixos SSTC	LP2.s2	950,0		LP2.s1	465,5
	LP2.s2	950,0		LP1.s2	588,3
	LP2.s2	950,0	Compressores associados aos eixos SSTC	LP2.s2	950,0
	LP2.s3	950,0		LP2.s2	950,0
	LP2.s3	950,0		LP2.s2	950,0
Válvulas	HP1.s4	-			950,0
	HP2.s2	-		LP2.s3	950,0
			Gerador	-	200,0
Eixo 1	-	4750,0	Eixo 1	-	200,0
Eixo 2	-	-	Eixo 2	-	5531,5
Eixo 3	-	-	Eixo 3	-	588,3
RTC	Q (kW)	A (m ²)	RTC	Q (kW)	A (m ²)
H6.C2.t2	1518,1	469,6	H1.C2.t3	2245,6	748,2

H1.C5.t1	4835,5	1778,2	H1.C6.t4	1851,1	692,2
H6.C5.t1	2293,5	1000	H7.C2.t3	4558,4	1446,1
H6.C6.t4	1163,8	654,6	H7.C5.t2	2336,4	1000,0
H6.C10.t1	3242,9	511,3	H7.C10.t3	2773,4	993,7
C5	881,6	84,8	C5	713,1	70,2
H1	1572,8	459,3	H1	2363,4	594,9
H2	575,8	344,1	H2	851,3	387,9
H3	775,5	277,8	H3	441,3	196,2
H6	4791,1	1000	H7	3936,6	1000,0
H7	1427,6	943,5	H8	2993,4	1000,0
H8	1864,3	455,4			
C_{total} (kUS\$/ano)		10.695	C_{total} (kUS\$/ano)		11.322

No Caso 1, o modelo matemático contém 3688 variáveis contínuas, 168 variáveis discretas com 4734 restrições, e 16360 elementos Jacobianos (não-zeros), dos quais 2264 são não-lineares. No Caso 2, o modelo matemático contém 3900 variáveis contínuas, 232 variáveis discretas com 5105 restrições, com 17710 elementos Jacobianos (não-zeros), dos quais 2482 são não-lineares. O modelo é resolvido com o *solver* DICOPT, os tempos de processamento são 6,30 min para o Caso 1 e 11,20 min para o Caso 2, as soluções ótimas são obtidas na sexta e nona iterações maiores, respectivamente.

Neste exemplo, a superestrutura proposta é utilizada para a síntese ótima de RTT com integração de calor de correntes que necessitam alcançar um estado de temperatura alvo. Os resultados indicam que o modelo pode ser que usado com sucesso para resolver esse tipo de problema. No entanto, observa-se que para satisfazer a demanda térmica do sistema é necessária a utilização de um maior número de equipamentos de troca de calor (i.e., trocadores de calor, aquecedores e refrigeradores). Conseqüentemente, uma quantidade maior de serviços térmicos—vapor e água de resfriamento—são necessários na rede. Em função disso, existe um aumento do custo total anualizado da rede, em comparação com os exemplos anteriores, em que a troca de calor intermediária entre as etapas de expansão e compressão é somente utilizada para melhorar a processo de recuperação de pressão. Além disso, o uso de três unidades de eixos SSTC provou ser economicamente menos atrativa, devido à

necessidade de um número maior de equipamentos nesta configuração—apesar de uma menor necessidade de quantidade de serviços térmicas—elevando-se o custo total anualizado da rede.

Em todos os casos estudados, a recuperação de calor entre os estágios da RTT é essencial para melhorar os processos de compressão e expansão. Deste modo, a integração de calor entre correntes de processo é economicamente interessante, uma vez que a utilização de aquecimento e resfriamento (aquecedores e resfriadores) é reduzida, o que resulta na diminuição dos custos. Deve-se lembrar que a redução do uso de serviços externos quentes e frios, como água e vapor de resfriamento também é responsável pela redução dos impactos ambientais.

4.7 Conclusões

Um novo modelo é proposto para a síntese simultânea de RTTs com integração térmica. A superestrutura desenvolvida é formulada em Programação Matemática, com o objetivo de obter a integração ótima de trabalho entre correntes à alta pressão e baixa pressão. Para tanto, utiliza-se equipamentos para a manipulação de pressão atuando sob a mesma unidade de eixo SSTC, em vários estágios de expansão e compressão. O modelo permite o uso de várias unidades de eixos SSTC. Entre as etapas da RTT as correntes são enviadas à RTC para promover a integração de calor, bem como para melhorar o processo de recuperação de pressão. Além de turbinas e compressores associados aos eixos SSTC, equipamentos autônomos (utilidades), i.e., compressores, turbinas e válvulas podem ser usados para satisfazer a demanda de energia das correntes. A superestrutura da RTT é otimizada usando uma formulação de programação não-linear mista inteira (PNLMI). O objetivo é sintetizar uma rede que apresente um custo total anualizado mínimo, composto pelo custo de capital de investimento nas diversas unidades da rede, e despesas operacionais relacionados com eletricidade, aquecimento e resfriamento das correntes de processo.

A síntese da RTT com integração de calor é um processo altamente complexo. Destina-se a encontrar a configuração ótima da rede utilizando a menor quantidade de equipamentos para a manipulação de pressão e troca de calor, assim como o consumo mínimo de energia e utilidades térmicas. A complexidade do modelo resultante é devido à

necessidade de otimizar simultaneamente todos os parâmetros relativos a ambas as redes (i.e., RTT e RTC). No que diz respeito ao projeto ótimo de RTTs, é necessário garantir que todas as pressões das subcorrentes sejam iguais em estágios de compressão e expansão, uma vez que correntes sob diferentes pressões não podem ser misturadas. Além disso, os compressores e turbinas associadas aos eixos SSTC compartilham um único eixo comum, e, por esta razão, devem funcionar corretamente para garantir a mesma taxa de fluxo. Para a síntese da RTC, o problema padrão é aumentado para incluir as temperaturas intermediárias desconhecidas das correntes ligadas à RTT.

A superestrutura da RTT proposta é escrita em GAMS e resolvida com o *solver* DICOPT. Os *solvers* CONOPT e CPLEX são usados como sub-*solvers* para resolver os problemas de PNL e PMI, respectivamente. Embora o algoritmo do *solver* DICOPT contenha provisões para lidar com não-convexidades, a alta não-linearidade e não-convexidade do modelo nem sempre garante o ótimo global. No entanto, alguns experimentos numéricos com este modelo mostram que aumento no número de iterações maiores, e resolução de problemas de viabilidade que podem surgir a partir de problemas de PNL, permitem obter boas soluções. Contudo, para a solução do modelo é crucial estabelecer adequadamente os limites de todas as variáveis. Os limites inferior e superior para as variáveis pressão, temperatura, fluxo de massa, e trabalho são especialmente críticos para o projeto da rede.

Três exemplos abrangendo-se diferentes situações foram estudados para verificar a aplicabilidade da metodologia proposta. Em todos os casos, demonstrou-se que a integração calor entre os estágios da RTT é essencial para melhorar os processos de compressão e expansão. Assim, a recuperação de calor das correntes provou ser economicamente atraente, devido à redução do custo de capital e das despesas operacionais relacionadas ao aquecimento e resfriamento de correntes, devido ao uso de uma quantidade menor de utilidades quentes e frias. Observou-se que o custo total anualizado da rede pode ser reduzido com o uso de geradores de energia e turbinas autônomas. Neste caso, o custo é reduzido pela receita da venda de eletricidade gerada, obtida a partir do excesso de trabalho de expansão nos eixos e turbinas independentes, que pode ser usado em outras etapas do processo e/ou para venda de energia.

Para a seleção do melhor projeto de RTT, além do fator econômico, o espaço disponível na planta de processamento também deve ser considerado. É importante notar que quanto maior for o número de equipamentos funcionando na mesma unidade de eixo SSTC,

maior será a dificuldade em mantê-los sob as mesmas condições de operação. Em contraste, o uso de um grande número de unidades SSTC pode requerer maior espaço para alocação na planta. Além de permitir o uso de várias unidades SSTC, o presente modelo pode ser usado para promover a integração do trabalho em um maior número de correntes de processo. Um maior número de estágios de compressão e expansão na RTT, bem como um maior número de estágios de troca de calor na RTC e restrições proibindo a troca de calor entre correntes podem ser facilmente incluídos na superestrutura da RTT. No entanto, um número muito grande de estágios na superestrutura e restrições devem ser evitados, devido à complexidade do problema que pode conduzir à soluções inviáveis, ou pelo menos longe do ótimo global.

Da mesma forma, o modelo proposto para o projeto de RTTs pode ser usado para permitir a integração entre calor e trabalho de correntes que necessitam atingir um estado de temperatura alvo. Neste caso, a utilização de um maior número de utilidades é necessária para satisfazer a demanda térmica das correntes, e atingir o estado de saída desejado no processo. Contudo, em todos os casos, o modelo foi capaz de sintetizar a rede em um reduzido tempo de processamento proporcionando boas soluções.

Lista de Símbolos

A	área de troca térmica
C	custo
CE	parâmetro de custo para eletricidade
Cp	capacidade calorífica
C_{po}	custo de equipamento unitário
CR_{max}	razão máxima de compressão
CS	parâmetro de custo para aquecimento
CV	parâmetro de custo para venda de eletricidade
CW	parâmetro de custo para resfriamento
E	número de unidades de eixos SSTC
f	fator de anualização do custo de capital
F	vazão mássica de correntes
Fb	vazão mássica através do <i>bypass</i>
F_{BM}	fator de correlação para o custo de equipamento
Fe	vazão através de equipamentos associados aos eixos SSTC
Fv	vazão através de válvulas
Fu	vazão através de equipamentos autônomos
h	coeficiente individual de transferência de calor
AP	correntes à alta pressão
K	número de divisão de correntes
BP	correntes à baixa pressão
M	parâmetro para formulação Big-M
ny	número de anos
P_{IN}	pressão de entrada na RTT
P_{in}	pressão de entrada no estágio
P_{OUT}	pressão de saída da RTT
P_{out}	pressão de saída no estágio
Q	calor
r	taxa de juros anual

S	número de estágios na RTT
T	temperatura
T_{IN}	temperatura de entrada na RTT
T_{in}	temperatura de entrada no estágio
T_{OUT}	temperatura de saída na RTT
T_{out}	temperatura de saída no estágio
T_{turb}	temperatura de saída da turbina
T_{val}	temperatura de saída da válvula
ΔT_{\min}	aproximação mínima de temperatura
W_e	trabalho do compressor/turbina no eixo SSTC
W_g	trabalho do gerador de energia
W_m	trabalho do motor auxiliar
W_u	trabalho do compressor/turbina utilitário
y	variável binária que define o uso do compressor/turbina do eixo
y^a	variável auxiliary para y
y^B	variável binária que define o <i>bypass</i>
y^U	variável binária que define o uso do compressor/turbina utilitária
y^V	variável binária que define o uso da válvula
γ	razão de capacidade calorífica
η	eficiência isentrópica
μ	coeficiente de Joule-Thompson

Subscritos

c	correntes frias
e	eixos SSTC
h	correntes quentes
i	correntes BP
j	correntes AP
k	divisão de correntes
m	utilidade de aquecimento
n	utilidade de resfriamento
s	estágios da RTT
t	estágios da RTC

Referências Bibliográficas

- Allen, B., Savard-Goguen, M., Gosselin, L., 2009. Optimizing heat exchanger networks with genetic algorithms for designing each heat exchanger including condensers. *Appl. Therm. Eng.* 29, 3437–3444.
- Al-mutairi, E.M., 2010. Optimal design of heat exchanger network in oil refineries. *Chem. Eng. Trans.* 21, 955–960.
- Aspelund, A., Berstad D.O., Gundersen, T., 2007. An extended pinch analysis and design procedure utilizing pressure based exergy for subambient cooling. *Appl. Therm. Eng.* 27, 2633–2649.
- Björk, K.-M., Nordman, R., 2005. Solving large-scale retrofit heat exchanger network synthesis problems with mathematical optimization methods. *Chem. Eng. Process. Process Intensif.* 44, 869–876.
- Caballero, J.A., Grossmann, I.E., 2013. A review of the state of the art in optimization. *J Rev. Iberoam. Autom. In.* 4, 5–23.
- Chen, J.J., 1987. Letter to editor: Comments on improvement on a replacement for the logarithmic mean. *Chem. Eng. Sci.* 42, 2488.
- Cheng, X., Liang, X., 2012a. Optimization principles for two-stream heat exchangers and two-stream heat exchanger networks. *Energy* 46, 421–429.
- Cheng, X., Liang, X., 2012b. Computation of effectiveness of two-stream heat exchanger networks based on concepts of entropy generation, entransy dissipation and entransy-dissipation-based thermal resistance. *Energy Convers. Manag.* 58, 163–170.
- Cheng, X., Liang, X., 2012c. Heat-work conversion optimization of one-stream heat exchanger networks. *Energy* 47, 421–429.
- Couper, J.R., Penney, W.R., Fair, J.R., Walas, S.M., 2010. *Chemical Process Equipment, Selection and Design*, second ed., Elsevier, USA.
- Escobar, M., Trierweiler, J.O., 2013. Optimal heat exchanger network synthesis: A case study comparison. *Appl. Therm. Eng.* 51, 801–826.
- Frausto-Hernández, S., Rico-Ramírez, V., Jiménez-Gutiérrez, A., Hernández-Castro, S., 2003. MINLP synthesis of heat exchanger networks considering pressure drop effects. *Comput. Chem. Eng.* 27, 1143–1152.

- Furman, K.C., Sahinidis, N.V., 2002. A critical review and annotated bibliography for heat exchanger network synthesis in the 20th century. *Ind. Eng. Chem. Res.* 41, 2335–2370.
- Gharaie, M., Zhang, N., Jobson, M., Smith, R., Panjeshahi, M.H., 2013. Simultaneous optimization of CO₂ emissions reduction strategies for effective carbon control in the process industries. *Chem. Eng. Res. Des.* 91, 1483–1498.
- Gorji-Bandpy, M., Yahyazadeh-Jelodar, H., Khalili, M., 2011. Optimization of heat exchanger network. *Appl. Therm. Eng.* 31, 779–784.
- Grossmann, I.E., Caballero, J.A., Yeomans, H., 2000. Advances in mathematical programming for the synthesis of process systems. *Latin Am. Appl. Res.* 284, 263–284.
- Gundersen, T., Naess, L., 1988. The synthesis of cost optimal heat exchanger networks: An industrial review of the state of the art. *Comput. Chem. Eng.* 12, 503–530.
- Hasan, M.M.F., Jayaraman, G., Karimi, I.A., 2010. Synthesis of heat exchanger networks with nonisothermal phase changes. *AIChE J.* 56, 930–945.
- Huang, K.F., Karimi, I.A., 2013. Simultaneous synthesis approaches for cost-effective heat exchanger networks. *Chem. Eng. Sci.* 98, 231–245.
- Hwa, C.S., 1965. Mathematical formulation and optimization of heat exchanger networks using separable programming, in: *AIChE-I Chem. Symp.* 101–106.
- Grossmann, I.E., 2002. Review of nonlinear mixed-integer and disjunctive programming techniques. *Optim. Eng.* 3, 227–252.
- Jezowski, J., 1994a. Heat exchanger network grassroot and retrofit design. The review of the state-of-the-art: Part I. Heat exchanger network targeting and insight based methods of synthesis. *Hungar J. Ind. Chem.* 22, 279–294.
- Jezowski, J., 1994b. Heat exchanger network grassroot and retrofit design. The review of the state-of-the-art: Part II. Heat exchanger network synthesis by mathematical methods and approaches for retrofit design. *Hungar J. Ind. Chem.* 22, 295–308.
- Kaluri, R.S., Basak, T., 2011. Entropy generation due to natural convection in discretely heated porous square cavities. *Energy* 36, 5065–5080.
- Kesler, M.S., Parker, R.O., 1969. Optimal networks of heat exchanger. *Chem. Eng. Prog. Symp. Ser.* 65, 111–120.
- Lara, Y., Lisbona, P., Martínez, A., Romeo, L.M., 2013. Design and analysis of heat exchanger networks for integrated Ca-looping systems. *Appl. Energy* 111, 690–700.
- Morar, M., Agachi, P.S., 2010. Review: Important contributions in development and improvement of the heat integration techniques. *Comput. Chem. Eng.* 34, 1171–1179.

- Vaklieva-Bancheva, N., Ivanov, B.B., Shah, N., Pantelides, C.C., 1996. Heat exchanger network design for multipurpose batch plants. *Comput. Chem. Eng.* 20, 989–1001.
- Onishi, V.C., Ravagnani, M.A.S.S., Caballero, J.A., 2013. Mathematical programming model for heat exchanger design through optimization of partial objectives. *Energy Convers. Manag.* 74, 60–69.
- Onishi, V.C., Ravagnani, M.A.S.S., Caballero, J.A., 2014. Simultaneous synthesis of heat exchanger networks with pressure recovery: optimal integration between heat and work. *AIChE J.* 60, 893–908.
- Ravagnani, M.A.S.S., Caballero, J.A., 2007. Optimal heat exchanger network synthesis with the detailed heat transfer equipment design. *Comput. Chem. Eng.* 31, 1432–1448.
- Razib, M.S., Hasan, M.M.F., Karimi, I.A., 2012. Preliminary synthesis of work exchange networks. *Comput. Chem. Eng.* 37, 262–277.
- Serna, M., Jiménez, A., 2004. An area targeting algorithm for the synthesis of heat exchanger networks. *Chem. Eng. Sci.* 59, 2517–2520.
- Serna-González, M., Ponce-Ortega, J.M., 2011. Total cost target for heat exchanger networks considering simultaneously pumping power and area effects. *Appl. Therm. Eng.* 31, 1964–1975.
- Smith, R., 2005. *Chemical Process Design and Integration*, second ed., John Wiley and Sons Ltda., England.
- Sors, A., Kravanja, Z., 2002. Simultaneous MINLP synthesis of heat exchanger networks comprising different exchanger types. *Comput. Chem. Eng.* 26, 599–615.
- Turton, R., Bailei, R.C., Whiting, W.B., Shaeiwitz, J.A., 2003. *Analysis, Synthesis and Design of Chemical Process*, second ed., McGraw-Hill, New York.
- Vaskan, P., Guillén-Gosálbez, G., Jiménez, L., 2012. Multi-objective design of heat-exchanger networks considering several life cycle impacts using a rigorous MILP-based dimensionality reduction technique. *Appl. Energy* 98, 149–161.
- Wang, R.Z., Xia, Z.Z., Wang, L.W., Lu, Z.S., Li, S.L., Li, T.X., Wu, J.Y., He, S., 2011. Heat transfer design in adsorption refrigeration systems for efficient use of low-grade thermal energy. *Energy* 36, 5425–5439.
- Wechsung, A., Aspelund, A., Gundersen, T., Barton, P.I., 2011. Synthesis of heat exchanger networks at subambient conditions with compression and expansion of process streams. *AIChE J.* 57, 2090–2108.

- Huang, Y.L., Fan, L.T., 1996. Analysis of a work exchanger network. *Ind. Eng. Chem. Res.* 35, 3528–3538.
- Yee, T.F., Grossmann, I.E., 1990. Simultaneous optimization models for heat integration - II. Heat exchanger network synthesis. *Comput. Chem. Eng.* 14, 1165–1184.

CAPÍTULO 5

Retrofit de Redes de Trocadores de Calor:

Modelo de Programação Matemática para Ótima Integração entre Calor e Trabalho em Redes Existentes

Alcançar a economia de energia a partir de um processo de recuperação otimizado é essencial em plantas industriais existentes. Este capítulo introduz um novo modelo matemático para o retrofit de redes de trocadores de calor (RTCs), no qual a recuperação de pressão de correntes é utilizada para melhorar a integração de calor. Especialmente importante em processos subambiente, o retrofit de RTCs com ótima integração entre calor e trabalho é destinado principalmente à redução do uso de serviços frios. A superestrutura proposta permite o incremento da área de troca térmica existente, bem como a utilização de novos equipamentos para manipulação de pressão e troca de calor. A recuperação de pressão de correntes é realizada simultaneamente com a síntese da RTC, de modo que as condições do processo (pressão e temperatura) sejam variáveis de otimização. O modelo de programação não-linear mista inteira (PNLMI) admite o acoplamento de turbina e compressor com um motor auxiliar, com objetivo de minimizar o custo total anualizado, composto pelo custo de capital adicional e despesas operacionais. Três estudos de casos são conduzidos para verificar a acurácia da abordagem proposta, incluindo uma aplicação industrial real relacionada à produção de gás natural liquefeito (GNL). Os resultados indicam que a recuperação da pressão de correntes é fundamental para economia de energia e, conseqüentemente, para redução do custo total do retrofit particularmente em processos criogênicos.

5.1 Introdução

Reduzir o consumo de energia através da implementação de estratégias mais eficientes e inovadoras é uma das principais preocupações em plantas de processamento. Neste contexto, as redes de trocadores de calor (RTCs) são responsáveis pela integração de calor, sendo essencial para a redução do consumo de energia em processos industriais (Escobar & Trierweiler, 2013). Apesar do esforço considerável, ao longo das últimas décadas, para resolver o problema da síntese ótima de RTCs (Furman & Sahinidis, 2002), uma parcela muito menor de investigação foi dirigida ao problema de reprojeto, ou *retrofit*, de RTCs existentes (Nguyen et al., 2010; Zhang & Rangaiah, 2013). Todavia, o *retrofit* de RTCs é uma forma eficaz para melhorar a recuperação de energia, e para alcançar a economia de energia desejada a partir de uma rede já estabelecida (Pan et al., 2013a; Wang & Smith, 2013; Wang et al., 2012). Atualmente, o *retrofit* de RTCs está recebendo mais atenção em ambos os campos acadêmico e industrial (Pan et al., 2013b), devido ao maior interesse na conservação de energia e seu uso eficiente, bem como às crescentes exigências para a redução dos impactos ambientais relacionados ao elevado consumo de energia (Lara et al., 2013; Liu et al., 2014).

