

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

LUCAS FRANCISCO DOS SANTOS

SÍNTESE E OTIMIZAÇÃO DE REDES DE TROCA DE CALOR E TRABALHO

MARINGÁ

2019

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

LUCAS FRANCISCO DOS SANTOS

SÍNTESE E OTIMIZAÇÃO DE REDES DE TROCA DE CALOR E TRABALHO

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química da Universidade Estadual de Maringá, como parte dos requisitos para obtenção do título de Mestre em Engenharia Química.

Orientadores: Mauro A. S. S. Ravagnani
Caliane Bastos Borba Costa

MARINGÁ

2019

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

Esta é a versão final da Dissertação de Mestrado apresentada por Lucas Francisco dos Santos perante a Comissão Julgadora do Curso de Mestrado em Engenharia Química em 09 de agosto de 2019.

COMISSÃO JULGADORA



Prof. Dr. Mauro Antônio da Silva Sá Ravagnani
Orientador / Presidente



Prof.ª Dr.ª Caliane Bastos Borba Costa
Coorientadora



Prof. Dr. José Antonio Caballero Suárez
Membro



Dr. Leandro Vitor Pavão
Membro

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

L933s	<p>Francisco dos Santos, Lucas</p> <p>Síntese e otimização de redes de troca de calor e trabalho / Lucas Francisco dos Santos. – Maringá, PR, 2019.</p> <p>91 f.: il. color., figs., tabs.</p> <p>Orientador: Prof. Dr. Mauro Antonio da Silva Sá Ravagnani. Coorientadora: Profa. Dra. Caliane Bastos Borba Costa. Dissertação (Mestrado) - Universidade Estadual de Maringá, Centro de Tecnologia, Departamento de Engenharia Química, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química, 2019.</p> <p>1. Calor e trabalho - Integração - Engenharia química . 2. Programação não-linear mista inteira. 3. Superestrutura. 4. Otimização. 5. Redes de troca - Calor e trabalho. I. Ravagnani, Mauro Antonio da Silva Sá , orient. II. Costa, Caliane Bastos Borba, coorient. III. Universidade Estadual de Maringá. Centro de Tecnologia. Departamento de Engenharia Química. Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química. IV. Título.</p> <p>CDD 23.ed. 660.28427</p>
-------	--

Dedico este trabalho e esforço à minha família, Ismael, Rosely e Mariane, e à minha amada companheira, Letícia.

AGRADECIMENTOS

Ao Professor Mauro Antônio da Silva Sá Ravagnani, pelo convite de desenvolver esse mestrado com sua orientação, o que me ajudou bastante quando eu estava com dificuldades de fazer escolhas profissionais. Sou grato, também, por me apresentar a um tema de pesquisa que envolve a tão intrigante e bela, programação matemática. Além disso, agradeço pela sua orientação e direcionamento durante esse mestrado e por sua proatividade no que tange questões institucionais.

À Professora Caliane Bastos Borba Costa, pelas orientações e ajudas para ultrapassar as barreiras nos momentos de bloqueio criativo. Também, agradeço por sua agilidade e minuciosidade nas correções dos trabalhos escritos durante este mestrado. Agradeço, ainda, pela excelente supervisão do meu estágio na docência do mestrado.

À minha família e namorada, pela paciência nos momentos difíceis e pela companhia nos momentos felizes de conquistas. Agradeço, também, por, apesar das dificuldades, me apoiarem tanto nas minhas escolhas em busca dos meus sonhos. Por último, mas não menos importante, agradeço pela confiança, amor e respeito que vocês têm por mim.

Aos companheiros (as) de nosso grupo de pesquisa, pela companhia no dia-a-dia da pesquisa, pelas apresentações e discussões nas reuniões de grupo, pelos debates produtivos e pelas viagens para congressos tão especiais.

Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) e à Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) pelo suporte financeiro durante a elaboração desta dissertação.

RESUMO

O aumento do consumo mundial de energia, somado ao fato da matriz energética no mundo ser majoritariamente formada por fontes não renováveis de energia, tem intensificado pesquisas que visem mitigar esse problema. O setor econômico que mais consome energia é o industrial. Então, para diminuir o consumo mundial de energia faz-se necessário aumentar a eficiência energética dos processos industriais. Nesses processos, as formas de energia mais frequentes são o calor e o trabalho, utilizados para aquecer, resfriar, comprimir e expandir correntes de processo. Assim, por meio da integração simultânea de calor e trabalho é possível fazer melhor uso dessas diferentes formas de energia e, portanto, reduzir o consumo de fontes externas de energia nas indústrias. A simultaneidade dessa integração é devida a interação do calor com o trabalho nas tarefas de compressão e expansão de correntes gasosas, uma vez que a temperatura dessas correntes varia significativamente no processo de mudança de pressão. Logo, a intenção dessa integração de processos é sintetizar redes de troca de calor e trabalho (RTCT) que satisfaçam as demandas de processo de compressão, expansão, aquecimento e resfriamento, aproveitando energia do próprio processo. Nesse contexto, esta dissertação teve como objetivo desenvolver uma nova metodologia de síntese e otimização de RTCT com mínimos custos de capital e de operação, usando programação matemática baseada em superestrutura. Para tanto, foi desenvolvida uma nova superestrutura para a representação da RTCT e um modelo sequencial de otimização com a formulação de um problema de programação não-linear mista inteira (MINLP). Além disso, desenvolveu-se o uso de substituição de variáveis e de otimização em terceiro nível como estratégias de redução de graus de liberdade e consequente redução das variáveis de decisão do problema. Para a solução do MINLP, uma técnica de otimização meta-heurística em dois níveis foi desenvolvida, empregando *Simulated Annealing* para o problema combinatório e *Particle Swarm Optimization* para o problema de programação não-linear. A validação da nova metodologia foi feita por sua aplicação a três estudos de caso, com duas, cinco e seis correntes de processo. A economia gerada com as RTCT obtidas por essa metodologia supera os melhores resultados reportados na literatura em faixa de 0,6 a 7,2 %. Conclui-se que tanto a superestrutura desenvolvida como a formulação do problema MINLP visando reduzir o número total de variáveis de decisão são eficazes na síntese e otimização de RTCT.

Palavras-chave: Integração simultânea de calor e trabalho. Programação não-linear mista inteira. Superestrutura. Otimização. Substituição de variáveis. Otimização em terceiro nível.

ABSTRACT

Both the increasing global energy consumption and the global energy matrix being mainly composed by non-renewable energy sources intensify research to mitigate this problem. The economic sector that consumes the most energy globally is the industry. Therefore, improving industrial processes energy efficiency is one way to diminish energy consumption worldwide. The most frequent energy available in industrial processes is heat and work that are used respectively for heating, cooling, compressing, and expanding process streams. Thus, the simultaneous heat and work integration is a mean of avoiding energy waste that results in reducing external energy sources consumption. The simultaneity of this integration is due to the heat and work interaction in compression and expansion of gaseous streams, once the temperature of gaseous streams varies with pressure change. The goal of this process integration is to determine work and heat exchange networks (WHEN) that perform industrial demands for compression, expansion, heating, and cooling with energy from within the process. In this context, the objective of present dissertation was to develop and implement a new methodology of synthesis and optimization of WHEN with minimum capital and operational costs using superstructure based mathematical programming. This methodology included a new WHEN superstructure and a sequential optimization model that has formulation of a mixed-integer nonlinear programming (MINLP) problem. Also, it included strategies of changes of variables and third-level optimization to reduce degrees of freedom and consequently the number of decision variables. For the MINLP solution approach a two-level meta-heuristic optimization method was developed, in which Simulated Annealing was used in combinatorial problem and Particle Swarm Optimization for the non-linear programming problem. For the sake of validation, this methodology was applied to three case studies that contained two, five, and six process streams. The WHENs economic savings obtained with this methodology overcame results reported in the literature from 0.6 to 7.2 %. Therefore, it is possible to conclude that both the new superstructure and its decision variables reduced MINLP model were efficient in the synthesis and optimization of WHEN.

Keywords: Simultaneous heat and work integration. Mixed-integer nonlinear programming. Superstructure. Optimization. Change of variables. Third-level optimization.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1: Superestrutura baseada em estágios de Yee e Grossmann (1990).....	24
Figura 2: Superestrutura de Wechsung <i>et al.</i> (2011).....	28
Figura 3: Superestrutura de Razib, Hasan e Karimi (2012). a) superestrutura multi-estágios para uma corrente. Estágio da superestrutura para corrente de b) baixa pressão, c) alta pressão.	29
Figura 4: Superestrutura de Onishi, Ravagnani e Caballero (2014a).....	30
Figura 5: Superestrutura de Onishi, Ravagnani e Caballero (2014b).....	31
Figura 6: Superestrutura de Huang e Karimi (2016). a) superestrutura multi-estágios para uma corrente. Estágio da superestrutura para corrente de b) alta pressão, c) baixa pressão.	32
Figura 7: Superestrutura de Onishi <i>et al.</i> (2018).	33
Figura 8: Superestrutura de Nair, Nagesh-Rao e Karimi (2018).....	34
Figura 9: Superestrutura de Pavão, Costa e Ravagnani (2019).	35
Figura 10: Superestrutura proposta para duas correntes de processo.....	38
Figura 11: Estágio de classificação	40
Figura 12: Estágio de integração de calor	41
Figura 13: Estágio de desclassificação	42
Figura 14: Estágio de ajuste de temperatura.....	43
Figura 15: Estágio de rede de troca de trabalho	44
Figura 16: Algoritmo de implementação sequencial do modelo matemático.	57
Figura 17: Exemplo genérico de modelagem a) sem e b) com substituição de variáveis.	59
Figura 18: Substituição de variáveis da seção de ajuste de temperatura.	61
Figura 19: Substituição de variáveis da seção de rede de troca de trabalho.....	62
Figura 20: Fluxograma esquemático do algoritmo de otimização em dois níveis.	63
Figura 21: RTCT final obtida pela presente metodologia para o estudo de caso 1.....	70
Figura 22: RTCT final obtida por Pavão, Costa e Ravagnani (2019) para o estudo de caso 1.71	
Figura 23: RTCT final obtida pela presente metodologia para o estudo de caso 2.....	75
Figura 24: RTCT final obtida por Huang e Karimi (2016) para o estudo de caso 2.	76
Figura 25: RTCT final obtida pela presente metodologia para o estudo de caso 3.....	82
Figura 26: RTCT final obtida por Pavão, Costa e Ravagnani (2019) para o estudo de caso 3.83	

LISTA DE TABELAS

Tabela 1: Dados das correntes de processo e utilidades do estudo de caso 1.....	68
Tabela 2: Parâmetros econômicos dos custos de capital do estudo de caso 1.....	69
Tabela 3: Parâmetros econômicos do custo operacional do estudo de caso 1 em \$.kWano ⁻¹ ..	69
Tabela 4: Parâmetros de implementação do SA para o estudo de caso 1.....	69
Tabela 5: Parâmetros de implementação do PSO para o estudo de caso 1	69
Tabela 6: Limite das variáveis do estudo de caso 1	69
Tabela 7: Parâmetros do modelo do estudo de caso 1	70
Tabela 8: Resumo do cenário de ISCT das duas RTCTs do estudo de caso 1	72
Tabela 9: Dados das correntes de processo e utilidades do estudo de caso 2.....	73
Tabela 10: Parâmetros econômicos dos custos de capital do estudo de caso 2.....	73
Tabela 11: Parâmetros econômicos do custo operacional do estudo de caso 2 em \$.kWano ⁻¹	73
Tabela 12: Parâmetros de implementação do SA para o estudo de caso 2.....	74
Tabela 13: Parâmetros de implementação do PSO para o estudo de caso 2	74
Tabela 14: Limite das variáveis e parâmetros do modelo do estudo de caso 2.....	74
Tabela 15: Parâmetros do modelo do estudo de caso 2.....	74
Tabela 16: Resumo do cenário de ISCT das duas RTCTs do estudo de caso 2	79
Tabela 17: Dados das correntes de processo e utilidades do estudo de caso 3.....	80
Tabela 18: Parâmetros econômicos dos custos de capital do estudo de caso 3.....	80
Tabela 19: Parâmetros econômicos do custo operacional do estudo de caso 3 em \$.kWano ⁻¹	80
Tabela 20: Parâmetros de implementação do SA para o estudo de caso 3.....	81
Tabela 21: Parâmetros de implementação do PSO para o estudo de caso 3	81
Tabela 22: Limite das variáveis e parâmetros do modelo do estudo de caso 3.....	81
Tabela 23: Parâmetros do modelo do estudo de caso 3	81
Tabela 24: Resumo do cenário de ISCT das duas RTCTs do estudo de caso 3	85

NOMENCLATURA

Acrônimos

AEU	Acoplado em eixo único
GA	<i>Genetic Algorithm</i>
IC	Integração de calor
ISCT	Integração simultânea de calor e trabalho
IT	Integração de trabalho
LP	Programação linear, do inglês <i>linear programming</i>
MILP	Programação linear mista inteira, do inglês <i>mixed-integer linear programming</i>
MINLP	Programação não-linear mista inteira, do inglês <i>mixed-integer nonlinear programming</i>
NLP	Programação não-linear, do inglês <i>nonlinear programming</i>
PSO	<i>Particle Swarm Optimization</i>
RTC	Rede de trocadores de calor
RTCT	Rede de troca de calor e trabalho
RTT	Rede de troca de trabalho
SA	<i>Simulated Annealing</i>
TCAEU	Turbina e compressor acoplado em eixo único

Superestrutura:

k	Índice de estágio vertical da superestrutura de RTCT
K	Número de estágios verticais da superestrutura de RTCT
n	Índice de estágio horizontal da superestrutura de RTCT
N_s	Número de estágios horizontais da superestrutura de RTCT
s	Índice de correntes de processo
S	Número de correntes de processo

Simulated Annealing:

CA	Chance de aceitação da topologia
K_{SA}	Número de iterações para cada temperatura
T_{SA}	Temperatura do SA [\$.ano ⁻¹]
$T_{SA,max}$	Temperatura inicial do SA [\$.ano ⁻¹]

$T_{SA,min}$ Temperatura final do SA [$\$.ano^{-1}$]
 α Constante de decaimento do SA

Particle Swarm Optimization:

c_1 Fator social da partícula no enxame (referente ao melhor valor do enxame)
 c_2 Fator cognitivo da partícula no enxame (referente ao melhor valor individual)
 dP_{PSO} Passo inicial máximo da pressão para as partículas do enxame [MPa]
 dQ_{PSO} Passo inicial máximo do calor para as partículas do enxame [kW]
 $dT_{adj,PSO}$ Passo inicial máximo da temperatura ajustada para as partículas do enxame [K]
 F Número de partículas do enxame
 i Índice referente ao número de partículas do enxame
 k_{PSO} Índice referente ao número de iterações do enxame
 K_{PSO} Número máximo de iterações do enxame
 ω Constante de inércia (referente à velocidade anterior)
 ω_{max} Constante de inércia inicial
 ω_{min} Constante de inércia final

Parâmetros do problema:

a Custo fixo de capital dos trocadores de calor [\$]
 a_c Custo fixo de capital dos compressores elétricos [\$]
 a_e Custo fixo de capital das turbinas elétricas [\$]
 a_g Custo fixo de capital dos geradores elétricos [\$]
 a_{hm} Custo fixo de capital dos motores elétricos [\$]
 a_{uc} Custo fixo de capital dos compressores AEU [\$]
 a_{ue} Custo fixo de capital das turbinas AEU [\$]
 b Coeficiente proporcional a área para o custo de capital dos trocadores de calor [$\$^{-1}$]
 b_c Coeficiente do trabalho para o custo de capital dos compressores elétricos [$\$^{-1}$]
 b_e Coeficiente do trabalho para o custo de capital das turbinas elétricas [$\$^{-1}$]
 b_g Coeficiente do trabalho para o custo de capital dos geradores elétricos [$\$^{-1}$]
 b_{hm} Coeficiente do trabalho para o custo de capital dos motores elétricos [$\$^{-1}$]
 b_{uc} Coeficiente do trabalho para o custo de capital dos compressores AEU [$\$^{-1}$]
 b_{ue} Coeficiente do trabalho para o custo de capital das turbinas AEU [$\$^{-1}$]
 c Coeficiente proporcional ao quadrado da área para o custo de capital dos trocadores de calor [$\$^{-2}$]

c_c	Expoente do trabalho para o custo de capital dos compressores elétricos
C_{CU}	Custo da utilidade fria [$\$.kWano^{-1}$]
CE	Custo da eletricidade [$\$.kWano^{-1}$]
c_e	Expoente do trabalho para o custo de capital das turbinas elétricas
c_g	Expoente do trabalho para o custo de capital dos geradores elétricos
c_{hm}	Expoente do trabalho para o custo de capital dos motores elétricos
C_{HU}	Custo da utilidade quente [$\$.kWano^{-1}$]
CP	Capacidade térmica das correntes de processo [$kW.K^{-1}$]
c_{uc}	Expoente do trabalho para o custo de capital dos compressores AEU
c_{ue}	Expoente do trabalho para o custo de capital das turbinas AEU
eps	Precisão relativa de um número flutuante na computação
f	Fator de anualização [ano^{-1}]
h	Coefficiente individual de troca térmica das correntes de processo [$kW.m^{-2}.K^{-1}$]
h_s	Coefficiente individual de troca térmica da utilidade quente [$kW.m^{-2}.K^{-1}$]
h_w	Coefficiente individual de troca térmica da utilidade fria [$kW.m^{-2}.K^{-1}$]
$p1_{leve}$	Coefficiente linear das penalizações leves [$\$.ano^{-1}$]
$p1_{pesado}$	Coefficiente linear das penalizações pesadas [$\$.ano^{-1}$]
$p2_{leve}$	Coefficiente angular das penalizações leves [$\$.ano^{-1}$]
$p2_{pesado}$	Coefficiente angular das penalizações pesadas [$\$.ano^{-1}$]
PE	Preço de venda da eletricidade [$\$.kWano^{-1}$]
P_{in}	Pressão de entrada das correntes de processo [MPa]
P_{low}	Limite inferior da pressão das correntes de processo [MPa]
P_{out}	Pressão de saída das correntes de processo [MPa]
P_{up}	Limite superior da pressão das correntes de processo [MPa]
Q_{low}	Limite inferior da carga térmica dos trocadores de calor [kW]
Q_{up}	Limite superior da carga térmica dos trocadores de calor [kW]
TI_{low}	Limite inferior da temperatura de entrada nas turbinas e compressores [K]
T_{in}	Temperatura de entrada das correntes de processo [K]
TI_{up}	Limite superior da temperatura de entrada nas turbinas e compressores [K]
T_{low}	Limite inferior da temperatura das correntes de processo [K]
T_{out}	Temperatura de saída das correntes de processo [K]
TS_{in}	Temperatura de entrada da utilidade quente [K]
TS_{out}	Temperatura de saída da utilidade quente [K]
T_{up}	Limite superior da temperatura das correntes de processo [K]

TW_{in}	Temperatura de entrada da utilidade fria [K]
TW_{out}	Temperatura de saída da utilidade fria [K]
ΔT_{min}	Diferença mínima de temperatura nos terminais dos trocadores de calor [K]
η_c	Eficiência isentrópica dos compressores
η_e	Eficiência isentrópica das turbinas
κ	Coeficiente politrópico das correntes de processo

Variáveis do modelo:

A	Área dos trocadores de calor entre correntes de processo [m ²]
A_s	Área dos aquecedores [m ²]
A_w	Área dos resfriadores [m ²]
c	Variável binária que controla a existência de compressores
CCC	Custo de capital da RTC [\$]
CCT	Custo de capital da RTT [\$]
COC	Custo operacional anualizado da RTC [\$.ano ⁻¹]
$CustoRTC$	Custo total anualizado da RTC [\$.ano ⁻¹]
$CustoRTT$	Custo total anualizado da RTT [\$.ano ⁻¹]
COT	Custo operacional anualizado da RTT [\$.ano ⁻¹]
d	Variável binária que classifica a corrente como quente (1) ou fria (0)
e	Variável binária que controla a existência de turbinas elétricas
FC	Capacidade térmica da corrente fria na seção de IC [kW.K ⁻¹]
FH	Capacidade térmica da corrente quente na seção de IC [kW.K ⁻¹]
m	Variável binária que controla se o equipamento de manipulação de pressão está ou não AEU
p	Variável binária que controla a existência de manipuladores de pressão
P	Pressão das correntes de processo [MPa]
pen	Variável contínua que armazena as penalizações do modelo [\$.ano ⁻¹]
Q	Carga térmica dos trocadores de calor entre correntes de processo [kW]
Q_s	Carga térmica dos aquecedores [kW]
Q_w	Carga térmica dos resfriadores [kW]
T	Temperatura da corrente de processo antes de ser classificada [K]
T_{adj}	Temperatura da corrente de processo ajustada com utilidades [K]
TC	Temperatura da corrente fria na seção de IC [K]
TH	Temperatura da corrente quente na seção de IC [K]

T_I	Temperatura de entrada na seção da RTT [K]
T_{ut}	Temperatura da corrente não classificada que entra na seção de ajuste de temperatura [K]
U	Coeficiente global de troca térmica em trocadores de calor [$\text{kW}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{K}^{-1}$]
uc	Variável binária que controla a existência de compressores AEU
ue	Variável binária que controla a existência de turbinas AEU
U_s	Coeficiente global de troca térmica em aquecedores [$\text{kW}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{K}^{-1}$]
U_w	Coeficiente global de troca térmica em resfriadores [$\text{kW}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{K}^{-1}$]
WC	Trabalho consumido em compressores elétricos [kW]
WE	Trabalho produzido em turbinas elétricas [kW]
WUC	Trabalho consumido em compressores AEU [kW]
WUE	Trabalho produzido em turbinas AEU [kW]
y	Variável binária que controla a existência de trocadores de calor
y_s	Variável binária que controla a existência de aquecedores
y_w	Variável binária que controla a existência de resfriadores
ΔT_{ml}	Média logarítmica das diferenças de temperatura nos terminais do trocador de calor [K]
ΔT_{sml}	Média logarítmica das diferenças de temperatura nos terminais do aquecedor [K]
ΔT_{wml}	Média logarítmica das diferenças de temperatura nos terminais do resfriador [K]

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO	18
2. REVISÃO DA LITERATURA.....	22
2.1. Redes de Trocadores de Calor.....	22
2.2. Redes de Troca de Calor e Trabalho	25
3. METODOLOGIA.....	36
3.1. Definição do Problema	36
3.2. Superestrutura Proposta.....	37
3.3. Modelagem Matemática do Problema.....	39
3.3.1. <i>Derivação do modelo a partir da superestrutura.....</i>	<i>39</i>
3.3.1.1. <i>Classificação.....</i>	<i>40</i>
3.3.1.2. <i>Integração de Calor.....</i>	<i>41</i>
3.3.1.3. <i>Desclassificação.....</i>	<i>42</i>
3.3.1.4. <i>Ajuste de Temperatura.....</i>	<i>43</i>
3.3.1.5. <i>Rede de Troca de Trabalho.....</i>	<i>44</i>
3.3.2. <i>Custo da RTC</i>	<i>46</i>
3.3.3. <i>Custo da RTT.....</i>	<i>47</i>
3.3.4. <i>Restrições e Penalizações.....</i>	<i>49</i>
3.3.5. <i>Função Objetivo</i>	<i>53</i>
3.4. Análise de Graus de Liberdade e Escolha das Variáveis de Decisão.....	53
3.4.1. <i>Classificação</i>	<i>54</i>
3.4.2. <i>Integração de Calor</i>	<i>54</i>
3.4.3. <i>Desclassificação</i>	<i>54</i>
3.4.4. <i>Ajuste de Temperatura</i>	<i>54</i>
3.4.5. <i>Rede de Troca de Trabalho</i>	<i>55</i>
3.4.6. <i>Custo de RTC.....</i>	<i>55</i>
3.4.7. <i>Custo de RTT.....</i>	<i>56</i>
3.5. Implementação do Modelo Sequencial e Otimização em Terceiro Nível	56
3.6. Substituição de Variáveis para Redução do Espaço de Busca	59
3.7. Otimização em Dois Níveis.....	63
3.8. Simulated Annealing para as Variáveis Binárias.....	65
3.9. Particle Swarm Optimization para as Variáveis Contínuas.....	66
4. RESULTADOS E DISCUSSÃO.....	68

4.1.	Estudo de Caso 1.....	68
4.2.	Estudo de Caso 2.....	72
4.3.	Estudo de Caso 3.....	79
4.4.	Discussão	85
5.	CONCLUSÕES.....	87
	REFERÊNCIAS	89

1. INTRODUÇÃO

O consumo de energia no mundo entre 1971 e 2016 aumentou cerca de 2,5 vezes (de 5.523 Mtoe para 13.761 Mtoe) e a preocupação com esta situação tem se tornado cada vez mais presente na sociedade. Além do aumento do consumo, outro problema é que a matriz energética mundial é predominantemente (cerca de 80 %) voltada às fontes não renováveis de energia, como o petróleo e derivados, o carvão e o gás natural. Ainda, o setor da economia que mais consome energia é a indústria, que representa 28,8 % do consumo mundial em 2016 (INTERNATIONAL ENERGY AGENCY, 2018).

Esse cenário se deve ao desenvolvimento econômico da sociedade e torna urgente a intensificação de pesquisas que procurem mitigar esses problemas, seja pelo desenvolvimento de novas fontes de energia, seja pelo aumento da eficiência energética. A eficiência energética é vital para se atingir múltiplos benefícios como as reduções de custos, de impactos climáticos e de poluição do ar devido aos processos de produção de energia ou o aumento do acesso à energia. Logo, o aumento da eficiência energética nas indústrias é de suma importância para amenizar os problemas energéticos no mundo.

Nos processos industriais, são comuns demandas por aquecimento, resfriamento, compressão e expansão de correntes materiais de processo. Mesmo que comuns, essas operações são responsáveis por grande parte do consumo de energia em plantas industriais. Assim, uma forma de se aumentar a eficiência energética, nesse contexto industrial, é promovendo uma integração de processos. Segundo Fu, Vikse e Gundersen (2018), integração de processos é uma metodologia que combina demandas do processo de tipos opostos, por exemplo, aquecer e resfriar ou comprimir e expandir.

Para o caso de aquecer e resfriar, essa metodologia é dita integração de calor (IC). A IC consiste em dividir as correntes materiais de processo em dois conjuntos, correntes quentes e frias. As correntes quentes são aquelas que necessitam diminuir seu nível energético, seja pela redução da temperatura ou mudança de fase (condensação, por exemplo). Já as correntes frias são o oposto, ou seja, necessitam aumentar seu nível energético por meio do aumento da temperatura ou pela mudança de fase (evaporação, por exemplo). Portanto, essa metodologia busca suprir as demandas de aquecimento das correntes frias com o calor disponível das correntes quentes. A grande restrição da IC é a segunda lei da termodinâmica, que pode ser enunciada aqui como a direção da transferência de calor ser sempre da maior para a menor temperatura. O objetivo principal da prática da IC é a redução dos custos de capital e operacional e dos impactos ambientais do processo industrial. Por fim, o resultado da IC é

uma rede de trocadores de calor (RTC) entre correntes de processos quentes e frias (ou, simplesmente, trocadores de calor), trocadores de calor entre correntes quentes e utilidades frias (resfriadores) e trocadores de calor entre correntes frias e utilidades quentes (aquecedores).

Por outro lado, no caso de comprimir e expandir, a integração de processos é dita integração de trabalho (IT). Similar à IC, a IT também divide as correntes materiais de processo em dois conjuntos, as correntes de alta pressão e as de baixa pressão. As correntes de alta pressão são aquelas que precisam ter sua pressão reduzida. Já as correntes de baixa pressão necessitam aumentá-la. Dessa forma, a fim de reduzir os custos e os impactos ambientais do processo, essa integração busca recuperar ao máximo o trabalho produzido pela expansão de correntes de alta pressão para utilizá-lo na compressão das correntes de baixa pressão. Essa recuperação de trabalho é feita por intermédio de turbinas e compressores acoplados em eixo único (TCAEUs). As TCAEUs são turbinas e compressores acoplados a um mesmo eixo de forma que o trabalho de expansão gerado em uma turbina seja transferido pelo eixo para ser utilizado no compressor. O resultado da IT é uma rede de turbinas elétricas, compressores elétricos, TCAEUs, válvulas, motores elétricos e geradores elétricos para comprimir e expandir as correntes de processo e, possivelmente, transformar trabalho de eixo em energia elétrica. Essa rede descrita é denominada rede de troca de trabalho (RTT).

Sabe-se que as variações na pressão de correntes de processo gasosas usando compressores, turbinas ou válvulas não são isotérmicas, pois implicam em mudanças na temperatura dessas correntes. Mudando a temperatura de correntes de processo, muda-se a energia disponível para IC. Por isso, diz-se que trabalho e calor interagem e, portanto, a IC e a IT devem ser realizados simultaneamente na chamada integração simultânea de calor e trabalho (ISCT). Essa simultaneidade se deve ao princípio de que a soma dos ótimos das partes, que não são mutuamente exclusivas, não representa o ótimo do todo. Finalmente, o resultado da ISCT é uma rede que contém os equipamentos da RTC e da RTT e desempenha as demandas de processo por compressão, expansão, aquecimento e resfriamento. Essa rede de ISCT é chamada de rede de troca de calor e trabalho (RTCT).

A ISCT é uma tarefa árdua, pois esse tipo de problema possui infinitas soluções. Ou seja, há infinitas RTCT que solucionem um problema de ISCT. Notoriamente, espera-se que a RTCT resultante da ISCT seja a melhor possível, no sentido de ser mais barata, de causar menos impactos ao meio ambiente, de ser mais controlável ou que apresente melhor desempenho para outro fator do interesse de quem usará a rede. Portanto, a tarefa de realizar a

ISCT significa determinar a melhor solução dentre muitas, e, dessa forma, pode ser formulada como um problema de otimização.

Com uso de superestruturas, esses problemas de ISCT podem ser modelados matematicamente e resolvidos por meio de otimização. Uma superestrutura é um conjunto de possíveis topologias que formam, eventualmente, uma solução de um problema combinatório. No entanto, uma solução de um problema de ISCT envolve tanto topologia (combinação dos equipamentos existentes na rede) quanto aspectos que matematicamente são representados por números pertencentes ao conjunto dos reais, como o dimensionamento de trocadores de calor, compressores, turbinas e assim por diante. Por isso, o problema matemático proveniente do desenvolvimento de um modelo a partir de uma superestrutura para a síntese de uma RTCT é um problema de programação mista, envolvendo variáveis inteiras (responsáveis por representar a topologia) e contínuas (responsáveis por representar dimensionamento dos equipamentos e condições de operação). Ainda, como as equações de projeto de trocador de calor, equações de estado de gases, equações de custos e outras são não-lineares, esses problemas podem ser formulados como de programação não-linear mista inteira (MINLP).

Assim, o objetivo geral do presente estudo é desenvolver e implementar uma nova metodologia de síntese e otimização de RTCT. Para tanto, tem-se por objetivos específicos:

- a elaboração de uma nova superestrutura de RTCT e o desenvolvimento de um modelo matemático a partir dessa superestrutura, com a formulação de um problema MINLP;
- a aplicação de substituição de variáveis e otimização em terceiro nível para redução do espaço de busca do problema MINLP sem perder a generalidade da superestrutura;
- a implementação sequencial do modelo MINLP e uma abordagem da otimização em dois níveis usando técnicas meta-heurísticas;
- a validação da metodologia pela sua aplicação a três casos de estudo propostos na literatura.

A presente dissertação é composta, inicialmente, por uma breve revisão da literatura sobre IC e uma detalhada a respeito dos trabalhos publicados na área de ISCT. Depois, a metodologia é apresentada pela definição do problema, apresentação da superestrutura, derivação do modelo matemático, análise de graus de liberdade e escolha das variáveis de decisão, implementação sequencial do modelo matemático, elaboração de substituição de variável e otimização em terceiro nível para redução dos graus de liberdade e da otimização meta-heurística em dois níveis. Em seguida, apresentam-se os resultados e as discussões

provenientes da aplicação da metodologia a três estudos de caso. Finalmente, as conclusões oriundas desta dissertação são apresentadas.

2. REVISÃO DA LITERATURA

Nesse capítulo apresenta-se uma breve revisão da literatura sobre síntese e otimização de RTCT. No entanto, antes de abordar os desenvolvimentos científicos na área de RTCT, vale iniciar pelo tema que é seu precursor. Portanto, inicia-se essa revisão de literatura pelos trabalhos mais influentes na área de RTC.

2.1. Redes de Trocadores de Calor

Um primeiro trabalho desse campo de investigação que é importante salientar é o de Linnhoff e Hindmarsh (1982). Nesse trabalho, os autores apresentaram os conceitos utilizados como base para a integração de processos por meio da Análise Pinch. Essa técnica foi revolucionária para a época, pois permitia, por meio da utilização das Leis da Termodinâmica e da proposição de regras heurísticas, desenvolver eficientemente RTCs para problemas complexos de IC. Nesse trabalho, os autores desenvolveram um método algorítmico, para se determinar a demanda mínima de energia necessária para alcançar a máxima integração de calor entre as correntes de processo. Ou seja, por meio da determinação da demanda mínima de utilidades quente e fria pôde-se prever qual era a máxima recuperação de calor permitida para um dado processo. O procedimento algorítmico sequencial tinha como base a segunda Lei da Termodinâmica e, para um valor mínimo fixado para a diferença de temperatura nos terminais de cada um dos trocadores de calor, por meio de regras heurísticas, a RTC poderia ser estruturada para garantir a máxima recuperação de calor.

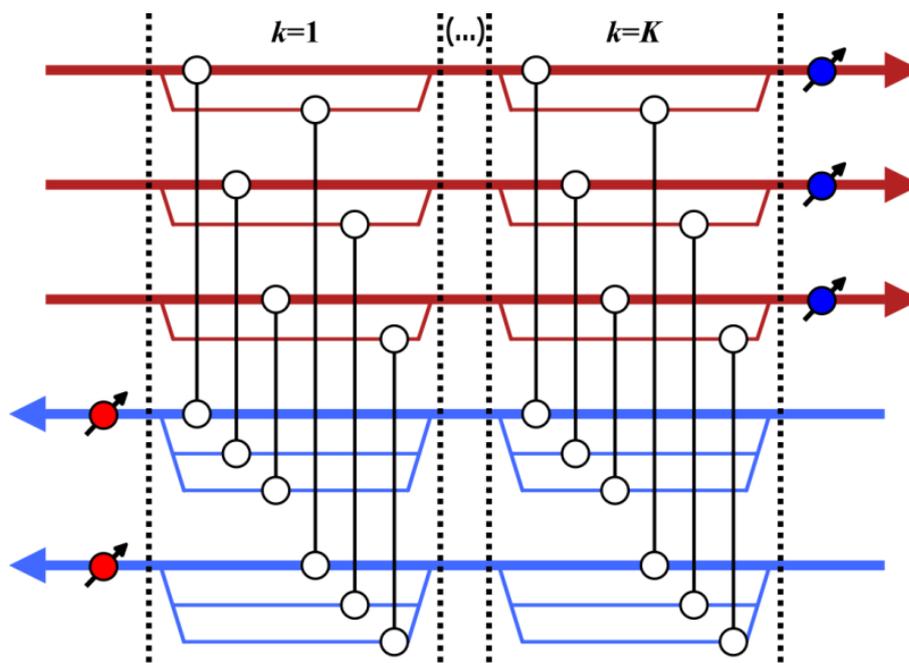
Além da Análise Pinch, métodos para a síntese e otimização de RTC foram desenvolvidos usando programação matemática. Dos trabalhos publicados sobre esses métodos destacam-se dois. O primeiro trabalho foi o de Papoulias e Grossmann (1983), no qual os autores propuseram uma metodologia sequencial composta por duas etapas. Na primeira etapa, formulava-se um problema de transbordo expandido tendo como base os intervalos de temperatura existentes entre as correntes de processo, em que o calor é transportado dos intervalos de temperatura mais elevada para os intervalos de menor temperatura para suprir suas demandas energéticas. Esse problema foi formulado como sendo de programação linear e foi usado para se determinar o custo mínimo de utilidades. O modelo do transbordo expandido possibilitava restringir trocas de calor específicas e considerar múltiplas utilidades. A partir daí, por meio da identificação do ponto pinch, um segundo modelo foi proposto, visando a minimização do número de unidades de troca térmica para as subredes acima e abaixo da temperatura do Pinch. Esse modelo foi formulado como um

problema MILP para cada uma das subredes. O resultado do MILP indicava, portanto, quais trocas de calor podem ocorrer entre as correntes de processo para se garantir o mínimo de unidades de troca térmica. No entanto, não se especificava como essas trocas deviam ocorrer, trabalho esse a ser feito manualmente.

O segundo trabalho que merece destaque é de Floudas, Ciric e Grossmann (1986). Esses autores propuseram a adição de um terceiro passo ao método sequencial do trabalho anterior, que é a minimização do custo de investimento. Para tanto, foi proposto uma superestrutura de como as trocas de calor determinadas no problema MILP deveriam ocorrer. Superestrutura, essa, que considerava troca de calor em paralelo, divisão de correntes, mistura e by-pass de correntes. Dessa superestrutura, os autores propuseram um modelo NLP para a minimização do custo de investimento e, assim, automatizaram a síntese e otimização de RTC por meio de um método sequencial.

A próxima grande revolução nesse tema foi o desenvolvimento de métodos simultâneos de síntese e otimização de RTC usando programação matemática baseada em superestruturas. Um primeiro trabalho que se destacou nessa área foi o de Yee e Grossmann (1990). Esses autores propuseram uma superestrutura de estágios e dessa estrutura derivaram um modelo com a formulação MINLP. Assim, esses autores não se apoiaram mais nem em sub-redes divididas na temperatura de Pinch, nem em valores heurísticos de diferença mínima nos terminais dos trocadores de calor. A superestrutura proposta por esses autores consiste em K estágios, nos quais cada corrente quente pode trocar calor paralelamente (divisão de corrente) com cada corrente fria. Uma representação dessa superestrutura para duas correntes quentes (H1 e H2) e duas correntes frias (C1 e C2) é ilustrada na Figura 1. Uma grande simplificação considerada nesse trabalho foi a mistura isotérmica, ou seja, cada ramo de corrente após troca de calor deve ser misturada na mesma temperatura ao final do estágio k . Essa consideração permitiu à formulação do problema MINLP apresentar não-linearidade apenas na função objetivo, mantendo as equações de restrição lineares, o que tornou a formulação bastante robusta e eficiente.

Figura 1: Superestrutura baseada em estágios de Yee e Grossmann (1990).



Fonte: Adaptado de Yee e Grossmann (1990).

Partindo do trabalho de Yee e Grossmann (1990), muitos autores desenvolveram novas superestruturas e modelos para síntese ótima de RTC. Por exemplo, Zamora e Grossmann (1997) propuseram uma superestrutura que não considerava divisão de correntes. Então, os trocadores de calor eram alocados em série em cada estágio de RTC. Essa superestrutura, apesar de simplificada, se mostrou robusta e apresentou boas alternativas para a soluções de problemas de síntese ótima de RTC. Björk e Westerlund (2002) mudaram o modelo de Yee e Grossmann (1990) para considerar mistura não isotérmica, aumentando as possibilidades de solução de RTC ao custo de aumentar as não-linearidades do problema MINLP. Outra superestrutura foi proposta por Zhaoyi *et al.* (2013), que considerava em um estágio divisão de correntes e em outro, nenhuma divisão. Já Pavão, Cosata e Ravagnani (2018) propuseram algumas melhorias à superestrutura de Yee e Grossmann (1990). Uma delas foi considerar utilidades em estágios intermediários, ao invés de apenas nos extremos. Dessa forma, uma corrente de processo podia trocar calor com utilidades no mesmo estágio em que o fazia com correntes de processo. Outra diferença foi possibilitar o uso de mais de um tipo de utilidades quente e fria, alocadas em paralelo nos estágios intermediários e finais. A mistura restrita a ser isotérmica também não foi mais considerada.

Dentre os métodos de solução dos problemas MINLP para a síntese de RTC ótimas alguns autores obtiveram bons resultados usando técnicas meta-heurísticas. Um primeiro

trabalho que se destacou foi o de Dolan, Cummings e Levan (1989), no qual os autores usaram o algoritmo do SA para otimização de RTC. O SA era usado para tomar decisões de adicionar e remover trocadores de calor, modificar as cargas térmicas desses e modificar as frações de divisão de correntes de processo. Athier *et al.* (1997) deram um passo importante, que foi o de dividir o problema MINLP em dois problemas de otimização, um combinatório e outro contínuo. Esse procedimento foi chamado de otimização em dois níveis. Os autores usaram um SA para a otimização combinatória (lidando com a existência de equipamentos) e programação quadrática sequencial para a otimização contínua (lidando com as cargas térmicas e frações de divisão de correntes). Logo, os autores hibridizaram um método estocástico (SA) com um determinístico (programação quadrática sequencial). Lewin (1998) também buscou a solução do problema usando dois níveis, sendo um *Genetic Algorithm* (GA) para a otimização combinatória e um GA adaptado para a otimização contínua. Ravagnani *et al.* (2005) usaram um GA para otimização da diferença mínima de temperatura nos terminais dos trocadores de calor e um GA para determinar a RTC ótima. Alguns outros autores usaram diferentes combinações de métodos meta-heurísticos com destaque a três trabalhos. Pavão, Costa e Ravagnani (2016) usaram uma combinação de GA e PSO para a solução do problema MINLP. Pavão, Costa e Ravagnani (2017) usaram uma combinação de SA e PSO para solucionar um modelo MINLP derivado de uma superestrutura que não considera divisão de correntes. Pavão *et al.* (2017) propuseram uma combinação de SA e *Rocket Fireworks Optimization*, que, por sua vez, trata-se de uma combinação de um SA contínuo inicial seguido de um PSO. Essa metodologia foi capaz de resolver problemas de IC em larga escala, com até 39 correntes de processo.

2.2. Redes de Troca de Calor e Trabalho

A ideia da integração simultânea de calor e trabalho começou a ser desenvolvida nos estudos de síntese de RTC nos quais se incluía máquinas térmicas e bombas de calor. Esse tema era chamado pelos pesquisadores da época de integração de calor e potência. Um trabalho que se destacou nessa área foi de Townsend e Linnhoff (1983) que desenvolveram critérios para a colocação apropriada de máquinas térmicas e bombas de calor nas RTCs. Yoon (1990) desenvolveu um método para a síntese de RTC e do sistema de utilidades simultaneamente. O autor propôs regras heurísticas e um modelo NLP para a otimização da RTC juntamente com o sistema de utilidades, que incluía as temperaturas de utilidades quente e fria, máquinas térmicas, bombas de calor e ciclos de refrigeração. Linnhoff e Dhole (1992) propuseram um método Pinch modificado para fazer o projeto simultâneo de RTC e de

sistemas de refrigeração de processos que operam a baixas temperaturas. Para tanto, eles usaram o método Pinch e análise exergetica para determinar a RTC e a demanda por trabalho de eixo no ciclo de refrigeração. Holiastos e Manousiouthakis (2002) propuseram uma formulação matemática para determinar o custo mínimo do sistema de utilidades necessário para um problema de integração de calor e potência. Ou seja, o custo mínimo da RTC, das máquinas térmicas e das bombas de calor para satisfazer a demanda do processo. Posada e Manousiouthakis (2005) aplicaram o modelo anterior a uma indústria de produção de hidrogênio por meio da reforma de metano.

Os trabalhos anteriormente citados não abordaram especificamente o problema de ISCT, pois lidaram apenas com a IC e com as mudanças de pressão dos fluidos usados como utilidades (máquinas térmicas e bombas de calor). A respeito da integração simultânea de calor e trabalho propriamente, houve dois tipos de abordagem que se destacaram na literatura. A primeira é aquela baseada na termodinâmica e em regras heurísticas (similar ao método Pinch, mas para ISCT). Já a outra é aquela que usa programação matemática baseada em superestruturas para síntese de RTCT.

Começando pelo primeiro grupo, um trabalho de importância foi o de Aspelund, Berstad e Gundersen (2007). Esses autores desenvolveram um método de síntese de RTCT baseado em fundamentos da termodinâmica e em heurísticas de processo. Esse método foi chamado ExPAnD, do inglês *Expanded Pinch Analysis Design*, e visava minimizar o consumo de exergia (irreversibilidades) na integração simultânea de calor e trabalho. Dentre as regras do método ExPAnD, destacou-se uma para o posicionamento de compressores e turbinas, que foi a seguinte: compressão (expansão) adiciona (remove) calor no (do) sistema, então deve ser feita acima (abaixo) da temperatura de Pinch. Para a alocação de trocadores de calor, uma regra que se destacou foi que as diferenças de temperatura nos terminais dos trocadores de calor deviam ser as mais próximas possíveis do valor mínimo. Assim, não se gerava irreversibilidade desnecessária, aumentava-se a geração de potência e se reduzia a necessidade de utilidades quente e fria. Esses autores aplicaram essa metodologia ao processo de liquefação de gás natural e obtiveram um aumento da eficiência exergetica de 49,7 % para 85,7 %.

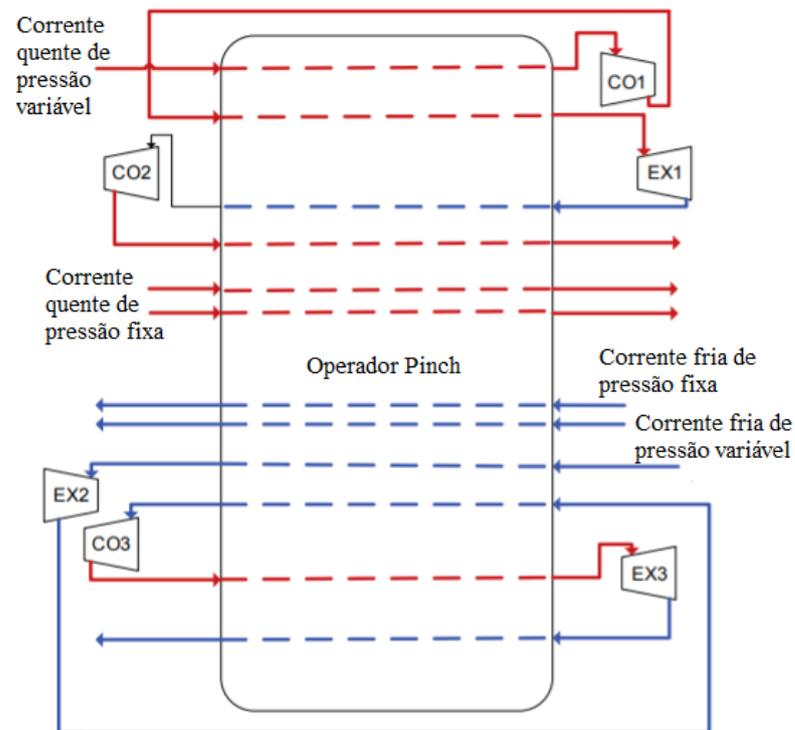
Posteriormente, Gundersen, Berstad e Aspelund (2009) agregaram ao método ExPAnD alguns *insights* de posicionamento adequado de compressores e turbinas em processos subambiente. Esses *insights* advieram de um estudo de caso que esses autores fizeram usando o método ExPAnD. Esse estudo se baseava em variar a temperatura de entrada dos compressores para determinar a temperatura em que a irreversibilidade fosse a

menor. Chegou-se, então, à conclusão que a temperatura ideal para compressão e expansão era a temperatura do Pinch, mas não houve prova matemática desses resultados. Ainda, os autores levantaram a problemática de que a temperatura do Pinch podia variar com as manipulações de pressão das correntes de processo, o que tornava o problema iterativo e melhor abordável por métodos de otimização baseada em superestruturas.

Depois, alguns artigos foram publicados propondo regras heurísticas que visavam, também, minimizar as irreversibilidades da integração simultânea de calor e trabalho para compressão e expansão em processos com temperaturas abaixo e acima da temperatura ambiente (FU; GUNDERSEN, 2015a, 2015b, 2015c, 2015d). Em poucas palavras, as conclusões desses trabalhos foram que as compressões e expansões deviam ser feitas nas temperaturas de Pinch, ambiente ou das utilidades quente e fria, dependendo do problema em questão. Com base nesses trabalhos, os mesmos autores desenvolveram um método gráfico para ISCT utilizando conceitos da Grande Curva Composta (FU; GUNDERSEN, 2016b). Esse método é uma extensão da curva composta do método Pinch que usa exergia do calor e trabalho ao invés de entalpia. A Grande Curva Composta foi usada pelos autores para identificar, antes da síntese, o consumo mínimo de exergia, que era atingido fazendo-se divisões de correntes, por exemplo.

Migrando para os trabalhos nos quais o problema de ISCT foi abordado por meio de programação matemática baseada em superestrutura, destaca-se, primeiramente, o artigo de Wechsung *et al.* (2011). Baseados nas conclusões de Gundersen, Berstad e Aspelund (2009), esses autores apresentaram uma metodologia de ISCT que combinava regras heurísticas, fundamentos da termodinâmica e programação matemática baseada em superestruturas. O problema que eles endereçaram era a síntese e otimização de RTC considerando correntes de processo que podiam ser expandidas e comprimidas. A superestrutura proposta por esses autores previa a divisão das correntes de processo em quatro grupos: correntes quentes de pressão fixa, frias de pressão fixa, quentes de pressão variável e frias de pressão variável. As correntes de pressão fixas apenas interagem no problema de recuperação de calor. Já as correntes de pressão variável podiam comprimir, expandir, aquecer e resfriar em rotas pré-determinadas de acordo com a sua identidade. Uma corrente quente de pressão variável podia ser resfriada, comprimida, resfriada, expandida, aquecida, comprimida e resfriada, e uma corrente fria de pressão variável podia ser aquecida, expandida, aquecida, comprimida, resfriada, expandida e aquecida. Essas rotas das correntes de pressões fixas e variáveis são representadas na Figura 2.

Figura 2: Superestrutura de Wechsung *et al.* (2011).



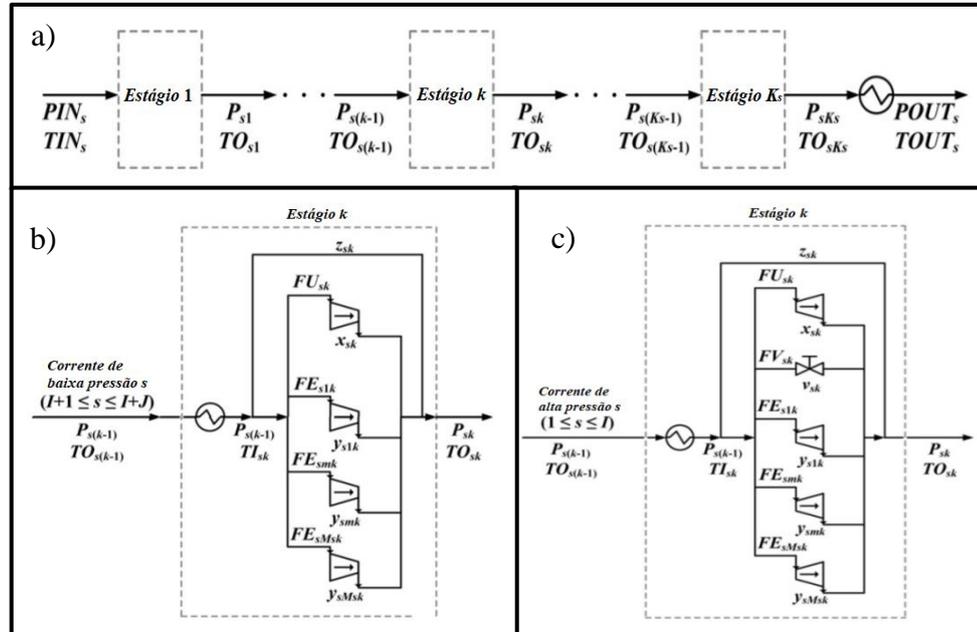
Fonte: adaptado de Wechsung *et al.* (2011).

A regra heurística de que compressão e expansão devem ser feitas na temperatura do Pinch foi utilizada nesse trabalho. Então, as metas de resfriamento ou aquecimento que precedem a compressão ou expansão eram conhecidas. Esses autores formularam esse problema na forma de um modelo MINLP que abarcava a análise Pinch, as variações de pressão e o cálculo das irreversibilidades do processo. O objetivo desse MINLP era minimizar as irreversibilidades e, para tanto, foi implementado em GAMS e resolvido usando o *solver* BARON. Essa metodologia foi aplicada a alguns casos de estudo e observou-se significativa redução das irreversibilidades dos processos.

Outro trabalho importante foi o de Razib, Hasan e Karimi (2012), no qual os autores propuseram uma nova superestrutura de multi-estágios para integração de trabalho com mudança de temperatura das correntes de processo, como pode ser observado na Figura 3 a). Nessa superestrutura, as correntes de processo foram divididas em correntes de baixa (Figura 3b) e de alta pressão (Figura 3c). As correntes de baixa pressão eram resfriadas com utilidade fria e comprimidas em estágios sequenciais. Já para as correntes de alta pressão era o oposto: essas eram aquecidas e expandidas em estágios sequenciais. Após o último estágio, um

resfriador para correntes de baixa pressão e um aquecedor para de alta era permitido para correção da temperatura.

Figura 3: Superestrutura de Razib, Hasan e Karimi (2012). a) superestrutura multi-estágios para uma corrente. Estágio da superestrutura para corrente de b) baixa pressão, c) alta pressão.

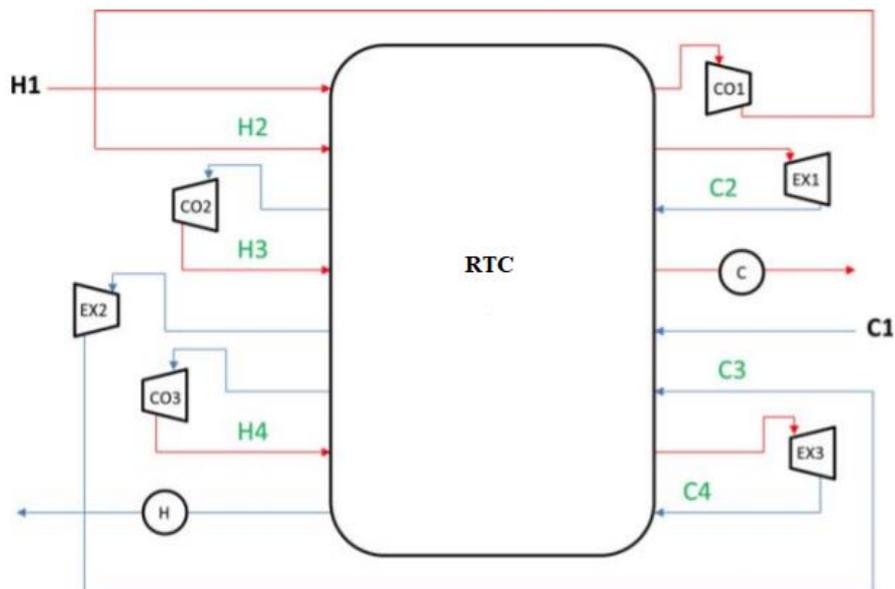


Fonte: adaptado de Razib, Hasan e Karimi (2012).

Uma grande contribuição desses autores foi introduzir ao problema de ISCT as turbinas e compressores acoplados em eixo único (TCAEUs) para a integração direta de trabalho. Em todos os artigos que precederam este, a integração de trabalho era realizada indiretamente por meio da produção de energia na turbina elétrica e sua utilização nos compressores elétricos. Na Figura 3 b) e c) foi ilustrado detalhadamente um estágio da superestrutura para uma corrente de baixa e de alta pressão. Basicamente, em um estágio de compressão uma corrente de baixa pressão podia, após resfriamento, ser comprimida paralelamente (divisão de correntes) em um compressor elétrico, em compressores acoplados a vários eixos de integração de trabalho, ou simplesmente fazer um *by-pass* do estágio. Para o estágio de expansão era similar, com a diferença de que no lugar de resfriamento, considerase o aquecimento, no lugar de compressores, usa-se turbinas e acrescenta-se a possibilidade de expansão em válvula. Essa superestrutura foi modelada em um problema de formulação MINLP visando minimizar o custo total anualizado (CTA) da RTCT, implementado em GAMS e resolvido usando o solver BARON.