O *retrofit* de RTCs visa reduzir o consumo de utilidades térmicas, através da minimização das mudanças necessárias para melhorar a recuperação de energia, em termos de reestruturação das possibilidades de troca de calor entre correntes (i.e., retubulação de correntes), e modificação ou substituição de trocadores de calor existentes, muitas vezes traduzidos como uma função dos custos de processo (Pan et al., 2013a; Polley et al., 2013). Nesta perspectiva, as abordagens convencionais para o *retrofit* de RTCs incluem o aumento da área de transferência de calor e/ou instalação de novos equipamentos, emprego de tecnologias para intensificação de transferência de calor, bem como a reconfiguração da estrutura de troca térmica (Pan et al., 2013b, 2013c, 2012; Rezaei & Shafiei, 2009). Entre as abordagens acima mencionadas, as alterações estruturais relacionadas com o rearranjo de rede existente, geralmente, necessitam um maior custo de capital de investimento para a implementação do projeto de *retrofit* de RTCs.

Em geral, três grupos de métodos de otimização são usados para o *retrofit* de RTCs. O primeiro inclui os métodos baseados em conceitos heurísticos e termodinâmicos, incluindo a análise *pinch*, o segundo está relacionado aos métodos baseados em Programação Matemática e o terceiro, aos métodos híbridos combinando ambos (Rezaei & Shafiei, 2009; Zhang &

Rangaiah, 2013). O primeiro trabalho apresentando uma proposta para solucionar o problema através da análise *pinch* foi proposto por Tjoe & Linnhoff (1986). Os autores propuseram uma abordagem manual em duas etapas, direcionamento e projeto, para a solução sistemática do problema. Em Programação Matemática, o problema de *retrofit* de RTCs é tratado como um problema de otimização, sendo esta a área que apresentou maiores avanços devido à sua capacidade de obtenção de soluções melhores. Dentre os primeiros trabalhos destaca-se o procedimento proposto por Yee & Grossmann (1987), no qual um método matemático simultâneo foi desenvolvido para alcançar alguns objetivos principais no *retrofit* de RTCs, compreendendo a máxima utilização de trocadores existentes, a atribuição de unidades existentes para novas possibilidades de troca entre correntes com um custo mínimo de tubulação, e a mínima utilização de unidades novas. Asante & Zhu (1997) propuseram um método para o *retrofit* de RTCs combinando análise *pinch* e Programação Matemática. Os autores desenvolveram um procedimento iterativo para remoção gradual dos pontos de estrangulamento (i.e., *pinches*) da rede, no qual a configuração potencialmente mais conveniente obtida na fase de diagnóstico é otimizada por meio de técnicas de otimização determinísticas. Deve-se enfatizar que apesar de serem muito úteis para a concepção de processos intensivos e complexos de energia, os métodos baseados em análise *pinch* não garantem a solução ótima global do problema, uma vez que estas abordagens não podem ser utilizados simultaneamente com balanços materiais (Kovac et al., 2000).

Segundo Onishi et al. (2014a), apesar das inúmeras tentativas para otimizar a recuperação de calor através da síntese de RTCs poucos trabalhos disponíveis na literatura apresentam propostas para solucionar o problema de integração entre calor e trabalho. Além disso, nenhum desses trabalhos considera a possibilidade de *retrofit* de redes existentes. O processo de manipulação de pressão é responsável por um consumo considerável de energia, desempenhando um papel especialmente importante em processos subambiente, tal como na produção de gás natural liquefeito (GNL) (Onishi et al., 2014b). No processo no mar da cadeia energética para o transporte e utilização de GNL representado na Figura 5.1, o gás natural (GN) submetido à alta pressão é pré-aquecido com dióxido de carbono líquido (CO₂L) através de um trocador de calor e, em seguida, expandido a uma pressão mais baixa para a troca de calor com nitrogênio líquido inerte (NLI). Em seguida, o GN passa através de uma turbina para atingir a pressão desejada para a sua armazenagem. O NLI à alta pressão passa através de dois trocadores de calor para resfriar o gás natural. (Aspelund & Gundersen, 2009a, 2009b, 2009c; Aspelund et al., 2009; Razib et al., 2012; Wechsung et al., 2011). Enfatiza-se que o significativo consumo de utilidades frias, extremamente caras neste

processo, é responsável por elevados custos operacionais. Evidentemente, é possível integrar calor e trabalho em uma mesma rede com a finalidade de economizar energia e, por conseguinte, reduzir custos de processo (Razib et al., 2011). Este conceito pode ser estendido para o *retrofit* de RTCs estabelecidas.

Wechsung et al. (2011) propuseram um modelo para a síntese de RTCs, permitindo o ajuste dos níveis de pressão de correntes de processo em condições subambiente. A formulação desenvolvida combina análise *pinch*, análise exérgica e Programação Matemática para a otimização de RTCs, através da minimização da irreversibilidade total do sistema. Neste trabalho é demonstrado através de uma aplicação industrial real relacionado a um processo criogênico, que uma determinada rota de expansão e compressão de correntes baseada no princípio “*plus-minus*” (Linnhoff & Vredeveld, 1984) pode resultar em uma RTC ótima com irreversibilidade mínima. Onishi et al. (2014b) apresentaram um modelo de otimização para a síntese simultânea de RTCs, considerando a manipulação de pressão de correntes de processo para melhorar a integração de calor. A formulação matemática envolve programação disjuntiva generalizada (PDG) e programação não-linear mista inteira (PNLMI), com o objetivo de obter o projeto ótimo da RTC através da minimização do custo total anualizado. Os autores demonstraram por meio do estudo de várias possibilidades de configuração envolvendo compressores, turbinas e válvulas que a recuperação de pressão durante a síntese da RTC pode reduzir a necessidade de utilidades térmicas, diminuindo o custo total do processo. No entanto, ainda que representem importantes contribuições para a área de síntese de processos, estes estudos não contêm nenhuma avaliação referente ao *retrofit* das redes existentes.

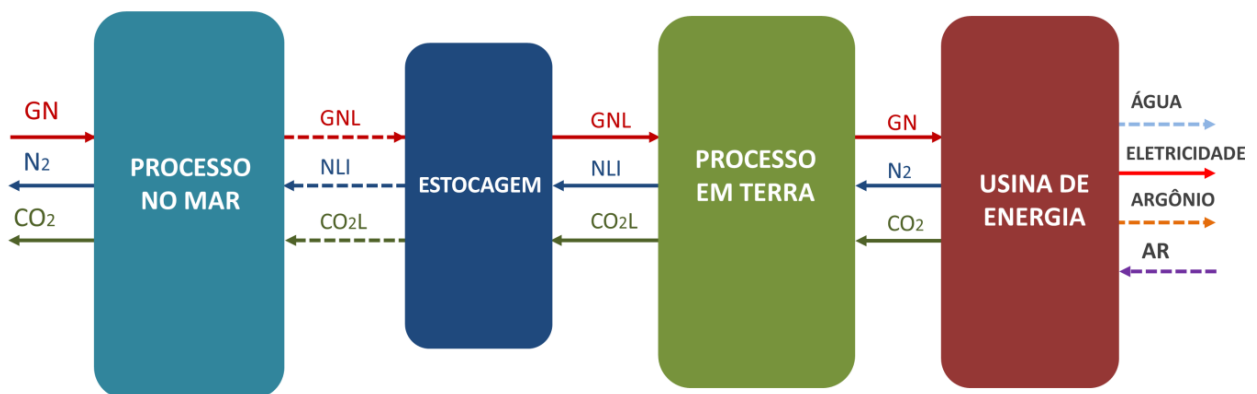


Figura 5.1. Cadeia energética para o transporte e utilização de gás natural liquefeito (GNL).

Fonte: Adaptado de Wechsung et al. (2011).

Este capítulo introduz um novo modelo matemático para o *retrofit* de redes de trocadores de calor (RTCs), em que a recuperação da pressão de correntes de processo é usada para melhorar a integração de calor. Uma superestrutura multi-estágio baseada no modelo de Onishi et al. (2014b) é proposta para otimizar o problema. Assim, a recuperação da pressão de correntes é realizada simultaneamente com o *retrofit* da RTC, através de estágios de manipulação de pressão conectados à integração de calor. Consequentemente, as condições do processo (pressão e temperatura das correntes) são tratadas como variáveis desconhecidas que devem ser otimizadas. Além disso, o método proposto permite aumentar a área de troca de calor existente, assim como o uso de novos equipamentos, tanto para a troca de calor quanto para manipulação de pressão e o acoplamento da turbina e um compressor com um motor auxiliar, visando obter a economia de energia desejada no processo. O modelo proposto é formulado em programação não-linear mista inteira (PNLMI), visando minimizar a função objetivo compreendida pelo custo total anualizado para a implementação do *retrofit*. Três estudos de casos são realizados para verificar a acurácia do modelo proposto, incluindo uma aplicação industrial real relacionado com a produção de gás natural liquefeito. Os resultados indicam que a recuperação da pressão de correntes diminui o custo total anualizado do *retrofit* da RTC, como consequência da redução de gastos relacionados com utilidades térmicas e as receitas provenientes da venda de eletricidade gerada por turbinas autônomas.

5.2 Definição do Problema

Considerando-se um conjunto de correntes quentes e frias com um conhecido estado de fornecimento (temperatura e pressão de entrada), e um estado alvo (temperatura e pressão de saída), além de vazões mássicas e capacidades caloríficas. Em adição, são também fornecidos os serviços térmicos para aquecimento e resfriamento de fluidos, eletricidade, equipamentos para manipulação de pressão e troca térmica, com seus respectivos custos. Todos os equipamentos térmicos da rede existente estão disponíveis para reutilização no *retrofit*. O principal objetivo reside na obtenção de um projeto ótimo para o *retrofit* de RTCs, considerando a recuperação de pressão de correntes e o aproveitamento de todos os equipamentos disponíveis na rede existente, através da minimização do custo total anualizado. A função objetivo é composta pelas contribuições relacionadas ao custo de

capital de investimento em equipamentos novos e aumento da área de troca térmica disponível, bem como despesas operacionais adicionais, incluindo receitas provenientes da geração de energia.

O modelo matemático para o *retrofit* de RTCs é baseado no modelo proposto em Onishi et al. (2014b), no qual a bem-conhecida superestrutura de Yee & Grossmann (1990) para síntese de RTCs é estendida para considerar a recuperação de pressão de correntes de processo. Desta forma, a superestrutura multi-estágio proposta para o *retrofit* de RTCs existentes permite a divisão de correntes, enquanto são assumidos taxa de fluxo de capacidade de calor constante e mistura isotérmica. Além disso, postula-se em todas as etapas da superestrutura cada corrente quente possa trocar calor com todas as correntes frias, e vice-versa. O número de etapas na RTC deve ser igual ao número máximo de possíveis trocas entre as correntes quentes e frias, e aquecedores e resfriadores são alocados nas extremidades das correntes para garantir que a temperatura final desejada possa ser atingida. Nesta nova abordagem proposta, algumas correntes de processo estão submetidas à expansão e compressão, de modo que a recuperação de pressão é usada para melhorar a integração de calor durante o *retrofit* da RTC. Assim, equipamentos para manipulação de pressão—nomeadamente, compressores e turbinas—também são utilizados durante o reprojeto da rede. Em consequência, a pressão e a temperatura das correntes se tornam variáveis desconhecidas na entrada e na saída da superestrutura da RTC.

De forma análoga a Onishi et al. (2014b), algumas correntes quentes e frias devem seguir uma rota específica de manipulação de pressão e troca de calor proposta por Wechsung et al. (2011). Desse modo, uma corrente quente pode, potencialmente, ser resfriada, comprimida, resfriada, expandida, aquecida, comprimida e resfriada. Similarmente, uma corrente fria pode ser aquecida, expandida, aquecida, comprimida, resfriada, expandida, e aquecida (ver Figura 5.2). As correntes que estão sujeitas à manipulação de pressão estão ligadas à RTC através compressores e expansores, de modo que o estado de saída da corrente do equipamento de manipulação de pressão deve corresponder ao estado de entrada na superestrutura da RTC. Ressalta-se que esta definição do problema é significativamente mais complexa que o problema padrão de recuperação de calor na síntese de RTCs como postulado por Yee & Grossmann (1990). Principalmente, devido a fatores que incluem a necessidade de tratar a temperatura das correntes como uma variável desconhecida que requer otimização, bem como a adição de uma nova variável referente a pressão das correntes. Além disso, durante os estágios de manipulação de pressão as correntes de processo podem mudar

temporariamente de identidade, de maneira que uma corrente fria pode se comportar como uma corrente quente, e vice-versa. As correntes de processo também podem atuar como utilidades térmicas, servindo como fontes ou dissipadores de energia à uma temperatura fora do intervalo produzido pelas utilidades disponíveis. Desta forma, neste tipo de problema não existe uma clara distinção entre correntes quentes e frias, e nem entre correntes e utilidades. Maiores detalhes sobre o problema de recuperação de pressão simultaneamente à síntese da RTC são reportados em Onishi et al. (2014b) e Wechsung et al. (2011). A todas as dificuldades citadas soma-se, ainda, a necessidade de um operador matemático para a manipulação de pressão das correntes, aumentando consideravelmente a não-linearidade e não-convexidade do modelo. O operador de manipulação de pressão é apresentado em Onishi et al. (2014b).

Durante o *retrofit* da rede todos os equipamentos para troca de calor, incluindo trocadores de calor, aquecedores e resfriadores, existentes na RTC podem ser reutilizados. Ademais, o modelo permite a instalação de novos equipamentos—tanto para troca térmica quanto para expansão e compressão—e o incremento da área de troca térmica existente. Contudo, neste modelo não é considerada a possibilidade de reestruturação das trocas térmicas, i.e., a retubulação das correntes de processo. O modelo permite, ainda, o acoplamento entre turbinas e compressores em um eixo comum, no qual a turbina é capaz de satisfazer até 80% da necessidade de energia do compressor. Neste caso, um motor auxiliar é utilizado para suprir a demanda de energia restante do compressor e atender o balanço de energia do eixo de acoplamento.

Para simplificar a formulação matemática, as seguintes suposições são consideradas para o *retrofit* de RTCs com recuperação de pressão:

- (i) Todas as compressões e expansões de correntes são isentrópicas.
- (ii) Todas as correntes gasosas comportam-se de maneira ideal. Além disso, um fator de eficiência isentrópico é introduzido para ajustar inevitáveis perdas de eficiência de equipamentos em processos reais.
- (iii) Todas as turbinas e compressores são centrífugos e construídos com aço carbono.

- (iv) A energia de arranque necessário para qualquer compressor ou turbina é negligenciada.
- (v) Todas as capacidades caloríficas das correntes são constantes
- (vi) Todos os coeficientes de transferência de calor são constantes.
- (vii) Quedas de pressão e perdas de calor em todos os equipamentos térmicos são negligenciados.

5.3 Modelo de Programação Matemática

O modelo matemático proposto é baseado na superestrutura desenvolvida por Onishi et al. (2014b), no qual o modelo para síntese de RTCs de Yee & Grossmann (1990) (apresentado no Apêndice B) é estendido para considerar a recuperação simultânea de pressão de correntes de processo. A manipulação de pressão de correntes é realizada através de uma rota específica de expansão e compressão proposta por Wechsung et al. (2011), com integração de calor intermediária na RTC.

A abordagem desenvolvida para o *retrofit* de RTCs com recuperação de pressão inclui o uso de todos os equipamentos para troca de calor disponíveis na rede, bem como o incremento da área de troca térmica existente. Contudo, a possibilidade de deslocamento dos trocadores existentes e a retubulação de correntes não são considerados no modelo. A formulação matemática para o *retrofit* de RTCs é apresentada nas seções a seguir.

A definição dos seguintes índices é necessária para o desenvolvimento do modelo:

$$\begin{aligned}
 I &= \{i / i = 1, 2, \dots, I \text{ são as correntes quentes}\} \\
 J &= \{j / j = 1, 2, \dots, J \text{ são as correntes frias}\} \\
 K &= \{k / k = 1, 2, \dots, K \text{ é o número de estágios na RTC}\} \\
 T &= \{t / t = 1, 2, \dots, T \text{ são as turbinas}\} \\
 V &= \{v / v = 1, 2, \dots, V \text{ são os compressores}\}
 \end{aligned}$$

5.3.1 Formulação Matemática para o Retrofit de RTCs

A integração térmica entre as correntes i e j deve ocorrer somente uma vez ou, o que é garantido pela seguinte restrição:

$$\sum_{k=1}^K y_{i,j,k} \leq 1 \quad i \in I, j \in J, 1 \leq k \leq K \quad (5.1)$$

Em cada etapa da superestrutura, os trocadores de calor podem ser maiores ou menores que os trocadores de calor disponíveis na rede existente, mas somente uma possibilidade deve ser escolhida. Se a área de troca térmica for menor ou igual a área disponível, o trocador existente é reutilizado. Caso contrário, a área adicional de troca de calor necessária é calculada para posteriormente ser contabilizada no custo total do processo. Desta forma, tem-se:

$$y_{i,j,k}^{smaller} + y_{i,j,k}^{bigger} \leq 1 \quad i \in I, j \in J, k \in K \quad (5.2)$$

$$0 \cdot y_{i,j,k}^{smaller} \leq A_{i,j,k}^{smaller} \leq A_{i,j,k}^{ex} \cdot y_{i,j,k}^{smaller} \quad i \in I, j \in J, k \in K \quad (5.3)$$

$$A_{i,j,k}^{ex} \cdot y_{i,j,k}^{bigger} \leq A_{i,j,k}^{bigger} \leq A_{i,j,k}^{UP} \cdot y_{i,j,k}^{bigger} \quad i \in I, j \in J, k \in K \quad (5.4)$$

$$y_{i,j,k} = y_{i,j,k}^{smaller} + y_{i,j,k}^{bigger} \quad i \in I, j \in J, k \in K \quad (5.5)$$

$$A_{i,j,k}^{add} = A_{i,j,k}^{bigger} - A_{i,j,k}^{ex} \cdot y_{i,j,k}^{bigger} \quad i \in I, j \in J, k \in K \quad (5.6)$$

Da mesma forma, os resfriadores alocados nos extremos das correntes podem ser maiores ou menores que os resfriadores disponíveis na RTC existente. Contudo, apenas uma opção deve ser escolhida. Assim, se a área de troca térmica do resfriador for menor ou igual a área disponível, o resfriador existente é reutilizado. Por outro lado, se houver a necessidade de aumentar a área do resfriador, a área adicional de troca de calor é calculada para posteriormente ser somada ao custo total do processo, ou seja:

$$y_{i,n}^{smaller} + y_{i,n}^{bigger} \leq 1 \quad i \in I \quad (5.7)$$

$$0 \cdot y_{i,n}^{smaller} \leq A_{i,n}^{smaller} \leq A_{i,n}^{ex} \cdot y_{i,n}^{smaller} \quad i \in I \quad (5.8)$$

$$A_{i,n}^{ex} \cdot y_{i,j,k}^{bigger} \leq A_{i,n}^{bigger} \leq A_{i,n}^{UP} \cdot y_{i,n}^{bigger} \quad i \in I \quad (5.9)$$

$$y_{i,n} = y_{i,n}^{smaller} + y_{i,n}^{bigger} \quad i \in I \quad (5.10)$$

$$A_{i,n}^{add} = A_{i,n}^{bigger} - A_{i,n}^{ex} \cdot y_{i,n}^{bigger} \quad i \in I \quad (5.11)$$

Analogamente, os aquecedores alocados nos extremos das correntes podem ser maiores ou menores que os aquecedores disponíveis na RTC existente. Contudo, apenas uma opção deve ser escolhida. Assim, se a área de troca térmica do aquecedor for menor ou igual a área disponível, o aquecedor existente é reutilizado. Por outro lado, se houver a necessidade de aumentar a área do aquecedor, a área adicional de troca de calor é calculada para posteriormente ser somada ao custo total do processo, ou seja:

$$y_{m,j}^{smaller} + y_{m,j}^{bigger} \leq 1 \quad j \in J \quad (5.12)$$

$$0 \cdot y_{m,j}^{smaller} \leq A_{m,j}^{smaller} \leq A_{m,j}^{ex} \cdot y_{m,j}^{smaller} \quad j \in J \quad (5.13)$$

$$A_{m,j}^{ex} \cdot y_{m,j}^{bigger} \leq A_{m,j}^{bigger} \leq A_{m,j}^{UP} \cdot y_{m,j}^{bigger} \quad j \in J \quad (5.14)$$

$$y_{m,j} = y_{m,j}^{smaller} + y_{m,j}^{bigger} \quad j \in J \quad (5.15)$$

$$A_{m,j}^{add} = A_{m,j}^{bigger} - A_{m,j}^{ex} \cdot y_{m,j}^{bigger} \quad j \in J \quad (5.16)$$

Conforme mencionado anteriormente, o modelo proposto para o *retrofit* de RTCs permite a divisão de correntes de processo. Contudo, as restrições dadas pelas equações Eq. (5.17) e Eq. (5.18) podem ser facilmente adicionadas ao modelo para proibir a divisão de correntes nas etapas da superestrutura da RTC.

$$\sum_{i=1}^I y_{i,j,k} \leq 1 \quad j \in J, k \in K \quad (5.17)$$

$$\sum_{j=1}^J y_{i,j,k} \leq 1 \quad i \in I, k \in K \quad (5.18)$$

As restrições apresentadas na formulação matemática para o *retrofit* de RTCs, através das equações Eq. (5.1)–(5.4), Eq. (5.7)–(5.9) e Eq. (5.12)–(5.14) são necessárias para garantir que cada trocador de calor, resfriador e aquecedor, respectivamente, sejam utilizados uma

única vez. No entanto, estas equações restringem ainda mais o espaço de busca da solução ótima do problema, em relação ao modelo original de Onishi et al. (2014b). Segundo Björk & Nordman (2005), a adição das restrições Eq. (5.17) e Eq. (5.18) ao modelo pode comprometer a qualidade das soluções obtidas, além de aumentar o tempo de processamento da solução do problema.