Onishi, Ravagnani e Caballero (2014a) também propuseram uma outra superestrutura de RTCT, como ilustrado na Figura 4:, dessa vez baseada na de Wechsung *et al.* (2011) e com algumas melhorias em relação a esses autores. Uma melhoria proposta foi a substituição da análise Pinch pela superestrutura proposta por Yee e Grossmann (1990) para a síntese de RTC. Assim, em comparação ao trabalho de Wechsung *et al.* (2011), deixou-se de usar regras heurísticas para a alocação de compressores e turbinas e migrou-se para a ISCT usando, puramente, programação matemática baseada em uma superestrutura. Outra mudança em relação ao trabalho de Wechsung *et al.* (2011) foi trocar a função objetivo a ser minimizada, de irreversibilidades para CTA, ou seja, passou-se para análise econômica da rede. Uma outra melhoria foi introduzir as TCAEUs à superestrutura de RTCT, como proposto por Razib, Hasan e Karimi (2012), permitindo a integração direta de trabalho. Por fim, foi adicionado à superestrutura um resfriador para correntes de baixa pressão e um aquecedor para as correntes de alta pressão ao final do último estágio para ajuste de temperatura. Essa superestrutura foi modelada em um problema de MINLP visando minimizar o CTA da RTCT, implementado em GAMS e resolvido usando o solver BARON. A metodologia foi aplicada a três estudos de caso.

Figura 4: Superestrutura de Onishi, Ravagnani e Caballero (2014a).



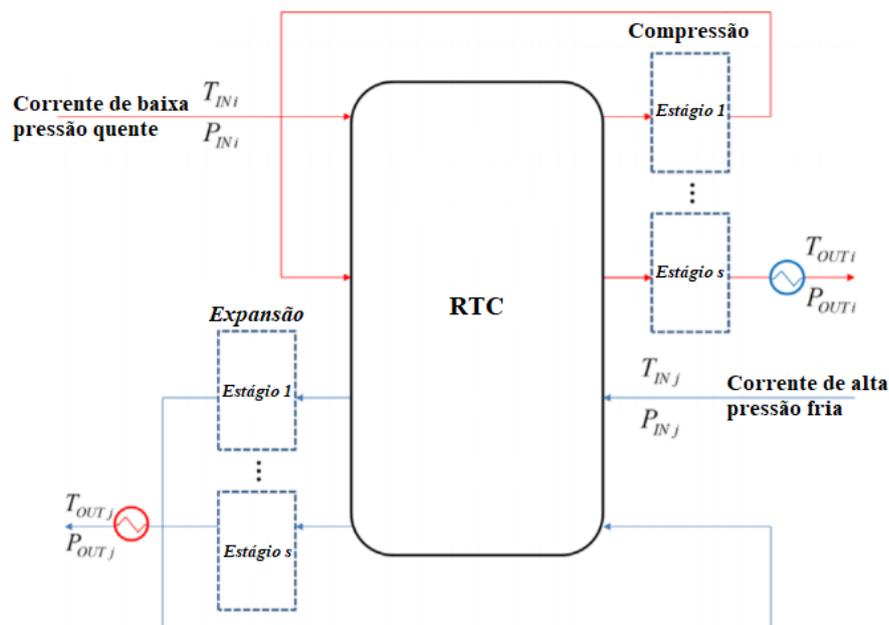
Fonte: adaptado de Onishi, Ravagnani e Caballero (2014a).

Baseados nessa superestrutura, os mesmos autores, no ano seguinte, desenvolveram uma metodologia de *retrofit* de RTC com correntes de processo que mudavam de pressão em

condições subambientes. A formulação do problema foi feita na forma de um problema de MINLP, implementada em GAMS e resolvida com o *solver* SBB. Essa metodologia foi aplicada a três estudos de caso, incluindo o problema de liquefação do gás natural (ONISHI; RAVAGNANI; CABALLERO, 2015).

Onishi, Ravagnani e Caballero (2014b) propuseram uma superestrutura de RTCT baseada em Razib, Hasan e Karimi (2012), como ilustrada na Figura 5: . Esses autores acrescentaram à superestrutura de multi-estágios a possibilidade de integração de calor, ao invés de usar somente aquecedores e resfriadores antes da expansão e compressão. A superestrutura de IC foi a de Yee e Grossmann (1990), na qual as correntes de baixa pressão eram tratadas como correntes quentes e as de alta pressão, correntes frias. Essa nova superestrutura de RTCT foi modelada como um problema de formulação MINLP visando minimizar o CTA da rede, implementado em GAMS e resolvido usando o *solver* SBB. A metodologia foi aplicada a dois estudos de caso.

Figura 5: Superestrutura de Onishi, Ravagnani e Caballero (2014b).



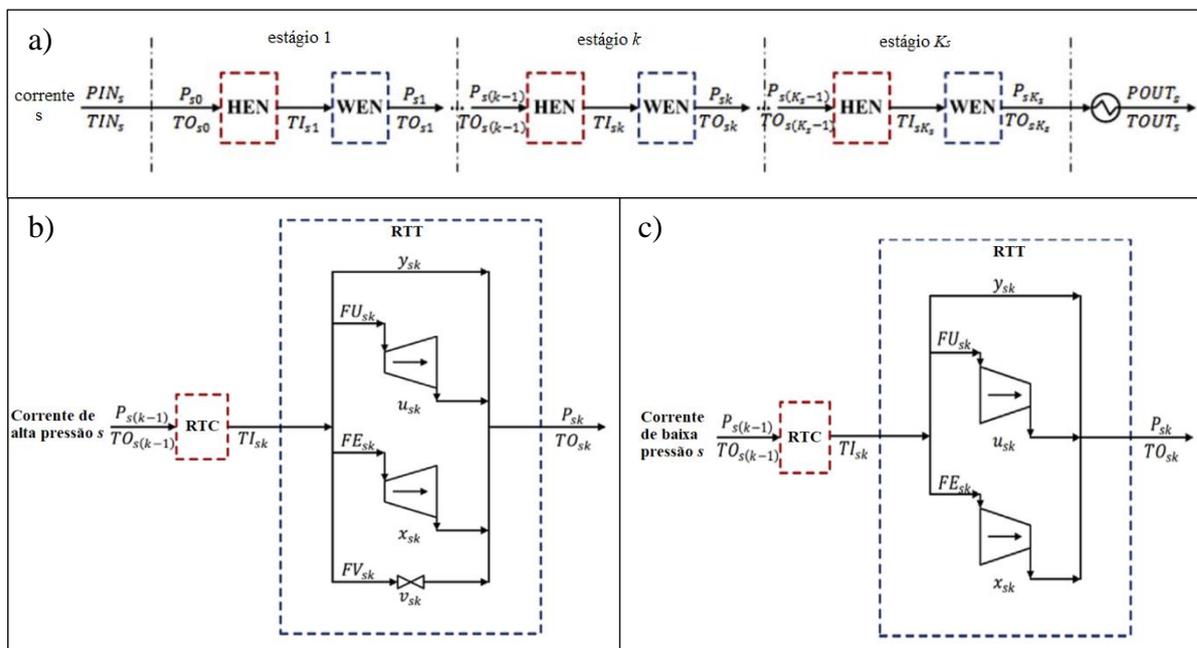
Fonte: Onishi, Ravagnani e Caballero (2014b).

Usando essa superestrutura, Onishi *et al.* (2017) acrescentaram ao modelo de formulação MINLP equações para o cálculo do impacto ambiental da RTCT. Como o trabalho visava a síntese da RTCT minimizando seu CTA e o impacto ambiental decorrente dela, tratava-se de uma otimização multi-objetivo. Para solução desse MINLP multi-objetivo

os autores usaram o método ε restrito. O modelo foi implementado em GAMS e resolvido usando o *solver* DICOPT. Para validar a metodologia do trabalho, os autores aplicaram-na a um estudo de caso, para o qual foram determinadas diversas RTCTs que compunham uma frente de Pareto entre impacto ambiental e CTA.

Posteriormente, Huang e Karimi (2016) propuseram uma superestrutura de RTCT baseada no trabalho de Onishi, Ravagnani e Caballero (2014b), como apresentada na Figura 6. Uma diferença introduzida por esses autores, que se mostrou importante, foi a alocação de um aquecedor ou resfriador no último estágio conforme a necessidade da corrente (ser aquecida ou resfriada) e não conforme sua identidade (alta ou baixa pressão). Em outras palavras, independente da identidade da corrente de processo, um resfriador ou aquecedor podia ser usado. Os outros autores mencionados anteriormente alocavam resfriadores em correntes de baixa pressão (quentes) e aquecedores nas de alta pressão (frias). Essa nova superestrutura de RTCT foi modelada na forma de um problema de MINLP visando minimizar o CTA da rede, implementado em GAMS e resolvido usando o *solver* BARON. A metodologia foi aplicada a dois estudos de caso para validação.

Figura 6: Superestrutura de Huang e Karimi (2016). a) superestrutura multi-estágios para uma corrente. Estágio da superestrutura para corrente de b) alta pressão, c) baixa pressão.

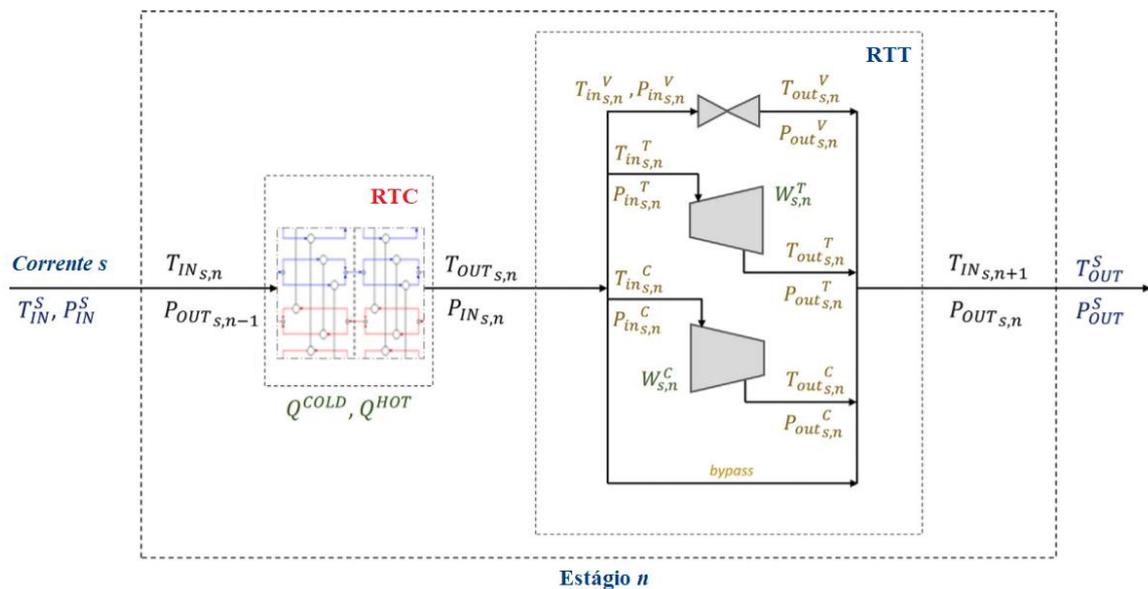


Fonte: Huang e Karimi (2016).

Onishi *et al.* (2018) propuseram uma nova superestrutura e uma nova metodologia de síntese de RTCT. Nessa nova superestrutura, que segue na Figura 7, algumas mudanças foram

feitas para lidar com correntes de processo não classificadas (quente, fria, alta pressão ou baixa pressão). Uma diferença foi unificar a superestrutura de RTT em que compressão e expansão são consideradas. A expansão podia ocorrer em válvula ou em uma turbina elétrica. Já a compressão podia ocorrer apenas em compressor elétrico. Considerou-se também a possibilidade de *by-pass* da RTT. Esses autores não incluíram as TCAEUs, pois nesse trabalho objetivou-se explorar as sinergias entre a integração simultânea de calor e trabalho para melhorar a eficiência energética, ao invés de obter RTCT complexas. Na modelagem da superestrutura usou-se programação disjuntiva generalizada para lidar com a seleção de manipuladores de pressão e com a classificação das correntes de processo. O modelo de otimização proposto incluiu programação matemática e método de localização do Pinch para minimizar o custo de RTCT. Essa formulação MINLP foi implementada em GAMS usando o solver BARON. A validação da metodologia foi feita pela sua aplicação a dois estudos de caso, que incluíam o processo *offshore* de liquefação de gás natural.

Figura 7: Superestrutura de Onishi *et al.* (2018).

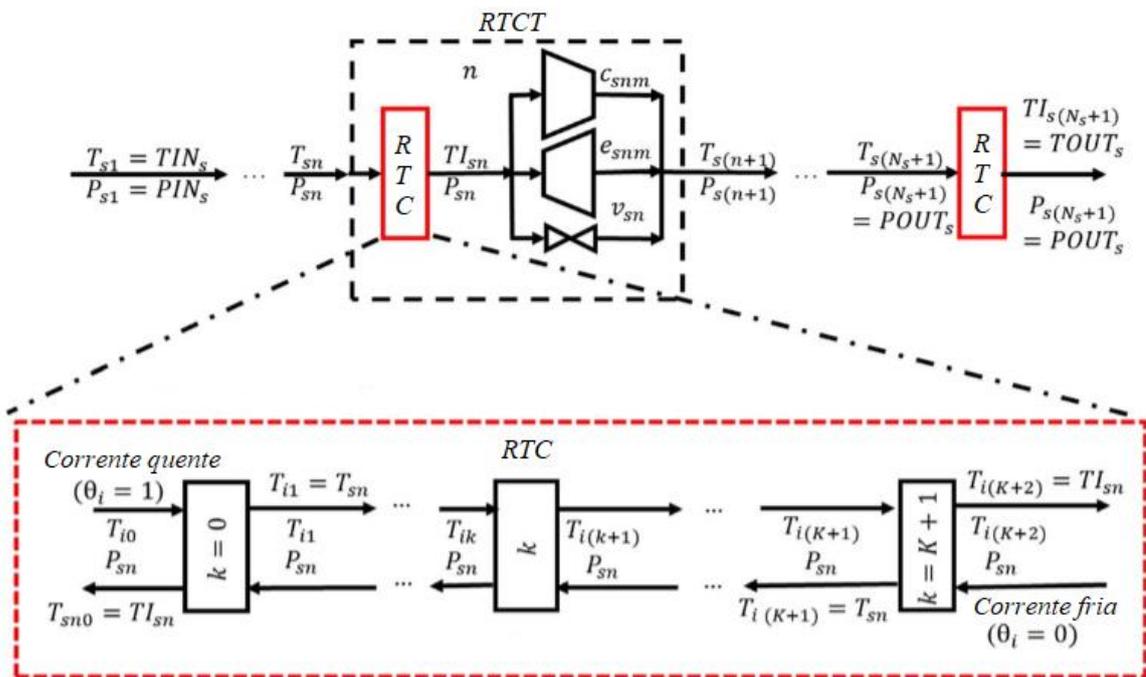


Fonte: Onishi *et al.* (2018).

Nair, Nagesh-Rao e Karimi (2018) propuseram uma nova superestrutura de RTCT baseada na de Huang e Karimi (2016), que está ilustrada na Figura 8. Algumas modificações foram feitas, como permitir integração de calor no último estágio para correção da temperatura das correntes e excluir a possibilidade do *by-pass* do RTT. No entanto, grandes inovações foram realizadas nesse trabalho na etapa de desenvolvimento do modelo, de forma

a não pré-classificar as correntes de processo nem quanto a sua demanda térmica (quente ou fria) nem quanto a sua demanda por mudança de pressão (alta ou baixa pressão), semelhante a Onishi *et al.* (2018). Isso permitiu a mudança de identidade térmica das correntes de processo em diferentes estágios, compressão e expansão de correntes sem variação global de pressão e, principalmente, compressão, expansão, aquecimento e resfriamento sem lógica fixa. Os autores também consideraram mudança de fase e capacidades calorífica não constantes. Essa nova superestrutura de RTCT levou a um modelo do tipo MINLP visando minimizar o CTA da rede. O modelo foi implementado em GAMS e resolvido usando o *solver* BARON. A metodologia foi validada pela sua aplicação ao problema de separação de propeno de propano e à liquefação do gás natural.

Figura 8: Superestrutura de Nair, Nagesh-Rao e Karimi (2018).

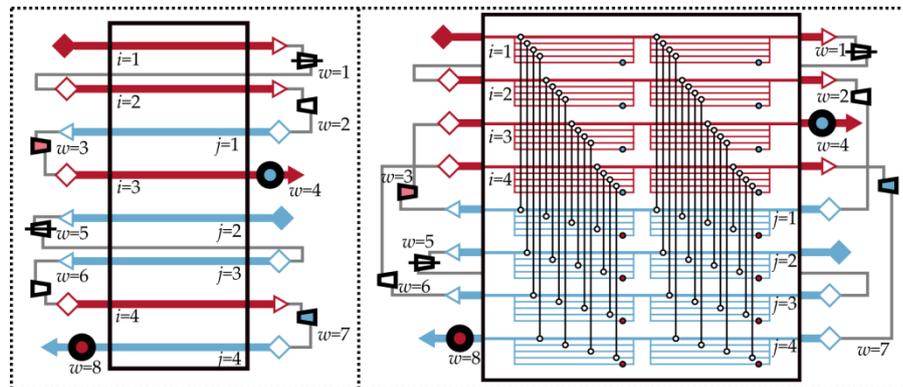


Fonte: Nair, Nagesh-Rao e Karimi (2018).

Pavão, Costa e Ravagnani (2019) basearam-se na superestrutura de Onishi, Ravagnani e Caballero (2014a) para elaborar uma nova superestrutura e metodologia de solução do problema de síntese e otimização de RTCT. Uma diferença dessa superestrutura, que é ilustrada na Figura 9, é a seção de RTC. Ao invés de usar a superestrutura de Yee e Grossmann (1990) como os outros autores, foi usada uma proposta por Pavão, Costa e Ravagnani (2018). Nessa superestrutura de RTC, a mistura isotérmica não é considerada e o

uso de utilidades é permitido em todos os estágios da RTC. Ou seja, aquecedores ou resfriadores podem ser alocados em paralelo aos trocadores de calor entre correntes de processo (divisão de corrente) e não só no final do estágio. Contudo, a maior inovação desses autores foi elaborar uma formulação matricial do problema MINLP, que foi implementada em C++. Essa formulação foi feita para se resolver o MINLP usando um método de otimização meta-heurístico em dois níveis, *Simulated Annealing* para o problema combinatório e *Rocket Fireworks Optimization* para o NLP. Esses autores foram os primeiros a aplicar métodos meta-heurísticos ao problema de ISCT. A validação dessa nova metodologia foi feita pela sua aplicação a três estudos de caso, que incluíam o problema de liquefação do gás natural e de separação por membranas de gases pós-combustão para captura de carbono.

Figura 9: Superestrutura de Pavão, Costa e Ravagnani (2019).



Fonte: Pavão, Costa e Ravagnani (2019).

Dos trabalhos publicados sobre a síntese e otimização de RTCT, identificou-se a possibilidade de se desenvolver uma nova abordagem para solução deste tipo de problema. Primeiramente, observou-se a perspectiva de se propor uma nova superestrutura que contempla a alocação tanto das utilidades quente e fria, quanto dos manipuladores de pressão, independentemente das classificações das correntes de processo em todos os estágios. Além disso, verificou-se a oportunidade de se explorar a modelagem do problema com vistas à redução do espaço de busca da otimização do problema MINLP.

3. METODOLOGIA

Neste trabalho propõe-se uma nova metodologia de síntese e otimização de RTCT. Inicialmente define-se o problema com as simplificações a serem consideradas neste estudo. Posteriormente, elabora-se uma nova superestrutura para esta síntese de RTCT, da qual se desenvolve um modelo matemático. Soma-se a esse modelo uma função objetivo econômica da RTCT, restrições físicas e de projeto para o problema, resultando em um modelo do tipo MINLP. Desse modelo, faz-se uma análise de graus de liberdade para seleção das variáveis de decisão binárias e contínuas e se propõe uma implementação sequencial. Aplica-se, também, ao modelo, técnicas de substituição de variáveis e otimização em terceiro nível para redução do espaço de busca da otimização. Por fim, um método de otimização meta-heurística em dois níveis é desenvolvido para esse problema MINLP.

3.1. Definição do Problema

O problema abordado neste estudo é o de síntese e otimização de RTCT. Ou seja, determinar uma RTCT que seja capaz de satisfazer uma demanda energética industrial por meio da mudança de temperatura e pressão de correntes de processo com menor custo de operação e capital anualizado possível. Define-se um conjunto de S correntes de processo ($s = 1, 2, \dots, S$), com suas informações de estado inicial ($T_{in}(s)$ e $P_{in}(s)$), estado final ($T_{out}(s)$ e $P_{out}(s)$), capacidade térmica ($CP(s)$) e coeficiente individual de troca térmica ($h(s)$). Além disso, tem-se disponível utilidades quente e fria com suas devidas temperaturas de entrada (TS_{in} e TW_{in}), saída (TS_{out} e TW_{out}) e seus coeficientes individuais de troca térmica (h_s e h_w).

Como se busca a síntese, intensificação e otimização de processos e não o desenvolvimento de modelos para o projeto de equipamentos, algumas simplificações podem ser feitas sem pôr em risco a consistência dos resultados deste trabalho. Essas simplificações se fazem presentes no projeto rigoroso de equipamentos, nos modelos termodinâmicos de estado e nos cálculos de perdas de processo. Dito isso, seguem algumas simplificações consideradas:

- Operação em estado estacionário;
- Todas as correntes de processo são gasosas e seus estados podem ser modelados considerando-as como gases ideais;
- As tarefas de compressão e expansão acontecem em compressores, turbinas e TCAEUs e são consideradas não isentrópicas com eficiências isentrópicas conhecidas;

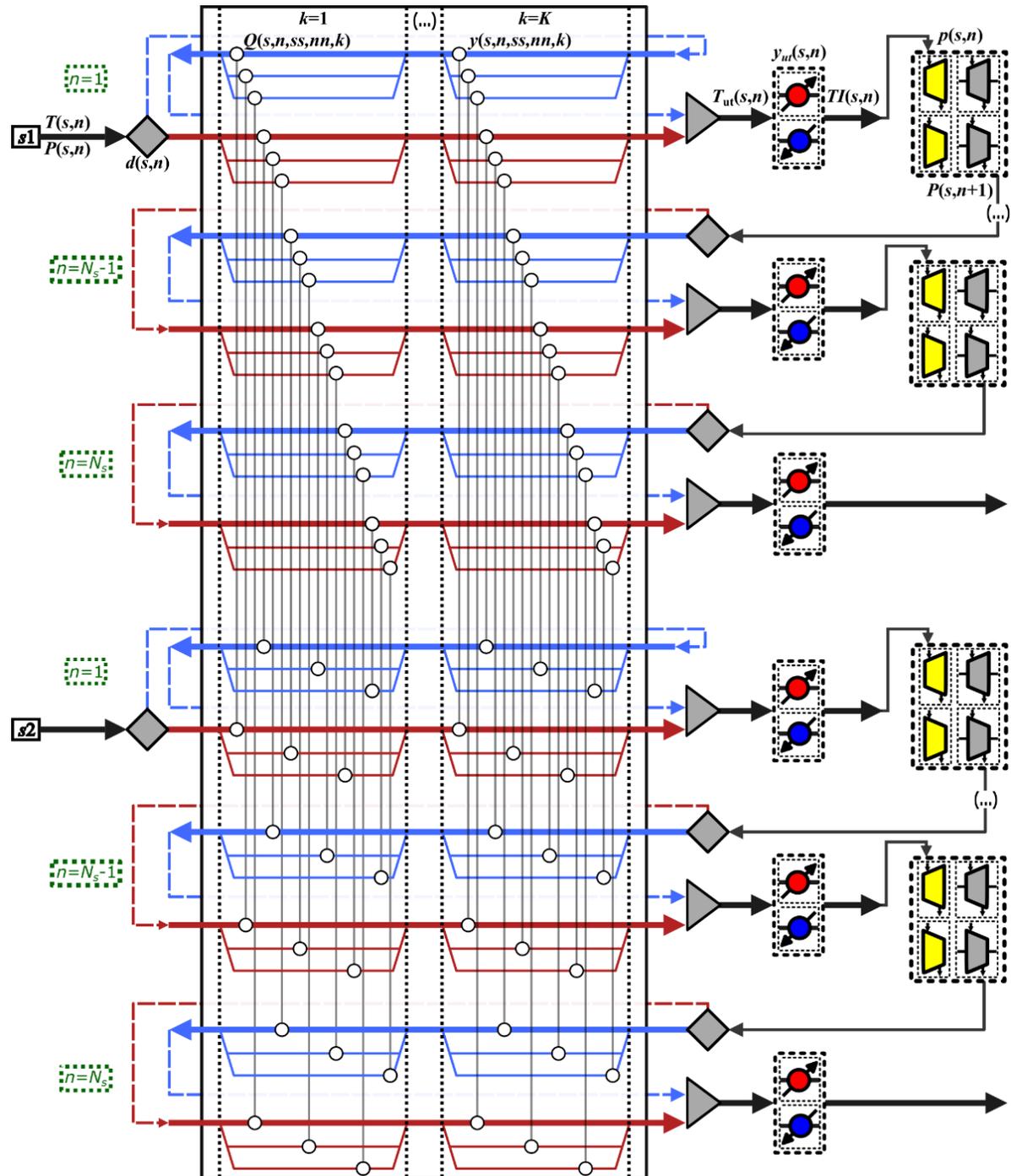
- As TCAEUs operam a qualquer velocidade e não há limite no número de equipamentos a serem alocados no eixo;
- Uma falta de energia no eixo no qual as turbinas e compressores são acoplados para integração de trabalho pode ser suprida por eletricidade adicionando-se um motor elétrico auxiliar no eixo. Similarmente, um excesso de energia pode ser transformado em eletricidade usando um gerador elétrico acoplado ao eixo;
- As capacidades caloríficas e os coeficientes de transferência de calor são constantes nas faixas de temperatura e pressão dos problemas;
- A queda de pressão em equipamentos de troca de calor e nas tubulações é negligenciada;
- Os custos de misturadores e separadores de correntes, bem como os de tubulações são negligenciados.

3.2. Superestrutura Proposta

Para a solução do problema enunciado no tópico 3.1, propõe-se uma nova superestrutura que contém configurações de soluções do problema de síntese de RTCT. Essa superestrutura foi baseada em Onishi *et al.* (2018) no sentido de ser multi-estágios e de não pré-classificar as correntes nem como quente nem como fria, nem de alta nem de baixa pressão. Assim, uma corrente pode ser aquecida, resfriada, comprimida ou expandida em estágios, sem uma lógica restrita e predeterminada. Além disso, a motivação por trás da elaboração dessa nova superestrutura de RTCT e de sua modelagem (vide 3.3) é de possibilitar a redução do número total de variáveis de decisão binárias e contínuas do problema de MINLP por meio das estratégias de otimização em terceiro nível (vide 3.5) e da substituição de variáveis (vide 3.6).

Essa superestrutura é composta por estágios horizontais e verticais. Os estágios verticais correspondem à IC e são descritos pelo índice k que vai de 1 até K . Já os estágios horizontais correspondem à ISCT e são divididos em cinco seções: classificação, integração de calor, desclassificação, ajuste de temperatura e rede de troca de trabalho. Esses estágios são descritos pelo índice n , que vai de 1 a N_s . A Figura 10 apresenta a superestrutura usada no presente trabalho para duas correntes de processo.

Figura 10: Superestrutura proposta para duas correntes de processo



Fonte: autoria própria.