A quantidade de calor adicional necessária aos resfriadores e aquecedores deve obedecer às seguintes restrições:

$$Q_{i,n}^{add} \geq Q_{i,n} - Q_{i,n}^{ex} \cdot y_{i,n} \quad i \in I \quad (5.19)$$

$$Q_{m,j}^{add} \geq Q_{m,j} - Q_{m,j}^{ex} \cdot y_{m,j} \quad j \in J \quad (5.20)$$

5.3.2 Formulação para o Acoplamento de Equipamentos

O modelo proposto para o *retrofit* de RTCs com recuperação de pressão permite o acoplamento de turbinas e compressores com um motor auxiliar, visando a economia de energia e redução de custos. Contudo, se uma turbina e/ou um compressor existir na rede, podem estar alocados no eixo de acoplamento ou atuarem como equipamentos autônomos. Logicamente, as duas possibilidades não podem ocorrer ao mesmo tempo. Assim, as seguintes restrições lógicas são necessárias para assegurar esta decisão.

$$y_t^a + y_t^s \leq 1 \quad t \in T \quad (5.21)$$

$$y_v^a + y_v^s \leq 1 \quad v \in V \quad (5.22)$$

Quando o acoplamento de equipamentos de manipulação de pressão ocorre, somente uma turbina e um compressor podem existir no eixo de acoplamento. Este fato é assegurado pelas equações Eq. (5.23) e Eq. (5.24).

$$\sum_{t=1}^T y_t^a \leq 1 \quad t \in T \quad (5.23)$$

$$\sum_{v=1}^V y_v^a \leq 1 \quad v \in V \quad (5.24)$$

Para evitar equipamentos demasiadamente pequenos ou grandes, os trabalhos de expansão e compressão devem estar limitados entre um valor mínimo e um valor máximo. Desta forma, se uma turbina autônoma existir na rede, esta deverá realizar um trabalho mínimo. Caso contrário, o trabalho de expansão deverá ser igual a zero.

$$We_t^s \geq We_{\min} - We_t^{UP} \cdot (1 - y_t^s) \quad t \in T \quad (5.25)$$

$$We_t^s \leq We_t^{UP} \cdot y_t^s \quad t \in T \quad (5.26)$$

Analogamente, se um compressor autônomo existir na rede, este deverá consumir um trabalho mínimo. Caso contrário, o trabalho de compressão deverá ser igual a zero.

$$Wc_v^s \geq Wc_{\min} - Wc_v^{UP} \cdot (1 - y_v^s) \quad v \in V \quad (5.27)$$

$$Wc_v^s \leq Wc_v^{UP} \cdot y_v^s \quad v \in V \quad (5.28)$$

Da mesma forma, se uma turbina for alocada no eixo de acoplamento, esta deverá realizar um trabalho mínimo. Caso contrário, o trabalho de expansão no eixo deverá ser igual a zero.

$$We_t^a \geq We_{\min} - We_t^{UP} \cdot (1 - y_t^a) \quad t \in T \quad (5.29)$$

$$We_t^a \leq We_t^{UP} \cdot y_t^a \quad t \in T \quad (5.30)$$

Similarmente, se um compressor for alocado no eixo de acoplamento, este deverá consumir um trabalho mínimo. Caso contrário, o trabalho de compressão no eixo deverá ser igual a zero.

$$Wc_v^a \geq Wc_{\min} - Wc_v^{UP} \cdot (1 - y_v^a) \quad v \in V \quad (5.31)$$

$$Wc_v^a \leq Wc_v^{UP} \cdot y_v^a \quad v \in V \quad (5.32)$$

Como sugerido por Couper et al. (2010), o trabalho de compressão e o trabalho de expansão devem ser restringidos entre um limite inferior e um limite superior:

$$100 \leq We_t^s (\text{kW}) \leq 1500, \quad 100 \leq We_t^a (\text{kW}) \leq 1500, \quad 18 \leq Wc_v^s (\text{kW}) \leq 950 \quad e$$

$$18 \leq Wc_v^a (\text{kW}) \leq 950$$

A turbina alocada no eixo de acoplamento é capaz de satisfazer 80% da demanda de energia do compressor no mesmo eixo.

$$We_t^a \leq 0,8 \cdot Wc_v^a \cdot y_v^a \quad t \in T, v \in V \quad (5.33)$$

Em consequência, um motor auxiliar deve ser utilizado para suprir o restante (20%) da necessidade de energia consumida pelo compressor. Desta forma, um balanço de energia global é necessário no eixo, para garantir que o trabalho de expansão realizada pela turbina e pelo motor auxiliar sejam iguais ao trabalho consumido pelo compressor.

$$\sum_{t=1}^T We_t^a + Wh = \sum_{v=1}^V Wc_v^a \quad (5.34)$$

5.3.3 Função Objetivo

O custo total anualizado (C_{total}) de implementação do *retrofit* é composto pelo custo de capital ($C_{\text{capital}}^{\text{add}}$) e pelas despesas operacionais ($C_{\text{operational}}^{\text{add}}$) adicionais. Neste caso, os custos operacionais incluem as despesas adicionais inerentes à utilização de serviços de aquecimento e resfriamento de fluidos, e energia elétrica consumida pelo compressor e pelo motor auxiliar. O trabalho de compressão consumido por compressores é somado às despesas operacionais adicionais relacionadas à eletricidade apenas no caso em que não ocorre o acoplamento de turbinas e compressores. As despesas adicionais de capital envolvem os custos relacionados ao incremento da área de troca térmica, assim como o custo com equipamentos novos tanto para troca de calor quanto para manipulação de pressão, incluindo o motor auxiliar. Assim, a função de objetivo pode ser expressa pela Eq. (5.35).

$$C_{total} = C_{capital}^{add} + C_{operational}^{add} \quad (5.35)$$

No qual,

$$C_{operational}^{add} = \sum_i \sum_n CC \cdot Q_{i,n}^{add} + \sum_m \sum_j CH \cdot Q_{m,j}^{add} + \sum_v CE \cdot Wc_v^s + CE \cdot Wh$$

$$C_{capital}^{add} = f \cdot \left[\begin{aligned} &\sum_{Hex} CPO_{Hex} \cdot FBM_{Hex} + \sum_{Cooler} CPO_{Cooler} \cdot FBM_{Cooler} + \sum_{Heater} CPO_{Heater} \cdot FBM_{Heater} \\ &+ \sum_v CPO_v \cdot FBM_v + \sum_t CPO_t \cdot FBM_t + CPO^{hm} \cdot FBM^{hm} \end{aligned} \right]$$

Em que CC , CH e CE são os parâmetros de custo para as utilidades frias e quentes, bem como para a energia elétrica, respectivamente. O termo FBM é o fator de correlação para o custo básico do equipamento, e CPO indica o custo de uma unidade de equipamento (em US\$), obtido a partir das correlações de Turton et al. (2003) para trocadores de calor, aquecedores e resfriadores. Para a estimativa de custos de compressores, turbinas e motores auxiliares, as correlações de Couper et al. (2010) são utilizadas. Essas correlações foram corrigidos de acordo com o índice CEPCI (sigla em inglês para *Chemical Engineering Plant Cost Index*) para o ano de 2012. Os custos de compressores e turbinas associados aos eixos SSTC são considerados 20% mais elevados do que o mesmo equipamento fora do eixo. O termo f é o fator de anualização para o custo de capital definido por Smith (2005). Dado r como a taxa de juros por ano e ny como o número de anos, então:

$$f = \frac{(1+r)^{ny} - 1}{r} \quad (5.36)$$

5.4 Estudos de Casos

Três estudos de casos são realizados para verificar a acurácia do modelo proposto quanto ao *retrofit* de RTCs com recuperação de pressão. Em todos os três casos estudados, a manipulação de pressão de correntes de processo em condições subambiente é avaliada, incluindo uma aplicação industrial real relacionada à produção de gás natural liquefeito.

Exemplo 5.1. Este exemplo é adaptado de Wechsung et al. (2011). Neste exemplo, o *retrofit* da RTC de um processo subambiente, composto por uma corrente quente (H1) e duas correntes frias (C1 e C2) é avaliado em termos de sua viabilidade econômica. A recuperação de pressão é realizada de forma simultânea à integração de calor das correntes. Assim, a corrente quente H1 e a corrente fria C1 estão à pressão constante, enquanto a segunda corrente fria C2 é expandida de 0,4 a 0,1 MPa. A rota de manipulação de pressão e integração térmica da corrente C2 inclui os seguintes passos consecutivos: aquecimento, expansão, aquecimento, compressão, resfriamento, expansão e aquecimento. Como consequência, C2 comporta-se como C3 após a primeira expansão, como H2 após a compressão e, finalmente, como C4 após a última expansão.

A Figura 5.2 apresenta o possível arranjo de correntes para este exemplo. Neste exemplo, as temperaturas intermediárias desconhecidas das correntes podem variar entre 103 e 373 K, a pressão de C3 está restrita a 0,1–0,4 MPa e a pressão de H2 está limitada entre 0,1–0,6 MPa. A capacidade calorífica e as vazões de todas as correntes são constantes conhecidas. Além disso, são considerados $\Delta T_{\min} = 4$ K, $T^h_U = 383$ K, $T^c_U = 93$ K, $\kappa = 1,352$, $\eta_t = 0,7$ e $\eta_v = 0,7$. O coeficiente de transferência de calor para todas as correntes é igual a 0,1 kW/m²K, e para utilidades quentes e frias o mesmo coeficiente é igual a 1,0 kW/m²K. Os dados das correntes de processo, assim como a RTC existente (i.e., equipamentos de troca de calor disponíveis) considerada para o *retrofit* são apresentados na Tabela 5.1. Neste caso, a rede existente não atende às especificações energéticas do processo. Um fator de custo anualizado $f = 0,18$, correspondente a 10% de taxa de juros em um período de 8 anos, é assumido para a estimativa de custos do *retrofit*. Para o *retrofit* da RTC, considera-se uma superestrutura com 4 estágios de integração térmica e possibilidade de divisão de correntes.

Dois estudos de casos distintos são realizados neste exemplo. Inicialmente, o *retrofit* da RTC é realizado sem a manipulação de pressão da corrente C2. No segundo estudo de caso, o modelo proposto para o *retrofit* com recuperação de pressão é usado para o projeto da rede considerando os equipamentos térmicos existentes, assim como o uso de compressores e expansores acoplados com motores auxiliares e, a venda de eletricidade gerada por turbinas autônomas. Em todos os casos estudados, considera-se a minimização da função objetivo composta pelo custo total anualizado do *retrofit* da RTC.

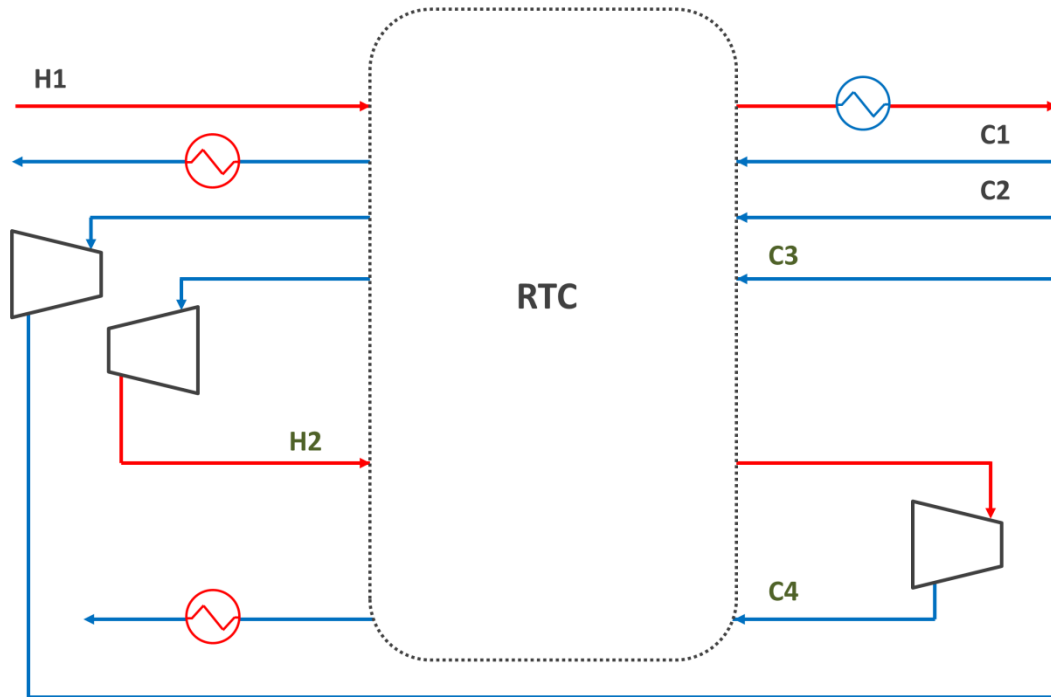


Figura 5.2. Possível arranjo de correntes para o Exemplo 5.1.

Tabela 5.1

Dados das correntes e RTC existente para o Exemplo 5.1.

Corrente	FC_p (kW/K)	h (kW/m ² K)	T_{in} (K)	T_{out} (K)	P (MPa)	
H1	3,0	0,1	288	123	0,1	
C1	2,0	0,1	213	288	0,1	
C2	1,7	0,1	113	-	0,4	
C3	1,7	0,1	-	-	-	
H2	1,7	0,1	-	-	-	
C4	1,7	0,1	-	288	0,1	
<i>RTC existente</i>		A (m ²)	Q (kW)			
H1.C1.k1		120	-			
H1.C2.k2		160	-			
H1.W1		20	60			
S1.C1		8	24			
S1.C2		8	80			

Dados de custo: $CW = 1150,00$ US\$/ano kW; $CS = 337,00$ US\$/ano kW; $CE = 455,04$ US\$/ano kW; $CV = 400,00$ US\$/ano kW

No Caso 1, a configuração ótima obtida para o *retrofit* da RTC é composta por dois trocadores de calor de áreas (quantidade de calor trocada) iguais a $115,83 \text{ m}^2$ ($Q = 120,21 \text{ kW}$) e $160,00 \text{ m}^2$ ($Q = 211,67 \text{ kW}$), um resfriador ($A = 86,80 \text{ m}^2$ – $Q = 163,12 \text{ kW}$) e dois aquecedores ($A = 4,44 \text{ m}^2$ – $Q = 29,79 \text{ kW}$ e $A = 8,00 \text{ m}^2$ – $Q = 85,83 \text{ kW}$). A Figura 5.3 apresenta a configuração ótima obtida para o *retrofit* da RTC neste caso. Desta forma, todos os equipamentos existentes na RTC foram utilizados no processo de *retrofit* da rede. Contudo, o resfriador H1.W1 necessita de uma área adicional de $66,80 \text{ m}^2$, equivalente a uma quantidade de calor adicional de $103,12 \text{ kW}$. Os aquecedores S1.C1 e S1.C2 necessitam de quantidades de calor adicionais de $5,79 \text{ kW}$ e $5,83 \text{ kW}$, respectivamente, para satisfazer a demanda de energia do processo. Neste caso, o custo total anualizado (C_{total}) correspondente a área adicional de equipamentos, e referente a serviços térmicos adicionais de aquecimento e resfriamento de correntes é igual a $148,7 \text{ kUS\$/ano}$ ($C_{capital} = 26,2 \text{ kUS\$/ano}$ e $C_{operational} = 122,5 \text{ kUS\$/year}$).

No Caso 2, a configuração ótima obtida para o *retrofit* da RTC com recuperação de pressão é composta por três trocadores de calor de áreas (quantidade de calor trocada) de 120 m^2 ($Q = 125,59 \text{ kW}$), $243,79 \text{ m}^2$ ($Q = 156,52 \text{ kW}$) e $195,89 \text{ m}^2$ ($Q = 160,78 \text{ kW}$). Além disso, são usados dois aquecedores de mesma área igual a 8 m^2 ($Q = 24,41 \text{ kW}$ e $Q = 85,83 \text{ kW}$), e um resfriador de 20 m^2 ($Q = 52,12 \text{ kW}$). Desta forma, todos os equipamentos existentes na RTC foram aproveitados novamente durante o *retrofit* da RTC. Contudo, ao ser considerada a manipulação de pressão da corrente C2, o trocador de calor H1.C2.k2 necessita uma área de troca térmica adicional de $83,79 \text{ m}^2$ e, um novo trocador de calor localizado em H1.C4.k2 necessita ser usado no processo. A Figura 5.4 apresenta a configuração da RTC ótima obtida neste caso, no qual os trocadores de calor hachurados indicam trocadores existentes na RTC que foram reutilizados.

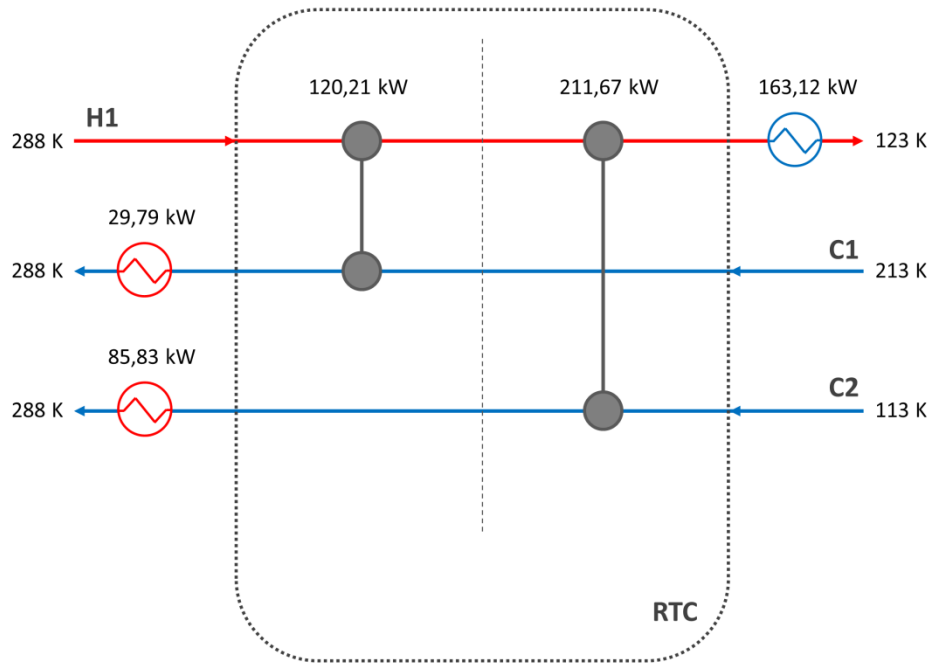


Figura 5.3. Configuração ótima obtida para o retrofit da RTC no Exemplo 5.1 – Caso 1.

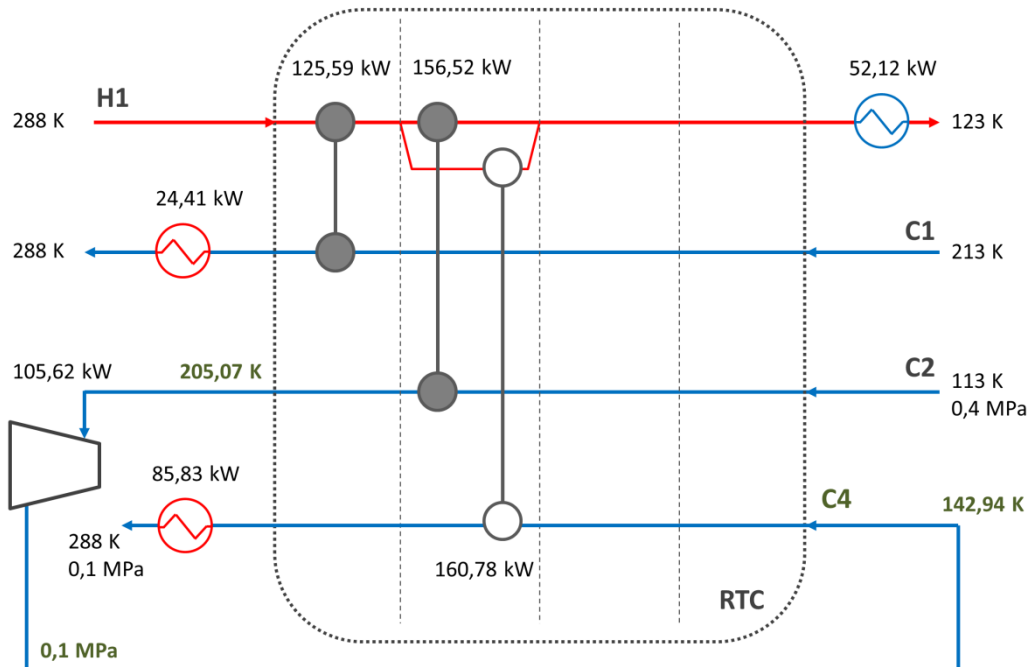


Figura 5.4. Configuração ótima obtida para o retrofit da RTC no Exemplo 5.1 – Caso 2.

Neste caso, o aquecedor localizado na corrente C2 é deslocado para a saída da corrente C4 devido ao processo de manipulação de pressão. Em adição aos equipamentos térmicos da RTC, uma turbina autônoma de capacidade de 105,62 kW é utilizada para a expansão de C2. Como consequência, a quantidade de calor adicional necessária às utilidades térmicas é reduzida—comparativamente ao Caso 1—a 0,41 kW (S1.C1), 5,83 kW (S1.C4) e a 0 kW para o resfriador (H1.W1). O custo total anualizado do retrofit da RTC, referente à área e quantidade de calor adicionais e ao expensor é igual a 54,9 kUS\$/ano, composto por 95,1 kUS\$/ano relacionados ao custo de capital de investimento e 2,1 kUS\$/ano em despesas operacionais. A venda de eletricidade gerada pela turbina é responsável por uma receita de 42,3 kUS\$/ano já descontado do custo total anualizado. Assim, o custo total do *retrofit* da RTC com recuperação de pressão é 37% menor em relação ao custo total obtido no Caso 1, no qual o *retrofit* é realizado sem a manipulação de pressão da corrente C2.