Como apresentado na Figura 10, uma corrente de processo não classificada (seta preta) é submetida à seção de classificação, na qual a corrente é classificada como quente (seta vermelha) ou fria (seta azul). Nela, uma variável binária (d) é responsável por definir a identidade térmica da corrente. Subsequentemente, a corrente classificada termicamente segue à seção de integração de calor. Nessa seção uma corrente quente pode trocar calor com todas

as correntes frias paralelamente uma vez em cada um dos K estágios, de acordo com a superestrutura de Yee e Grossmann (1990). Uma diferença em relação a essa superestrutura de RTC é que os aquecedores e resfriadores não são considerados após os K estágios na seção de IC. Por outro lado, a consideração de mistura isotérmica também é assegurada no presente trabalho. Ou seja, a temperatura no ponto de mistura de cada estágio k deve ser a mesma para todos os ramos de uma dada corrente. Após essa seção de IC, as correntes de processo se tornam novamente não-classificadas na seção de desclassificação. Essa corrente não-classificada pode ser aquecida ou resfriada usando utilidades na seção de ajuste de temperatura. Finalmente, essa corrente não-classificada e com temperatura ajustada pode comprimir ou expandir em compressores elétricos, turbinas elétricas ou em TCAEUs na seção de RTT. Essa rota das cinco seções se repete por $N_s - 1$ vezes, pois no último estágio a corrente de processo já deve estar na pressão final e só ajuste de temperatura é permitido. Então, no estágio N_s a seção de RTT não é considerada.

3.3. Modelagem Matemática do Problema

Dada a superestrutura de síntese de RTCT proposta em 3.2, deriva-se um modelo matemático de forma MINLP. O desenvolvimento do modelo foi dividido, para fins didáticos, no modelo físico da superestrutura, no modelo econômico de custo de RTC e RTT, nas restrições do problema e na função objetivo, que é o custo total anualizado da RTCT.

3.3.1. Derivação do modelo a partir da superestrutura

Para obter o modelo a partir da superestrutura, a tarefa foi dividida em cinco seções, como previamente explicado. No entanto, antes de iniciar o desenvolvimento do modelo para cada seção, algumas igualdades lógicas entre as variáveis do modelo devem ser esclarecidas, referentes às variáveis $T(s,n)$ e $P(s,n)$, que são a temperatura e a pressão da corrente de processo s que entra no estágio horizontal n . Primeiramente, T e P devem ser iguais aos valores de entrada (T_{in} e P_{in}) no estágio $n = 1$. Similarmente, T no estágio $N_s + 1$ e P nos estágios N_s e $N_s + 1$ correspondem aos valores de saída (T_{out} e P_{out}). O estágio $N_s + 1$ refere-se à saída do estágio N_s , que é o último.

$$T(s,1) = T_{in}(s) \quad (1)$$

$$P(s,1) = P_{in}(s) \quad (2)$$

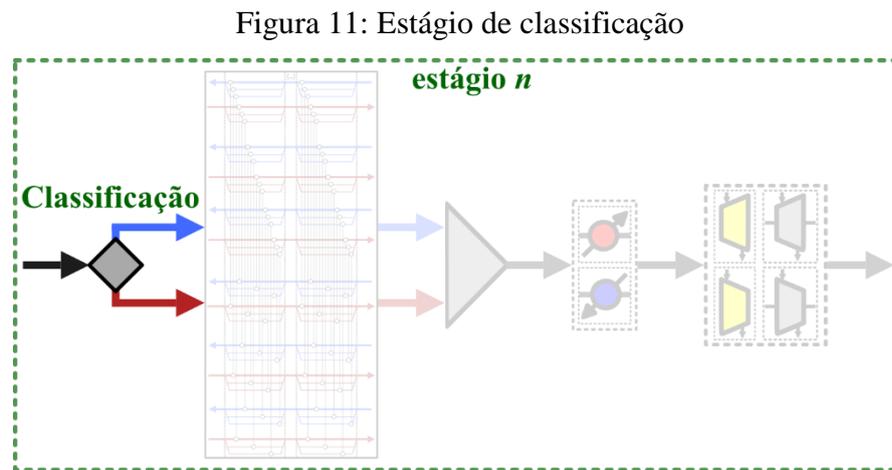
$$P(s, N_s) = P_{out}(s) \quad (3)$$

$$P(s, N_S + 1) = P_{out}(s) \quad (4)$$

$$T(s, N_S + 1) = T_{out}(s) \quad (5)$$

3.3.1.1. Classificação

Nessa seção fazem-se balanços de massa e de energia na divisão de corrente anterior à IC como ilustrado na Figura 11.



Fonte: autoria própria

Esses balanços resultam no seguinte conjunto de equações (quatro para cada $s \in [1, S]$, $n \in [1, N_S]$):

$$FH(s, n) = d(s, n).CP(s) \quad (6)$$

$$FC(s, n) = [1 - d(s, n)].CP(s) \quad (7)$$

$$TH(s, n, 0) = T(s, n) \quad (8)$$

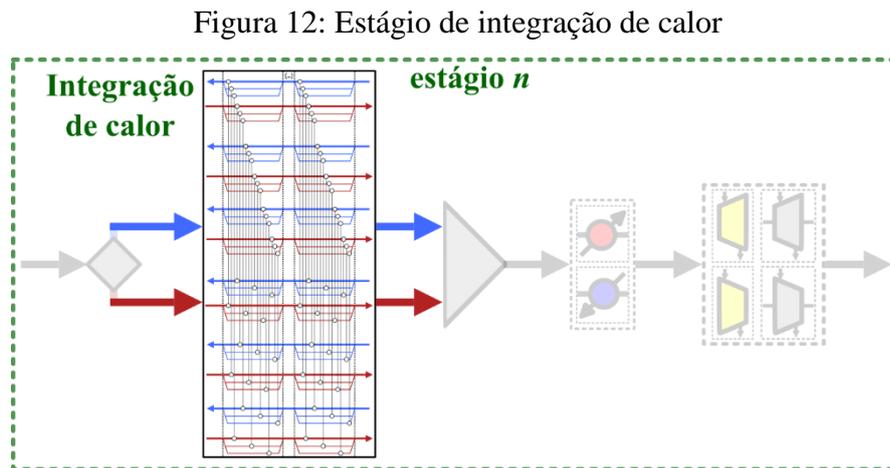
$$TC(s, n, K) = T(s, n) \quad (9)$$

Na realidade, essa divisão de correntes não existe, mas foi considerada no modelo como artifício para a classificação térmica de correntes de processo como quente ou fria. Matematicamente, isso é feito por meio da variável binária d , que representa a fração quente da divisão da capacidade térmica da corrente não-classificada (CP). Essa variável binária define se a capacidade térmica da corrente classificada quente (FH) ou fria (FC) é nula. Então, por tratar-se de uma divisão de correntes com uma entrada e uma saída, não há, de fato, divisão, mas sim uma classificação.

Os índices dessas variáveis são definidos na forma de matrizes de duas dimensões. Os índices de FH , FC , T e d são s e n , que se referem à corrente s no estágio horizontal n . Já TH e TC , que são, respectivamente, as temperaturas das correntes classificadas quente e fria em cada estágio k , têm índices s , n e k . Esses índices correspondem à corrente s , no estágio horizontal n e estágio vertical k . Tanto TH quanto TC têm valores iguais a T , pois não há perda ou ganho de energia nessa seção de classificação.

3.3.1.2. Integração de Calor

Nessa seção fazem-se balanços de energia global em torno de todos os trocadores de calor alocados na corrente s , no estágio horizontal n e no estágio vertical k na seção de integração de calor, como ilustrado na Figura 12.



Fonte: autoria própria

Esses balanços resultam no seguinte conjunto de duas equações para cada $s \in [1, S]$, $n \in [1, N_s]$ e $k \in [1, K]$:

$$TH(s, n, k) = TH(s, n, k - 1) - \frac{\sum_{ss=1}^S \sum_{nn=1}^{N_s} y(s, n, ss, nn, k - 1) \cdot Q(s, n, ss, nn, k - 1)}{FH(s, n) + eps} \quad (10)$$

$$TC(s, n, K - k) = TC(s, n, K + 1 - k) - \frac{\sum_{ss=1}^S \sum_{nn=1}^{N_s} y(ss, nn, s, n, K - k) \cdot Q(ss, nn, s, n, K - k)}{FC(s, n) + eps} \quad (11)$$

Esse conjunto de equações é suficiente para descrever essa seção graças à consideração de mistura isotérmica, pois cada ramo de corrente tem a mesma temperatura

após a troca de calor em um estágio k (YEE; GROSSMANN, 1990). Em outras palavras, essa consideração elimina a necessidade do cálculo da temperatura de cada ramo da corrente.

O parâmetro eps é o menor valor que o computador usa para distinguir um valor de outro. Ou seja, um número mais um incremento que seja menor que eps continuará sendo o número inicial. Esse parâmetro é, aqui, usado somando-se ao denominador da divisão para evitar-se uma indeterminação do tipo algum número, inclusive zero, dividido por zero.

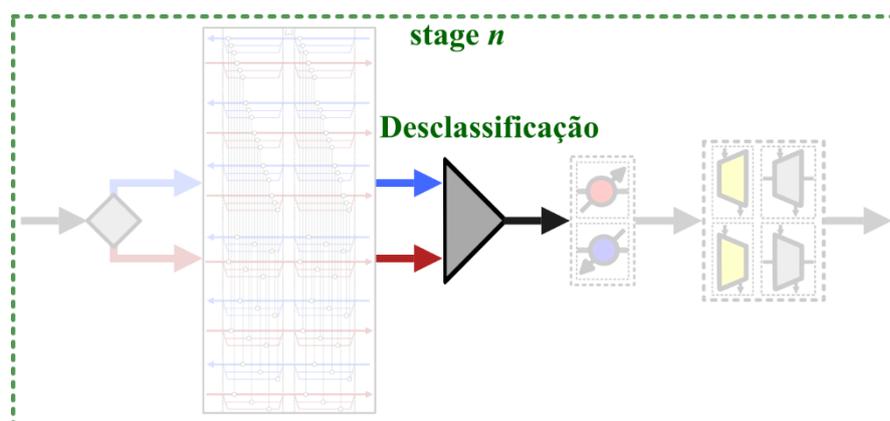
O índice (s,n,ss,nn,k) representa um trocador de calor que tem como corrente quente a corrente s no estágio horizontal n e como corrente fria a corrente ss em nn , sendo que esse trocador de calor se encontra no estágio vertical k . Mais genericamente, os dois primeiros slots da matriz identificam a corrente quente do trocador de calor, enquanto os dois slots seguintes identificam a corrente fria e, por fim, o quinto slot indica em qual estágio de RTC o trocador de calor se encontra.

A variável binária $y(s,n,ss,nn,k)$ é introduzida para controlar a existência (1 para existência e 0 para não existência) do trocador de calor (s,n,ss,nn,k) , que possui uma carga térmica de $Q(s,n,ss,nn,k)$.

3.3.1.3. Desclassificação

Nessa seção é feito um balanço de energia no misturador de correntes após a IC, como ilustrado na Figura 13, com o objetivo de remover a identidade térmica da corrente.

Figura 13: Estágio de desclassificação



Fonte: autoria própria

Para tanto, introduz-se uma nova variável T_{ut} a fim de representar a temperatura da corrente não-classificada após integração de calor.

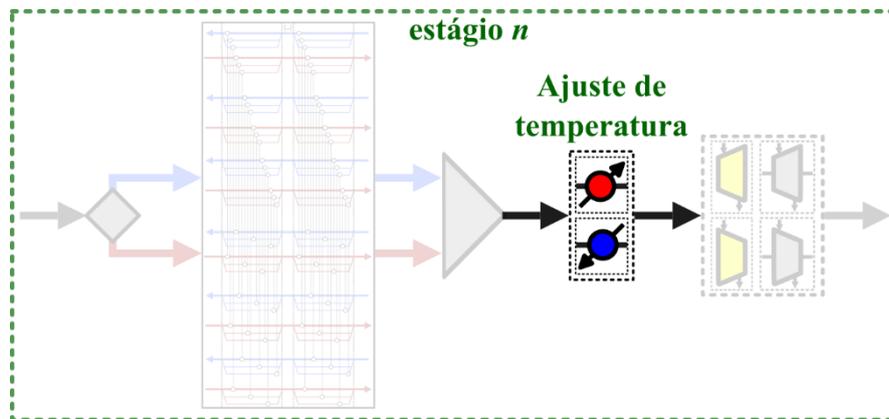
$$T_{ut}(s, n) = d(s, n).TH(s, n, K) + [1 - d(s, n)].TC(s, n, 0) \quad (12)$$

Esse conjunto de equações (uma para cada $s \in [1, S]$ e $n \in [1, N_s]$) calcula a temperatura resultante (T_{ut}) da mistura das correntes quente e fria após a IC. Observa-se que d anula o efeito da corrente quente ou da fria na temperatura resultante dependendo da identidade que a corrente assumiu na IC. Assim, como há apenas uma entrada e uma saída, não há de fato um misturador, mas trata-se novamente de um artifício usado para garantir a eliminação da identidade térmica das correntes para os próximos passos.

3.3.1.4. Ajuste de Temperatura

Nessa seção, faz-se um balanço de energia global em torno dos trocadores de calor da corrente de processo com utilidade quente ou fria (aquecedor ou resfriador) como ilustrado na Figura 14.

Figura 14: Estágio de ajuste de temperatura



Fonte: autoria própria

Esses balanços resultam no conjunto de equações (três para cada $s \in [1, S]$, $n \in [1, N_s]$) que segue:

$$TI(s, n) = T_{ut}(s, n).(1 - y_{ut}(s, n)) + T_{adj}(s, n).y_{ut}(s, n) \quad (13)$$

$$Q_s(s, n) = \max(0, CP(s).(TI(s, n) - T_{ut}(s, n))) \quad (14)$$

$$Q_w(s, n) = \max(0, CP(s).(T_{ut}(s, n) - TI(s, n))) \quad (15)$$

Algumas novas variáveis foram introduzidas, como TI que é a temperatura ajustada final (ou temperatura de entrada na RTT), T_{adj} que é a temperatura ajustada no caso de existir um aquecedor/resfriador, y_{ut} que é uma variável binária que controla a existência de um aquecedor/resfriador e Q_s e Q_w que são, respectivamente, as cargas térmicas do aquecedor e do resfriador.

Vale dizer que os três conjuntos de equações estão interconectados de forma que, se y_{ut} for 0 (inexistência de aquecedor/resfriador), TI recebe o valor de T_{ut} devido à equação (13) e Q_s e Q_w serão nulos, devido às equações (14) e (15). Por outro lado, se y_{ut} for 1, TI recebe o valor de T_{adj} e existirá um aquecedor, caso TI seja maior que T_{ut} ou um resfriador, caso TI seja menor que T_{ut} . As cargas térmicas desse aquecedor ou resfriador são calculadas utilizando as equações (14) e (15).

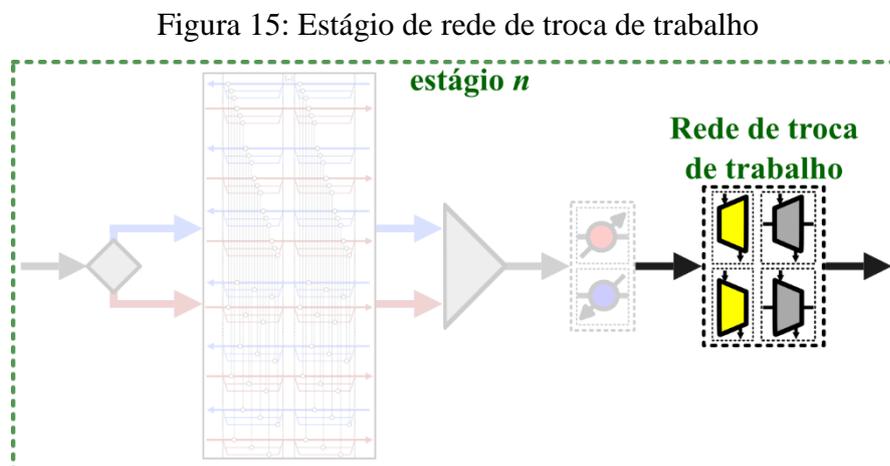
Aqui, surgem algumas outras igualdades lógicas entre variáveis do modelo. Para garantir que a equação 5 seja verdadeira, TI em N_s também deve ser igual a T_{out} , pois não há maneira de mudança de temperatura após essa etapa no estágio N_s . Então, para se garantir isso, adicionam-se as seguintes equações:

$$T_{adj}(s, N_s) = T_{out}(s) \quad (16)$$

$$y_{ut}(s, N_s) = 1 \quad (17)$$

3.3.1.5. Rede de Troca de Trabalho

Nessa seção faz-se um balanço de energia global em torno dos equipamentos de manipulação de pressão, como ilustrado na Figura 15.



Fonte: autoria própria

Esses balanços resultam no conjunto de equações (três para cada $s \in [1, S]$, $n \in [1, N_s]$) que segue:

$$c_{tmp}(s, n) = \frac{\max(0, p(s, n) \cdot [P(s, n+1) - P(s, n)])}{\max(\epsilon p s, p(s, n) \cdot [P(s, n+1) - P(s, n)])} \quad (18)$$

$$e_{tmp}(s, n) = \frac{\max(0, p(s, n) \cdot [P(s, n) - P(s, n+1)])}{\max(\epsilon p s, p(s, n) \cdot [P(s, n) - P(s, n+1)])} \quad (19)$$

$$T(s, n+1) = TI(s, n) \cdot \left\{ 1 + \left[\frac{c_{tmp}(s, n)}{\eta_c} + e_{tmp}(s, n) \cdot \eta_e \right] \cdot \left[\left(\frac{P(s, n+1)}{P(s, n)} \right)^{\frac{\kappa-1}{\kappa}} - 1 \right] \right\} \quad (20)$$

Algumas variáveis binárias foram adicionadas nessa seção. A variável binária p indica se a corrente de processo s no estágio horizontal n poderá mudar sua pressão. As variáveis binárias c_{tmp} e e_{tmp} são as que controlam, respectivamente, a existência de um compressor ou de turbina (sejam elétricos ou AEU's) na corrente s no estágio n . No caso de p ser 0, a corrente s em n não muda sua pressão e tanto c_{tmp} quanto e_{tmp} são automaticamente zerados, conforme as equações (18) e (19). No caso de p ser 1, c_{tmp} ou e_{tmp} será 1, dependendo do valor da pressão do próximo estágio n . Caso a pressão no próximo estágio seja maior, então c_{tmp} será 1, pois compressão se faz necessária. Em caso contrário, e_{tmp} será 1 para garantir a expansão da corrente.

A temperatura da corrente que muda devido a mudança de pressão (P) e que será a temperatura de entrada do próximo estágio ($n+1$) é calculada utilizando a equação (20). Nessa equação, foram usadas as considerações de mudança de estado com eficiência isentrópica conhecida de η_c para compressão e η_e para expansão e expoente politrópico κ para todas as correntes de processo.

A fim de garantir que a equação (3) seja verdadeira, ou seja, para que a pressão da corrente atinja a meta no último estágio de manipulação de pressão, é necessário que p em $N_s - 1$ seja igual a 1, para se poder instalar um compressor ou turbina de acordo com a necessidade da corrente de processo. Ainda, para que no último estágio N_s não exista mudança de pressão, o valor de p deve ser nulo. Matematicamente, acrescenta-se o seguinte conjunto de equações (duas para cada $s \in [1, S]$):

$$p(s, N_s - 1) = 1 \quad (21)$$

$$p(s, N_s) = 0 \quad (22)$$

3.3.2. Custo da RTC

O custo anualizado da RTC (*CustoRTC*) é composto pelo custo operacional anual (*COC*) e pelo custo de capital da RTC (*CCC*). O custo de capital da RTC foi considerado como uma função quadrática das áreas de todos trocadores de calor (A), aquecedores (A_s) e resfriadores (A_w) (TURTON et al., 2012). Para se calcular essas áreas, faz-se necessário determinar previamente os valores do coeficiente global de troca térmica (U) e da média logarítmica das diferenças de temperatura nos terminais dos trocadores de calor (ΔT_{ml}). As equações referentes a esses cálculos são:

$$CustoRTC = COC + f.CCC \quad (23)$$

$$COC = \sum_{s=1}^S \sum_{n=1}^{N_s} (Q_s(s, n).C_{HU} + Q_w(s, n).C_{CU}) \quad (24)$$

$$CCC = \sum_{s=1}^S \sum_{n=1}^{N_s} \sum_{ss=1}^S \sum_{nn=1}^{N_s} \sum_{k=1}^K y(s, n, ss, nn, k). [a + b.A(s, n, ss, nn, k) + c.A(s, n, ss, nn, k)^2] + \sum_{s=1}^S \sum_{n=1}^{N_s} \left\{ \frac{Q_s(s, n)}{Q_s(s, n) + eps} [a + b.A_s(s, n) + c.A_s(s, n)^2] + \frac{Q_w(s, n)}{Q_w(s, n) + eps} [a + b.A_w(s, n) + c.A_w(s, n)^2] \right\} \quad (25)$$

$$A(s, n, ss, nn, k) = \frac{Q(s, n, ss, nn, k)}{U(s, ss). \Delta T_{ml}(s, n, ss, nn, k)} \quad (26)$$

$$U(s, ss) = \frac{h(s).h(ss)}{h(s) + h(ss)} \quad (27)$$

$$\Delta T_{ml}(s, n, ss, nn, k) = \begin{cases} \text{if } ([TH(s, n, k) - TC(ss, nn, k)] == [TH(s, n, k-1) - TC(ss, nn, k-1)]): \\ TH(s, n, k) - TC(ss, nn, k) \\ \text{else:} \\ \frac{[TH(s, n, k) - TC(ss, nn, k)] - [TH(s, n, k-1) - TC(ss, nn, k-1)]}{\ln\left(\frac{TH(s, n, k) - TC(ss, nn, k)}{TH(s, n, k-1) - TC(ss, nn, k-1)}\right)} \end{cases} \quad (28)$$

$$A_s(s, n) = \frac{Q_s(s, n)}{U_s(s). \Delta T_{s, ml}(s, n)} \quad (29)$$

$$U_s(s) = \frac{h(s).h_s}{h(s) + h_s} \quad (30)$$

$$\Delta T_{s_{ml}}(s, n, ss, nn, k) = \begin{cases} \text{if } ([TS_{out} - T_{ut}(s, n)] == [TS_{in} - TI(s, n)]): \\ TS_{out} - T_{ut}(s, n) \\ \text{else :} \\ \frac{[TS_{out} - T_{ut}(s, n)] - [TS_{in} - TI(s, n)]}{\ln\left(\frac{TS_{out} - T_{ut}(s, n)}{TS_{in} - TI(s, n)}\right)} \end{cases} \quad (31)$$

$$A_w(s, n) = \frac{Q_w(s, n)}{U_w(s) \cdot \Delta T_{w_{ml}}(s, n)} \quad (32)$$

$$U_w(s) = \frac{h(s) \cdot h_w}{h(s) + h_w} \quad (33)$$

$$\Delta T_{w_{ml}}(s, n, ss, nn, k) = \begin{cases} \text{if } ([T_{ut}(s, n) - TW_{out}] == [TI(s, n) - TW_{in}]): \\ T_{ut}(s, n) - TW_{out} \\ \text{else :} \\ \frac{[T_{ut}(s, n) - TS_{out}] - [TI(s, n) - TW_{in}]}{\ln\left(\frac{T_{ut}(s, n) - TW_{out}}{TI(s, n) - TW_{in}}\right)} \end{cases} \quad (34)$$

Nestas equações, f é o fator de anualização, a , b e c são os parâmetros econômicos do custo dos trocadores de calor e as áreas calculadas considerando trocadores de calor em escoamento contracorrente. Vale ressaltar que o cálculo das médias logarítmicas é igual à diferença de temperatura nos terminais do trocador de calor caso essas sejam iguais.

3.3.3. Custo da RTT

Antes da análise econômica da RTT, necessita-se escolher qual equipamento foi usado na corrente s e estágio n em que $p(s, n)$ é igual a 1, uma vez que c_{tmp} e e_{tmp} somente garantem que houve, respectivamente, compressão ou expansão. O conjunto de equações (quatro para cada $s \in [1, S]$, $n \in [1, N_s]$) para essa escolha é:

$$c(s, n) = \max(0, p(s, n) \cdot m(s, n) \cdot c_{tmp}(s, n)) \quad (35)$$

$$e(s, n) = \max(0, p(s, n) \cdot m(s, n) \cdot e_{tmp}(s, n)) \quad (36)$$

$$uc(s, n) = \max(0, p(s, n) \cdot [1 - m(s, n)] \cdot c_{tmp}(s, n)) \quad (37)$$

$$ue(s, n) = \max(0, p(s, n) \cdot [1 - m(s, n)] \cdot e_{tmp}(s, n)) \quad (38)$$

As variáveis binárias c , e , uc e ue determinam a existência de um compressor AEU, uma turbina AEU, um compressor elétrico e uma turbina elétrica, respectivamente. A variável binária m é responsável por determinar se o equipamento está acoplado no eixo de integração de trabalho ($m = 1$) ou não ($m = 0$).

As equações (35), (36), (37) e (38) são formuladas de forma que apenas uma das quatro variáveis binárias c , e , uc e ue seja ativa (valha 1) e as outras sejam nulas. Isso se dá pela multiplicação das variáveis binárias p , m (ou $1 - m$) e c_{tmp} (ou e_{tmp}). Primeiramente, a variável p deve valer 1 para se cogitar a escolha dos equipamentos de pressão, pois, em sendo 0, p anula todas as quatro equações. Então, sendo p igual a 1, a determinação de o equipamento ser um compressor ($c_{tmp} = 1$) ou ser uma turbina ($e_{tmp} = 1$) é feita de acordo com as variáveis c_{tmp} e e_{tmp} determinadas em 3.3.1.5. Por fim, falta-se determinar se o compressor ou a turbina estão acoplados no eixo de integração de trabalho. Para tanto usa-se a variável m . Se m for igual a 1, esse compressor ou turbina é acoplado ao eixo de integração de trabalho e ou c ou e , respectivamente, é igual a 1. Caso m seja igual a 0, então o compressor ou a turbina é elétrico(a) e ou uc ou ue , respectivamente, é igual a 1.

Determinado qual equipamento de manipulação de pressão existe, necessita-se determinar sua carga energética (trabalho usado ou produzido). Esse cálculo é feito pelo seguinte conjunto de equações (quatro para cada $s \in [1, S]$, $n \in [1, N_s]$):

$$WC(s, n) = c(s, n).CP(s).(T(s, n+1) - TI(s, n)) \quad (39)$$

$$WE(s, n) = e(s, n).CP(s).(TI(s, n) - T(s, n+1)) \quad (40)$$

$$WUC(s, n) = uc(s, n).CP(s).(T(s, n+1) - TI(s, n)) \quad (41)$$

$$WUE(s, n) = ue(s, n).CP(s).(TI(s, n) - T(s, n+1)) \quad (42)$$

As equações (39), (40), (41) e (42) são responsáveis por determinar as cargas de trabalho de compressores AEU, turbinas AEU, compressores elétricos e turbinas elétricas, respectivamente. Esse cálculo é baseado na variação da entalpia da corrente gasosa devido à sua mudança de temperatura na compressão ou expansão, pois, para gases ideais, a variação da entalpia devido a variação de pressão é nula.

As equações para determinar se no eixo das TCAEUs necessita-se de um motor auxiliar ou de um gerador elétrico e suas cargas são:

$$hm = \frac{\max\left(0, \sum_{s=1}^S \sum_{n=1}^{N_s} [WC(s, n) - WE(s, n)]\right)}{\max\left(eps, \sum_{s=1}^S \sum_{n=1}^{N_s} [WC(s, n) - WE(s, n)]\right)} \quad (43)$$

$$g = \frac{\max\left(0, \sum_{s=1}^S \sum_{n=1}^{N_s} [WE(s, n) - WC(s, n)]\right)}{\max\left(eps, \sum_{s=1}^S \sum_{n=1}^{N_s} [WE(s, n) - WC(s, n)]\right)} \quad (44)$$

$$WM = hm \cdot \sum_{s=1}^S \sum_{n=1}^{N_s} [WC(s, n) - WE(s, n)] \quad (45)$$

$$WG = g \cdot \sum_{s=1}^S \sum_{n=1}^{N_s} [WE(s, n) - WC(s, n)] \quad (46)$$

As variáveis binárias hm e g controlam a existência de um motor elétrico auxiliar ou um gerador elétrico no eixo das TCAEUs e são determinadas dependendo se há falta ou excesso de trabalho no eixo, respectivamente. Ou seja, a demanda por energia no eixo (WM) é suprida pelo motor elétrico e o excesso de energia no eixo (WG) é transformado em eletricidade pelo gerador elétrico.