Os resultados das configurações e variáveis de decisão obtidas para o *retrofit* da RTC para os Casos 1 e 2 são apresentados na Tabela 5.2. A redução do custo total anualizado do *retrofit* é devida à utilização do expensor que, além de produzir energia que pode ser vendida ou aproveitada em outras etapas do processo, é responsável pela redução das despesas relacionadas com o resfriamento de fluidos, como resultado da diminuição significativa da necessidade de serviços frios.

No Caso 1, o modelo matemático contém 105 variáveis contínuas, 23 variáveis discretas, 134 restrições com 349 elementos Jacobianos (não-nulos), dos quais 32 são elementos não-lineares. No Caso 2, o modelo matemático contém 534 variáveis contínuas, 110 variáveis discretas, 697 restrições com 1852 elementos Jacobianos (não-nulos), dos quais 211 são elementos não-lineares. O tempo de processamento para o Caso 1 é de 15 s e para o Caso 2 é de 1,14 min, ambos com o *solver* SBB sob o *software* GAMS.

Tabela 5.2Configurações e variáveis de decisão obtidas para o *retrofit* da RTC no Exemplo 5.1.

<i>Caso 1</i>				<i>Caso 2</i>			
Variáveis de decisão	T_{in} (K)	T_{out} (K)	P (MPa)	Variáveis de decisão	T_{in} (K)	T_{out} (K)	P (MPa)
C2	-	-	-	C2	-	205,07	-
C3	-	-	-	C3	205,07	205,07	0,4
H2	-	-	-	H2	205,07	205,07	0,4
C4	-	-	-	C4	142,94	-	-
RTC	Q (kW)	A (m ²)	W (kW)	RTC	Q (kW)	A (m ²)	W (kW)
H1.C1.k1	120,21	115,83	-	H1.C1.k1	125,59	120,00	-
H2.C2.k2	211,67	160,00	-	H1.C2.k2	156,52	243,79	-
H1	163,12	86,80	-	H1.C4.k2	160,78	195,89	-
C1	29,79	4,44	-	H1	52,12	20,00	-
C2	85,83	8,00	-	C1	24,41	8,00	-
				C4	85,83	8,00	-
				<i>Turbinas autônomas</i>	-	-	105,62
	C_{total} (kUS\$/ano)		148,7		C_{total} (kUS\$/ano)		54,9

Exemplo 5.2. Neste exemplo, uma corrente quente H1 e uma corrente fria C1 estão à pressão constante, enquanto uma segunda corrente C2 é submetida à manipulação de pressão, passando de um estado inicial de 3,0 MPa até um estado final de 0,1 MPa. O *retrofit* da RTC com correntes submetidas às condições subambiente é realizado de forma que a integração térmica na RTC ocorra entre os estágios de recuperação de pressão. Assim, a rota de manipulação de pressão e integração térmica da corrente C2 inclui os seguintes passos consecutivos: aquecimento, expansão, aquecimento, compressão, resfriamento, expansão e aquecimento. Como consequência, C2 comporta-se como C3 após a primeira expansão, como H2 após a compressão e, finalmente, como C4 após a última expansão. O possível arranjo de correntes para este exemplo é mostrado na Figura 5.2.

Neste exemplo, as temperaturas intermediárias desconhecidas das correntes podem variar entre 103 e 383 K, a pressão de C3 está restrita a 0,1–2,0 MPa e, a pressão de H2 está limitada entre 2,0–3,0 MPa. A capacidade calorífica e as vazões de todas as correntes são constantes conhecidas. O coeficiente de transferência de calor para todas as correntes é igual a 0,1 kW/m²K, e para utilidades quentes e frias o mesmo coeficiente é igual a 1,0 kW/m²K. Além disso, são considerados $\Delta T_{\min} = 4$ K, $T_U^h = 383$ K, $T_U^c = 93$ K, $\kappa = 1,352$, $\eta_t = 0,7$ e $\eta_v = 0,7$. Os dados das correntes de processo, assim como a RTC existente (i.e., equipamentos disponíveis) considerada para o *retrofit* são apresentados na Tabela 5.3. Neste caso, a rede existente não atende às especificações energéticas do processo necessitando ser reprojeta.

Um fator de custo anualizado $f = 0,18$, correspondente a 10% de taxa de juros em um período de 8 anos, é assumido para a estimativa de custos do *retrofit* da RTC. Para o *retrofit*, considera-se uma superestrutura com 4 estágios de integração térmica e possibilidade de divisão de correntes.

Tabela 5.3

Dados das correntes e RTC existente para o Exemplo 5.2.

Corrente	FCp (kW/K)	h (kW/m ² K)	T_{in} (K)	T_{out} (K)	P (MPa)
H1	3,5	0,1	365	108	3,0
C1	4,2	0,1	220	300	3,0
C2	1,8	0,1	103	-	3,0
C3	1,8	0,1	-	-	-
H2	1,8	0,1	-	-	-
C4	1,8	0,1	-	290	0,1
<i>RTC existente</i>		A (m ²)	Q (kW)		
H1.C1.k1		120	-		
H1.C2.k2		180	-		
H1.W1		80	100		
S1.C2		10	80		

Dados de custo: $CW = 1150,00$ US\$/ano kW; $CS = 337,00$ US\$/ano kW; $CE = 455,04$ US\$/ano kW; $CV = 400,00$ US\$/ano kW

Dois estudos de casos distintos são realizados neste exemplo para avaliar a viabilidade econômica do *retrofit* da RTC. Desta forma, no primeiro caso o *retrofit* da RTC é considerado sem a manipulação de pressão de correntes, enquanto no segundo estudo de caso, o modelo proposto para o *retrofit* com recuperação de pressão é usado para o projeto da rede considerando os equipamentos térmicos existentes, assim como o uso de compressores e expansores acoplados com motores auxiliares e, a venda de eletricidade gerada por turbinas autonômas. Em todos os casos estudados, considera-se a minimização da função objetivo composta pelo custo total anualizado do *retrofit* da RTC.

No Caso 1, a configuração ótima obtida para o *retrofit* é composta por dois trocadores de calor de áreas (quantidade de calor trocada) iguais a $120,00 \text{ m}^2$ ($Q = 336,00 \text{ kW}$) e $161,51 \text{ m}^2$ ($Q = 277,12 \text{ kW}$), um aquecedor de área $8,32 \text{ m}^2$ ($Q = 59,48 \text{ kW}$) e um resfriador de área $94,66 \text{ m}^2$ ($Q = 286,38 \text{ kW}$). Assim, todos os equipamentos existentes na RTC foram reaproveitados no *retrofit* da rede. Contudo, o resfriador localizado na corrente H1 necessita uma área adicional de $14,66 \text{ m}^2$, responsável por uma quantidade de calor adicional de $186,38 \text{ kW}$. A Figura 5.5 apresenta a configuração ótima obtida para o *retrofit* da RTC neste caso. O custo total anualizado do *retrofit* da RTC com essa configuração é de $238,1 \text{ kUS\$/ano}$, composto por $23,8 \text{ kUS\$/ano}$ referente ao custo de capital com a área adicional de equipamentos e, $214,3 \text{ kUS\$/ano}$ relacionados com despesas operacionais adicionais de resfriamento de correntes de processo.

No Caso 2, a configuração ótima obtida para o *retrofit* da RTC com recuperação de pressão é composta por quatro trocadores de calor de áreas (quantidade de calor trocada) de 120 m^2 ($Q = 336,00 \text{ kW}$), $180,00 \text{ m}^2$ ($Q = 119,11 \text{ kW}$), $81,47 \text{ m}^2$ ($Q = 97,35 \text{ kW}$) e $102,32 \text{ m}^2$ ($Q = 256,60 \text{ kW}$). Além disso, são usados um aquecedor de área igual a 10 m^2 ($Q = 80,00 \text{ kW}$), e um resfriador de 80 m^2 ($Q = 90,45 \text{ kW}$). Desta forma, todos os equipamentos existentes na RTC foram aproveitados novamente no *retrofit* da RTC. Contudo, ao ser considerado a manipulação de pressão da corrente C2, dois novos trocadores de calor (H1.C3.k2 e H1.C4.k3) são necessários no processo, correspondendo a uma área adicional de troca térmica de $183,79 \text{ m}^2$. A Figura 5.6 apresenta a configuração da RTC ótima obtida neste caso, no qual os trocadores de calor hachurados indicam trocadores existentes na RTC que foram reutilizados. Neste caso, o resfriador localizado na corrente C2 é deslocado para a saída da corrente C4 devido ao processo de manipulação de pressão.

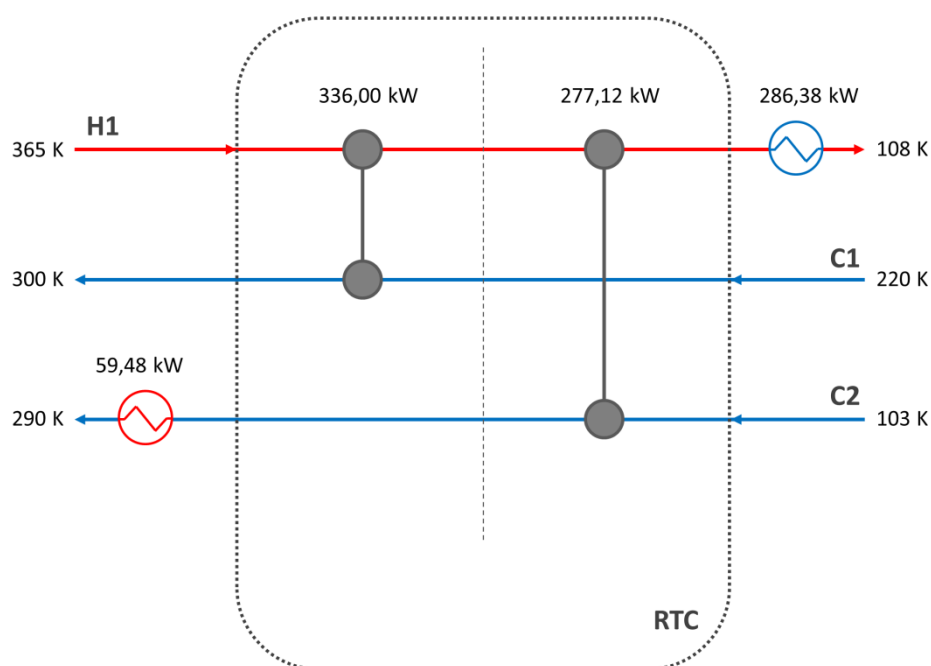


Figura 5.5. Configuração ótima obtida para o *retrofit* da RTC no Exemplo 5.2 – Caso 1.

Em adição aos equipamentos térmicos da RTC, uma turbina autônoma de capacidade de 241,46 kW, e um compressor (125 kW) acoplado a um expansor (100 kW) com um motor auxiliar (25 kW) são utilizados para a manipulação de pressão de correntes de processo. Neste caso, o expansor alocado no eixo é capaz de suprir 80% da demanda energética do compressor, sendo necessário a utilização do motor auxiliar para satisfazer o balanço de energia no eixo de acoplamento. Como consequência do processo de recuperação de pressão, nenhuma quantidade de calor adicional é necessária às utilidades térmicas e, portanto, nenhum custo adicional referente a serviços térmicos de aquecimento e resfriamento é somado ao processo. O custo total anualizado do *retrofit* da RTC, referente à área adicional de troca térmica, bem como aos novos equipamentos para manipulação de pressão é igual a 212,1 kUS\$/ano, composto por 297,3 kUS\$/ano relacionados com o custo de capital de investimento e 85,2 kUS\$/ano em receita proveniente da venda de eletricidade gerada pela turbina autônoma, já descontado o custo de eletricidade consumido pelo motor auxiliar. Assim, o custo total do *retrofit* da RTC com recuperação de pressão é 11% menor em relação ao custo total obtido no Caso 1, no qual o *retrofit* é realizado sem a manipulação de pressão da corrente C2. Os resultados das configurações e variáveis de decisão obtidas para o *retrofit* da RTC para os Casos 1 e 2 são apresentados na Tabela 5.4.

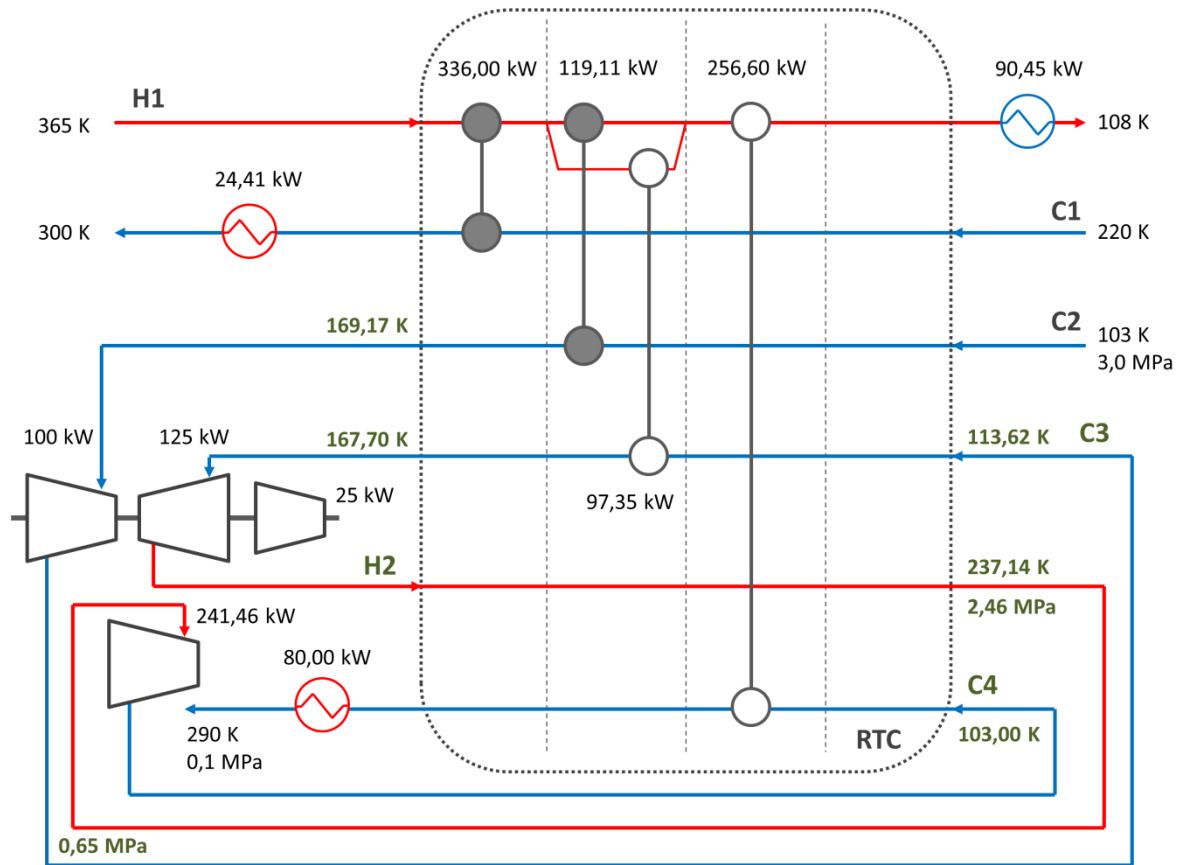


Figura 5.6. Configuração ótima obtida para o *retrofit* da RTC no Exemplo 5.2 – Caso 2.

A redução do custo total anualizado do *retrofit* da RTC é devida à utilização dos equipamentos para manipulação de pressão. Estes equipamentos são responsáveis pela redução das despesas relacionadas com o resfriamento de fluidos, como resultado da diminuição significativa da necessidade de serviços frios. Além disso, apesar do aumento significativo com o custo de capital de investimento em equipamentos, a receita proveniente da venda de eletricidade gerada na rede, assim como a redução de despesas associadas ao resfriamento de fluidos, tornam o *retrofit* da RTC com recuperação de pressão viável economicamente.

No Caso 1, o modelo matemático contém 105 variáveis contínuas, 23 variáveis discretas, 134 restrições com 349 elementos Jacobianos (não-nulos), dos quais 32 são elementos não-lineares. No Caso 2, o modelo matemático contém 534 variáveis contínuas, 110 variáveis discretas, 697 restrições com 1852 elementos Jacobianos (não-nulos), dos quais 211 são elementos não-lineares. O tempo de processamento para o Caso 1 é de 15 s e para o Caso 2 é de 6,48 min, ambos com o *solver* SBB sob o *software* GAMS.

Tabela 5.4Configurações e variáveis de decisão obtidas para o *retrofit* da RTC no Exemplo 5.2.

<i>Caso 1</i>				<i>Caso 2</i>			
Variáveis de decisão	T_{in} (K)	T_{out} (K)	P (MPa)	Variáveis de decisão	T_{in} (K)	T_{out} (K)	P (MPa)
C2	-	-	-	C2	-	169,17	-
C3	-	-	-	C3	113,62	167,70	0,65
H2	-	-	-	H2	237,14	237,14	2,46
C4	-	-	-	C4	103,00	-	-
RTC	Q (kW)	A (m ²)	W (kW)	RTC	Q (kW)	A (m ²)	W (kW)
H1.C1.k1	336,00	120,00	-	H1.C1.k1	336,00	120,00	-
H2.C2.k2	277,12	161,51	-	H1.C2.k2	119,11	180,00	-
H1	286,38	94,66	-	H1.C3.k2	97,35	81,47	-
C2	59,48	8,32	-	H1.C4.k3	256,60	102,32	-
				H1	90,45	80,00	-
				C4	80,00	10,00	-
				<i>Turbinas</i>			
				<i>autônomas</i>	-	-	241,46
				<i>compressor</i>			
				<i>(eixo)</i>	-	-	125,00
				<i>turbina</i>			
				<i>(eixo)</i>	-	-	100,00
				<i>Motor</i>			
				<i>auxiliary</i>	-	-	25,00
	C_{total} (kUS\$/ano)		238,1		C_{total} (kUS\$/ano)		212,1

Exemplo 5.3. Este exemplo é adaptado de Wechsung et al. (2011). O gás natural (GN) é liquefeito para produzir gás natural liquefeito (GNL) na seção no mar do processo da cadeia energética para transporte e utilização de GNL, através do resfriamento com dióxido de carbono líquido CO₂L e nitrogênio líquido inerte NLI (veja Figura 5.1). O nitrogênio reaquecido é emitido para a atmosfera sob condições ambientes, enquanto que o CO₂ à alta

pressão é transferido para um campo de petróleo no mar (Aspelund et al., 2010, 2009a, 2009b; Aspelund & Gundersen, 2009a, 2009b, 2009c; Kumar et al., 2011). Neste exemplo, como se trata de uma aplicação industrial real, a capacidade calorífica das correntes de processo não é constante. Desta forma, como sugerido por Wechsung et al. (2011), a vazão de GN é dividida em três correntes distintas (H1–H3), o que resulta em um bom ajuste na curva de resfriamento real. De forma análoga, a corrente de CO₂L é dividida em duas correntes individuais (C1 e C2) e a corrente de NLI é dividida em três correntes distintas (C3–C5) para obter um ajuste mais preciso das capacidades caloríficas destas correntes. As temperaturas de entrada e saída das correntes de GN e CO₂L, assim como a temperatura de entrada da corrente de NLI são parâmetros conhecidos para o *retrofit* da RTC. As pressões de GN e CO₂L são mantidas fixas, enquanto que a corrente de NLI é expandida de 10 MPa até 0,1 MPa, de acordo com a Figura 5.7. As temperaturas e pressões intermediárias da corrente de NLI são variáveis de otimização do problema. Todas as vazões das correntes são fixas e, os cálculos do *retrofit* do processo são baseados na taxa de produção de 1,0 kg/s de GNL. Assim, se 90% do dióxido de carbono gerado for capturado no processo, a vazão de CO₂L na seção no mar da cadeia produtiva de GNL é igual a 2,46 kg/s.

Os dados das correntes e os equipamentos térmicos existentes no processo são apresentados na Tabela 5.5. Neste caso, a rede existente não atende às especificações energéticas do processo necessitando ser reprojeta. A rota de manipulação de pressão da corrente de NLI (C5) inclui três etapas consecutivas de expansão, compressão e expansão, com integração térmica na RTC entre cada uma dessas etapas. Como resultado, a corrente C5 comporta-se como uma corrente fria C6 após a primeira etapa de expansão, como H4 após a compressão e, finalmente, como C7 após a última etapa de expansão. De forma geral, o *retrofit* da RTC com recuperação de pressão é modelado com quatro correntes quentes (H1–H4) e sete correntes frias (C1–C7). A recuperação de pressão é realizada através de duas turbinas e um compressor, no qual um expansor pode estar acoplado ao compressor com um motor auxiliar. Em decorrência da alta pressão e baixa temperatura da corrente de NLI (C5), a manipulação de pressão de C5 não pode ser considerada ideal. Para modelar o comportamento não-ideal desta corrente, um expoente politrópico de 1,51 e um fator de eficiência isentrópica de 0,7 são assumidos no processo. Neste exemplo, a pressão de C6 é limitada entre 0,3 MPa e 1 MPa, enquanto que a pressão de H4 é restrita entre 1 MPa e 3,5 MPa. Todas as temperaturas de entrada desconhecidas das correntes são limitadas entre 95,15 K e 380,15 K.

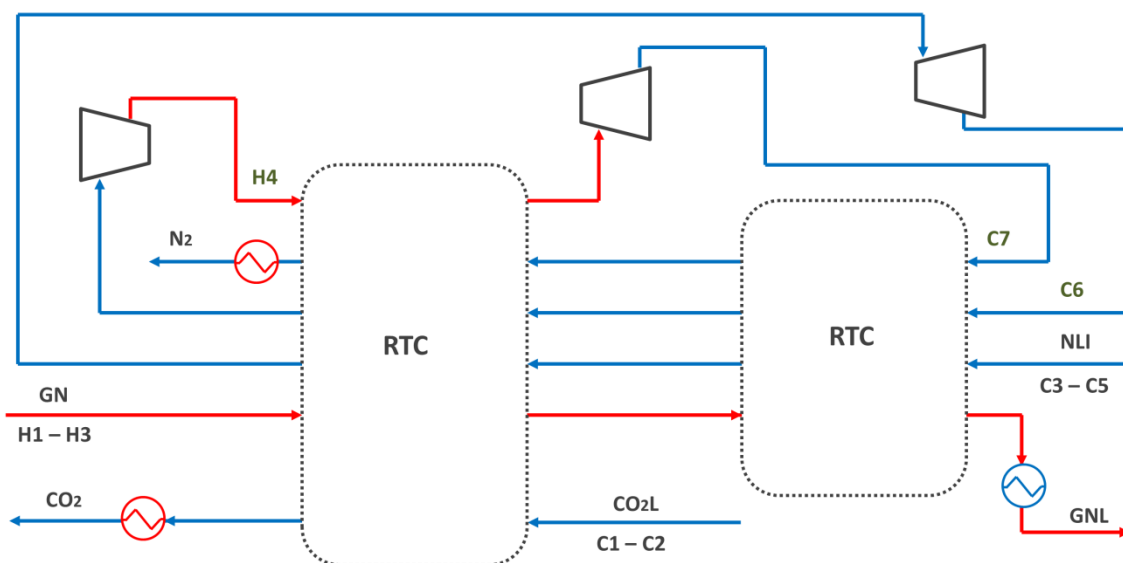


Figura 5.7. Diagrama de processo para produção na seção no mar de GNL. Fonte: Adaptado de Wechsung et al. (2011)

Em adição, são dados do processo $\Delta T_{\min} = 4 \text{ K}$, $T^c_U = 93,15 \text{ K}$ e $T^h_U = 383,15 \text{ K}$. O coeficiente de transferência de calor para todas as correntes é igual a $0,1 \text{ kW/m}^2\text{K}$ e, para as utilidades quentes e fria igual a $1,0 \text{ kW/m}^2\text{K}$. A vazão do fluxo de NLI é fixo em $1,0 \text{ kg/s}$. Além disso, um fator de custo anualizado f de $0,18$, correspondente a 10% de taxa de juros em um período de 8 anos, é assumido para a estimativa de custos do *retrofit* da RTC. Para o *retrofit* da RTC, considera-se uma superestrutura com 4 estágios de integração térmica e possibilidade de divisão de correntes. Para o *retrofit* da RTC são considerados quatro trocadores de calor, dois aquecedores e dois resfriadores existentes no processo, com a possibilidade de adição de área de troca térmica nos equipamentos existentes, bem como a utilização de novos equipamentos para troca de calor e manipulação de pressão. O objetivo final consiste na minimização do custo total anualizado, composto por despesas operacionais adicionais e custo de capital de investimento em novas unidades da rede.

Tabela 5.5

Dados das correntes e RTC existente para o Exemplo 5.3.

Corrente	F (kg/s)	C_p (kJ/kg K)	h (kW/m ² K)	T_{in} (K)	T_{out} (K)	P (MPa)
H1-NG	1,0	3,46	0,1	319,80	265,15	10,0
H2-NG	1,0	5,14	0,1	265,15	197,35	10,0
H3-NG	1,0	3,51	0,1	197,35	104,75	10,0
C1-LCO ₂	2,46	2,11	0,1	221,12	252,55	6,0
C2-LCO ₂	2,46	2,48	0,1	252,55	293,15	6,0
C3-LIN	-	2,48	0,1	103,45	171,05	10,0
C4-LIN	-	1,80	0,1	171,05	218,75	10,0
C5-LIN	-	1,18	0,1	218,75	-	10,0
C6-LIN	-	1,07	0,1	-	-	-
H4-LIN	-	1,15	0,1	-	-	-
C7-LIN	-	1,04	0,1	-	-	0,1
<i>Existent network</i>		A (m ²)	Q (kW)			
H1.C2.k1		50	-			
H1.C4.k2		25	-			
H2.C3.k2		30	-			
H3.C3.k4		60	-			
H2.W1		20	200			
H3.W1		85	180			
S1.C1		15	150			
S1.C2		15	130			

Dados de custo: $CW = 1150,00$ US\$/ano kW; $CS = 337,00$ US\$/ano kW; $CE = 455,04$ US\$/ano kW; $CV = 400,00$ US\$/ano kW

Neste caso, a configuração ótima obtida para o *retrofit* da RTC com recuperação de calor é composta por seis trocadores de calor de áreas 50,00 m² (H1.C2.k1 com $Q = 103,23$ kW), 20,91 m² (H1.C4.k2 com $Q = 85,86$ kW), 6,12 m² (H2.C3.k2 com $Q = 29,74$ kW), 29,61 m² (H2.C6.k3 com $Q = 95,88$ kW), 60,00 m² (H3.C3.k4 com $Q = 137,91$ kW) e 7,74 m² (H4.C2.k4 com $Q = 13,69$ kW). Assim, todos os trocadores de calor existentes foram aproveitados no *retrofit* da RTC e, dois novos equipamentos—H2.C6.k3 e H4.C2.k4—foram

adicionados à RTC. Além disso, dois aquecedores, S1.C1 e S1.C2, de áreas de 15 m² ($Q = 222,87$ kW e $Q = 187,12$ kW) cada um, e dois resfriadores, H2.W1 e H3.W1, de áreas de 27,74 m² ($Q = 163,14$ kW) e 83,99 m² ($Q = 130,77$ kW), respectivamente, existentes na rede foram reutilizados no *retrofit* da RTC. Desta forma, são necessários 45,09 m² de área de troca térmica adicional e, uma quantidade de calor adicional de 29,99 kW para o aquecimento e 13,91 kW para o resfriamento de fluidos no processo. Em adição aos equipamentos para integração térmica, dois expansores (100 kW e 172,92 kW) e um compressor (125 kW) são utilizados para a recuperação de pressão da corrente de NLI, no qual o compressor está acoplado ao primeiro expensor com um motor auxiliar de 25 kW de capacidade. A Figura 5.8 apresenta a configuração ótima obtida para o *retrofit* da RTC com recuperação de pressão do processo no mar de produção de GNL, na qual os trocadores de calor hachurados indicam os equipamentos existentes que foram reutilizados.

O trabalho de expansão produzido pela turbina autonôma (i.e, 172,92 kW) pode ser aproveitado em outras etapas do processo ou vendido na forma de eletricidade. Por outro lado, o trabalho consumido pelo compressor é suprido em 80% pela turbina e o restante pelo motor auxiliar alocados no eixo de acoplamento. Como resultado, somente o motor auxiliar consome eletricidade no processo, reduzindo as despesas operacionais. Os resultados da configuração e variáveis de decisão obtidas para o *retrofit* da RTC são apresentados na Tabela 5.6. O custo total anualizado do *retrofit* com essa configuração é de 284,0 kUS\$/ano, composto por 302,6 kUS\$/ano relativo ao custo de capital de investimento em área de troca térmica adicional e novos equipamentos—incluindo turbinas, compressor, motor de ajuda e trocadores de calor—e 39,2 kUS\$/ano em despesas operacionais adicionais com eletricidade, aquecimento e resfriamento de fluidos. Neste caso, a receita proveniente da venda de eletricidade gerada pela turbina corresponde à 57,8 kUS\$/ano.

Neste exemplo, o modelo matemático é composto por 1634 variáveis contínuas, 373 variáveis discretas, 2077 restrições com 5801 elementos Jacobianos (não-nulos), dos quais 632 são elementos não-lineares. O tempo de processamento é de 30,4 min, com o *solver* SBB sob o *software* GAMS.

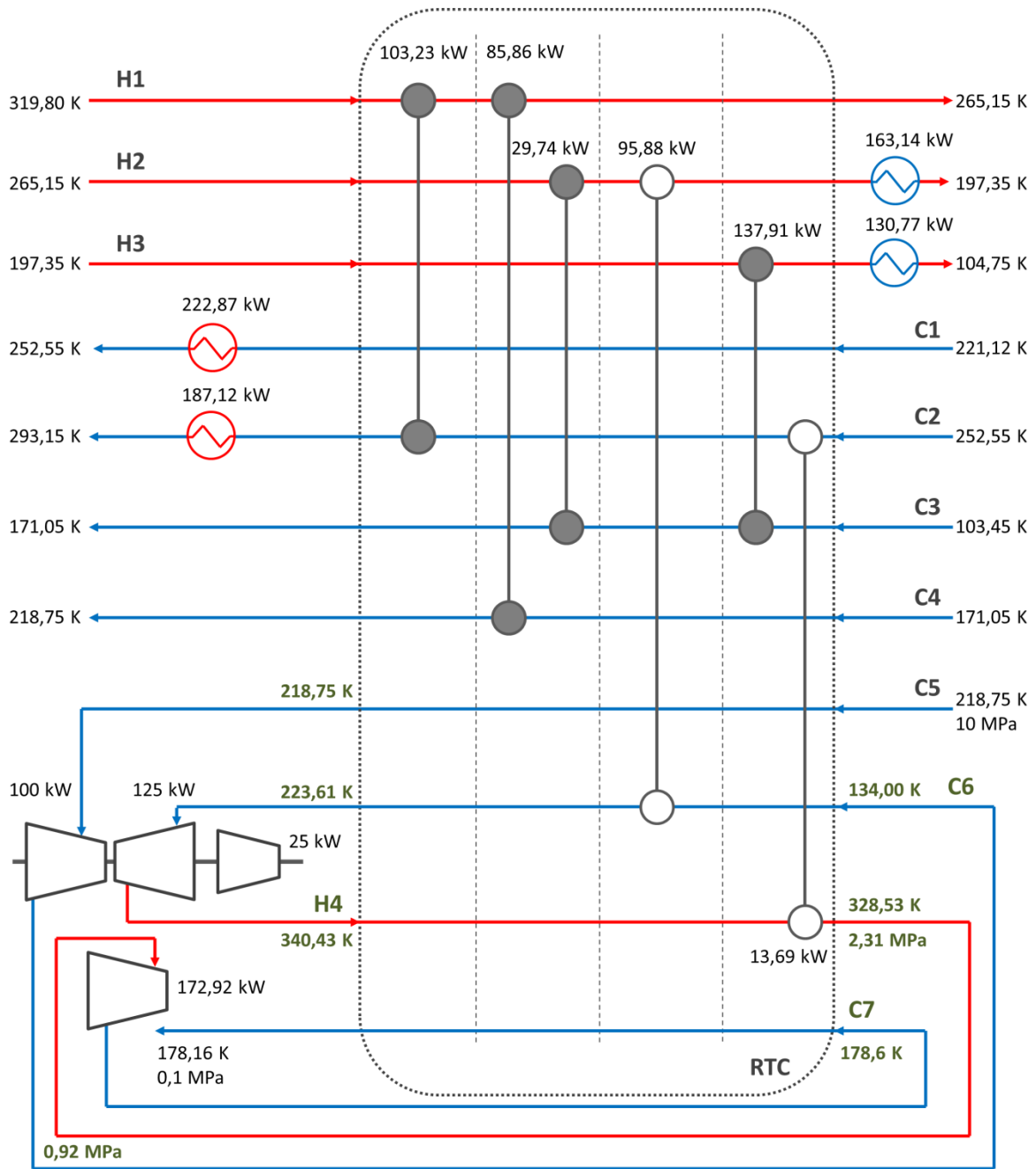


Figura 5.8. Configuração ótima obtida para o retrofit da RTC no Exemplo 5.3.

Tabela 5.6Configuração e variáveis de decisão obtidas para o *retrofit* da RTC no Exemplo 5.3.

Variáveis de decisão	T_{in} (K)	T_{out} (K)	P (MPa)
C5-LIN	-	218,75	-
C6-LIN	134,00	223,61	0,92
H4-LIN	340,43	328,53	2,31
C7-LIN	178,16	178,16	-
RTC	Q (kW)	A (m ²)	W (kW)
H1.C2.k1	103,23	50,00	-
H1.C4.k2	85,86	20,91	-
H2.C3.k2	29,74	6,12	-
H2.C6.k3	95,88	29,61	-
H3.C3.k4	137,91	60,00	-
H4.C2.k4	13,69	7,74	-
H2	163,14	27,74	-
H3	130,77	83,99	-
C1	222,87	15,00	-
C2	187,12	15,00	-
<i>Turbinas autônomas</i>	-	-	172,92
<i>Compressor (eixo)</i>	-	-	125,00
<i>Turbina (eixo)</i>	-	-	100,00
<i>Motor auxiliary</i>	-	-	25,00
	C_{total} (kUS\$/ano)		284,0

5.5 Conclusões

Um novo modelo matemático para o *retrofit* de redes de trocadores de calor (RTCs) é proposto, no qual a recuperação de pressão de correntes de processo é usada para melhorar a integração de calor. A superestrutura multi-estágio desenvolvida é formulada em programação não-linear mista inteira (PNLMI). Considera-se a possibilidade de divisão de correntes e são assumidos taxa de fluxo de capacidade de calor constante e mistura isotérmica. Durante o *retrofit* da rede todos os equipamentos para troca de calor, incluindo trocadores de calor, aquecedores e resfriadores, disponíveis na RTC existente devem ser reutilizados. Nesta nova abordagem proposta, a recuperação da pressão de correntes é realizada simultaneamente com o *retrofit* da rede, por meio de estágios de expansão e compressão conectados à integração de calor na RTC. Assim, além de considerar o incremento da área de troca de calor existente, o modelo permite o uso de novos equipamentos, tanto para a troca de calor quanto para manipulação de pressão.

As correntes de processo sujeitas à compressão e expansão estão ligadas à RTC através compressores e expansores, de modo que o estado de saída da corrente do equipamento de manipulação de pressão deve corresponder ao estado de entrada na superestrutura da RTC. Deste modo, as condições do processo (pressão e temperatura das correntes) devem ser tratadas como variáveis desconhecidas que requerem otimização. Deve ser enfatizado que este fato eleva significativamente a complexidade do modelo em relação às abordagens de *retrofit* convencionais. O modelo proposto permite, ainda, o acoplamento de uma turbina e um compressor com um motor auxiliar, com o objetivo de minimizar o custo total anualizado para a implementação do *retrofit*. Neste caso, a função objetivo é composta pelas contribuições relacionadas ao custo de capital de investimento em equipamentos novos e incremento da área de troca térmica disponível, bem como despesas operacionais adicionais. Em adição, considera-se a receita proveniente da venda de eletricidade gerada pelas turbinas autônomas.

O modelo é escrito em GAMS e resolvido com *solver* SBB. Três estudos de casos são realizados para verificar a acurácia do modelo proposto, em relação ao projeto ótimo de *retrofit* de RTCs com recuperação de pressão. Em todos os casos estudados, a manipulação de pressão de correntes de processo em condições subambiente é avaliada, incluindo uma aplicação industrial real relacionada à produção de gás natural liquefeito. No primeiro exemplo estudado, os resultados obtidos para o *retrofit* da rede com recuperação de pressão

indicam uma redução de 37% do custo total anualizado adicional em relação ao custo do *retrofit* da RTC sem manipulação de pressão de correntes. Neste caso, a redução de custos é devida ao uso de uma turbina capaz de produzir energia para ser vendida ou aproveitada em outros setores de processo, e responsável por promover a diminuição significativa na necessidade de de serviços frios, extremamente caros em processos subambientes.

No segundo estudo de caso realizado, observa-se uma redução do custo total anualizado do *retrofit* na ordem de 11% em relação ao custo do *retrofit* da RTC sem recuperação de pressão de correntes. Neste caso, a utilização de uma turbina e um compressor aumentam consideravelmente o custo de capital em equipamentos novos. Por outro lado, estes equipamentos são responsáveis pela redução das despesas relacionadas com o resfriamento de fluidos, como resultado da diminuição significativa da necessidade de serviços frios. Além disso, o acoplamento da turbina e compressor com um motor auxiliar reduz os gastos com eletricidade, e aliado à venda de energia gerada pela turbina autônoma tornam o *retrofit* da RTC com recuperação de pressão viável economicamente. No último exemplo, a aplicação do modelo a um estudo de caso real indica a eficácia da abordagem proposta, quanto a obtenção de um reprojeto ótimo de RTC evidenciando a sua aplicabilidade a complexos processos criogênicos reais.

Deve ser enfatizado que a imposição de limites inferiores e superiores para as variáveis pressão e temperatura é essencial para a solução do modelo, neste caso estes limites foram especificados individualmente nos estudos de casos realizados.

Lista de Símbolos

A	área de troca térmica
A^{add}	área adicional de troca térmica
A^{bigger}	área de troca térmica maior que a área existente
A^{ex}	área de troca térmica existente
$A^{smaller}$	área de troca térmica menor que a área existente
C	custo
C^{add}	custo adicional
CC	parâmetro de custo para o resfriamento
CE	parâmetro de custo para eletricidade
CH	parâmetro de custo para o aquecimento
CPO	custo unitário de equipamento
f	fator de anualização do custo de capital
FBM	fator de correlação para o custo de equipamento
Q	quantidade de calor trocada
Q^{add}	quantidade de calor adicional
Q^{ex}	quantidade de calor existente
We^s	trabalho de expansão da turbina autônoma
We^a	trabalho da turbina alocada no eixo de acoplamento
Wc^s	trabalho de compressão do compressor autônomo
Wc^a	trabalho do compressor alocado no eixo de acoplamento
Wh	trabalho do motor auxiliar
y	variável binária que define a troca de calor entre as correntes quentes e frias
y^{bigger}	variável binária que define a utilização de trocadores de calor maiores que os existentes
$y^{smaller}$	variável binária que define a utilização de trocadores de calor menores que os existentes
y^a	variável binária que define a utilização de turbinas e compressores acoplados no eixo

y^s variável binária que define a utilização de turbinas e compressores autônomos

Subscritos:

i corrente quente
 j corrente fria
 k estágios da superestrutura
 m utilidade quente
 n utilidade fria
 t turbinas
 v compressores

Referências Bibliográficas

- Aspelund, A., Gundersen, T., Myklebust, J., Nowak, M.P., Tomasgard, A., 2010. An optimization-simulation model for a simple LNG process. *Comput. Chem. Eng.* 34, 1606–1617.
- Aspelund, A., Gundersen, T., 2009a. A liquefied energy chain for transport and utilization of natural gas for power production with CO₂ capture and storage – Part 2: The offshore and the onshore processes. *Appl. Energy* 86, 793–804.
- Aspelund, A., Gundersen, T., 2009b. A liquefied energy chain for transport and utilization of natural gas for power production with CO₂ capture and storage – Part 4: Sensitivity analysis of transport pressures and benchmarking with conventional technology for gas transport. *Appl. Energy* 86, 815–825.
- Aspelund, A., Gundersen, T., 2009c. A liquefied energy chain for transport and utilization of natural gas for power production with CO₂ capture and storage – Part 1. *Appl. Energy* 86, 781–792.
- Aspelund, A., Gundersen, T., 2009d. The liquefied energy chain. *Energy Procedia* 1, 1633–1640.
- Aspelund, A., Tveit, S.P., Gundersen, T., 2009a. A liquefied energy chain for transport and utilization of natural gas for power production with CO₂ capture and storage – Part 3: The combined carrier and onshore storage. *Appl. Energy* 86, 805–814.
- Asante, N.D.K., Zhu, X.X., 1997. An automated and interactive approach for heat exchanger network retrofit. *Trans. IChemE* 75, 349–360.
- Björk, K.-M., Nordman, R., 2005. Solving large-scale retrofit heat exchanger network synthesis problems with mathematical optimization methods. *Chem. Eng. Process. Process Intensif.* 44, 869–876.
- Couper, J.R., Penney, W.R., Fair, J.R., Walas, S.M., 2010. *Chemical Process Equipment, Selection and Design*, second ed., Elsevier, USA.
- Escobar, M., Trierweiler, J.O., 2013. Optimal heat exchanger network synthesis: A case study comparison. *Appl. Therm. Eng.* 51, 801–826.
- Furman, K.C., Sahinidis, N.V., 2002. A critical review and annotated bibliography for heat exchanger network synthesis in the 20th century. *Ind. Eng. Chem. Res.* 41, 2335–2370.

- Kovac, A., Glavic, P., Kravanja, Z., 2000. Retrofit of complex and energy intensive processes II : stepwise simultaneous superstructural approach. *Comput. Chem. Eng.* 24, 125–138.
- Kumar, S., Kwon, H.-T., Choi, K.-H., Lim, W., Cho, J.H., Tak, K., Moon, I., 2011. LNG: An eco-friendly cryogenic fuel for sustainable development. *Appl. Energy* 88, 4264–4273.
- Lara, Y., Lisbona, P., Martínez, A., Romeo, L.M., 2013. Design and analysis of heat exchanger networks for integrated Ca-looping systems. *Appl. Energy* 111, 690–700.
- Linnhoff, B., Vredeveld, D.R., 1984. Pinch technology has come of age. *Chem. Eng. Prog.* 80, 33–40.
- Liu, X., Luo, X., Ma, H., 2014. Studies on the retrofit of heat exchanger network based on the hybrid genetic algorithm. *Appl. Therm. Eng.* 62, 785–790.
- Nguyen, D.Q., Barbaro, A., Viphanurat, N., Bagajewicz, M.J., 2010. All-at-once and step-wise detailed retrofit of heat exchanger networks using an MILP model. *Ind. Eng. Chem. Res.* 49, 6080–6103.
- Onishi, V.C., Ravagnani, M.A.S.S., Caballero, J.A., 2014a. Simultaneous synthesis of work exchange networks with heat integration. *Chem. Eng. Sci.* (*in press*). Doi: 10.1016/j.ces.2014.03.018.
- Onishi, V.C., Ravagnani, M.A.S.S., Caballero, J.A., 2014b. Simultaneous synthesis of heat exchanger networks with pressure recovery: optimal integration between heat and work. *AIChE J.* 60, 893–908.
- Pan, M., Bulatov, I., Smith, R., 2013a. New MILP-based iterative approach for retrofitting heat exchanger networks with conventional network structure modifications. *Chem. Eng. Sci.* 104, 498–524.
- Pan, M., Bulatov, I., Smith, R., Kim, J.-K., 2012. Novel MILP-based iterative method for the retrofit of heat exchanger networks with intensified heat transfer. *Comput. Chem. Eng.* 42, 263–276.
- Pan, M., Bulatov, I., Smith, R., Kim, J.-K., 2013b. Optimisation for the retrofit of large scale heat exchanger networks with different intensified heat transfer techniques. *Appl. Therm. Eng.* 53, 373–386.
- Pan, M., Smith, R., Bulatov, I., 2013c. A novel optimization approach of improving energy recovery in retrofitting heat exchanger network with exchanger details. *Energy* 57, 188–200.
- Polley, G.T., Tamakloe, E., Picon Nunez, M., Ishiyama, E.M., Wilson, D.I., 2013. Applying thermo-hydraulic simulation and heat exchanger analysis to the retrofit of heat recovery systems. *Appl. Therm. Eng.* 51, 137–143.