Para finalizar essa seção, o custo anualizado da RTT ($CustoRTT$) é calculado pela soma do custo operacional anual (COT) e do custo de capital (CCT) anualizado. As equações usadas para cálculo desses custos são:

$$CustoRTT = COT + f.CCT \quad (47)$$

$$COT = \sum_{s=1}^S \sum_{n=1}^{N_s} [uc(s, n).WUC(s, n).CE - ue(s, n).WUE(s, n).PE] + hm.WM.CE - g.PE.WG \quad (48)$$

$$CCT = \sum_{s=1}^S \sum_{n=1}^{N_s} \left[\begin{array}{l} e(s, n).(a_e + b_e.WE(s, n)^{c_e}) + c(s, n).(a_c + b_c.WC(s, n)^{c_c}) \\ + ue(s, n).(a_{ue} + b_{ue}.WUE(s, n)^{c_{ue}} - a_g - b_g.WUE(s, n)^{c_g}) \\ + uc(s, n).(a_{uc} + b_{uc}.WUC(s, n)^{c_{uc}} - a_{hm} - b_{hm}.WUC(s, n)^{c_{hm}}) \end{array} \right] + \left[\begin{array}{l} hm.(a_{hm} + b_{hm}.WM^{c_{hm}}) \\ + g.(a_g + b_g.WG^{c_g}) \end{array} \right] \quad (49)$$

CE é o custo de compra da eletricidade e PE é o preço de venda da eletricidade. As constantes a_i , b_i e c_i são os parâmetros econômicos de custo de capital dos equipamentos da RTT (COUPER; PENNEY; FAIR, 2012).

3.3.4. Restrições e Penalizações

Para garantir que a solução de um problema MINLP esteja na região de factibilidade, pode-se adotar um sistema de penalização para as soluções que se encontram fora dessa região. O sistema de penalização adotado no presente trabalho foi de penalizações proporcionais às quantidades que extrapolaram as restrições. No entanto, há penalizações que são mais severas que outras, pois há violações de restrições mais graves que outras. Pensando

nisso, determina-se que os coeficientes linear ($p1_{leve}$) e angular ($p2_{leve}$) das penalizações leves são menores que os das penalizações pesadas ($p1_{pesado}$ e $p2_{pesado}$).

Uma primeira restrição que deve ser obedecida é que as temperaturas em cada estágio k da integração de calor, que apresenta troca de calor, devem estar dentro de limites superior (T_{up}) e inferior (T_{low}). Esses limites são devidos ao próprio processo, seja por restrição de equipamento, pela segurança industrial, integridade de matéria-prima ou qualidade de produto. No entanto, há também a restrição de que as temperaturas devam permanecer acima do zero absoluto. Essa restrição é elaborada para as temperaturas das correntes quentes (TH), pois essas são resfriadas e podem violá-las. Como essa última restrição se trata de uma Lei da Termodinâmica inviolável na natureza, logo, mais fundamental que uma restrição de processo, sua não observância deve ser punida mais severamente. Matematicamente, tem-se:

$$TH(s, n, k) \cdot \sum_{ss=1}^S \sum_{nn=1}^{N_s} y(s, n, ss, nn, k) \geq T_{low} \cdot \sum_{ss=1}^S \sum_{nn=1}^{N_s} y(s, n, ss, nn, k) \quad (50)$$

$$TC(s, n, k) \cdot \sum_{ss=1}^S \sum_{nn=1}^{N_s} y(s, n, ss, nn, k) \leq T_{up} \cdot \sum_{ss=1}^S \sum_{nn=1}^{N_s} y(s, n, ss, nn, k) \quad (51)$$

$$TH(s, n, k) \cdot \sum_{ss=1}^S \sum_{nn=1}^{N_s} y(s, n, ss, nn, k) \geq 0 \quad (52)$$

Os somatórios presentes nas equações (50), (51) e (52) são um artifício matemático usado para considerar as restrições, caso exista pelo menos um trocador de calor na corrente s em n no estágio k . No caso de não existir trocador de calor, o somatório zera ambos os lados da desigualdade ($0 \geq 0$ ou $0 \leq 0$) o que torna todas as proposições (50), (51) e (52) verdadeiras e evita uma penalização falso-positiva. No caso de haver um ou mais trocadores de calor, esse somatório adquire um valor maior ou igual a 1, mas não altera a desigualdade, pois esse valor é um fator de multiplicação em ambos os lados da inequação. Logo, uma simples divisão em ambos os lados por esse valor traz a inequação para seu formato mais intuitivo de comparação de temperaturas. As penalizações decorrentes da não observância dessas restrições são, respectivamente:

$$pen+ = \frac{\sum_{ss=1}^S \sum_{nn=1}^{N_s} y(s, n, ss, nn, k)}{\sum_{ss=1}^S \sum_{nn=1}^{N_s} y(s, n, ss, nn, k) + eps} \cdot [p1_{leve} + p2_{leve} \cdot (T_{low} - TH(s, n, k))] \quad (53)$$

$$pen+ = \frac{\sum_{ss=1}^S \sum_{nn=1}^{N_s} y(s, n, ss, nn, k)}{\sum_{ss=1}^S \sum_{nn=1}^{N_s} y(s, n, ss, nn, k) + eps} \cdot [p1_{leve} + p2_{leve} \cdot (TC(s, n, k) - T_{up})] \quad (54)$$

$$pen+ = \frac{\sum_{ss=1}^S \sum_{nn=1}^{N_s} y(s, n, ss, nn, k)}{\sum_{ss=1}^S \sum_{nn=1}^{N_s} y(s, n, ss, nn, k) + eps} \cdot [p1_{leve} + p2_{leve} \cdot (0 - TH(s, n, k))] \quad (55)$$

Primeiramente, vale dizer que o sinal += indica que a variável de penalização (*pen*) recebe o valor do lado direito de todas as equações de penalização ((53), (54), (55), (61), (62), (63), (64), (65), (67), (69), (71), (73), (75), (77), (79), (81), (83) e (85)) para todo $s \in [1, S]$, $n \in [1, N_s]$ e $k \in [1, K]$. O primeiro termo do lado direito das equações (53), (54) e (55) é outro artifício matemático usado com o mesmo objetivo que fora descrito para as equações (50), (51) e (52). No presente artifício, caso não haja trocadores de calor, o somatório de y para todo ss e nn será nulo. Assim, esse termo se torna uma divisão de 0 por um número muito pequeno (*eps*), que totaliza zero. Portanto, nenhuma penalização (*pen*) é acrescida. Caso esse somatório seja diferente de zero, esse termo se torna a divisão de um número inteiro positivo por ele mesmo somado a um número infinitesimal (*eps*). Isso resulta em 1 e ativa a penalização caso a restrição tenha sido desobedecida.

As restrições presentes na seção de RTT são parecidas com as da seção de integração de calor. Nessa seção as temperaturas de saída dos compressores e turbinas ($T(s, n+1)$) devem estar entre o limite inferior e superior de temperatura e ser maiores que zero. Além disso, as temperaturas de entrada dos compressores e turbinas devem estar dentro de um limite inferior (TI_{low}) e superior (TI_{up}) de temperatura de operação desses equipamentos. Não há necessidade de restringir TI de ter valores abaixo de 0, pois TI advém de TC e TH , então, caso essa última variável tenha extrapolado essa restrição, já houve penalização de acordo com a equação (55).

Matematicamente, tem-se:

$$p(s, n) \cdot T(s, n+1) \geq p(s, n) \cdot T_{low} \quad (56)$$

$$p(s, n) \cdot T(s, n+1) \leq p(s, n) \cdot T_{up} \quad (57)$$

$$p(s, n) \cdot T(s, n+1) \geq 0 \quad (58)$$

$$p(s, n) \cdot TI(s, n) \geq p(s, n) \cdot TI_{low} \quad (59)$$

$$p(s, n) \cdot TI(s, n) \leq p(s, n) \cdot TI_{up} \quad (60)$$

As penalizações decorrentes da não obediência dessas restrições são, respectivamente, as seguintes:

$$pen+ = p(s, n) \cdot [p1_{leve} + p2_{leve} \cdot (T_{low} - T(s, n + 1))] \quad (61)$$

$$pen+ = p(s, n) \cdot [p1_{leve} + p2_{leve} \cdot (T(s, n + 1) - T_{up})] \quad (62)$$

$$pen+ = p(s, n) \cdot [p1_{pesado} + p2_{pesado} \cdot (0 - T(s, n + 1))] \quad (63)$$

$$pen+ = p(s, n) \cdot [p1_{leve} + p2_{leve} \cdot (T_{low} - TI(s, n))] \quad (64)$$

$$pen+ = p(s, n) \cdot [p1_{leve} + p2_{leve} \cdot (TI(s, n) - T_{up})] \quad (65)$$

Para a seção de cálculo do custo da RTC, existem algumas restrições referentes às diferenças de temperatura entre as correntes quentes e as correntes frias nos terminais dos trocadores de calor. Essas diferenças de temperatura precisam, não somente serem maiores do que zero para não infringir a segunda Lei da Termodinâmica, mas também serem maiores que um diferença mínima (ΔT_{min}) para viabilizar a operação industrial e suas perturbações. Assim, as restrições dessa seção intercaladas às respectivas penalizações decorrentes da não observância das restrições são:

$$Q(s, n, ss, nn, k) \cdot (TH(s, n, k) - TC(ss, nn, k)) \geq Q(s, n, ss, nn, k) \cdot \Delta T_{min} \quad (66)$$

$$pen+ = \frac{Q(s, n, ss, m, k)}{Q(s, n, ss, m, k) + eps} \cdot \{ p1_{leve} + p2_{leve} \cdot |\Delta T_{min} - |TH(s, n, k) - TC(ss, nn, k)|| \} \quad (67)$$

$$Q(s, n, ss, nn, k) \cdot (TH(s, n, k) - TC(ss, nn, k)) \geq 0 \quad (68)$$

$$pen+ = \frac{Q(s, n, ss, m, k)}{Q(s, n, ss, m, k) + eps} \cdot \{ p1_{pesado} + p2_{pesado} \cdot (TC(ss, nn, k) - TH(s, n, k)) \} \quad (69)$$

$$Q_s(s, n) \cdot (TS_{out} - T_{ut}(s, n)) \geq Q_s(s, n) \cdot \Delta T_{min} \quad (70)$$

$$pen+ = \frac{Q_s(s, n)}{Q_s(s, n) + eps} \cdot \{ p1_{leve} + p2_{leve} \cdot |\Delta T_{min} - |TS_{out} - T_{ut}(s, n)|| \} \quad (71)$$

$$Q_s(s, n) \cdot (TS_{in} - TI(s, n)) \geq Q_s(s, n) \cdot \Delta T_{min} \quad (72)$$

$$pen+ = \frac{Q_s(s, n)}{Q_s(s, n) + eps} \cdot \{ p1_{leve} + p2_{leve} \cdot |\Delta T_{min} - |TS_{in} - TI(s, n)|| \} \quad (73)$$

$$Q_s(s, n) \cdot (TS_{out} - T_{ut}(s, n)) \geq Q_s(s, n) \cdot 0 \quad (74)$$

$$pen+ = \frac{Q_s(s, n)}{Q_s(s, n) + eps} \cdot \{p1_{pesado} + p2_{pesado} \cdot (T_{ut}(s, n) - TS_{out})\} \quad (75)$$

$$Q_s(s, n) \cdot (TS_{in} - TI(s, n)) \geq Q_s(s, n) \cdot 0 \quad (76)$$

$$pen+ = \frac{Q_s(s, n)}{Q_s(s, n) + eps} \cdot \{p1_{pesado} + p2_{pesado} \cdot (TI(s, n) - TS_{in})\} \quad (77)$$

$$Q_w(s, n) \cdot (T_{ut}(s, n) - TW_{out}) \geq Q_w(s, n) \cdot \Delta T_{min} \quad (78)$$

$$pen+ = \frac{Q_w(s, n)}{Q_w(s, n) + eps} \cdot \{p1_{leve} + p2_{leve} \cdot |\Delta T_{min} - |T_{ut}(s, n) - TW_{out}||\} \quad (79)$$

$$Q_w(s, n) \cdot (TI(s, n) - TW_{in}) \geq Q_w(s, n) \cdot \Delta T_{min} \quad (80)$$

$$pen+ = \frac{Q_w(s, n)}{Q_w(s, n) + eps} \cdot \{p1_{leve} + p2_{leve} \cdot |\Delta T_{min} - |TI(s, n) - TW_{in}||\} \quad (81)$$

$$Q_w(s, n) \cdot (T_{ut}(s, n) - TW_{out}) \geq Q_w(s, n) \cdot 0 \quad (82)$$

$$pen+ = \frac{Q_w(s, n)}{Q_w(s, n) + eps} \cdot \{p1_{pesado} + p2_{pesado} \cdot (TW_{out} - T_{ut}(s, n))\} \quad (83)$$

$$Q_w(s, n) \cdot (TI(s, n) - TW_{in}) \geq Q_w(s, n) \cdot 0 \quad (84)$$

$$pen+ = \frac{Q_w(s, n)}{Q_w(s, n) + eps} \cdot \{p1_{pesado} + p2_{pesado} \cdot (TW_{in} - TI(s, n))\} \quad (85)$$

3.3.5. Função Objetivo

Para concluir o desenvolvimento do modelo MINLP, falta definir a sua função objetivo. Adota-se como função objetivo a ser minimizada o custo total anualizado (*CTA*) que é o custo de RTC e RTT somados ao termo de penalização (*pen*).

$$CTA = CustoRTC + CustoRTT + pen \quad (86)$$

Por fim, o problema de otimização consiste em minimizar o custo total anualizado calculado pela equação (86) sujeito às equações e inequações (1) - (85).

3.4. Análise de Graus de Liberdade e Escolha das Variáveis de Decisão

A análise de graus de liberdade de um problema matemático é de suma importância para se determinar sua forma de solução. Os graus de liberdade consistem na diferença entre as variáveis do modelo e o seu número de equações independentes. Sabe-se que, se o número

total de graus de liberdade for maior que zero, o problema matemático terá infinitas soluções. Esse caso é de se esperar em um problema de otimização, pois viabiliza a busca pelos valores das variáveis de decisão em que a função objetivo é otimizada. Vale dizer que o número total de graus de liberdade é o número de variáveis de decisão que necessitam ser investigadas dentro do espaço de busca factível na determinação do ótimo.

Para investigar os graus de liberdade do modelo e determinar as variáveis de decisão, divide-se a análise nas cinco seções anteriores, além da seção do cálculo do custo de RTC e RTT.

3.4.1. Classificação

A seção de classificação é composta por cinco variáveis (d , FH , FC , $TH_{k=0}$ e $TC_{k=K}$) para cada $s \in [1, S]$ e $n \in [1, N_s]$ e por quatro equações ((6), (7), (8) e (9)) para cada s e n pertencentes ao mesmo intervalo.

Logo, o número de graus de liberdade resultantes dessa seção é $1.S.N_s$. Para suprir esses graus de liberdade, necessita-se selecionar uma variável de decisão para cada s e n desse intervalo. A variável escolhida é a binária $d(s,n)$.

3.4.2. Integração de Calor

A seção de integração de calor é composta por duas variáveis (TH e TC) para cada $s \in [1, S]$, $n \in [1, N_s]$ e $k \in [1, K]$, por duas variáveis (y , Q) para cada $s \in [1, S]$, $n \in [1, N_s]$, $ss \in [1, S]$, $nn \in [1, N_s]$ e $k \in [1, K]$ e por duas equações ((10) e (11)) para cada s , n e k pertencentes ao primeiro intervalo.

Logo, o número de graus de liberdade resultantes dessa seção é $2.S^2.N_s^2.K$. Para suprir esses graus de liberdade, necessita-se selecionar duas variáveis de decisão para cada s , n , ss , nn e k desse intervalo. As variáveis escolhidas são a binária $y(s,n,ss,nn,k)$ e a contínua $Q(s,n,ss,nn,k)$.

3.4.3. Desclassificação

A seção de desclassificação é composta por uma variável (T_{ur}) para cada $s \in [1, S]$ e cada $n \in [1, N_s]$ e por uma equação ((12)) para cada s e n pertencentes ao mesmo intervalo. Logo, o total de graus de liberdade resultante dessa seção é nulo. Assim, essa seção se encontra completamente determinada.

3.4.4. Ajuste de Temperatura

A seção de ajuste de temperatura é composta por cinco variáveis (y_{ut} , T_{adj} , TI , Q_s e Q_w) para cada $s \in [1, S]$ e cada $n \in [1, N_s]$, por três equações ((13), (14) e (15)) para cada s e n pertencentes ao mesmo intervalo e por duas equações ((16) e (17)) para cada $s \in [1, S]$.

Logo, o número de graus de liberdade resultantes dessa seção é $2.S.(N_s - 1)$. Para suprir esses graus de liberdade, necessita-se selecionar duas variáveis de decisão para cada s e n desse intervalo. As variáveis escolhidas são a binária $y_{ut}(s,n)$ e a contínua $T_{adj}(s,n)$. Nota-se que o intervalo de n não abrange o último estágio N_s , pois no último estágio a temperatura ajustada (T_{adj}) é conhecida.

3.4.5. Rede de Troca de Trabalho

A seção de rede de troca de trabalho é composta por cinco variáveis (p , e_{tmp} , c_{tmp} , P_{n+1} e T_{n+1}) para cada $s \in [1, S]$ e cada $n \in [1, N_s]$, por três equações ((18), (19) e (20)) para cada s e n pertencentes ao mesmo intervalo e quatro equações ((3), (4), (21) e (22)) para cada $s \in [1, S]$.

Logo, o número de graus de liberdade resultantes dessa seção é $2.S.(N_s - 2)$. Para suprir esses graus de liberdade, necessita-se selecionar duas variáveis de decisão para cada s e n desse intervalo. As variáveis escolhidas são a binária $p(s,n)$ e a contínua $P(s,n+1)$ no intervalo de $s \in [1, S]$ e cada $n \in [1, N_s - 2]$. Nota-se que o intervalo de n não abrange os dois últimos estágios e isso se deve porque p e P são conhecidos no último estágio de mudança de pressão ($N_s - 1$) e no último estágio de fato (N_s), no qual não há mudança de pressão.

3.4.6. Custo de RTC

A seção de cálculo do custo de RTC é composta por doze variáveis:

- 3 simples: $CustoRTC$, COC e CCC ;
- 3 para cada $s \in [1, S]$, $n \in [1, N_s]$, $ss \in [1, S]$, $nn \in [1, N_s]$ e $k \in [1, K]$: A , U e ΔT_{ml} ;
- 6 para cada $s \in [1, S]$ e cada $n \in [1, N_s]$: A_s , U_s , ΔT_{sml} , A_w , U_w e ΔT_{wml} .

Existem doze equações independentes:

- 3 simples: equações (23), (24) e (25);
- 3 para cada $s \in [1, S]$, $n \in [1, N_s]$, $ss \in [1, S]$, $nn \in [1, N_s]$ e $k \in [1, K]$: equações (26), (27) e (28);
- 6 para cada $s \in [1, S]$ e cada $n \in [1, N_s]$: equações (29), (30), (31), (32), (33) e (34).

Como o número de equações independentes coincide com o número de variáveis desconhecidas, essa seção não apresenta graus de liberdade. Então está suficientemente determinada.

3.4.7. *Custo de RTT*

Essa seção do cálculo do custo de RTT apresenta dezesseis variáveis:

- 9 para cada $s \in [1, S]$ e $n \in [1, N_s]$: $m, e, c, ue, uc, WE, WC, WUE$ e WUC ;
- 7 simples: $hm, g, WM, WG, CustoRTT, COT$ e CCT .

Apresenta 15 equações:

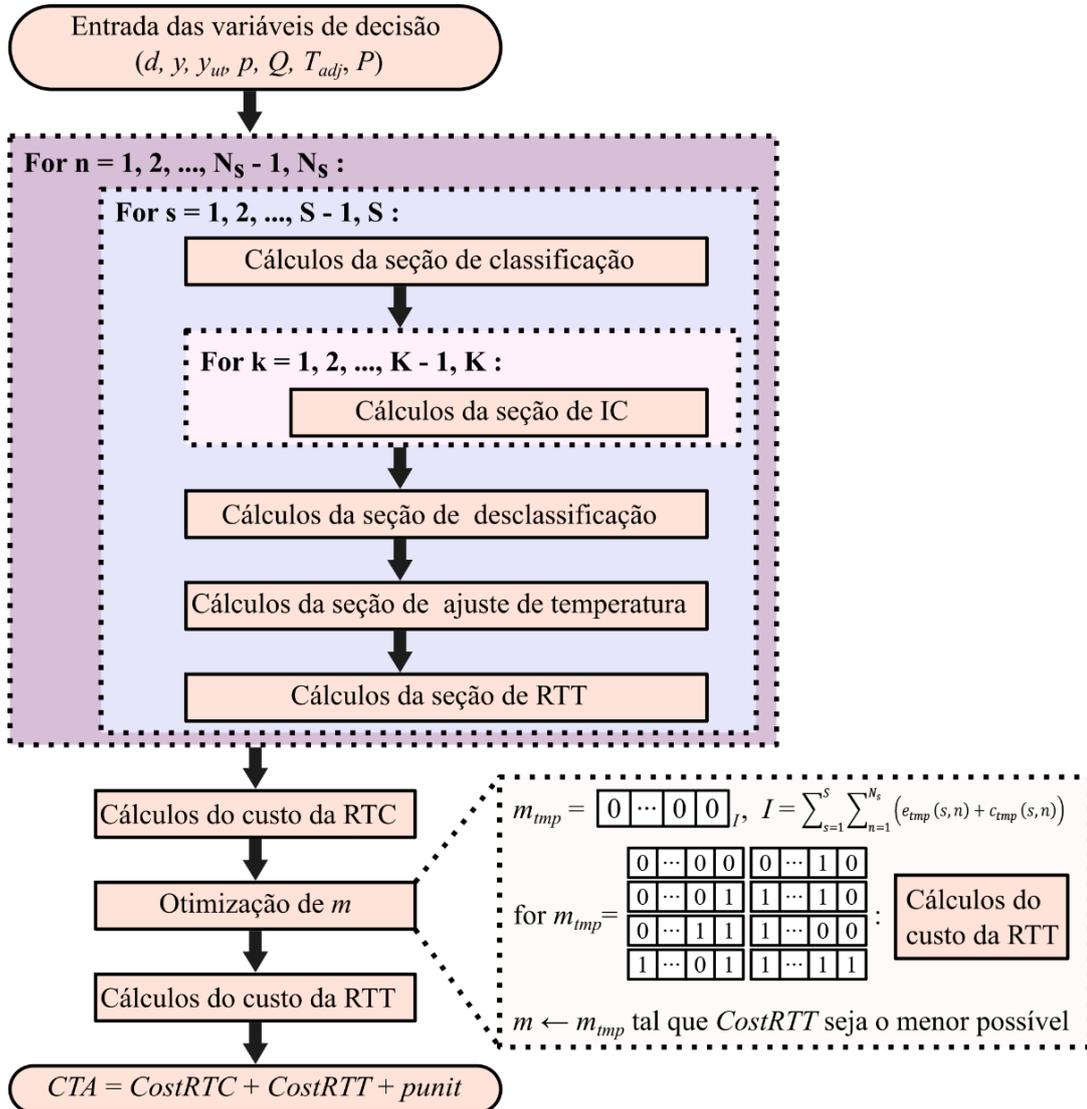
- 8 para cada $s \in [1, S]$ e $n \in [1, N_s]$: equações (35), (36), (37), (38), (39), (40), (41) e (42);
- 7 simples: equações (43), (44), (45), (46), (47), (48) e (49).

Assim, o número de graus de liberdade resultante dessa seção é de $1.S.N_s$. Para suprir esses graus de liberdade, escolheu-se como variável de decisão a binária m no intervalo de $s \in [1, S]$ e $n \in [1, N_s]$.

3.5. Implementação do Modelo Sequencial e Otimização em Terceiro Nível

O modelo matemático do problema descrito no tópico 3.3 é implementado sequencialmente. Ou seja, os cálculos presentes no modelo são feitos em estágios, começando pelo início e progredindo de forma que o resultado de um estágio é a entrada do estágio seguinte. Com informações das variáveis de decisão definidas no tópico 3.4, esse modelo está suficientemente pronto para ser implementado. Para tanto, propõe-se o algoritmo de implementação do modelo sequencial ilustrado na Figura 16.

Figura 16: Algoritmo de implementação sequencial do modelo matemático.



Fonte: autoria própria.

Por meio desse algoritmo, dada uma configuração das variáveis de decisão ($d, y, y_{uv}, p, m, Q, T_{adj}, P$) que determinam uma, e somente uma, RTCT, pode-se calcular o CTA dessa rede. No entanto, nota-se que no algoritmo ilustrado na Figura 16, a variável m não está incluída entre as variáveis de entrada e isso se deve ao fato de m ser calculado internamente pela otimização em terceiro nível, que será melhor explicada adiante. Ao se calcular a variável m , a aplicação da estratégia de otimização em terceiro nível reduz do problema MINLP os $1.S.N_s$ graus de liberdade referentes a essa variável de decisão. Assim, essa estratégia tem o objetivo de reduzir o espaço de busca do problema MINLP a ser tratado pelo método de otimização.

Para que a otimização em terceiro nível exista, é necessário a possibilidade de se extrair de um problema MINLP um subproblema isolado e sem interação. Ou seja, um subproblema que esteja contido em uma seção e que não tenha interferência nas equações *upstream* do modelo. Ainda, deve ser possível avaliar a influência na função objetivo unicamente devido a essa variável. Em poucas palavras, as condições de aplicação da otimização em terceiro nível a uma variável de decisão são que essa variável esteja contida em uma seção, que ela não interfira em variáveis e equações de seções anteriores e que sua variação possa ser mensurada na função objetivo independentemente. Atendendo-se essas condições, a otimização em terceiro nível se trata da determinação, após se ter obtido todo o resto da configuração do problema, do valor ótimo de uma ou mais variáveis de decisão que estão isoladas e sem interação com as outras seções em um problema MINLP. Para o presente caso, por exemplo, a determinação do valor ótimo da variável binária m é feito pela otimização em terceiro nível, pois seu valor não interfere nos cálculos previamente realizados já que ela está contida somente na seção do cálculo de custo de RTT e pode-se avaliar independentemente sua influência na função objetivo, CTA.

O algoritmo começa recebendo a configuração das novas variáveis de decisão reduzidas ($d, y, y_{ut}, p, Q, T_{adj}, P$). Abre-se um laço de iteração de $n \in [1, N_s]$ e um interno a esse de $s \in [1, S]$ e se realiza os cálculos da seção de classificação. Após isso, abre-se outro laço em $k \in [1, K]$, no qual se realizam os cálculos da integração de calor. Ao finalizar o laço de k , fazem-se os cálculos, em sequência, das seções de desclassificação, ajuste de temperatura e rede de troca de trabalho até o fim dos laços de s e n . Finalizado o laço mais externo, que é o de n , resta calcular o custo da RTCT.