- Razib, M.S., Hasan, M.M.F., Karimi, I.A., 2012. Preliminary synthesis of work exchange networks. *Comput. Chem. Eng.* 37, 262–277.
- Rezaei, E., Shafiei, S., 2009. Heat exchanger networks retrofit by coupling genetic algorithm with NLP and ILP methods. *Comput. Chem. Eng.* 33, 1451–1459.
- Smith, R., 2005. *Chemical Process Design and Integration*, second ed, Wiley.
- Tjoe, T.N., Linnhoff, B., 1986. Using pinch technology for process retrofit. *Chem. Eng.* 93, 47–60.
- Turton, R., Bailei, R.C., Whiting, W.B., Shaeiwitz, J.A., 2003. *Analysis, synthesis and design of chemical processes*. 2nd ed. New York, McGraw-Hill.
- Wang, Y., Smith, R., 2013. Retrofit of a heat-exchanger network by considering heat-transfer enhancement and fouling. *Ind. Eng. Chem. Res.* 51, 8527–8537.
- Wang, Y., Smith, R., Kim, J.-K., 2012. Heat exchanger network retrofit optimization involving heat transfer enhancement. *Appl. Therm. Eng.* 43, 7–13.
- Wechsung A, Aspelund A, Gundersen T, B.P., 2011. Synthesis of heat exchanger networks at subambient conditions with compression and expansion of process streams. *Process Syst. Eng.* 57, 2090–2108.
- Yee, T.F., Grossmann, I.E., 1990. Simultaneous optimization models for heat integration. II. Heat exchanger network synthesis. *Comput. Chem. Eng.* 14, 1165–1184.
- Yee, T.F., Grossmann, I.E., 1987. Optimization model for structural modifications in the retrofit of heat exchanger networks. *Proc. Found. Comput. Aided Process Oper.* 653.
- Zhang, H., Rangaiah, G.P., 2013. One-step approach for heat exchanger network retrofitting using integrated differential evolution. *Comput. Chem. Eng.* 50, 92–104.

CAPÍTULO 6

Conclusões Gerais:

Principais Contribuições, Sugestões e Publicações Realizadas

Neste capítulo são apresentadas as conclusões gerais do trabalho, incluindo as principais contribuições provenientes do desenvolvimento de cada modelo em particular, assim como sugestões para trabalhos futuros e publicações científicas realizadas ao longo do período de doutorado.

6.1 Principais Contribuições do Trabalho

Nesta tese, quatro modelos de otimização baseados em Programação Matemática foram propostos para resolver diferentes aspectos relacionados à recuperação ótima de energia em processos industriais. No Capítulo 2, um modelo de Programação Matemática é apresentado para o projeto detalhado de equipamentos de troca de calor, nomeadamente trocadores de calor do tipo casco e tubo (TCCTs). A formulação matemática da superestrutura envolve programação disjuntiva generalizada (PDG) e programação não-linear mista inteira (PNLMI), com objetivo final de obtenção de um equipamento que cumpra com todas as restrições impostas pelo processo, e apresente uma área de troca de calor e/ou custo total mínimo. O modelo segue rigorosamente as normas TEMA, através da utilização de uma tabela de 565 linhas para escolha do equipamento padronizado. Além disso, o método mais preciso de Bell-Delaware é usado para o projeto do lado casco do trocador de calor. Contudo, a principal contribuição deste modelo reside no desenvolvimento de uma abordagem de otimização baseado em uma abordagem sequencial de metas parciais objetivas. Desta forma, o conjunto total de equações de projeto é dividido em subconjuntos de equações relacionadas,

com a proposição de distintas funções objetivo baseadas no conhecimento empírico do processo. Os vários estudos de casos realizados comprovam a acurácia do modelo proposto quanto à obtenção de um projeto ótimo de TCCTs. Em todos os exemplos, o modelo desenvolvido apresenta melhores resultados em relação aos obtidos na literatura.

No Capítulo 3, um novo modelo de otimização é proposto para a síntese simultânea de redes de trocadores de calor (RTCs). A superestrutura é formulada em PDG e PNLMI com o objetivo de minimizar o custo total anualizado, composto por despesas operacionais e custo de capital de investimento em todos os equipamentos que compõem a rede. A grande inovação deste trabalho reside em tratar-se de um modelo matemático que permite o ajuste de níveis de pressão de correntes de processo com o intuito de melhorar a integração de calor, através da ótima recuperação de pressão do sistema. Desta forma, as correntes de processo passam por estágios de expansão e compressão de forma intermediária à integração térmica na RTC, de modo que as condições de processo—temperatura e pressão—são tratadas como variáveis de otimização. Ressalta-se que este fato aliado a que, neste tipo de problema, não existe uma clara distinção entre correntes quentes e frias, e nem entre correntes e utilidades térmicas, tornam o modelo consideravelmente mais complexo que o problema padrão de síntese de RTCs. Além disso, a nova abordagem proposta permite o acoplamento de turbina e compressor a um eixo comum, bem como a troca de turbinas por válvulas para economia de energia. Os resultados obtidos com este modelo, incluindo uma aplicação industrial real, indicam que a recuperação de pressão de correntes é essencial para reduzir a quantidade de utilidades térmicas necessárias no processo, reduzindo o custo total da RTC.

No Capítulo 4, um novo modelo matemático é proposto para a síntese simultânea de redes de troca de trabalho (RTTs) com integração de calor de correntes de processo. Através de uma abordagem análoga ao problema de síntese de RTCs, a integração de trabalho ocorre entre correntes submetidas a alta pressão e baixa pressão, em diversos estágios de manipulação de pressão por meio de equipamentos atuando em eixos comuns. Além de desenvolver um conceito relativamente novo na literatura aberta, a grande contribuição deste trabalho reside no fato de que o modelo permite a integração de calor de correntes de processo, de forma que a RTC é sintetizada simultaneamente à RTT. Desta forma, todos os parâmetros relativos as duas redes devem ser otimizados de forma concomitante, o que resulta em um modelo altamente não-linear e não convexo. Além disso, o modelo admite o uso de diversos eixos unitários de turbina e compressor do tipo SSTC (*single-shaft-turbine-compressor*) que podem funcionar sob qualquer velocidade de rotação, bem como turbinas,

compressores e válvulas autonômas. Motores auxiliares e geradores de energia são usados para satisfazer o balanço de energia nos eixos SSTC. A superestrutura multi-estágio é formulada em PNLMI, na qual a minimização do custo total anualizado é considerada como função objetivo do problema. Neste caso, os resultados obtidos indicam que a integração de calor na RTT é fundamental para a diminuição da necessidade por utilidades quentes e frias na rede, atuando de forma decisiva na redução dos custos associados ao processo.

No Capítulo 5, um novo modelo para o *retrofit* de RTCs é proposto como resposta à necessidade de estender os conceitos desenvolvidos a processos existentes. A contribuição principal deste trabalho é a recuperação de pressão de correntes de processo, visando melhorar a integração térmica de sistemas em operação. Além disso, o modelo proposto é especialmente aplicável a processos criogênicos, no qual as despesas relacionadas ao resfriamento de fluidos são extremamente elevadas. O modelo formulado em PNLMI permite o incremento da área de troca térmica existente, bem como a utilização de novos equipamentos tanto para troca de calor quanto para manipulação de pressão, como turbinas e compressores. Como função objetivo, considera-se a minimização do custo total anualizado composto por despesas operacionais e custo de capital adicionais. Uma vez que a recuperação de pressão de correntes é realizada de forma simultânea à síntese da RTC, as condições de processo como temperatura e pressão são variáveis desconhecidas que requerem otimização. Este fato eleva a complexidade do modelo, em relação ao problema padrão de *retrofit* de RTC e, conseqüentemente, a dificuldade de solução do problema. Adicionalmente, o modelo apresenta a proposta de acoplamento de turbinas e compressores com um motor auxiliar objetivando a economia de energia, de forma inovadora para este tipo de problema. Os resultados obtidos com a aplicação deste modelo, incluindo em um processo industrial real de produção de gás natural liquefeito (GNL), indicam que a recuperação de pressão de correntes é essencial para a redução do uso de utilidades frias e, por conseguinte, para a redução do custo relacionado ao *retrofit* de RTCs.

Como considerações finais, enfatiza-se que todos os modelos desenvolvidos nesta tese descrevem com acurácia os processos aos que se destinam, apresentando melhores soluções para os respectivos problemas, assim como melhores resultados em relação às abordagens apresentadas na literatura. Além disso, todos os modelos apresentam propostas inovadoras para solucionar problemas relativamente comuns a processos industriais, sendo capazes de lidar de forma eficaz com problemas de grande porte relacionados a aplicações industriais reais.

6.2 Sugestões para Trabalhos Futuros

A continuação do presente trabalho poderá ser realizada através das seguintes sugestões:

- (i) Incorporação do projeto detalhado de TCCTs à síntese de RTCs com recuperação de pressão de correntes de processo.
- (ii) Incorporação do projeto detalhado de TCCTs à síntese de RTTs com recuperação de calor de correntes de processo.
- (iii) Incorporação do projeto detalhado de TCCTs ao *retrofit* de RTCs com recuperação de pressão de correntes de processo.
- (iv) Desenvolvimento de uma superestrutura para síntese de RTCs com a recuperação de pressão de correntes por meio de estágios de compressão e expansão, ocorrendo simultaneamente na RTT. Esta ideia surge da necessidade de solucionar o problema de correntes quentes e frias que necessitem seguir uma rota específica de compressão e expansão, com integração térmica entre cada um destes estágios de manipulação de pressão.
- (v) Incorporação de aspectos ambientais à RTC e RTT, como análise de ciclo de vida de energia (ACVE) e redução simultânea de emissões gasosas.
- (vi) Análise de flexibilidade da rede de trocadores de calor com recuperação de pressão de correntes e da rede de troca de trabalho com recuperação de calor de correntes de processo.
- (vii) Análise de robustez dos projetos de rede de trocadores de calor com recuperação de pressão de correntes e da rede de troca de trabalho com recuperação de calor de correntes de processo.
- (viii) Análise de incerteza aplicada à rede de trocadores de calor com recuperação de pressão de correntes e à rede de troca de trabalho com recuperação de calor de correntes de processo.
- (ix) Análise de exergia aplicada à rede de trocadores de calor com recuperação de pressão de correntes e à rede de troca de trabalho com recuperação de calor de correntes de processo.

6.3 Publicações Realizadas

As publicações realizadas ao longo do desenvolvimento desta tese são listadas, em ordem cronológica, a seguir (ver Apêndice C):

6.3.1 Trabalhos Publicados em Revistas Indexadas

1. Onishi, V.C., Ravagnani, M.A.S.S., Caballero, J.A., 2013. Mathematical Programming Model for Heat Exchanger Design through Optimization of Partial Objectives. *Energy Conversion and Management* 74, 60–69. Doi: 10.1016/j.enconman.2013.05.011.
2. Onishi, V.C., Ravagnani, M.A.S.S., Caballero, J.A., 2014. Simultaneous Synthesis of Heat Exchanger Networks with Pressure Recovery: Optimal Integration between Heat and Work. *AIChE Journal* 60, 893–908. Doi:10.1002/aic.14314.
3. Onishi, V.C., Ravagnani, M.A.S.S., Caballero, J.A., 2014. Simultaneous Synthesis of Work Exchange Networks with Heat Integration. *Chemical Engineering Science* 112, 87–107. Doi: 10.1016/j.ces.2014.03.018.

6.3.2 Trabalhos Publicados em Eventos Científicos

4. Onishi, V.C., Ravagnani, M.A.S.S., 2012. A MINLP Model for the Rigorous Design of Shell and Tube Heat Exchangers. In: IX Brazilian Workshop on Continuous Optimization 1, 7.
5. Onishi, V.C., Ravagnani, M.A.S.S., 2012. Modelo de Otimização para o Projeto de Trocadores de Calor Casco e Tubo. In: XIX Congresso Brasileiro de Engenharia Química 1, 8199-8208. ISSN 2178-3659.
6. Silva, R.O., Mano, T.B., Onishi, V.C., Moor, W.S., Defendi, R.O., Lima, O.C.M., 2012. Aplicação Prática do Método de Bell-Delaware em Sala de Aula por meio de Ferramenta Eletrônica. In: XIV Encontro Brasileiro sobre Ensino de Engenharia Química 1, 17. ISSN 2316-2015.

6.3.3 Trabalhos Aceitos para Publicação em Eventos Científicos

7. Onishi, V.C., Ravagnani, M.A.S.S., Caballero, J.A., MINLP Optimization Algorithm for the Synthesis of Heat and Work Exchange Networks, 24th European Symposium on Computer Aided Process Engineering – ESCAPE 24 (June 15-18, 2014, Budapest, Hungary).
8. Onishi, V.C., Ravagnani, M.A.S.S., Caballero, J.A., MINLP Model for the Synthesis of Heat Exchanger Networks with Handling Pressure of Process Streams, 24th European Symposium on Computer Aided Process Engineering – ESCAPE 24 (June 15-18, 2014, Budapest, Hungary).

6.3.4 Trabalhos Submetidos à Publicação em Revistas Indexadas

9. Onishi, V.C., Ravagnani, M.A.S.S., Caballero, J.A., Retrofit of Heat Exchanger Networks with Pressure Recovery of Streams at Sub-ambient Conditions (submitted to Applied Thermal Engineering).

6.3.5 Trabalhos Submetidos à Publicação em Eventos Científicos

10. Onishi, V.C., Ravagnani, M.A.S.S., Caballero, J.A., Heat Exchanger Networks Retrofitted with Simultaneous Pressure Recovery. XIX Congresso Brasileiro de Engenharia Química, 2014.

Apêndice

Apêndice A. Estudos Comparativos de Casos Adicionais para o Projeto de TCCTs

Tabela A.1

Dados de entrada do processo e propriedades físicas para os diferentes estudos de casos.

	T_{in} (K)	T_{out} (K)	m (kg/s)	μ (kg/ms)	ρ (kg/m ³)	C_p (J/kgK)	k (W/mK)	r_d (W/mK)
Exemplo 2.4:								
Quente	387,15	339,15	43,60	2,45e-3	820	2170	0,128	1,5e-4
Frio	299,15	323,15	45,40	6,82e-4	993	4170	0,630	1,5e-4
Exemplo 2.5:								
Quente	368,15	313,15	27,80	3,4e-4	750	2840	0,190	2,0e-4
Frio	298,00	313,15	68,90	8,0e-4	995	4200	0,590	2,0e-4
Exemplo 2.6:								
Quente	472,15	366,45	5,520	4,00e-4	850	2470	0,130	3,1e-4
Frio	310,95	349,85	18,80	3,58e-3	995	2050	0,130	3,1e-4
Exemplo 2.7:								
Quente	338,75	333,55	36,30	64,6e-3	849	2094	0,140	1,76e-5
Frio	305,35	310,57	18,10	7,23e-4	993	4187	0,630	8,80e-5

Dados de custo: $a_c = 123$, $b_c = 0.59$ e $c_c = 1.31$

Tabela A.2

Configuração ótima de TCCT obtida para o Exemplo 2.4.

	Serna & Jiménez (2005)	Ponce-Ortega & Serna-González (2009)	Modelo proposto ^a	Modelo proposto ^b
Conjunto 1				
<i>D_s</i> (m)	0,899	0,769	0,991	1,219
<i>Dotl</i> (m)	-	-	0,946	1,168
<i>N_t</i>	838	1545	1212	1690
<i>l_s</i> (m)	0,181	0,301	0,270	0,300
<i>N_{tp}</i>	4	4	8	8
<i>d_{ex}</i> (mm)	19,10	12,70	19,05	19,05
<i>d_{in}</i> (mm)	16,60	10,92	17,00	17,00
<i>L</i> (m)	4,156	3,080	2,438	2,438
<i>v^s</i> (m/s)	1,32	0,780	0,997	0,500
<i>Arr</i>	quadrado	quadrado	triangular	triangular
<i>pt</i> (mm)	-	-	23,79	25,40
Fluido quente	casco	casco	casco	tubo
<i>Re^s</i>	-	-	100000	28627
Conjunto 2				
<i>N_b</i>	21	9	8	7
<i>f_{i^s}</i>	-	-	0,109	0,108
<i>L_c</i>	0,168	0,228	0,248	0,076
<i>Pr^s</i>	-	-	41,535	4,514
<i>h^s</i> (W/m ² °C)	1009,15	1247,17	1027,56	4068,18
ΔP^s (kPa)	61,354	36,467	22,309	17,106
Conjunto 3				
<i>v^t</i> (m/s)	1,00	1,26	1,394	1,163
<i>Re^t</i>	-	-	33702,43	6461,39
Conjunto 4				
<i>Pr^t</i>	-	-	4,514	41,535
<i>Nu^t</i>	-	-	186,9	206,8

h^i (W/m ² °C)	5567,92	6062,84	6182,04	702,12
ΔP^f (kPa)	15,822	30,543	51,982	36,060
Q (kW)	-	-	4543	4543
$MLDT$	-	-	51,063	51,063
Ud (W/m ² °C)	483,06	535,32	546,65	392,04
Uc (W/m ² °C)	-	-	663,49	448,71
Ft	-	-	0,920	0,920
rd (m ² °C/W)	-	-	3,22e-4	3,22e-4
A (m ²)	200,02	180,49	176,84	246,58

^a sem especificação da localização do fluido quente no TCCT

^b fixando-se o fluido quente no lado casco

pressão no lado casco = 68 kPa e pressão no lado tubo = 28 kPa

Tabela A.3

Configuração ótima de TCCT obtida para o Exemplo 2.5.

	Kern (1950)	Caputo et al. (2008)	Modelo proposto ^a	Modelo proposto ^b
Conjunto 1				
D_s (m)	0,894	0,830	0,889	0,940
$Dotl$ (m)	-	-	0,848	0,895
Nt	918	1567	480	982
l_s (m)	0,356	0,500	0,779	0,316
Ntp	-	-	8	4
dex (mm)	20,00	16,00	25,40	19,05
din (mm)	-	-	23,00	17,00
L (m)	4,830	3,379	6,706	4,877
v^s (m/s)	0,580	0,440	0,500	0,500
Arr	-	-	quad.	triangular
pt (mm)	25,00	20,00	31,75	25,40
Fluido quente	casco	casco	tubo	casco
Re^s	18381	11075	20842,81	30177,91
Conjunto 2				
Nb	-	-	7	14
fi^s	-	-	0,108	0,108
Lc	-	-	0,222	0,235
Pr^s	5,1	5,1	5,7	5,1
h^s (W/m ² °C)	1573,0	1740,0	4634,4	1812,54
ΔP^s (kPa)	35,789	13,267	12,831	12,192
Conjunto 3				
v^t (m/s)	0,75	0,69	1,50	1,30
Re^t	14925	10936	75768,66	26907,92
Conjunto 4				
Pr^t	5,7	5,7	5,1	5,7
Nu^t	-	-	371,8	168,7
h^t (W/m ² °C)	3812	3762	2781,14	5224,61
ΔP^t (kPa)	6,251	4,298	66,898	37,848

Q (kW)	-	-	4342	4342
$MLDT$	-	-	30,907	30,907
Ud (W/m ² °C)	615,0	660,0	673,59	603,64
Uc (W/m ² °C)	-	-	940,96	814,93
Ft	-	-	0,812	0,812
rd (m ² °C/W)	-	-	4,21e-4	4,29e-4
A (m ²)	278,6	262,8	256,86	286,62

^a sem especificação da localização do fluido quente no TCCT

^b fixando-se o fluido quente no lado casco

pressão no lado casco = 68 kPa e pressão no lado tubo = 15 kPa

Tabela A.4

Configuração ótima de TCCT obtida para o Exemplo 2.6.

	Kern (1950)	Modelo proposto ^a
Conjunto 1		
D_s (m)	0,539	0,489
$Dotl$ (m)	-	0,457
Nt	158	188
ls (m)	0,127	0,098
Ntp	-	8
dex (mm)	25,00	19,05
din (mm)	-	16,10
L (m)	4,880	4,877
v^s (m/s)	0,470	1,581
Arr	-	Quadrado
pt (mm)	31,00	25,40
Fluido quente	casco	Tubo
Re^s	25281	75283,99
Conjunto 2		
Nb	-	49
ft^s	-	0,109
Lc	-	0,122
Pr^s	7,5	56,454
h^s (W/m ² °C)	920	1156,26
ΔP^s (kPa)	24,909	68,95
Conjunto 3		
v^t (m/s)	1,44	1,36
Re^t	8227	46440,39
Conjunto 4		
Pr^t	55,2	7,6
Nu^t	-	287,399
h^t (W/m ² °C)	619	1961,25
ΔP^t (kPa)	49,25	68,544

Q (kW)	-	1441
$MLDT$	-	84,547
Ud (W/m ² °C)	317,0	348,465
Uc (W/m ² °C)	-	459,345
Ft	-	0,891
rd (m ² °C/W)	-	6,93e-4
A (m ²)	61,5	54,87

^a sem especificação da localização do fluido quente no TCCT

pressão no lado casco = 68,95 kPa e pressão no lado tubo = 68,95 kPa

Tabela A.5

Configuração ótima de TCCT obtida para o Exemplo 2.7.