O cálculo do custo da RTCT inicia-se pela determinação do custo da RTC. Os cálculos dessa seção são diretos, pois, como demonstrado em 3.4.6, essa seção não apresenta graus de liberdade. Então, basta que se realizem os cálculos das equações do tópico 3.3.2. Por outro lado, para a determinação do custo da RTT precisa-se determinar a variável m , que supre os graus de liberdade dessa seção. A forma de se determinar m é por meio de uma otimização do tipo busca exaustiva dessa variável. Ou seja, testar todas as configurações binárias de $m(s,n)$ para todo (s,n) tal que $c_{mp}(s,n)$ ou $e_{mp}(s,n)$ seja 1, ou ainda, em todo (s,n) que exista algum equipamento de manipulação de pressão. Matematicamente, isso pode ser traduzido da seguinte forma:

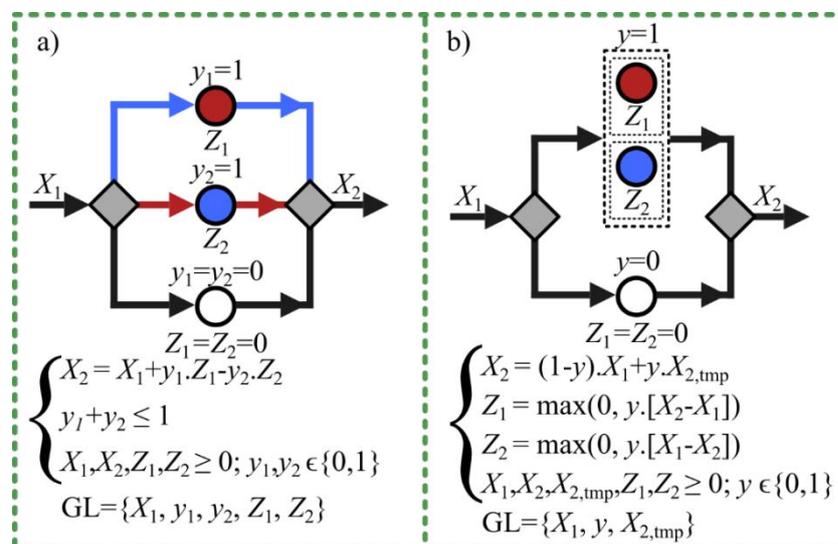
$$0 \leq m(s,n) \leq e_{mp}(s,n) + c_{mp}(s,n) \quad (87)$$

Para a otimização de m , esquematicamente ilustrada na Figura 16, inicialmente, declara-se uma variável (vetor) auxiliar binária $m_{tmp}(i)$, tal que o tamanho desse vetor (I) seja a soma de $e_{tmp}(s,n)$ e $c_{tmp}(s,n)$ para todo $s \in [1, S]$ e $n \in [1, N_s]$. O significado dessa variável m_{tmp} é o mesmo de m original. A partir daí deve-se determinar se o equipamento de troca de pressão ao qual cada elemento desse vetor se refere está (valor 1) ou não (valor 0) acoplado no eixo de integração de trabalho. Tendo declarado essa variável auxiliar, faz-se um laço em i que avalia todas as 2^I permutações binárias de m_{tmp} e, para cada permutação, calcula-se o custo da RTT. Ao fim do laço i , m recebe os valores da combinação de m_{tmp} tal que o custo de RTT foi o menor possível. Por se tratar de um problema combinatório pequeno (2^I possibilidades), essa otimização de forma exaustiva não compromete o tempo de computação e, ainda, garante que a configuração de acoplamento dos equipamentos de manipulação de pressão no eixo de integração de trabalho seja a melhor possível, dado o resto da configuração de RTCT.

3.6. Substituição de Variáveis para Redução do Espaço de Busca

Este tópico visa apresentar uma estratégia de substituição de variáveis para redução do espaço de busca. Ou seja, redução do número de variáveis de decisão a serem consideradas pelos modelos de otimização. Essa estratégia consiste em usar uma variável binária, com o auxílio de equações fundadas em relações lógicas entre variáveis do modelo, no lugar de outras duas ou mais, em uma seção da superestrutura. Um exemplo genérico do tipo de substituição de variáveis que é realizado na presente metodologia está ilustrado na Figura 17.

Figura 17: Exemplo genérico de modelagem a) sem e b) com substituição de variáveis.



Fonte: autoria própria.

Nesse exemplo, as variáveis binárias y_1 e y_2 são substituídas e reduzidas à variável binária y . Essa nova variável determina a existência exclusiva de y_1 ou y_2 , caso y valha 1, ou nenhum dos dois, caso y valha 0. Um outra nova variável foi acrescentada devido a substituição supracitada que é $X_{2,tmp}$. Essa variável representa o valor de X_2 , caso y valha 1. Ou seja, o valor de X_2 , caso Z_1 ou Z_2 sejam não nulos.

Devido à natureza do problema, é preciso garantir que apenas ou Z_1 ou Z_2 tenha valor não nulo a fim de garantir a restrição de que $y_1+y_2 \leq 1$. Para tanto, acrescentam-se equações fundadas nas seguintes observações lógicas:

- a taxa de variação de $X_2 - X_1$ por Z_1 é sempre positiva e de $X_2 - X_1$ por Z_2 sempre negativa;
- necessariamente, Z_1 ou Z_2 é nulo.

Dessas relações lógicas, infere-se que:

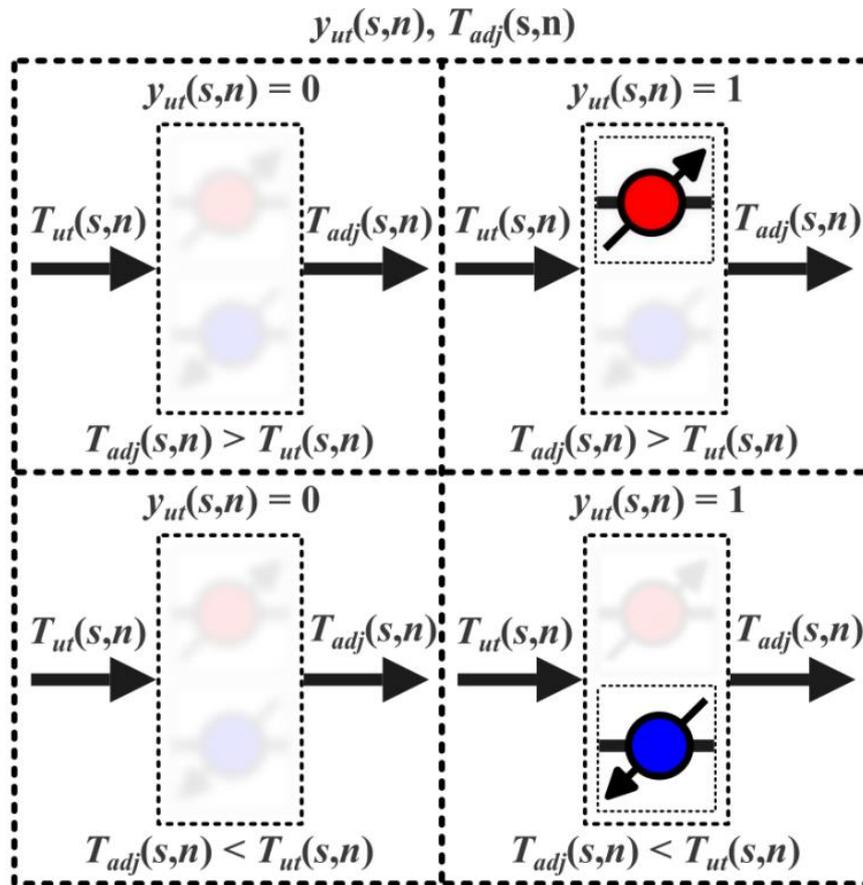
- caso X_2 seja maior que X_1 , Z_1 é maior que 0 (y_1 existe) e Z_2 é nulo (y_2 não existe);
- caso X_2 seja menor que X_1 , Z_2 é maior que 0 (y_2 existe) e Z_1 é nulo (y_1 não existe);
- caso X_2 seja igual a X_1 , tanto Z_1 quanto Z_2 valem 0.

A forma como essas deduções foram equacionadas foi pelo uso de funções de máximo como exposto na Figura 12. Em Z_1 a função de máximo assume o valor de zero caso X_2 seja menor que X_1 . Já em Z_2 , a função de máximo assume o valor de zero caso X_2 seja maior que X_1 . Por último, tanto em Z_1 quanto em Z_2 , a função de máximo assume valor zero caso X_2 seja igual a X_1 . Assim, a função de máximo garante a existência exclusiva de Z_1 ou Z_2 .

Nesse exemplo genérico, antes da substituição de variáveis, o problema era composto por 6 variáveis e 1 equação, resultando em 5 graus de liberdade (X_1, y_1, y_2, Z_1, Z_2). Já depois da substituição de variáveis, o número de variáveis permaneceu 6 e de equações aumentou para 3, resultando em 3 graus de liberdade ($X_1, y, X_{2,tmp}$). Portanto, a aplicação dessa substituição de variáveis reduziu os graus de liberdade do problema em 40 %, de 5 variáveis de decisão para apenas 3.

Na presente metodologia, duas substituições de variáveis nesse formato foram usadas. A primeira delas é referente à seção de ajuste de temperatura pelo uso da variável y_{ut} , que determina a existência exclusiva de um aquecedor (y_s) ou resfriador (y_w) ou nenhum dos dois. Para tanto, usaram-se relações lógicas de T_{adj} com T_{ut} , que é conhecido, equacionadas com auxílio de funções de máximo similar ao explicado acima, vide equações (13), (14) e (15). Essas equações garantem que apenas um entre as cargas térmicas do aquecedor (Q_s) e resfriador (Q_w) possa ser não nulo. A Figura 18 apresenta como a variável y_{ut} e as relações lógicas de T_{adj} com T_{ut} funcionam para determinar a seção de ajuste de temperatura.

Figura 18: Substituição de variáveis da seção de ajuste de temperatura.



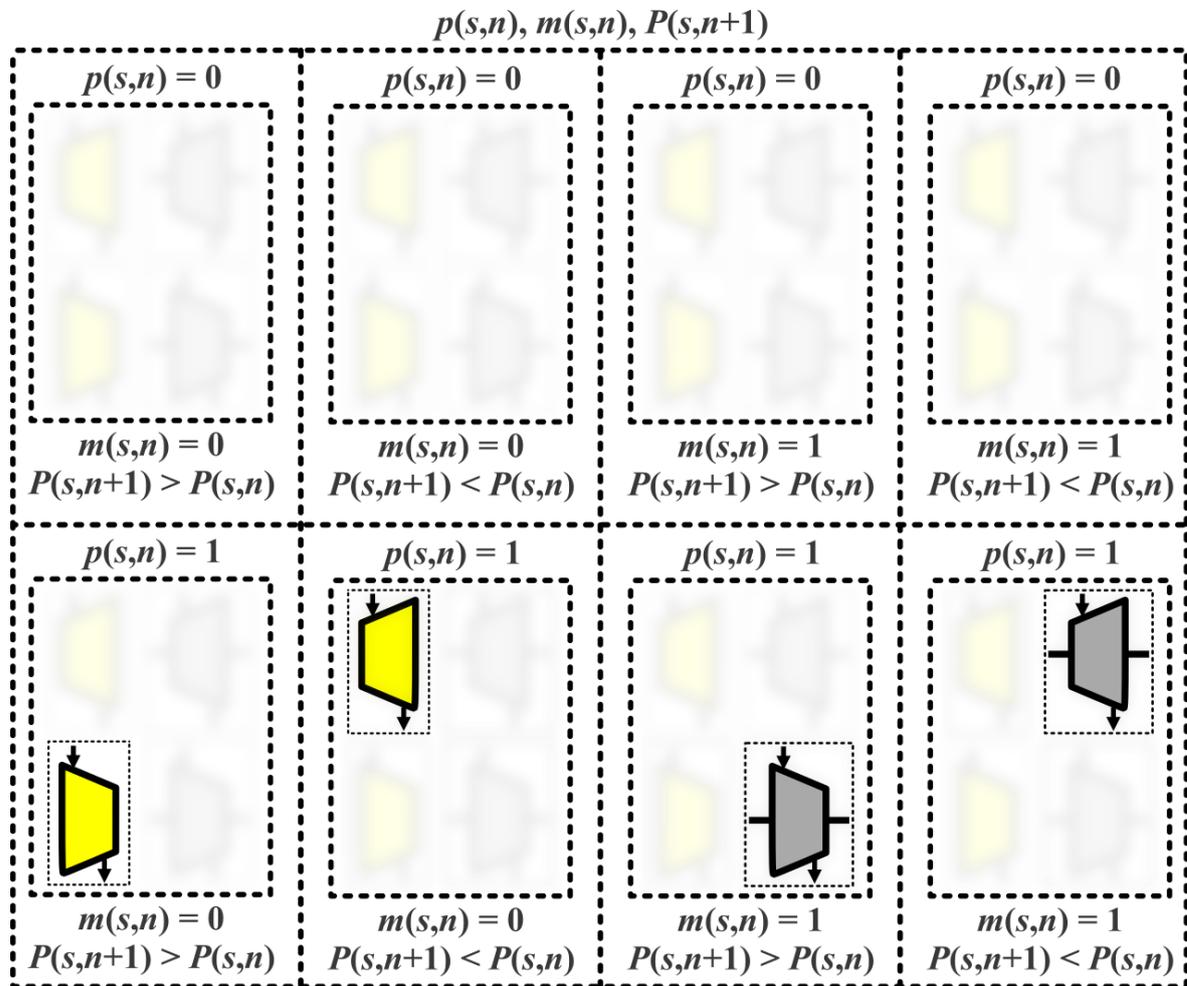
Fonte: autoria própria.

O similar dessa seção sem a mudança de variáveis usaria quatro variáveis de decisão: uma para controlar a existência de aquecedores (y_s), uma para a existência de resfriadores (y_w), uma para determinar a carga térmica dos aquecedores (Q_s) e outra para determinar a carga térmica dos resfriadores (Q_w). Como na presente metodologia foi usado apenas y_{ut} e T_{adj} , há uma redução de 50% das variáveis de decisão, de 4 para 2, devido ao uso dessa substituição de variáveis.

Essa mesma estratégia é adotada para a seção de RTT. Nesse caso, usam-se as variáveis binárias p e m para determinar a existência de compressores AEU (c), turbinas AEU (e), compressores elétricos (uc) e turbinas elétricas (ue). Para tanto, usaram-se relações lógicas de P_{n+1} com P_n , que é conhecido, equacionadas com auxílio de funções de máximo das equações (18), (19), (35), (36), (37) e (38). Essas equações garantem que apenas um entre as cargas energéticas dos compressores AEU (WC), turbinas AEU (WE), compressores elétricos (WUC) e turbinas elétricas (WUE) possa ser não nulo. A Figura 19 apresenta como

as variáveis binárias p e m e as relações lógicas de P_{n+1} com P_n funcionam para determinar a seção de RTT.

Figura 19: Substituição de variáveis da seção de rede de troca de trabalho.



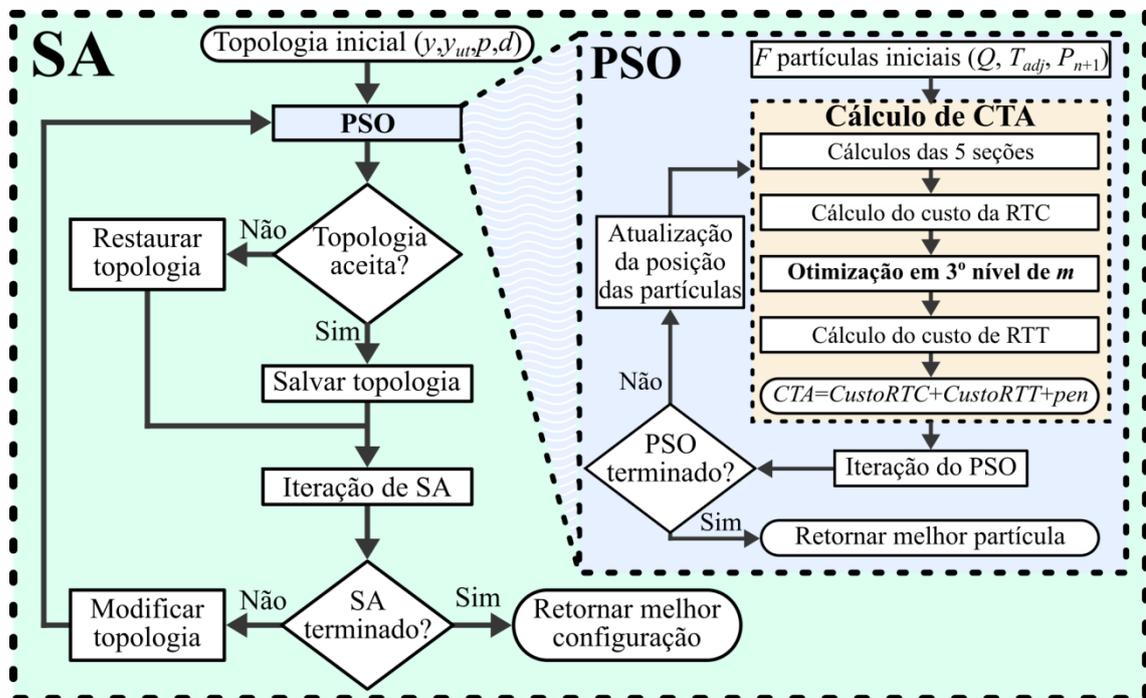
Fonte: autoria própria.

Sem a mudança de variáveis essa tarefa seria feita usando cinco variáveis de decisão: uma para controlar a existência de compressores AEU (c), uma para controlar a existência turbinas AEU (e), uma para controlar a existência compressores elétricos (uc), uma para controlar a existência turbinas elétricas (ue) e uma para determinar as cargas de trabalho (W) ou a pressão após o equipamento (P_{n+1}). Como na presente metodologia foi usado apenas p , m e P_{n+1} , há uma redução de 40% das variáveis de decisão dessa seção, de 5 para 3. Na verdade, como m é calculado internamente pela otimização em terceiro nível, não sendo de fato uma variável de decisão, reduz-se 60% das variáveis de decisão nessa seção, sendo desses 60%, somente 40% devido a substituição de variáveis.

3.7. Otimização em Dois Níveis

Além do algoritmo de implementação do modelo matemático apresentado em 3.5, é necessário determinar o método de otimização do problema MINLP. Esse método de solução é proposto por meio de uma otimização meta-heurística em dois níveis, ou seja, dividindo-se a otimização entre as variáveis binárias e as contínuas. No nível mais externo, aplica-se uma formulação de *Simulated Annealing* (SA) para lidar com as variáveis de decisão binárias (d , y , y_{ut} e p), que, juntas, formam a topologia da rede. Já no nível mais interno, aplica-se *Particle Swarm Optimization* (PSO) para lidar com as variáveis de decisão contínuas (Q , T_{adj} e P). Um fluxograma esquemático do algoritmo é apresentado na Figura 20.

Figura 20: Fluxograma esquemático do algoritmo de otimização em dois níveis.



Fonte: autoria própria.

O primeiro passo do algoritmo é gerar uma estimativa inicial para a topologia da rede. Para garantir boa performance do algoritmo SA, inicia-se com a topologia trivial da RTCT. Ou seja, uma topologia que toda compressão e expansão (p) sejam feitas no último estágio da RTT ($N_s - 1$) e todo aquecimento e resfriamento (y e y_{ut}) seja feito com utilidades (y_{ut}) no último estágio do ajuste de temperatura (N_s). Além disso, a identidade térmica (d) inicial de todas as correntes de processo é quente para as correntes que precisam resfriar e/ou comprimir e fria para as que precisam aquecer e/ou expandir.

Dada a topologia presente, inicializam-se as partículas do algoritmo PSO, nas quais são armazenados os valores, randomicamente gerados entre um limite inferior e um superior, das variáveis de decisão contínuas. Ou seja, cada partícula armazena uma matriz com os valores de Q , uma para T_{adj} e outra para P que respeita as desigualdades abaixo:

$$y(s, n, ss, nn, k) \cdot Q_{up} \geq Q(s, n, ss, nn, k) \geq y(s, n, ss, nn, k) \cdot Q_{low} \quad (88)$$

$$y_{ut}(s, n) \cdot T_{up} \geq T_{adj}(s, n) \geq y_{ut}(s, n) \cdot T_{low} \quad (89)$$

$$p(s, n) \cdot (P_{up} - P(s, n - 1)) + P(s, n) \geq P(s, n + 1) \geq p(s, n) \cdot (P_{low} - P(s, n - 1)) + P(s, n) \quad (90)$$

O próximo passo do algoritmo é, para cada partícula do enxame, fazer os cálculos das seções de classificação, IC, desclassificação, ajuste de temperatura, RTT e custo de RTC. Feito isso, aplica-se a otimização em terceiro nível da variável m , seguido do cálculo do custo de RTT e do CTA de cada partícula. Realiza-se, então a iteração do PSO e, se o critério de término não é atingido, o algoritmo realiza modificações nas posições das partículas de acordo com as equações do PSO e retorna ao bloco de determinação de CTA. Quando o critério de parada do PSO é atingido, seleciona-se a melhor partícula (que apresenta o menor CTA) para retornar ao algoritmo do SA. Dada essa partícula, avalia-se se, no PSO, a presente topologia gerou um CTA que seja aceitável pelos critérios do SA. Caso seja aceita, armazena-se a topologia como “topologia antiga” (d_{old} , y_{old} , $y_{ut,old}$ e p_{old}). Caso não seja aceita, a presente topologia recebe os valores armazenados anteriormente em “topologia antiga”.

Um passo extra do algoritmo proposto é o de armazenar toda a configuração (topologia e variáveis contínuas) caso o valor de CTA encontrado na presente iteração do SA seja a melhor até então. Esse passo evita possíveis perdas de boas soluções devido à flexibilidade de aceitação de topologias do SA.

Posteriormente, um passo é dado na iteração do SA. Se o critério de término do SA não for atingido, faz-se uma modificação na topologia para continuar o laço de iteração do SA. A modificação pode ser adicionar ou remover um trocador de calor (y), um aquecedor/resfriador (y_{ut}), um manipulador de pressão (p) e/ou mudar a identidade de uma corrente de processo (d). Após a modificação da topologia, o algoritmo retorna ao início do PSO, que é atribuir às F partículas valores iniciais das variáveis de decisão contínuas. Quando o critério de parada do SA é atingido, o algoritmo retorna a melhor configuração armazenada até então (d_{best} , y_{best} , $y_{ut,best}$, p_{best} , Q_{best} , $T_{adj,best}$ e P_{best}).

3.8. *Simulated Annealing* para as Variáveis Binárias

Como explicado no item 3.7, o algoritmo SA desenvolvido nesse trabalho é responsável pela otimização das variáveis de decisão binárias. No entanto, como as variáveis binárias e contínuas interagem, as duas otimizações devem ser feitas simultaneamente, como também explicado no tópico anterior.

O SA é um método de otimização de problemas combinatórios primeiramente proposto por Kirkpatrick, Gelatt e Vecchi (1983). Esse método se baseia na mecânica estatística, na qual, devido ao alto número de átomos ou moléculas, somente o estado mais estável é esperado em experimentos reais. Partindo desse pressuposto, a ideia do algoritmo é imitar os processos de resfriamento de materiais. Nesse tipo de processo um material é inicialmente aquecido a elevadas temperaturas, aumentando a agitação das moléculas e, assim, reduzindo a estabilidade da configuração molecular. Ao longo do processo, a temperatura é reduzida vagarosamente. Consequentemente, as moléculas vão reduzindo sua agitação e vão se acomodando em configurações mais estáveis.

Traduzindo para o problema de síntese e otimização de RTCT, nas primeiras iterações quando a temperatura é bastante elevada, há grandes chances da configuração (topologia da RTCT) mudar, mesmo que para um estado menos estável (maior CTA). A chance de isso ocorrer é determinada pela probabilidade de Boltzmann que é equacionada nesse problema da seguinte forma.

$$CA = e^{\frac{-\Delta CTA}{T_{SA}}} \quad (91)$$

O parâmetro CA calculado é a probabilidade de aceitação da nova configuração, que apresenta um determinado ΔCTA . Ou seja, determinada diferença entre o CTA presente e o CTA armazenado da topologia antiga (CTA_{old}). O decaimento da temperatura de *annealing* (T_{SA}) é lento, então, demora-se KSA iterações de SA até que a temperatura diminua de acordo com a seguinte equação.

$$T_{SA} = \alpha \cdot T_{SA} \quad (92)$$

Sendo α um valor decimal entre 0 e 1. O critério de parada dessa otimização é quando a temperatura de *annealing* (T_{SA}) atinge um valor inferior ou igual a um dado limite ($T_{SA,min}$). Ou seja, foi resfriada por completo, sendo que a temperatura inicial do SA é $T_{SA,max}$.

3.9. Particle Swarm Optimization para as Variáveis Contínuas

Nessa metodologia, o algoritmo PSO é responsável pela otimização do CTA avaliando-se as variáveis contínuas. Como esse método de otimização recebe a topologia gerada pelo SA, aquele está inserido nesse, como explicado no tópico 3.7.

O PSO, proposto primeiramente por Kennedy e Eberhart (1995), consiste em um método de otimização de funções não lineares contínuas de implementação computacional simples e requer apenas operações de matemática elementares. Esse método é baseado no deslocamento de animais em coletivo, como o cardume de peixes e bando de pássaros, na busca por comida. Essa busca é baseada em duas forças motrizes: o conhecimento individual (cognição) e o coletivo (comunicação). Isso quer dizer que uma partícula do enxame tem uma componente da velocidade que aponta para a melhor posição que essa partícula já esteve e uma outra componente que aponta para a melhor posição já atingida dentre todas as partículas do enxame. Além disso, há uma terceira componente da velocidade que é devido à inércia da partícula, ou seja, proporcional ao passo dado anteriormente.

Traduzido ao problema de síntese de otimização de RTCT, as equações que regem o PSO são as seguintes:

$$v_{Q,k_{PSO}+1}^{(i)} = y \left[\omega_{k_{PSO}} \cdot v_{Q,k_{PSO}}^{(i)} + c_1 \cdot r_1 \cdot (Q_{pbest,k_{PSO}}^{(i)} - Q_{k_{PSO}}^{(i)}) + c_2 \cdot r_2 \cdot (Q_{gbest,k_{PSO}} - Q_{k_{PSO}}^{(i)}) \right] \quad (93)$$

$$v_{T_{adj},k_{PSO}+1}^{(i)} = y_{ut} \left[\omega_{k_{PSO}} \cdot v_{T_{adj},k_{PSO}}^{(i)} + c_1 \cdot r_1 \cdot (T_{adj,pbest,k_{PSO}}^{(i)} - T_{adj,k_{PSO}}^{(i)}) + c_2 \cdot r_2 \cdot (T_{adj,gbest,k_{PSO}} - T_{adj,k_{PSO}}^{(i)}) \right] \quad (94)$$

$$v_{P,k_{PSO}+1}^{(i)} = p_{n-1} \left[\omega_{k_{PSO}} \cdot v_{P,k_{PSO}}^{(i)} + c_1 \cdot r_1 \cdot (P_{pbest,k_{PSO}}^{(i)} - P_{k_{PSO}}^{(i)}) + c_2 \cdot r_2 \cdot (P_{gbest,k_{PSO}} - P_{k_{PSO}}^{(i)}) \right] \quad (95)$$

$$Q_{k_{PSO}+1}^{(i)} = Q_{k_{PSO}}^{(i)} + v_{Q,k_{PSO}+1}^{(i)} \quad (96)$$

$$T_{adj,k_{PSO}+1}^{(i)} = T_{adj,k_{PSO}}^{(i)} + v_{T_{adj},k_{PSO}+1}^{(i)} \quad (97)$$

$$P_{k_{PSO}+1}^{(i)} = P_{k_{PSO}}^{(i)} + v_{P,k_{PSO}+1}^{(i)} \quad (98)$$

As constantes ω_k , c_1 e c_2 regulam, respectivamente, o peso do passo referente à inércia (passo anterior), à melhor posição individual atingida pela partícula i e à melhor posição atingida dentre todas as partículas do enxame até então. A variável v referente a Q , T_{adj} e P é o passo a ser dado pela partícula nas respectivas variáveis de decisão Q , T_{adj} e P . O subscrito $pbest$ se refere ao melhor valor encontrado pela partícula i , enquanto $gbest$ refere-se ao melhor valor encontrado dentre todas as partículas. As constantes r_1 e r_2 são números

gerados aleatoriamente entre 0 e 1 para deixar mais aleatória a escolha da partícula entre seguir a direção individual ou a coletiva.

Para considerar um certo amortecimento do efeito de inércia, que pode ser traduzido como uma redução na velocidade das partículas conforme elas se aproximam do ótimo final, um decaimento linear é proposto como em Shi, Eberhart (1998), sendo K_{PSO} o número total de iterações do PSO.

$$\omega_{k+1} = \omega_{\max} - k_{PSO} \cdot \frac{\omega_{\max} - \omega_{\min}}{K_{PSO}} \quad (99)$$

Outro parâmetro importante do PSO é o número de partículas no enxame expresso pelo parâmetro F .

Para o primeiro passo de Q , T_{adj} e P não serem somente em direção ao melhor valor global, um passo inicial é gerado aleatoriamente de acordo com as seguintes equações, sendo $rand1$ e $rand2$ dois números aleatórios entre 0 e 1 e dQ_{PSO} , $dT_{adj,PSO}$ e dP_{PSO} parâmetros que determinam o máximo do módulo do passo na variável Q , T_{adj} e P .

$$v_{Q,k_{PSO}=0}^{(i)} = (1 - 2 \cdot rand1) \cdot dQ_{PSO} \cdot rand2 \quad (100)$$

$$v_{T_{adj},k_{PSO}=0}^{(i)} = (1 - 2 \cdot rand1) \cdot dT_{adj,PSO} \cdot rand2 \quad (101)$$

$$v_{P,k_{PSO}=0}^{(i)} = (1 - 2 \cdot rand1) \cdot dP_{PSO} \cdot rand2 \quad (102)$$

4. RESULTADOS E DISCUSSÃO

A metodologia proposta no presente trabalho foi implementada na linguagem de programação C++ em Dev-C++ 5.11 e aplicada a três estudos de caso de problemas de ISCT usando um computador com processador Intel® Core™ i5-5200U CPU a 2,20 GHz com 8,00 GB de RAM. As redes finais obtidas desses estudos de caso pela presente metodologia, bem como seus CTAs, foram comparadas com as redes propostas anteriormente na literatura e seus respectivos CTAs.

4.1. Estudo de Caso 1

Antes de apresentar o resultado do estudo de caso 1, necessita-se declarar alguns parâmetros do problema. Esse problema foi elaborado e resolvido por Onishi, Ravagnani e Caballero (2014a) e, também, resolvido por Pavão, Costa e Ravagnani (2019). A Tabela 1 apresenta os dados das correntes de processo e utilidades para o primeiro estudo de caso.

Tabela 1: Dados das correntes de processo e utilidades do estudo de caso 1

Corrente	T_{in} [K]	T_{out} [K]	CP [kW.K ⁻¹]	h [kW.m ⁻² .K ⁻¹]	P_{in} [MPa]	P_{out} [MPa]
s1	650	370	3	0,1	0,1	0,5
s2	410	650	2	0,1	0,5	0,1
HU	680	680	–	1	–	–
CU	300	300	–	1	–	–

Além dessas informações, há também os parâmetros de compressão e expansão. As eficiências isentrópicas de compressão (η_c) e expansão (η_e) são consideradas iguais a 1 (100%) para todos os compressores e turbinas. Já o expoente politrópico (κ) vale 1,352 para todas correntes. Ainda sobre os dados desse estudo de caso, a Tabela 2 apresenta os parâmetros econômicos de custo de capital e a Tabela 3 apresenta os parâmetros de custos operacionais.

Tabela 2: Parâmetros econômicos dos custos de capital do estudo de caso 1

Componente	a	b	c
Trocador de Calor	106.017,23	618,68	0,1689
Compressor	0	47840,41	0,62
Compressor AEU	0	47840,41	0,62
Turbina	0	2420,32	0,81
Turbina AEU	0	2420,32	0,81
Motor/Gerador	0	988,49	0,62

Tabela 3: Parâmetros econômicos do custo operacional do estudo de caso 1 em \$.kWano⁻¹

Utilidade fria	Utilidade quente	Preço de compra de eletricidade	Preço de venda de eletricidade
100	337	455,04	364,03

A Tabela 4 mostra os parâmetros de implementação do SA, a Tabela 5 os parâmetros de implementação do PSO e a Tabela 6 os limites das variáveis e na Tabela 7 os parâmetros do modelo. Os parâmetros de implementação da superestrutura usados foram de 2 estágios verticais (K) e 3 estágios horizontais (N_s).

Tabela 4: Parâmetros de implementação do SA para o estudo de caso 1

K_{SA} [iterações]	$T_{SA,max}$ [\$.ano ⁻¹]	$T_{SA,min}$ [\$.ano ⁻¹]	α
15	10.000	5	0,8

Tabela 5: Parâmetros de implementação do PSO para o estudo de caso 1

F [partículas]	K_{PSO} [iterações]	c_1	c_2	ω_{max}	ω_{min}	dQ_{PSO} [kW]	dT_{PSO} [K]	dP_{PSO} [MPa]
50	200	1	1	0,75	0,5	10	3	0,01

Tabela 6: Limite das variáveis do estudo de caso 1

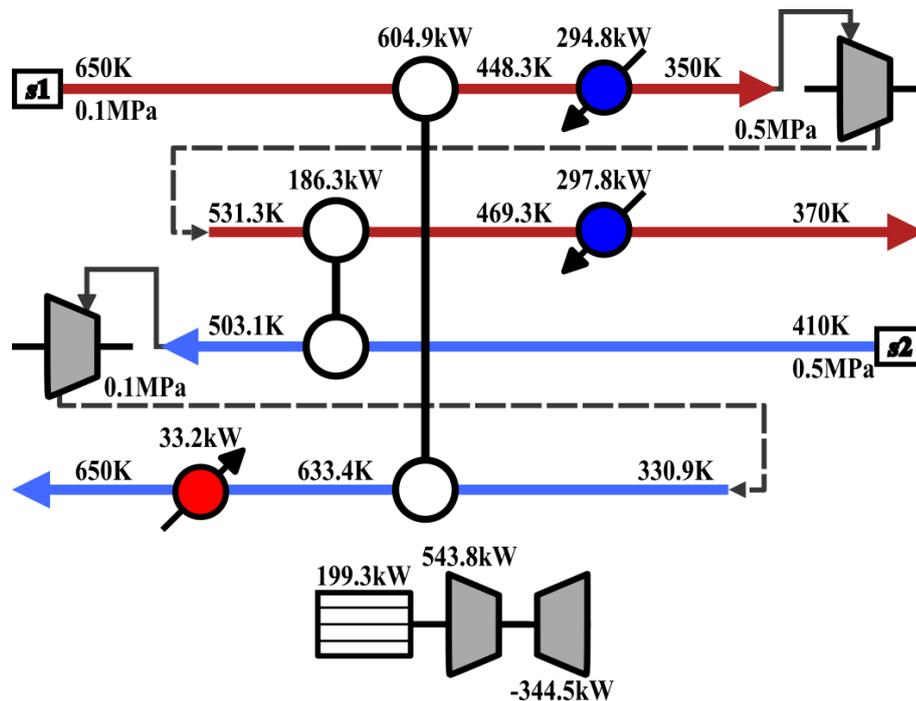
T_{up} [K]	T_{low} [K]	TI_{up} [K]	TI_{low} [K]	P_{up} [MPa]	P_{low} [MPa]	Q_{up} [kW]	Q_{low} [kW]
$+\infty$	$-\infty$	750	350	0,5	0,1	800	0

Tabela 7: Parâmetros do modelo do estudo de caso 1

$\Delta T_{min}[K]$	$p1_{leve}[\$.ano^{-1}]$	$p2_{leve}[\$.ano^{-1}]$	$p1_{pesado}[\$.ano^{-1}]$	$p2_{pesado}[\$.ano^{-1}]$
1	1e5	1e4	2e6	2e4

Com os dados do problema e aplicando a metodologia proposta nesse trabalho chegou-se à RTCT apresentada na Figura 21:

Figura 21: RTCT final obtida pela presente metodologia para o estudo de caso 1.

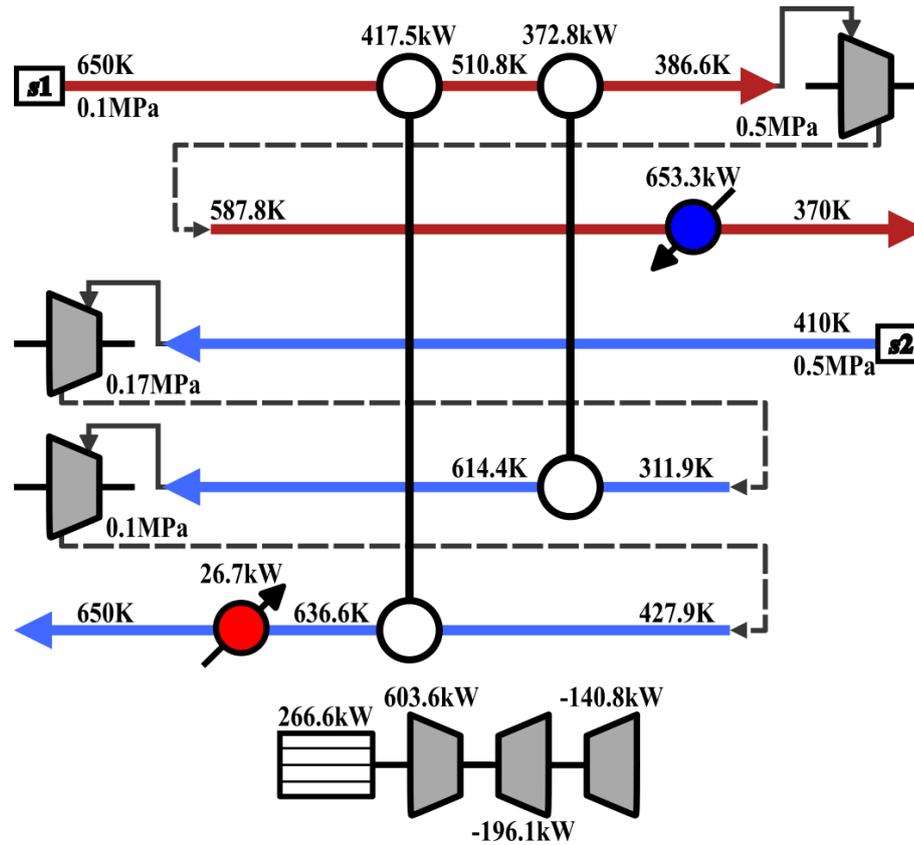


Fonte: autoria própria.

Essa rede apresenta um CTA de \$ 773.904,00/ano, bastante menor que o resultado obtido por Pavão, Costa e Ravagnani (2019) de \$ 834.204,00/ano, que é o melhor resultado reportado na literatura até então. Portanto, a presente metodologia teve uma grande eficiência na redução do custo da RTCT para um pequeno problema de duas correntes de processo, redução essa de \$ 60.300,00/ano ou 7,2 %. O tempo decorrido da programação computacional foi de 5 minutos, mas vale lembrar que há bastante tempo morto devido ao display de informação e backup de dados em arquivos de texto.

A Figura 22 apresenta a RTCT proposta por Pavão, Costa e Ravagnani (2019) para uma posterior comparação para além do CTA.

Figura 22: RTCT final obtida por Pavão, Costa e Ravagnani (2019) para o estudo de caso 1.



Fonte: adaptado de Pavão, Costa e Ravagnani (2019).

Nota-se que as maiores diferenças são as posições dos trocadores de calor, as temperaturas de entrada no compressor e turbinas, a quantidade de turbinas e o uso de resfriadores em estágios iniciais.

Sobre as temperaturas de entrada em compressores e turbinas, tem-se que, no presente trabalho, o uso de um resfriador na corrente s1 no primeiro estágio reduziu ainda mais a temperatura de entrada no compressor. Essa redução de temperatura foi bastante importante, porque favoreceu a redução tanto do trabalho necessário para a compressão total dessa corrente, quanto do uso total de utilidade fria por s1. A diminuição do trabalho de compressão reflete num menor tamanho do motor elétrico e na redução da energia gasta por ele.

Outra diferença importante foi a divisão da expansão de s2 em duas etapas com um aquecimento entre elas, como foi feito por Pavão, Costa e Ravagnani (2019), ou o pré-aquecimento e expansão dessa corrente em uma só etapa, como foi feito nesse trabalho. Apesar de parecer promissora a divisão da expansão para aquecimento intermediário, a configuração encontrada pela presente metodologia se mostrou mais eficaz. Isso se deu, pois,

por pré-aquecer a corrente s_2 , houve uma maior produção de trabalho mesmo na expansão em uma única etapa. Essa maior produção de trabalho compensou o pequeno aumento do custo com utilidade quente no último estágio.

Para uma visão macro mais simplificada, segue na Tabela 8 um resumo do cenário de ISCT das duas RTCTs.

Tabela 8: Resumo do cenário de ISCT das duas RTCTs do estudo de caso 1

	Pavão, Costa e Ravagnani (2019)	Presente trabalho
Custo total anualizado ($\$.ano^{-1}$)	834.204,00	773.904,00
Calor integrado (kW)	790,3	791,2
Trabalho integrado (kW)	336,9	344,5
Utilidade quente (kW)	26,7	33,2
Utilidade fria (kW)	653,3	592,6
Eletricidade consumida (kW)	266,6	199,3
Eletricidade produzida (kW)	0	0
Número de unidades de troca térmica	4	5
Número de manipuladores de pressão	3	2

Da visão macro de ambas as RTCTs, conclui-se que os cenários estão bastante similares na quantidade de calor e trabalho integrados e nos números de unidades de troca térmica (considerando trocadores de calor, aquecedores e resfriadores) e de manipuladores de pressão. Com relação a quantidade de utilidades quente e fria e ao consumo de eletricidade, o presente trabalho se sobressaiu com relação a RTCT proposta pelos outros autores.

4.2. Estudo de Caso 2

O estudo de caso 2 é um problema de síntese e otimização de RTCT primeiramente resolvido por Onishi, Ravagnani e Caballero (2014a) e, também, por Huang e Karimi (2016). Trata-se de um problema teórico de cinco correntes de processo cujos dados estão na Tabela 9.

Tabela 9: Dados das correntes de processo e utilidades do estudo de caso 2

Corrente	T_{in} [K]	T_{out} [K]	CP [kW.K ⁻¹]	h [kW.m ⁻² .K ⁻¹]	P_{in} [MPa]	P_{out} [MPa]
s1	350	350	36,81	0,1	0,9	0,1
s2	350	350	14,73	0,1	0,85	0,15
s3	400	400	21,48	0,1	0,7	0,2
s4	390	390	25,78	0,1	0,1	0,7
s5	420	420	36,81	0,1	0,1	0,9
HU	680	680	–	1	–	–
CU	300	300	–	1	–	–

Nota-se que as temperaturas iniciais e finais de cada corrente são as mesmas. Ou seja, trata-se de um problema de compressões e expansões e resfriamento e aquecimento devido a essas mudanças de pressão.

As eficiências isentrópicas de compressão (η_c) e expansão (η_e) são consideradas iguais a 0,7 (70%) para todos os compressores e turbinas, enquanto o expoente politrópico (κ) vale 1,4 para todas correntes. A Tabela 10 apresenta os parâmetros econômicos do custo de capital do problema e a Tabela 11 apresenta os parâmetros de custos operacionais.

Tabela 10: Parâmetros econômicos dos custos de capital do estudo de caso 2

Componente	a	b	c
Trocador de Calor	3.000	30	0
Compressor	250.000	1000	1
Compressor AEU	200.000	1000	1
Turbina	50.000	1000	1
Turbina AEU	40.000	1000	1
Motor/Gerador	2.000	1000	1

Tabela 11: Parâmetros econômicos do custo operacional do estudo de caso 2 em \$.kWano⁻¹

Utilidade fria	Utilidade quente	Preço de compra de eletricidade	Preço de venda de eletricidade
8	280	960	800

Uma pequena diferença no cálculo do custo da RTT é usada por Huang e Karimi (2016) e, para possibilitar uma comparação de CTA coerente, usa-se a mesma função custo. A diferença é que no lugar do trabalho (WC , WUC , WE e WUE), usa-se a capacidade térmica (CP) na equação (49) referente ao custo de capital anualizado da RTT.

A Tabela 12 mostra os parâmetros de implementação do SA, a Tabela 13 os parâmetros de implementação do PSO, a Tabela 14 os limites das variáveis e a Tabela 15 os parâmetros do modelo. Os parâmetros de implementação da superestrutura usados foram de 2 estágios verticais (K) e 3 estágios horizontais (N_s).

Tabela 12: Parâmetros de implementação do SA para o estudo de caso 2

K_{SA} [iterações]	$T_{SA,max}$ [\$.ano ⁻¹]	$T_{SA,min}$ [\$.ano ⁻¹]	α
50	1e5	20.000	0,8

Tabela 13: Parâmetros de implementação do PSO para o estudo de caso 2

F [partículas]	K_{PSO} [iterações]	c_1	c_2	ω_{max}	ω_{min}	dQ_{PSO} [kW]	dT_{PSO} [K]	dP_{PSO} [MPa]
50	300	1	1	0,75	0,5	20	5	0,05

Tabela 14: Limite das variáveis e parâmetros do modelo do estudo de caso 2

T_{up} [K]	T_{low} [K]	TI_{up} [K]	TI_{low} [K]	P_{up} [MPa]	P_{low} [MPa]	Q_{up} [kW]	Q_{low} [kW]
288	600	288	600	0,9	0,1	1,5e4	0

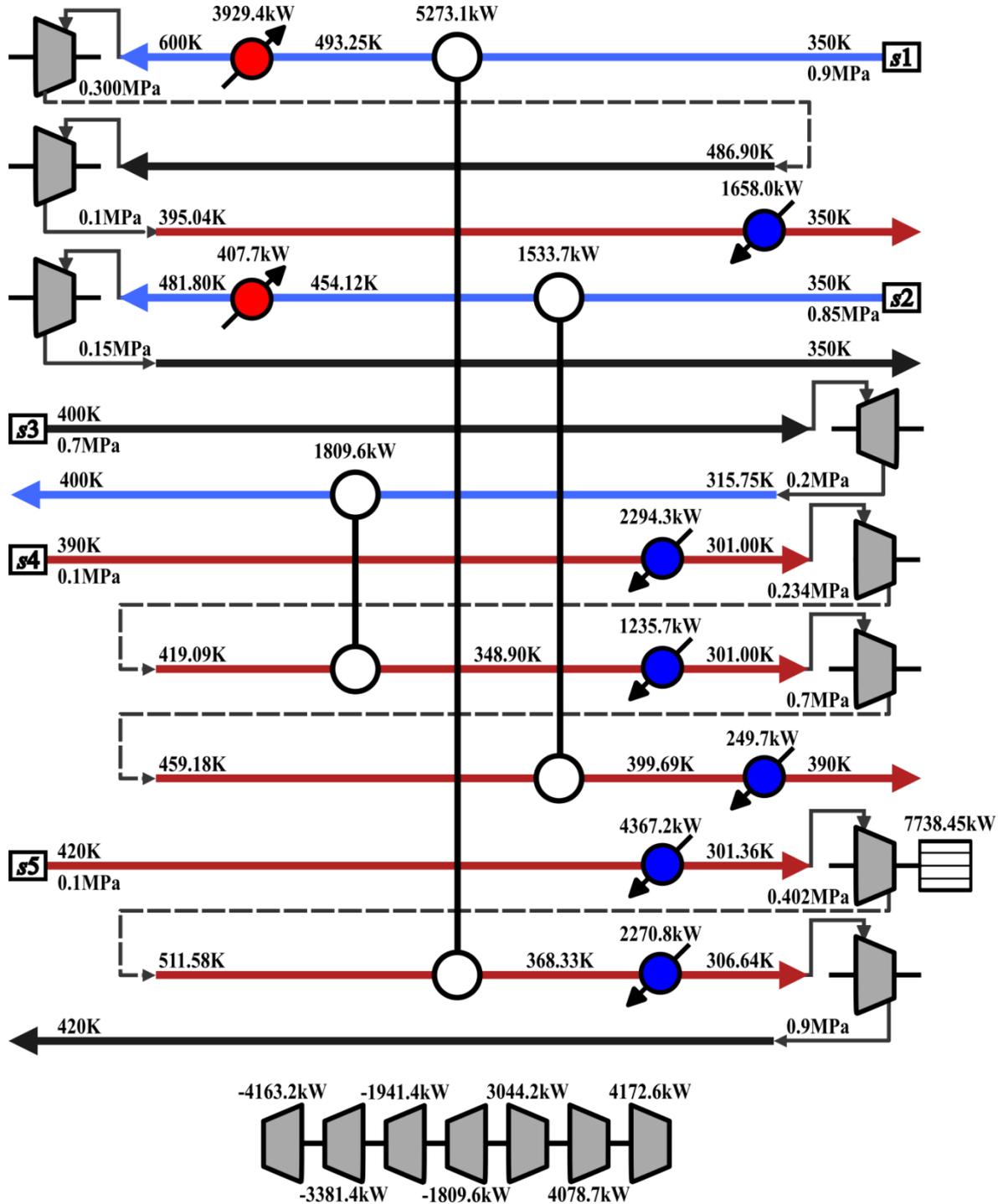
Tabela 15: Parâmetros do modelo do estudo de caso 2

ΔT_{min} [K]	$p1_{leve}$ [\$.ano ⁻¹]	$p2_{leve}$ [\$.ano ⁻¹]	$p1_{pesado}$ [\$.ano ⁻¹]	$p2_{pesado}$ [\$.ano ⁻¹]
1	1e7	3e6	3e7	6e6

Com os dados do problema e aplicando a metodologia proposta nesse trabalho chegou-se a RTCT representada na Figura 23. Essa rede apresenta um CTA de \$ 10.004.220,70/ano. Esse CTA é inferior ao valor reportado como melhor resultado da literatura até então por Huang e Karimi (2016) que é de \$ 10.186.680,00/ano. Portanto, a presente metodologia obteve boa eficiência na redução do custo da RTCT para um problema de cinco correntes de processo, uma redução de \$ 182.080,00/ano ou 1,80 % do melhor resultado publicado na literatura. O tempo decorrido da programação computacional foi de 85

minutos, mas vale lembrar que há tempo morto devido ao display de informação e backup de dados em arquivos de texto.

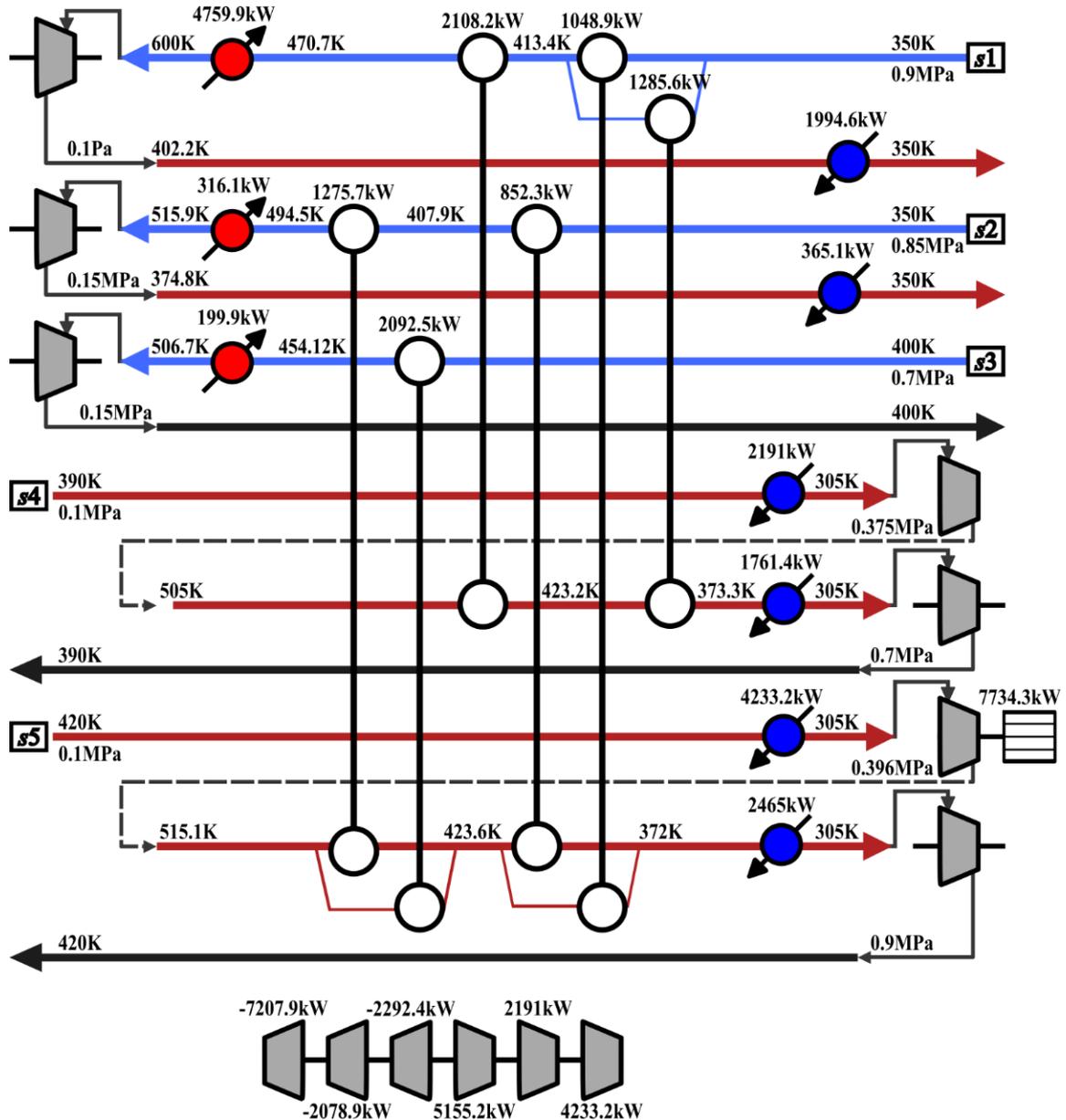
Figura 23: RTCT final obtida pela presente metodologia para o estudo de caso 2.



Fonte: autoria própria.

A Figura 24 apresenta a RTCT proposta por Huang e Karimi (2016) para uma posterior comparação para além do CTA.

Figura 24: RTCT final obtida por Huang e Karimi (2016) para o estudo de caso 2.



Fonte: adaptado de Huang e Karimi (2016).

Por se tratar de um problema maior de ISCT (mais correntes de processo e mais possibilidades de integrar calor e trabalho), as diferenças entre as duas RTCTs também são maiores. Portanto, segue uma comparação detalhada das RTCTs corrente a corrente.

Começando por s1, num primeiro estágio da RTCT de Huang e Karimi (2016) essa corrente foi aquecida até 600 K, assim como na RTCT do presente trabalho. No entanto, na

RTCT desses autores três trocadores de calor e um aquecedor (4759,9 kW) foram usados para isso, enquanto no presente trabalho um trocador de calor e um aquecedor (3922,7 kW) foram usados. Usando mais trocadores de calor, a quantidade de utilidade quente usada ainda foi maior para a outra rede. A expansão dessa corrente divergiu entres esses trabalhos. Na RTCT proposta por Huang e Karimi (2016), a corrente s_1 é expandida em um único estágio, enquanto no presente trabalho essa corrente foi expandida em dois estágios sem aquecimento intermediário. O porquê disso fica claro ao se calcular o trabalho gerado nessa expansão, que foi de 7.544,6 kW na presente RTCT, contra 7.207,9 kW na de Huang e Karimi (2016). Esse aumento de trabalho foi importante, pois implicou em mais energia para comprimir outras correntes de processo. Ao produzir mais trabalho pela expansão resultou-se, também, em uma maior redução da temperatura dessa corrente. Assim, menos utilidade fria foi necessária para correção da temperatura no último estágio. Conclui-se então que, para a corrente s_1 , o cenário encontrado pela presente metodologia foi mais favorável que o dos outros autores, pois apresentou menos trocadores de calor, produziu mais trabalho e necessitou de menos utilidades quente e fria.

Sobre a corrente s_2 , na RTCT de Huang e Karimi (2016), essa corrente foi aquecida até 515,9 K usando dois trocadores de calor e um aquecedor, seguido de uma expansão (2078,9 kW) em um estágio e finalizada com utilidade fria (365,1 kW) para correção da temperatura no último estágio. Aplicando-se a presente metodologia, encontrou-se uma RTCT que apresenta algumas diferenças para essa corrente. Primeiramente, a corrente foi aquecida até 481,8 K usando um trocador de calor e um aquecedor (407,7 kW), depois expandida (1941,4 kW) em um estágio e a utilidade fria não se fez necessária, uma vez que a temperatura de saída da turbina já é a temperatura final. Observa-se, então, que o número de trocadores de calor foi menor e economizou-se utilidade fria, além de o trabalho produzido ser menor também.