	Shah & Sekulic (2003)	Modelo proposto ^a
Conjunto 1		
D_s (m)	0,336	0,438
$Dotl$ (m)	0,321	0,406
Nt	-	178
ls (m)	0,279	0,348
Ntp	2	2
dex (mm)	19,00	19,05
din (mm)	-	16,00
L (m)	4,30	3,658
v^s (m/s)	-	1,122
Arr	quadrado	Quadrado
pt (mm)	-	25,40
Fluido quente	casco	Casco
Re^s	-	607,428
Conjunto 2		
Nb	-	10
fi^s	-	0,110
Lc	-	0,110
Pr^s	-	966,231
h^s (W/m ² °C)	-	447,739
ΔP^s (kPa)	111,397	60,00
Conjunto 3		
v^t (m/s)	-	1,058
Re^t	-	22906,93
Conjunto 4		
Pr^t	-	4,79
Nu^t	-	139,95
h^t (W/m ² °C)	-	4628,23
ΔP^t (kPa)	21,665	10,611

Q (kW)	-	395596
$MLDT$	-	28,190
Ud (W/m ² °C)	-	362,193
Uc (W/m ² °C)	-	379,279
Ft	-	0,994
rd (m ² °C/W)	-	1,24e-4
A (m ²)	26,69	38,97
<i>Custo de área</i> (US\$/ano)	853,99	1067,64
<i>Custo de bombeamento</i> (US\$/ano)	6923,75	3614,01
<i>Custo total anual*</i> (US\$/ano)	7777,74	4681,65

^a sem especificação da localização do fluido quente no TCCT

^b fixando-se o fluido quente no lado casco

pressão no lado casco = 60 kPa e pressão no lado tubo = 20 kPa; condutividade térmica na parede dos tubos = 111 W/mK

Apêndice B. Modelo para Síntese de RTCs de Yee & Grossmann (1990)

Yee & Grossmann (1990) apresentaram um modelo robusto baseado em Programação Matemática para a síntese de RTCs. A solução deste modelo de PNLMI permite identificar a rede com um custo mínimo dentro da superestrutura, identificando-se quais trocadores de calor são requeridos na rede, bem como os serviços térmicos e temperaturas de cada corrente. Uma das vantagens deste modelo reside na sua capacidade de lidar facilmente com as restrições de divisão de correntes. Este é um dos modelos com maior aceitação dentre os métodos simultâneos baseados em superestruturas. O modelo é apresentado a seguir.

B.1 Índices/Sets

Para desenvolver o modelo é necessário definir os seguintes índices:

$$\begin{aligned}HP &= \{i / i \text{ é uma corrente quente}\} \\CP &= \{j / j \text{ é uma corrente fria}\} \\ET &= \{k / k \text{ é um estágio da superestrutura}\}\end{aligned}$$

B.2 Dados de Entrada

Os seguintes dados de entrada são conhecidos:

C	coeficiente de custo de área
CCU	custo unitário de utilidade fria
CF	custo fixo de trocadores de calor
CHU	custo unitário de utilidade quente
F	fluxo de calor associado com cada corrente
NOK	número total de etapas da superestrutura
Tin	temperatura de entrada das correntes de processo
$Tout$	temperatura de saída das correntes de processo
L	coeficiente global de transmissão de calor
B	expoente de custo de área
Ω	limite superior para a troca de calor em um trocador
Γ	limite superior para a diferença de temperatura

B.3 Variáveis

As variáveis do problema são as seguintes:

$dt_{i,j,k}$	diferença de temperatura para a troca (i, j) na etapa k
$dctu_i$	diferença de temperatura para a troca entre a corrente quente i e a utilidade fria
$dthu_j$	diferença de temperatura para a troca entre a corrente fria j e a utilidade quente
$q_{i,j,k}$	troca de calor entre corrente quente i e a corrente fria j na etapa k
qcu_i	troca de calor entre a corrente quente i e a utilidade fria
qhu_j	troca de calor entre a a corrente fria j e a utilidade quente
$t_{i,k}$	temperatura da corrente quente i no extremo quente da etapa k
$t_{j,k}$	temperatura da corrente fria j no extremo quente da etapa k
$z_{i,j,k}$	variável binária que indica a existência de troca (i, j) no passo k
zcu_i	variável binária que indica a troca de calor entre a utilidade fria e a corrente i
zhu_j	variável binária que indica a troca de calor entre a utilidade quente e a corrente j

B.4 Modelo de PNLMI

O modelo é formado pelas seguintes equações.

Balanço de energia global para cada corrente. Este balanço de energia é necessário para garantir o aquecimento ou resfriamento suficientes para cada corrente de processo. A restrição especifica que o calor total transferido para cada corrente deve ser igual à soma da quantidade de calor que cada corrente troca com todas as outras correntes de processo em todos os intervalos, além da troca de calor com a corrente de serviço.

$$\begin{aligned}
 (Tin_i - Tout_i)F_i &= \sum_{k \in ET} \sum_{j \in CP} q_{i,j,k} + qcu_i & i \in HP \\
 (Tout_j - Tin_j)F_j &= \sum_{k \in ET} \sum_{i \in HP} q_{i,j,k} + qhu_j & j \in CP
 \end{aligned} \tag{B.1}$$

Balanco de energia em cada etapa. Um balanço de energia é necessário em cada etapa da superestrutura para a determinação de temperaturas. Devido à consideração de mistura isotérmica, variáveis de fluxo não são necessárias.

$$\begin{aligned}
 (t_{i,k} - t_{i,k+1})F_i &= \sum_{j \in CP} q_{i,j,k} & k \in ET, i \in HP \\
 (t_{j,k} - t_{j,k+1})F_j &= \sum_{i \in HP} q_{i,j,k} & k \in ET, j \in CP
 \end{aligned} \tag{B.2}$$

Atribuição de temperaturas de entrada na superestrutura. As temperaturas de entrada fixas (Tin) de todas as correntes de processo são atribuídas às temperaturas de entrada da superestrutura.

$$\begin{aligned}
 Tin_i &= t_{i,1} & i \in HP \\
 Tin_j &= t_{j,NOK+1} & j \in CP
 \end{aligned} \tag{B.3}$$

Viabilidade de temperaturas. A temperatura ao longo das diferentes etapas deverá diminuir de forma monótona. Além disso, é necessário especificar que a temperatura de saída de cada corrente deve ser mais baixa do que a temperatura de saída final de cada corrente.

$$\begin{aligned}
 t_{i,k} &\geq t_{i,k+1} & k \in ET, i \in HP \\
 t_{j,k} &\geq t_{j,k+1} & k \in ET, j \in CP \\
 Tout_i &\leq t_{i,NOK+1} & i \in HP \\
 Tout_j &\geq t_{j,1} & j \in CP
 \end{aligned} \tag{B.4}$$

Cálculo do calor trocado com utilidades. A necessidade de utilidades quentes e frias é determinada para cada corrente de processo através de um balanço de energia nos pontos de saída de cada corrente.

$$\begin{aligned} (t_{i,NOK+1} - Tout_i) F_i &= qcu_i \quad i \in HP \\ (Tout_j - t_{j,1}) F_j &= qhu_j \quad j \in CP \end{aligned} \tag{B.5}$$

Restrições lógicas. As restrições lógicas, escritas como uma função de variáveis binárias são necessárias para determinar a existência ou não da troca (i, j) a cada etapa k , bem como a troca de calor entre as correntes e utilidades de processo.

$$\begin{aligned} q_{i,j,k} - \Omega z_{i,j,k} &\leq 0 \quad i \in HP, j \in CP, k \in ET \\ qcu_i - \Omega zcu_i &\leq 0 \quad i \in HP \\ qhu_j - \Omega zhu_j &\leq 0 \quad j \in CP \end{aligned} \tag{B.6}$$

Cálculo de temperaturas de aproximação entre as correntes. A área necessária para uma troca particular é incorporada na função objetivo. Para o cálculo destas áreas é necessário determinar as diferenças de temperatura (temperaturas de aproximação) em cada extremo do trocador de calor. Não obstante, essas diferenças de temperatura são ativas somente se houver uma troca de calor. Portanto, variáveis binárias são usadas para ativar ou desativar o cálculo dessas diferenças.

$$\begin{aligned} dt_{i,j,k} &\leq t_{i,k} - t_{j,k} + \Gamma(1 - z_{i,j,k}) \quad i \in HP, j \in CP, k \in ET \\ dt_{i,j,k+1} &\leq t_{i,k+1} - t_{j,k+1} + \Gamma(1 - z_{i,j,k}) \quad i \in HP, j \in CP, k \in ET \\ dtcu_i &\leq t_{i,NOK+1} - Tout_{CU} + \Gamma(1 - zcu_i) \quad i \in HP \\ dthu_j &\leq Tout_{HU} - t_{j,1} + \Gamma(1 - zhu_j) \quad j \in CP \end{aligned} \tag{B.7}$$

É adequado especificar uma temperatura mínima de aproximação na rede, de tal modo que a diferença de temperatura entre as correntes quentes e frias, em qualquer ponto da rede é de pelo menos igual a este valor.

$$dt_{i,j,k} \geq EMAT \quad (B.8)$$

Função objetivo. A função de objetivo pode ser definida como o custo total da rede. O custo total consiste no custo dos serviços, os custos fixos de trocadores de calor e o custo associado a cada área de troca de calor. Para calcular a área de troca do trocador de calor, é necessária uma diferença de temperatura média logarítmica. Yee & Grossmann (1990) propuseram o uso da aproximação de Chen (1987):

$$\Delta Tml_{i,j} = (\theta^1_{i,j} - \theta^2_{i,j}) / \ln(\theta^1_{i,j} / \theta^2_{i,j}) \approx [\theta^1_{i,j} \cdot \theta^2_{i,j} (\theta^1_{i,j} + \theta^2_{i,j}) / 2]^{1/3} \quad (B.9)$$

Esta abordagem é utilizada para evitar dificuldades numéricas associadas à média logarítmica, quando as diferenças de temperatura ($\theta^1_{i,j}$; $\theta^2_{i,j}$), em ambos os lados do trocador de calor são iguais. Por outro lado, se a diferença de temperatura em ambos os lados tende para zero, a aproximação de Chen (1987) também tenderá para zero. Assim, a função objetivo é definida como segue.

$$\begin{aligned} \min: & \sum_{i \in HP} CCU \cdot qcu_i + \sum_{j \in CP} CHU \cdot qhu_j + \sum_{i \in HP} \sum_{j \in CP} \sum_{k \in ET} CF_{i,j} \cdot z_{i,j,k} + \sum_{i \in HP} CF_{i,CU} \cdot zcu_i + \\ & \sum_{j \in CP} CF_{j,HU} \cdot zhu_j + \sum_{i \in HP} \sum_{j \in CP} \sum_{k \in ET} C_{i,j} \left\{ q_{i,j,k} / U_{i,j} \left[dt_{i,j,k} \cdot dt_{i,j,k+1} (dt_{i,j,k} + dt_{i,j,k+1}) / 2 \right]^{1/3} \right\}^{\beta_{i,j}} + \\ & \sum_{i \in HP} C_{i,CU} \left\{ qcu_i / U_{i,CU} \left[dtcu_i (Tout_i - Tin_{CU}) (dtcu_i + (Tout_i - Tin_i)) / 2 \right]^{1/3} \right\}^{\beta_{i,CU}} + \\ & \sum_{j \in CP} C_{HU,j} \left\{ qhu_j / U_{HU,j} \left[dthu_j (Tin_{HU} - Tout_j) (dthu_j + (Tin_{HU} - Tout_j)) / 2 \right]^{1/3} \right\}^{\beta_{HU,j}} \end{aligned} \quad (B.10)$$

$$\text{Onde, } 1/U_{i,j} = 1/h_i + 1/h_j; \quad 1/U_{i,CU} = 1/h_{CU} + 1/h_i; \quad 1/U_{HU,j} = 1/h_j + 1/h_{HU} \quad (\text{B.11})$$

O modelo de PNLMI resultante inclui a função objetivo e todas as restrições comentadas anteriormente. É importante ressaltar que todas as restrições que aparecem neste modelo são lineares. As não-linearidades aparecem apenas na função objetivo. Contudo, a natureza não-convexa da solução deste problema pode conduzir a mínimos locais.

Uma característica importante do modelo é que ele permite, em geral, evitar configurações em que as divisões de corrente aparecem. Isto é conseguido através da adição da condição de que cada corrente não pode ter mais do que uma troca em cada etapa. Matematicamente, isto pode ser expresso como se segue:

$$\sum_{i \in HP} z_{i,j,k} \leq 1 \quad j \in CP, k \in ET, \quad \sum_{j \in CP} z_{i,j,k} \leq 1 \quad i \in HP, k \in ET \quad (\text{B.12})$$

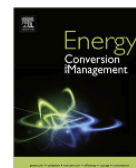
Apêndice C. Trabalhos Científicos Publicados ao Longo do Doutorado

C.1 Trabalhos Publicados em Revistas Indexadas



Contents lists available at SciVerse ScienceDirect

Energy Conversion and Management

journal homepage: www.elsevier.com/locate/enconman

Mathematical programming model for heat exchanger design through optimization of partial objectives

Viviani C. Onishi^{a,b,c,*}, Mauro A.S.S. Ravagnani^a, José A. Caballero^b^a Department of Chemical Engineering, State University of Maringá, Av. Colombo 5790, 87020-900 Maringá, PR, Brazil^b Department of Chemical Engineering, University of Alicante, Ap Correos 99, 03080 Alicante, Spain^c CAPES Foundation, Ministry of Education of Brazil, 70040-20 Brasília, DF, Brazil

ARTICLE INFO

Article history:
Received 20 March 2013
Accepted 1 May 2013

Keywords:

Mathematical programming
Mixed integer non-linear programming (MINLP)
Heat exchanger design
Shell-and-tube heat exchanger (STHE)
Sequential optimization

ABSTRACT

Mathematical programming can be used for the optimal design of shell-and-tube heat exchangers (STHEs). This paper proposes a mixed integer non-linear programming (MINLP) model for the design of STHEs, following rigorously the standards of the Tubular Exchanger Manufacturers Association (TEMA). Bell–Delaware Method is used for the shell-side calculations. This approach produces a large and non-convex model that cannot be solved to global optimality with the current state of the art solvers. Notwithstanding, it is proposed to perform a sequential optimization approach of partial objective targets through the division of the problem into sets of related equations that are easier to solve. For each one of these problems a heuristic objective function is selected based on the physical behavior of the problem. The global optimal solution of the original problem cannot be ensured even in the case in which each of the sub-problems is solved to global optimality, but at least a very good solution is always guaranteed. Three cases extracted from the literature were studied. The results showed that in all cases the values obtained using the proposed MINLP model containing multiple objective functions improved the values presented in the literature.

© 2013 Elsevier Ltd. All rights reserved.

1. Introduction

Optimal heat recuperation is fundamental in solving the problem of efficient energy usage and consequently to promote the reduction of gas emissions and fuel consumption. Since nearly 80% of the total energy consumption is related to heat transfer, improvement on heat transfer performance is of great significance to the reduction of the energy consumption [1–4]. In this perspective, heat exchangers are one of the most efficient types of heat transfer equipment used to recover heat between two process fluids [5,6]. Shell-and-tube heat exchangers (STHEs) are widely used in industrial chemical processes, plants, power and process industries because of their great adaptability to different operational conditions, strength characteristic and design flexibility. However, the design of STHEs, including thermodynamic and fluid dynamic design, cost estimation and optimization, is a complex process involving the integration of design rules and empirical knowledge from several areas, especially for the shell-side that presents complex characteristics of heat transfers and pressure drop [7].

The design of STHEs involves the determination of a large number of thermal–hydraulic and operative variables for obtaining the optimum geometry, satisfying the required amount of heat and the set of constraints imposed by the process [6,7]. In the last decade, due to the important role developed by the STHEs within the industrial context, a considerable research effort has been devoted to solving the optimization problem of this type of equipment. Thus, several researchers used different optimization techniques: i.e. genetic algorithms [8–11], particle swarm optimization [6], and mathematical programming [7,12–14], to improve the design of this type of heat exchangers by optimizing different objectives like the annual cost, including area expenses and/or pumping costs [6,7,9,12–14] or entropy generation [11,15,16]. Other studies have been dedicated to the optimization of a single geometric parameter, such as the spacing of baffles [17,18], or a variety of geometric and operational parameters of STHEs [19].

Different design methods have also been proposed. The first method for determining the thermal–hydraulic parameters, heat exchange area, heat transfer coefficients and pressure drop was published by Kern [20]. The method of Kern was developed for designing heat exchangers or to evaluate existing equipment with regard to pressure drop and fouling. In this method, correlations were obtained based on equivalent diameter, overestimating the design parameters for the shell-side [7]. According to Taborek [21], the method of Bell–Delaware provides more realistic and

* Corresponding author at: Department of Chemical Engineering, University of Alicante, Ap Correos 99, 03080 Alicante, Spain. Tel.: +34 965903400; fax: +34 965903826.

E-mail addresses: pg51551@uem.br (V.C. Onishi), ravag@deq.uem.br (M.A.S.S. Ravagnani), caballer@ua.es (J.A. Caballero).

Simultaneous Synthesis of Heat Exchanger Networks with Pressure Recovery: Optimal Integration between Heat and Work

Viviani C. Onishi

Dept. of Chemical Engineering, University of Alicante, Ap Correos 99, Alicante 03080, Spain

Dept. of Chemical Engineering, State University of Maringá, Av. Colombo 5790, Maringá 87020-900, PR, Brazil

CAPES Foundation, Ministry of Education of Brazil, Brasília 70040-20, DF, Brazil

Mauro A. S. S. Ravagnani

Dept. of Chemical Engineering, State University of Maringá, Av. Colombo 5790, Maringá 87020-900, PR, Brazil

José A. Caballero

Dept. of Chemical Engineering, University of Alicante, Ap Correos 99, Alicante 03080, Spain

DOI 10.1002/aic.14314

Published online December 21, 2013 in Wiley Online Library (wileyonlinelibrary.com)

The optimal integration between heat and work may significantly reduce the energy demand and consequently the process cost. This article introduces a new mathematical model for the simultaneous synthesis of heat exchanger networks (HENs), in which the pressure levels of the process streams can be adjusted to enhance the heat integration. A superstructure is proposed for the HEN design with pressure recovery, developed via generalized disjunctive programming, and mixed-integer nonlinear programming formulation. The process conditions (stream temperature and pressure) must be optimized. Furthermore, the approach allows for coupling of the turbines and compressors and selection of the turbines and valves to minimize the total annualized cost, which consists of the operational and capital expenses. The model is tested for its applicability in three case studies, including a cryogenic application. The results indicate that the energy integration reduces the quantity of utilities required, thus decreasing the overall cost. © 2013 American Institute of Chemical Engineers AIChE J, 60: 893–908, 2014

Keywords: optimization, mathematical modeling, heat exchanger network, energy integration, pressure recovery

Introduction

Applying innovative strategies for energy conservation and efficiency is fundamental to reducing energy consumption in industrial processes. The increasing global energy demand, the current high cost of energy due to the rapid depletion of crude oil reserves, and the tightening environmental regulations on CO₂ emissions aimed at alleviating global warming are among the many driving forces behind the need for energy conservation and efficiency,^{1–4} and are often achieved by adopting more efficient processing technologies or by optimizing energy usage.

Heat and work are two forms of energy frequently available in industrial plants. Effective heat recovery is critical for solving the problem of energy efficiency and consequently decreasing the process cost.^{5,6} Thus, analysis and optimization of thermal integration are imperative because a reduced energy consumption is directly associated with improved heat transfer.^{7,8} Heat exchanger network (HEN)

synthesis is responsible for the energy integration. Given the importance of the HEN in the total cost and its interdependence with other sectors of the process, HEN synthesis has been extensively studied in recent decades.^{6,9,10}

The synthesis of HENs began to attract attention during the oil crisis of the 1970s.^{6,11} Hwa,¹² using separable programming methods, and Kesler and Parker,¹³ using linear programming, were among the first to present solutions to the problem of HEN design. Since then, several studies have used different methods to solve the problem.¹⁴ The recent trend in the development of more sustainable processes has renewed interest in the design of these systems.¹¹

Gundersen and Naess¹⁰ and Furman and Sahinidis⁶ published comprehensive reviews on HEN synthesis. Important lines of research were proposed, such as pinch analysis and mathematical programming. Pinch analysis is based on thermodynamic concepts and heuristics.^{15–18} In mathematical programming, the HEN synthesis is treated as an optimization problem. According to Grossmann et al.,¹⁹ the use of the mathematical programming method has gradually evolved from sequential approaches in which one seeks a step-by-step solution to the problem^{20–24} to work using simultaneous optimization in which all variables are optimized concurrently.^{25–27}

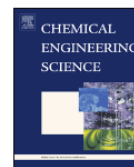
Correspondence concerning this article should be addressed to V. C. Onishi at pg51551@uem.br or viviani.onishi@hotmail.com.

© 2013 American Institute of Chemical Engineers



Contents lists available at ScienceDirect

Chemical Engineering Science

journal homepage: www.elsevier.com/locate/ces

Simultaneous synthesis of work exchange networks with heat integration

Viviani C. Onishi ^{a,b,c,*}, Mauro A.S.S. Ravagnani ^a, José A. Caballero ^b^a Department of Chemical Engineering, State University of Maringá, Av. Colombo 5790, 87020-900 Maringá, PR, Brazil^b Department of Chemical Engineering, University of Alicante, Ap Correos 99, 03080 Alicante, Spain^c CAPES Foundation, Ministry of Education of Brazil, 70040-20 Brasília, DF, Brazil

HIGHLIGHTS

- New MINLP model for the synthesis of work exchange networks with heat integration.
- Work integration of streams at high and low-pressure in a multi-stage superstructure.
- Pressure manipulation equipment acting on several shafts and stand-alone equipment.
- Heat integration between pressure manipulation stages in the work exchange network.
- Use of a smaller amount of utilities reducing capital cost and operational expenses.