A corrente s_3 na RTCT de Huang e Karimi (2016) foi aquecida usando um trocador de calor e um aquecedor (199,9 kW) até 506,7 K e depois expandida (2292,4 kW) em um único estágio até a pressão e temperatura final. Na RTCT obtida utilizando a presente metodologia, essa corrente foi expandida (1809,6 kW) em um único estágio e depois aquecida até a temperatura final usando um trocador de calor. Então, observa-se que a utilidade quente foi economizada ao custo de produzir menos trabalho de expansão.

A corrente s_4 na RTCT de Huang e Karimi (2016) foi, primeiramente, resfriada usando utilidade fria (2191 kW) até 305 K, depois comprimida (5155,2 kW) parcialmente até 0,375 MPa, seguida por um resfriamento em dois trocadores de calor e um resfriador (1761,4

kW) até 305 K e, por fim, comprimida (2191 kW) até a pressão e temperatura finais. Para a RTCT obtida pela presente metodologia, essa corrente é resfriada usando utilidade fria (2294,3 kW) até 301 K, comprimida (7738,45 kW) usando um compressor elétrico até 0,234 MPa, resfriada novamente até 301 K usando um trocador de calor e um resfriador (1235,7 kW), comprimida (3044,2 kW) até a pressão final e, finalmente, resfriada até a temperatura final usando um trocador de calor e um resfriador (249,7 kW). Observa-se que a presente metodologia apresentou aqui uma RTCT que gasta menos utilidade fria, mas consome mais trabalho na compressão e usa um trocador de calor a mais.

Por fim, a corrente *s5* na RTCT de Huang e Karimi (2016) foi, inicialmente, resfriada usando utilidade fria (4233,2 kW) até 305 K, para ser comprimida (7734,3 kW) em compressor elétrico até a pressão de 0,396 MPa. Depois foi resfriada usando quatro trocadores de calor e um resfriador (2465 kW) até 305 K para ser comprimida (4233,2 kW) até a pressão e temperatura finais. Na RTCT obtida pela presente metodologia, a corrente é resfriada até 301,36 K usando utilidade fria (4367,2 kW), depois é comprimida (4078,7 kW) até 0,402 MPa, depois resfriada até 306,64 K usando um trocador de calor e um resfriador (2270,8 kW) e, por fim, comprimida (4172,6 kW) até a pressão e temperatura finais. Então, observa-se que a presente metodologia apresentou uma RTCT com três unidades de troca térmica a menos e que gasta menos utilidade fria e trabalho para compressão dessa corrente.

Nota-se que, em ambas RTCTs, a mudança de identidade térmica de correntes aconteceu. Na presente metodologia, a corrente *s1* se inicia como corrente fria e é aquecida para potencializar a produção de energia na expansão. Depois da expansão, essa mesma corrente se torna quente para ser resfriada e atingir a meta de temperatura. Vale ressaltar que considerar o resfriamento dessa corrente é muito pouco intuitivo. Isso, pois se trata de uma corrente que precisa reduzir sua pressão e retornar a temperatura inicial. Ou seja, intuitivamente, esquentar e expandir. No entanto, a consideração dessa troca de identidade possibilitou melhor recuperação de energia, logo, economia do processo.

Outro aspecto da presente RTCT que merece destaque são os trocadores de calor entre correntes de processo nas correntes *s4* e *s5*. Esses trocadores de calor resfriaram essas correntes entre uma compressão e outra. Ou seja, servem para recuperar a energia devido ao aumento da temperatura na compressão dessas correntes gasosas. Assim, esses trocadores justificam claramente o porquê da simultaneidade da integração de calor e trabalho e também são bastante difíceis de serem determinados sem o uso da programação matemática.

Para uma visão macro mais simplificada, a Tabela 16 apresenta um resumo do cenário de ISCT das duas RTCTs.

Tabela 16: Resumo do cenário de ISCT das duas RTCTs do estudo de caso 2

	Huang e Karimi (2016)	Presente trabalho
Custo total anualizado (\$/ano)	10.186.680,00	10.004.220,70
Calor integrado (kW)	8.663,2	8.616,4
Trabalho integrado (kW)	11.579,2	11.295,5
Utilidade quente (kW)	5.275,9	4.337,1
Utilidade fria (kW)	13.010,3	12.075,7
Eletricidade consumida (kW)	7.734,3	7.738,4
Eletricidade produzida (kW)	0	0
Número de unidades de troca térmica	15	11
Número de manipuladores de pressão	7	8

Da visão macro de ambas as RTCTs, conclui-se que os cenários estão bastante similares, com exceção da quantidade de utilidade quente e fria e do número de unidades de troca térmica (tanto entre correntes de processo, como também em aquecedores e resfriadores) que foram bastante menores nesse trabalho em relação a RTCT proposta pelos outros autores. Essa redução de quase 1000 kW de utilidades quente e fria são interessantes para além do custo operacional. Por se tratar de quase 20 % do uso de utilidade quente, essa redução pode implicar em uma diminuição do sistema de caldeira, no caso dessa utilidade ser vapor, por exemplo. Similarmente, a redução de 4 unidades de troca térmica (26,7 %) pode implicar em diminuição do espaço industrial, que é muito importante em processos *offshore*, por exemplo.

4.3. Estudo de Caso 3

O estudo de caso 3 é um problema de síntese e otimização de RTCT baseado em um processo industrial real de separação de CO₂/N₂ por membrana para a captura de carbono pós-combustão. A ideia de ISCT foi primeiro proposta por Fu e Gundersen (2016a), os quais propuseram uma otimização voltada a potencializar a recuperação de energia. Mais recentemente, Pavão, Costa e Ravagnani (2019) propuseram resolver o mesmo problema, agora o avaliando economicamente. Trata-se de um problema real com seis correntes de processo cujos dados são apresentados na Tabela 17.

Tabela 17: Dados das correntes de processo e utilidades do estudo de caso 3

Corrente	T_{in} [K]	T_{out} [K]	CP [kW.K ⁻¹]	h [kW.m ⁻² .K ⁻¹]	P_{in} [MPa]	P_{out} [MPa]
s1	298,15	298,15	37,49	0,1	0,1	0,8
s2	298,15	298,15	10,09	0,1	0,1	0,8
s3	650,15	348,15	43,77	0,1	–	–
s4	298,15	298,15	27,40	0,1	0,8	0,1
s5	298,15	298,15	4,40	0,1	0,8	0,1
s6	298,15	600,15	34,7	0,1	–	–
CU	288,15	288,15	–	1	–	–

Além de ser o maior dos 3 estudos de caso (6 correntes de processo), um desafio extra é a ausência de utilidade quente. Para lidar com essa variação, introduziu-se uma penalização grave proporcional ao valor de Q_s , caso ele seja considerado pelo modelo. Inviabiliza-se, assim, o emprego de utilidade quente.

As eficiências isentrópicas de compressão (η_c) e expansão (η_e) são iguais a 0,85 e 0,9, respectivamente para todos os compressores e turbinas, enquanto o expoente politrópico (κ) vale 1,4 para todas correntes. A Tabela 18 apresenta os parâmetros econômicos de custo de capital do problema e a Tabela 19 os parâmetros de custos operacionais.

Tabela 18: Parâmetros econômicos dos custos de capital do estudo de caso 3

Componente	a	b	c
Trocador de Calor	93500,12	602,96	0,149
Compressor	0	51104,85	0,62
Compressor AEU	0	51104,85	0,62
Turbina	0	2585,47	0,81
Turbina AEU	0	2585,47	0,81
Motor/Gerador	0	985,47	0,62

Tabela 19: Parâmetros econômicos do custo operacional do estudo de caso 3 em \$.kWano⁻¹

Utilidade fria	Utilidade quente	Preço de compra de eletricidade	Preço de venda de eletricidade
100	-	455,04	364,03

A Tabela 20 mostra os parâmetros de implementação do SA, a Tabela 21 os parâmetros de implementação do PSO, a Tabela 22 os limites das variáveis e a Tabela 23 parâmetros do modelo. Os parâmetros de implementação da superestrutura usados foram de 2 estágios verticais (K) e 3 estágios horizontais (N_s).

Tabela 20: Parâmetros de implementação do SA para o estudo de caso 3

K_{SA} [iterações]	$T_{SA,max}$ [\$/ano]	$T_{SA,min}$ [\$/ano]	α
75	1e5	5000	0,8

Tabela 21: Parâmetros de implementação do PSO para o estudo de caso 3

F [partículas]	K_{PSO} [iterações]	c_1	c_2	ω_{max}	ω_{min}	dQ_{PSO} [kW]	dT_{PSO} [K]	dP_{PSO} [MPa]
50	300	1,1	1,1	0,75	0,5	10	3	0,01

Tabela 22: Limite das variáveis e parâmetros do modelo do estudo de caso 3

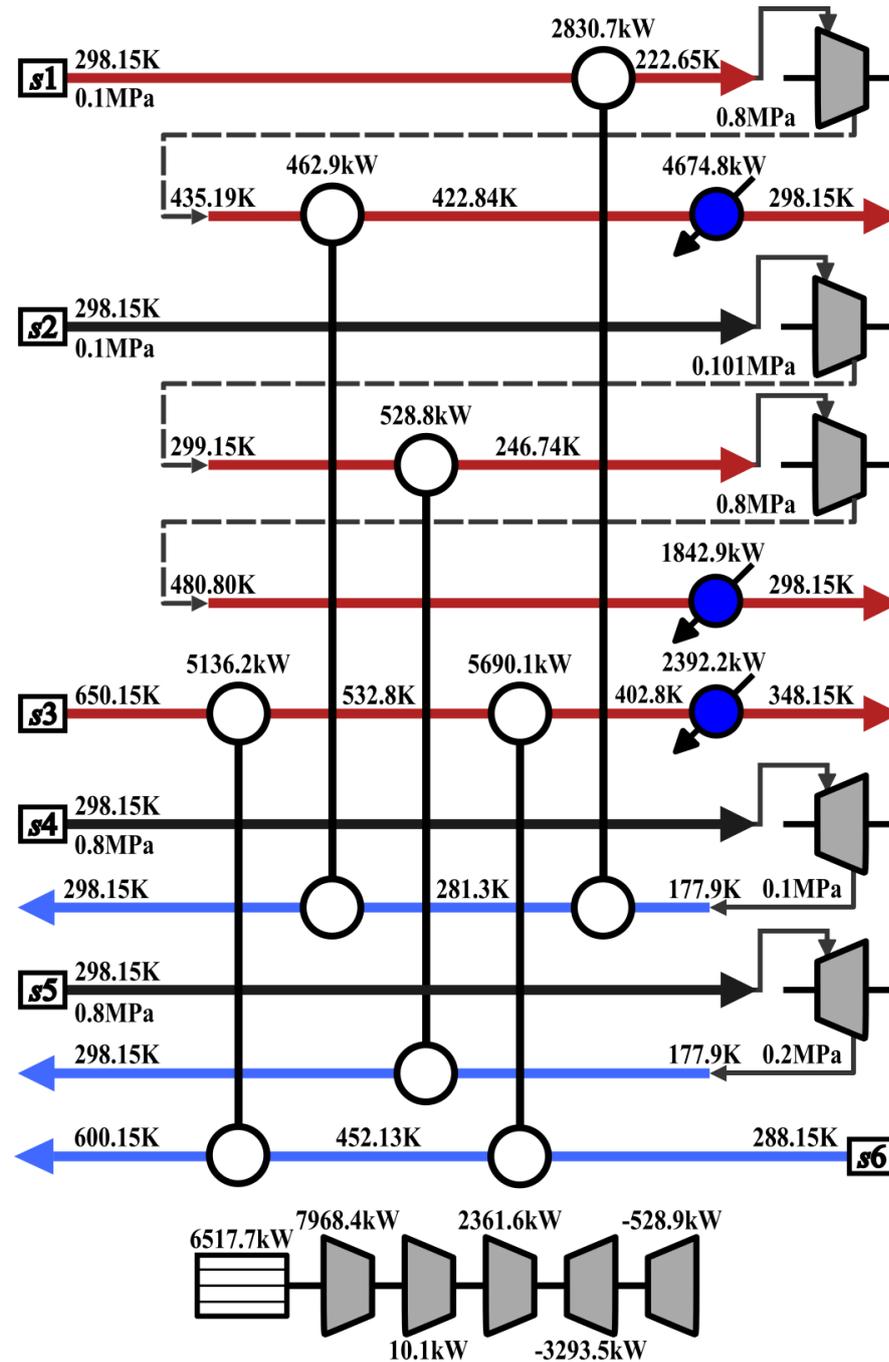
T_{up} [K]	T_{low} [K]	TI_{up} [K]	TI_{low} [K]	P_{up} [MPa]	P_{low} [MPa]	Q_{up} [kW]	Q_{low} [kW]
$+\infty$	$-\infty$	$+\infty$	$-\infty$	0,8	0,1	1,5e4	0

Tabela 23: Parâmetros do modelo do estudo de caso 3

ΔT_{min} [K]	$p1_{leve}$ [\$.ano ⁻¹]	$p2_{leve}$ [\$.ano ⁻¹]	$p1_{pesado}$ [\$.ano ⁻¹]	$p2_{pesado}$ [\$.ano ⁻¹]
1	2e6	1e5	2e7	2e5

Com os dados do problema e aplicando a metodologia proposta nesse trabalho chegou-se a RTCT apresentada na Figura 25. Essa rede possui um CTA de \$ 8.958.880,00/ano. Esse CTA é bastante menor que o valor reportado como melhor resultado da literatura até então por Pavão, Costa e Ravagnani (2019) que foi de \$ 9.011.115,00/ano. Portanto, a presente metodologia teve uma grande eficiência na redução do custo de um RTCT para esse problema de seis correntes de processo, que significa uma redução de \$ 52.235,00/ano ou 0,58 %. O tempo decorrido da programação computacional foi de 170 minutos, mas vale lembrar que há bastante tempo morto devido ao display de informação e backup de dados em arquivos de texto.

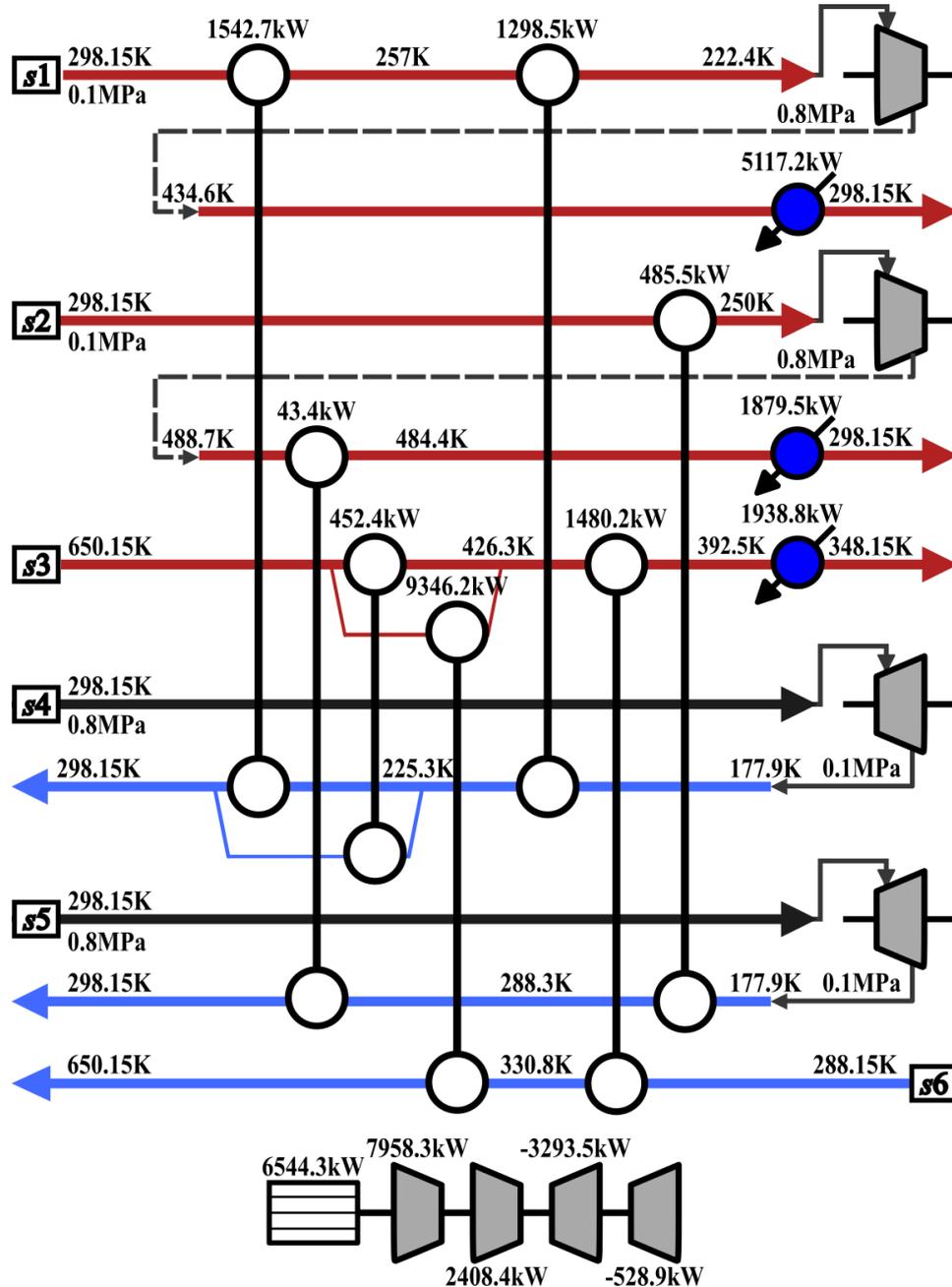
Figura 25: RTCT final obtida pela presente metodologia para o estudo de caso 3.



Fonte: autoria própria.

A Figura 26 apresenta a RTCT proposta por Pavão, Costa e Ravagnani (2019) para uma posterior comparação dos resultados para além do CTA.

Figura 26: RTCT final obtida por Pavão, Costa e Ravagnani (2019) para o estudo de caso 3.



Fonte: adaptado de Pavão, Costa e Ravagnani (2019).

Para esse estudo de caso, semelhante ao que foi feito para o caso 2, apresenta-se uma comparação detalhada, corrente a corrente, entre a RTCT de Pavão, Costa e Ravagnani (2019) e aquela obtida pela presente metodologia.

A corrente s1 (ou H1 e H2 na Figura 26), na RTCT de Pavão, Costa e Ravagnani (2019), foi, inicialmente, resfriada até 222,4 K usando-se dois trocadores de calor. Depois, foi comprimida (7958,3 kW) até a pressão final e, por fim, sua temperatura foi ajustada usando-se utilidade fria (5117,2 kW). Na RTCT obtida pela presente metodologia, essa corrente foi

resfriada até 224,2 K usando-se um trocador de calor, comprimida (8022,5 kW) até a pressão final e resfriada até a temperatura final usando um trocador de calor e um resfriador (4728,9 kW). Observa-se que a maior diferença foi na posição dos trocadores de calor, pois não houve muita diferença com respeito a quantidade de utilidade fria nem ao trabalho gasto na compressão.

A corrente s_2 (ou H3 e H4 na Figura 26), na RTCT de Pavão, Costa e Ravagnani (2019), foi resfriada até 250 K em um trocador de calor, comprimida (2408,4 kW) até sua pressão final e, por fim, sua temperatura foi ajustada à temperatura final usando-se um trocador de calor e um resfriador (1879,5 kW). Na presente RTCT, essa corrente foi, inicialmente, comprimida (10,1 kW) até 0,101 MPa, depois resfriada até 246,7 K usando-se um trocador de calor, então comprimida (2361,6 kW) até a pressão final e resfriada usando utilidade fria (1842,9 kW) até a temperatura final. Observa-se que a presente RTCT apresenta um pequeno (10,1 kW) compressor a mais e um trocador de calor a menos. A quantidade de utilidade fria e o trabalho integrado foram semelhantes.

A corrente s_3 (ou H5 na Figura 26), que é uma corrente de pressão fixa, na RTCT de Pavão, Costa e Ravagnani (2019), foi resfriada até a temperatura final usando-se três trocadores de calor e um resfriador (1938,8 kW). Na presente RTCT, essa corrente foi resfriada usando-se dois trocadores de calor e um resfriador (2392,2 kW). Observa-se, então, que os outros autores obtiveram melhor resultado de recuperação de calor dessa corrente.

A corrente s_4 (C1 na Figura 26), na RTCT de Pavão, Costa e Ravagnani (2019), foi, inicialmente, expandida (3293,5 kW) até a pressão final, seguido de um aquecimento usando-se três trocadores de calor até a temperatura final. Na presente RTCT, essa corrente foi, também, inicialmente expandida até a pressão final (3293,5 kW) e aquecida até a temperatura final em dois trocadores de calor. A diferença aqui, portanto, é o menor número de trocadores de calor da presente RTCT.

A corrente s_5 (C3 e C4 na Figura 26), na RTCT de Pavão, Costa e Ravagnani (2019), foi expandida (528,9 kW) até a pressão final e aquecida até a temperatura final em dois trocadores de calor. Na presente RTCT foi parecido, com a diferença de que o aquecimento final foi em um único trocador de calor.

Por fim, a corrente s_6 (C5 na Figura 26), que é uma corrente de pressão fixa, tanto na RTCT de Pavão, Costa e Ravagnani (2019), quanto na presente RTCT, foi aquecida usando-se dois trocadores de calor.

A Tabela 24 apresenta um resumo do cenário de ISCT das duas RTCTs para posterior análise.

Tabela 24: Resumo do cenário de ISCT das duas RTCTs do estudo de caso 3

	Pavão, Costa e Ravagnani (2019)	Presente trabalho
Custo total anualizado (\$/ano)	9.011.115,00	8.958.880,00
Calor integrado (kW)	14.648,9	14.648,7
Trabalho integrado (kW)	3.833,4	3.822,4
Utilidade quente (kW)	-	-
Utilidade fria (kW)	8.935,5	8.909,9
Eletricidade consumida (kW)	6.544,3	6.517,7
Eletricidade produzida (kW)	0	0
Número total de unidades de troca térmica	10	8
Número de manipuladores de pressão	4	5

Da visão macro de ambas as redes, conclui-se que os cenários estão bastante similares, com exceção do número total de unidades de troca térmica, que foi reduzido de 10 para 8. Isso só foi possível graças a alocação do pequeno compressor (10,1 kW) em *s2*, o que elevou a temperatura dessa corrente para possibilitar a troca de calor com *s5*. Esse pré-aquecimento poderia ter sido feito com utilidade quente, no entanto, não havia utilidade quente disponível nesse problema. Ou seja, essa compressão funcionou como utilidade quente. Vale dizer que é possível que o tamanho desse compressor seja inviável industrialmente, por ser da ordem de mil vezes menor que o outro compressor. No entanto, matematicamente, a RTCT proposta neste trabalho se trata de um resultado melhor que aquele proposto por Pavão, Costa e Ravagnani (2019) por apresentar um CTA menor.

4.4. Discussão

A metodologia proposta no presente trabalho foi eficiente na síntese e otimização das RTCT estudadas. Tanto para um problema pequeno (2 correntes de processo), quanto para problemas maiores (5 e 6 correntes), a aplicação dessa metodologia obteve RTCTs com CTAs menores do que aqueles reportados na literatura.

Um aspecto da metodologia desse trabalho que deve ser ressaltado como agente importante na eficiência da resolução dos estudos de caso foram as estratégias utilizadas para redução do problema de otimização. A primeira delas foi substituição de variáveis para redução do espaço de busca da otimização. Ou seja, na formulação MINLP, usar uma variável binária, com o auxílio de equações fundadas em relações lógicas entre variáveis do modelo,

no lugar de outras duas ou mais. Outra estratégia importante na redução do problema de otimização foi a otimização interna (em terceiro nível) usada para calcular a variável binária de decisão m e, conseqüentemente, reduzir os graus de liberdade do problema de otimização.

A formulação na forma MINLP com graus de liberdade reduzido foi capaz de determinar redes complexas e não intuitivas. Um exemplo disso foi a utilização de compressor pequeno no estudo de caso 3 como forma de aumentar a temperatura da corrente e viabilizar a recuperação de sua energia. Outro exemplo foi a mudança da identidade térmica da corrente de processo no estudo de caso 2, no qual uma corrente de processo foi aquecida em um estágio e resfriada em outro.

No entanto, algumas características presentes na superestrutura não foram observadas nas soluções ótimas obtidas. Um exemplo disso é a divisão de correntes para recuperação de calor em paralelo. Uma análise que pode ser feita dessa ausência de divisão de correntes é que a consideração de mistura isotérmica, apesar de simplificar o problema de MINLP, pode ter restringido alguma solução que apresentasse divisão de corrente, mas mistura não isotérmica.

5. CONCLUSÕES

Uma nova metodologia de síntese e otimização de RTCT foi proposta. Essa metodologia incluiu uma nova superestrutura de RTCT da qual foi derivado um modelo com a formulação de um problema MINLP. Modelo esse ao qual foram aplicadas estratégias de redução de graus de liberdade por substituição de variáveis e otimização em terceiro nível e que foi implementado sequencialmente. Além disso, a metodologia expôs um método de solução do problema MINLP usando otimização meta-heurística em dois níveis.

A aplicação dessa metodologia a três estudos de casos mostrou-a eficaz na resolução de problemas de síntese e otimização de RTCT. Essa eficácia ficou evidente nos resultados de CTA que foram mais baixos do que os melhores valores reportados na literatura até então.

Considerando os bons resultados obtidos pela otimização, conclui-se que a formulação do problema de MINLP visando reduzir o número total de variáveis de decisão binárias e contínuas foi uma boa estratégia. Portanto, práticas de substituição de variáveis e otimização em terceiro nível são formas eficazes de redução de problemas MINLP. Conclui-se também que a otimização em dois níveis usando SA e PSO partindo de uma configuração trivial e progredindo evolutivamente é uma boa metodologia para otimização de problemas MINLP de grande porte, como os resolvidos neste trabalho.

Do problema físico de ISCT, observou-se nos três estudos de caso que muito pode ser economizado (CTA) a partir da síntese de redes otimizadas. As economias geradas pelas redes obtidas por essa metodologia em comparação aos melhores resultados reportados na literatura até então foram de 0,6 até 7,2 %. Estas porcentagens representam monetariamente até \$ 182.080,00/ano. Alguns aspectos dessas redes que geraram economia foram complexos e pouco intuitivos, ou seja, dificilmente obtidos pela síntese de RTCT que não usa programação matemática. Um grande exemplo disso foi observado no estudo de caso três, no qual um pequeno compressor foi alocado em uma corrente de processo para aumentar minimamente sua temperatura de forma que sua energia pôde ser recuperada por uma corrente de processo fria. Outro exemplo, foram os trocadores de calor entre correntes de processo nas correntes s_4 e s_5 , do estudo de caso dois, que resfriaram essas correntes entre uma compressão e outra. Ou seja, houve recuperação da energia proveniente do aumento da temperatura na compressão de corrente gasosa. Ainda, outro aspecto pouco intuitivo que se observou foi a mudança de identidade térmica da corrente s_1 no estudo de caso 2, que iniciou fria sendo aquecida para expansão e, no último estágio, tornou-se quente, sendo resfriada até sua temperatura final.

Como proposta para investigações futuras, sugere-se implementar equações de estado de gases não-ideais para melhor descrever a capacidade calorífica, a variação da temperatura com a pressão e o cálculo do trabalho de compressão e expansão nos problemas de RTCT. Seria, também, importante a investigação da síntese e otimização da RTCT que considere os impactos ambientais ou controlabilidade da RTCT juntamente com a análise econômica. Outra investigação que seria proveitosa seria aplicar a presente metodologia em problemas de *retrofit* de RTCT.

REFERÊNCIAS

- ASPELUND, A.; BERSTAD, D. O.; GUNDERSEN, T. An Extended Pinch