ARTICLE INFO

Article history:

Received 31 October 2013

Received in revised form

23 January 2014

Accepted 17 March 2014

Available online 21 March 2014

Keywords:

Optimization

Mixed-integer nonlinear programming (MINLP)

Work exchange network (WEN)

Heat exchanger network (HEN)

Heat integration

Pressure recovery

ABSTRACT

The optimal integration of work and its interaction with heat can represent large energy savings in industrial plants. This paper introduces a new optimization model for the simultaneous synthesis of work exchange networks (WENs), with heat integration for the optimal pressure recovery of process gaseous streams. The proposed approach for the WEN synthesis is analogous to the well-known problem of synthesis of heat exchanger networks (HENs). Thus, there is work exchange between high-pressure (HP) and low-pressure (LP) streams, achieved by pressure manipulation equipment running on common axes. The model allows the use of several units of single-shaft-turbine-compressor (SSTC), as well as stand-alone compressors, turbines and valves. Helper motors and generators are used to respond to any demand and excess of energy. Moreover, between the WEN stages the streams are sent to the HEN to promote thermal recovery, aiming to enhance the work integration. A multi-stage superstructure is proposed to represent the process. The WEN superstructure is optimized in a mixed-integer nonlinear programming (MINLP) formulation and solved with the GAMS software, with the goal of minimizing the total annualized cost. Three examples are conducted to verify the accuracy of the proposed method. In all case studies, the heat integration between WEN stages is essential to improve the pressure recovery, and to reduce the total costs involved in the process.

© 2014 Elsevier Ltd. All rights reserved.

1. Introduction

The energy efficiency is crucial in transformation processes, since it is responsible for a large portion of expenditures and acts decisively on environmental aspects. One of the main reasons to develop techniques for efficient and sustainable energy use is the increasing global demand, allied to the high cost of energy due to the rapid decrease in the availability of fossil fuels. Other significant reasons

include the technological barriers and forbidding prices of renewable energy, the strict standards that regulate carbon dioxide emissions, as an attempt to palliate the greenhouse effect and its consequences (Gharaie et al., 2013; Hasan et al., 2010; Huang and Karimi, 2013; Razib et al., 2012; Wechsung et al., 2011). The minimization of environmental impacts can be achieved by increasing energy efficiency in industrial plants, particularly through the reduction of energy consumption, adoption of innovative strategies and development of more efficient processing techniques (Lara et al., 2013; Morar and Agachi, 2010).

The optimization of heat recovery is critical to solve the problem of the efficient use of energy and, consequently, to promote the reduction of gaseous emissions and consumption of oil and natural

* Corresponding author at: Department of Chemical Engineering, State University of Maringá, Av. Colombo 5790, 87020-900 Maringá, PR, Brazil. Tel: +34 965903400.

E-mail addresses: pg51551@uem.br, viviani.onishi@hotmail.com (V.C. Onishi), ravag@deq.uem.br (M.A.S.S. Ravagnani), caballer@ua.es (J.A. Caballero).

<http://dx.doi.org/10.1016/j.ces.2014.03.018>

0009-2509/© 2014 Elsevier Ltd. All rights reserved.

C.2 Trabalhos Publicados em Eventos Científicos

A MINLP MODEL FOR THE RIGOROUS DESIGN OF SHELL AND TUBE HEAT EXCHANGERS

V. C. ONISHI¹, M. A. S. S. RAVAGNANI²

^{1,2} DEQ/ PEQ/ CTC/ UEM – State University of Maringá, Maringá, PR, Brazil, e-mail: pg51551@uem.br.

The design of shell and tube heat exchangers can be formulated as an optimization problem. The main objective is to find the equipment that provides the minimum cost, considering the expenses related to the heat transfer area of and/or pumping associated with pressure drop. This paper proposes a mixed integer non-linear programming (MINLP) model for the design of shell and tube heat exchangers, following rigorously the TEMA (Tubular Exchanger Manufacturers Association) Standards. Bell-Delaware Method is used for the heat transfer coefficients and pressure drop calculus in the shell side. The final design of the equipment shall comply with the limits for pressure drop, fluid speed and fouling imposed by the process. The mechanical design characteristics (shell and tube bundle diameters, external and internal tube diameters, tube length, pitch and tube arrangement, number of tubes and tube passes), and thermal-hydraulic variables (heat exchange area, heat duty, overall and individual heat transfer coefficients, shell and tube pressure drops and fouling), are variables of optimization. The equipment is designed under pressure drop and fouling limits. More realistic values are obtained, considering fouling and pressure drop effects according to TEMA Standards.



IX BRAZILIAN WORKSHOP ON CONTINUOUS OPTIMIZATION

29th Jul - 04th Aug, 2012

LUIS CORREIA - PIAUÍ - BRAZIL

Cara **Viviani Caroline Onishi**,

Temos a satisfação de informá-la que o seu trabalho *A MinLP model for the rigorous design of Shell and tube heat* (co-autoria de **M. A. S. S. Ravagnani**) foi aceito para a apresentação oral (30 minutos) no IX Workshop Brasileiro de Otimização Contínua, que acontecerá em Luis Correia (PI) de 29 de julho a 04 de agosto de 2012.

Visando facilitar o trabalho de organização do evento, é imprescindível que você se inscreva no Workshop até 15/04/2012, caso contrário o seu trabalho poderá ser removido do programa. (http://www.impa.br/opencms/pt/eventos/store/evento_1202?link=11)

Você precisa estar disponível para apresentar o seu trabalho a qualquer data e hora do Workshop. Um programa preliminar será publicado em Junho no sítio: <http://www.optim-pi.mat.br/brazopt2012.html>

Faremos todo o esforço possível para que não ocorram mudanças no programa, mas alterações de última hora são passíveis de ocorrer.

Todas as salas de conferência estão completamente equipadas, mas caso você julgue necessário requisitar algum equipamento em especial, por favor, envie uma mensagem para brazopt2012@optim-pi.mat.br

Contamos com a sua contribuição e presença no Workshop.

Atenciosamente,

João Xavier da Cruz Neto

Presidente do Comitê Organizador

IX Workshop Brasileiro de Otimização Contínua

Department of Scientific Activities

Phone +55 21 2529 5277 / 5017

Fax +55 21 2529 5019

brazopt2012@optim-pi.mat.br - <http://www.optim-pi.mat.br/brazopt2012.html>



09 a 12 de setembro de 2012
Búzios, RJ

MODELO DE OTIMIZAÇÃO PARA O PROJETO DE TROCADORES DE CALOR CASCO E TUBO

V. C. ONISHI¹, M. A. S. S. RAVAGNANI¹

¹ Universidade Estadual de Maringá, Departamento de Engenharia Química
E-mail para contato: pg51551@uem.br

RESUMO – O projeto de trocadores de calor casco e tubo (TCCT) pode ser formulado como um problema de otimização. O principal objetivo é determinar as características de um equipamento que apresente um custo mínimo, considerando o custo referente à área de troca térmica e/ou os custos de bombeamento associados à perda de carga. Neste trabalho é proposto um modelo de otimização PNLMI para o projeto de TCCTs, seguindo rigorosamente os padrões TEMA. O método de Bell-Delaware é utilizado para formular os cálculos para o lado casco. As variáveis utilizadas para a otimização do projeto mecânico e características térmico-hidráulicas incluem temperaturas dos fluidos, vazões, propriedades físicas, queda de pressão e fator de incrustação. O problema é dividido em conjuntos de equações. Funções objetivo são propostas para a otimização de cada conjunto. Um exemplo extraído da literatura é estudado, considerando a minimização de variáveis mecânicas (diâmetro do casco, número de tubos e comprimento de tubos), maximização da queda de pressão e número de Reynolds para ambos os lados tubo e casco e minimização da área transferência de calor ou minimização do custo anual, incluindo despesas com área e/ou despesas com bombeamento, de acordo com a disponibilidade de dados. Os resultados mostram que os valores obtidos usando o modelo PNLMI proposto contendo múltiplas funções objetivo apresenta melhores resultados em comparação aos apresentados na literatura.

1. INTRODUÇÃO

Trocadores de calor casco e tubo (TCCTs) são largamente empregados em processos químicos industriais devido à sua grande adaptabilidade a diferentes condições operacionais, resistência característica e flexibilidade de projeto. Entretanto, o projeto de TCCTs, incluindo o projeto termodinâmico e fluidodinâmico, estimação de custos e otimização, é um processo complexo que envolve a integração entre regras de projeto e conhecimento empírico de várias áreas, principalmente para o lado casco que apresenta complexas características de transferência de calor e queda de pressão (Patel *et al.*, 2010; Ravagnani e Caballero, 2007).

O projeto de TCCTs envolve a determinação de um grande número de variáveis termo-hidráulicas e operacionais para obtenção da geometria ótima que satisfaça a quantidade de

**ENBEQ 2012**XIV ENCONTRO BRASILEIRO SOBRE O
ENSINO DE ENGENHARIA QUÍMICA**12 a 14 de setembro de 2012****Búzios, RJ****APLICAÇÃO PRÁTICA DO MÉTODO BELL-DELAWARE EM SALA DE
AULA POR MEIO DE FERRAMENTA ELETRÔNICA****R. O. SILVA¹, T. B. MANO², V. C. ONISHI³, W. S. MOOR⁴, R. O. DEFENDI⁵ e O. C.
MOTTA LIMA⁶**^{1, 2, 3, 4, 5, 6} DEQ – Universidade Estadual de Maringá

Há vários métodos de cálculo de trocadores de calor casco e tubos, muitos estão disponíveis na literatura, enquanto outros, desenvolvidos por empresas ou institutos especializados, podem ser utilizados apenas pelos patrocinadores ou associados. Os métodos que estão no primeiro caso são aqueles amplamente divulgados em artigos ou livros, sendo os métodos de Kern e Bell-Delaware os mais conhecidos. O método de Kern tem importância bastante grande, tornou-se padrão industrial utilizado durante muitos anos. Talvez hoje seja o método mais conhecido, embora sua precisão seja reconhecidamente inferior à de outros, e sabe-se que o escoamento no lado do casco é bem mais complexo do que esse método considera. O método de Bell-Delaware, talvez o último a ser publicado, é visivelmente o mais preciso e recomendado da literatura aberta, por utilizar diferentes correntes que podem existir no lado do casco. Entretanto, normalmente o método de Kern é ensinado em sala de aula, em função da possibilidade de ser analisado por meio de cálculos manuais. Visto que o método de Bell-Delaware é mais preciso e moderno que o de Kern, desenvolveu-se uma planilha de Excel, com interface em Visual Basic, para que aquele método possa ser ministrado em sala de aula. Neste novo formato, é possível conciliar a teoria e a prática do método Bell-Delaware dentro do cronograma proposto pelo programa da matéria de Operações Unitárias II no curso de Engenharia Química da Universidade Estadual de Maringá.

C3. Trabalhos Aceitos para Publicação em Eventos Científicos

Jiří Jaromír Klemeš, Petar Sabeв Varbanov and Peng Yen Liew (Editors)
Proceedings of the 24th European Symposium on Computer Aided Process Engineering – ESCAPE 24
June 15-18, 2014, Budapest, Hungary. © 2014 Elsevier B.V. All rights reserved.

MINLP Optimization Algorithm for the Synthesis of Heat and Work Exchange Networks

Viviani C. Onishi^{a,b,c,*}, Mauro A. S. S. Ravagnani^a, José A. Caballero^b

^a*Department of Chemical Engineering, State University of Maringá, Av. Colombo 5790, Maringá-PR 87020-900, Brazil*

^b*Department of Chemical Engineering, University of Alicante, Ap Correos 99, Alicante03080, Spain*

^c*CAPES Foundation, Ministry of Education of Brazil, Brasília-DF 7004020, Brazil
pg51551@uem.br/viviani.onishi@hotmail.com*

Abstract

This paper introduces a new optimization model for the simultaneous synthesis of heat and work exchange networks. The work integration is performed in the work exchange network (WEN), while the heat integration is carried out in the heat exchanger network (HEN). In the WEN synthesis, streams at high-pressure (HP) and low-pressure (LP) are subjected to pressure manipulation stages, via turbines and compressors running on common shafts and stand-alone equipment. The model allows the use of several units of single-shaft-turbine-compressor (SSTC), as well as helper motors and generators to respond to any shortage and/or excess of energy, respectively, in the SSTC axes. The heat integration of the streams occurs in the HEN between each WEN stage. Thus, as the inlet and outlet streams temperatures in the HEN are dependent of the WEN design, they must be considered as optimization variables. The proposed multi-stage superstructure is formulated in mixed-integer nonlinear programming (MINLP), in order to minimize the total annualized cost composed by capital and operational expenses. A case study is conducted to verify the accuracy of the proposed approach. The results indicate that the heat integration between the WEN stages is essential to enhance the work integration, and to reduce the total cost of process due the need of a smaller amount of hot and cold utilities.

Keywords: optimization; mixed-integer nonlinear programming (MINLP); work exchange network (WEN); heat exchanger network (HEN); heat integration.

1. Introduction

Heat and work are two forms of energy frequently available in processing plants. The optimization of energy integration through the application of innovative strategies, and development of more efficient processing techniques is the most effective way to reduce process costs, and minimize environmental impacts related to high energy consumption (Lara et al., 2013). The pressure manipulation of streams is extremely important in many industrial processes, such as production of ammonia and natural gas, wherein is responsible for the consumption of large energy amounts and, consequently, high operating expenses. Although the synthesis of heat exchanger networks (HENs) has been intensively studied since the energy crisis in the 1970s (Ravagnani and Silva, 2012), with significant impact on the industry (Huang and Karimi, 2013), the literature about the problem of work integration is rather limited (Onishi et al., 2013).

Jiří Jaromír Klemeš, Petar Sabeв Varbanov and Peng Yen Liew (Editors)
Proceedings of the 24th European Symposium on Computer Aided Process Engineering – ESCAPE 24
June 15-18, 2014, Budapest, Hungary. © 2014 Elsevier B.V. All rights reserved.

MINLP Model for the Synthesis of Heat Exchanger Networks with Handling Pressure of Process Streams

Viviani C. Onishi^{a,b,c,*}, Mauro A. S. S. Ravagnani^a, José A. Caballero^b

^a*Department of Chemical Engineering, State University of Maringá, Av. Colombo 5790, Maringá-PR 87020-900, Brazil*

^b*Department of Chemical Engineering, University of Alicante, Ap Correos 99, Alicante 03080, Spain*

^c*CAPES Foundation, Ministry of Education of Brazil, Brasília-DF 7004020, Brazil
pg51551@uem.br/viviani.onishi@hotmail.com*

Abstract

This paper introduces a new mathematical model for the simultaneous synthesis of heat exchanger networks (HENs), wherein the handling pressure of process streams is used to enhance the heat integration. The proposed approach combines generalized disjunctive programming (GDP) and mixed-integer nonlinear programming (MINLP) formulation, in order to minimize the total annualized cost composed by operational and capital expenses. A multi-stage superstructure is developed for the HEN synthesis, assuming constant heat capacity flow rates and isothermal mixing, and allowing for streams splits. In this model, the pressure and temperature of streams must be treated as optimization variables, increasing further the complexity and difficulty to solve the problem. In addition, the model allows for coupling of compressors and turbines to save energy. A case study is performed to verify the accuracy of the proposed model. In this example, the optimal integration between the heat and work decreases the need for thermal utilities in the HEN design. As a result, the total annualized cost is also reduced due to the decrease in the operational expenses related to the heating and cooling of the streams.

Keywords: optimization, mixed-integer nonlinear programming (MINLP), heat exchanger network (HEN), heat integration, handling pressure.

1. Introduction

Optimizing energy use through the application of more efficient processing technologies is essential to improve the energy conservation in industrial processes (Onishi et al., 2013). The increasing global energy demand allied with the current high cost of energy, and the tightening environmental regulations on gaseous emissions are among the many driving forces behind the need for energy conservation (Razib et al., 2012) and efficiency in processing plants. The synthesis of heat exchanger networks (HENs) has been extensively studied over the past few decades (Huang and Karimi, 2012), due to the importance of thermal integration in the reduction of energy consumption and efficient energy usage (Ravagnani and Silva, 2012). Amongst the major research areas, mathematical programming stands out for treating the HEN design as an optimization problem, in order to obtain an optimal network in economic and thermodynamic terms. Although the simultaneous methods are, generally, more difficult to implement and solve, it can lead to larger economic advantages (Kamath et al., 2012).

C.4 Trabalhos Submetidos à Publicação em Revistas Indexadas

Retrofit of heat exchanger networks with pressure recovery of process streams at sub-ambient conditions

Viviani C. Onishi ^{a,b,c,*}, Mauro A. S. S. Ravagnani ^a, José A. Caballero ^b

^a Department of Chemical Engineering, State University of Maringá, Av. Colombo 5790, 87020-900, Maringá, PR, Brazil. E-mail addresses: pg51551@uem.br, ravag@deq.uem.br

^b Department of Chemical Engineering, University of Alicante, Ap Correos 99, 03080 Alicante, Spain. E-mail address: caballer@ua.es

^c CAPES Foundation, Ministry of Education of Brazil, 70040-20, Brasília, DF, Brazil

* Corresponding author. Tel: +34 965903400. E-mail address: pg51551@uem.br/viviani.onishi@hotmail.com (Viviani C. Onishi).

Abstract

This paper introduces a new mathematical model for the retrofit of heat exchanger networks (HENs), in which the pressure recovery of streams is used to enhance heat integration. Especially important in sub-ambient processes, the HEN retrofit with optimal integration between heat and work is mainly aimed at reducing the usage of expensive cold utility. The proposed superstructure for the HEN retrofit allows the increment of the existing heat exchange area, and the use of new equipment for both heat exchange and pressure manipulation. The pressure recovery of streams is performed simultaneously with the HEN synthesis, such that the process conditions (streams pressure and temperature) are optimization variables. The mathematical model based on a mixed-integer nonlinear programming (MINLP) formulation considers the coupling of turbine and compressor with a helper motor, in order to minimize the total annualized cost composed by additional capital and operational expenses. Three case studies are conducted to verify the accuracy of the proposed approach, including a real industrial application related to liquefied natural gas (LNG) production. The results indicate that the pressure recovery of streams is efficient for energy savings and, consequently, for decreasing the total cost of the HEN retrofit particularly in cryogenic processes.

C.5 Trabalhos Submetidos à Publicação em Eventos Científicos

Heat Exchanger Networks Retrofitted with Simultaneous Pressure Recovery

Onishi, V.C.¹
RAVAGNANI, M. A. S. S.²
Caballero, J. A.³

¹Universidade Estadual de Maringá - Departamento de Engenharia Química

²Universidade Estadual de Maringá

³Universidad de Alicante

Categoria da apresentação:

Oral

Área temática

8. Simulação, Otimização e Controle de Processos

Palavras-chave:

Optimization
retrofit
heat exchanger network (HEN)
pressure recovery
sub-ambient processes

Resumo:

This paper presents a new optimization model for the retrofit of heat exchanger networks (HENs), in which the pressure recovery of streams is used to enhance heat integration. Especially important in sub-ambient processes, the HEN retrofit with pressure recovery is mainly aimed at reducing the usage of expensive cold utility. The proposed superstructure allows the increment of the existing heat exchange area, and the use of new equipment for both heat exchange and pressure manipulation. The pressure recovery of streams is performed simultaneously with the HEN synthesis, such that the process conditions are optimization variables. The model based on a mixed-integer nonlinear programming formulation considers the coupling of turbine and compressor with a helper motor, in order to minimize the total annualized cost composed by additional capital and operational expenses. The results indicate that the pressure recovery is essential for decreasing the total cost of the HEN retrofit.

Apresentador:

Viviani Caroline Onishi



HEAT EXCHANGER NETWORKS RETROFITTED WITH SIMULTANEOUS PRESSURE RECOVERY

V. C. ONISHI^{1,2,3}, M. A. S. S. RAVAGNANI¹, J. A. CABALLERO²

¹ State University of Maringá, Department of Chemical Engineering, Av. Colombo 5790, 87020-900, Maringá, PR, Brazil

² University of Alicante, Department of Chemical Engineering, Ap Correos 99, 03080 Alicante, Spain

³ CAPES Foundation, Ministry of Education of Brazil, 70040-20, Brasília, DF, Brazil

E-mail adress: pg51551@uem.br/viviani.onishi@hotmail.com

ABSTRACT – This paper introduces a new optimization model for the retrofit of heat exchanger networks (HENs), wherein the pressure recovery of process streams is used to enhance the heat integration. Especially important in cryogenic processes, the HEN retrofit with optimal integration between heat and work is mainly aimed at reducing the usage of the extremely expensive cooling services. In this approach, the conventional problem of HENs retrofit is extended to include streams subjected to a specific pressure manipulation route. Thus, the adjustment of pressure levels of process streams is performed simultaneously with the HEN synthesis, such that the streams pressure and temperature are optimization variables. The mathematical model based on a mixed-integer nonlinear programming (MINLP) formulation allows for the increment of the existing heat exchange area, and the use of new equipment for both heat exchange and pressure manipulation. Moreover, the proposed superstructure considers the coupling of turbine and compressor with a helper motor, in order to minimize the total annualized cost composed by additional capital and operational expenses. A case study is conducted to verify the accuracy of the proposed approach. The results indicate that the pressure recovery is essential for reducing the energy consumption in a sub-ambient process and, consequently, for decreasing the total cost of the HEN retrofitted.

1. INTRODUCTION

Reducing energy consumption through implementation of more efficient and innovative strategies is one of the major concerns in processing plants. In this context, the retrofit of heat exchanger networks (HENs) is an effective way to achieve the desired energy savings from an already established network (Wang and Smith, 2013; Wang et al., 2012). The HENs retrofit is aimed at reducing the consumption of thermal utilities, by minimizing changes needed to improve energy recovery in terms of restructuring the possibilities of heat exchange between streams (i.e., re-piping), and modifying or replacing existing heat exchangers, often translated as function of process costs (Pan et al., 2013; Polley et al., 2013). Despite the numerous attempts to optimize the heat recovery by synthesizing new HENs, only a reduced number of studies in the available literature propose solutions to the problem of optimal integration between heat and work. It is noteworthy that none of these

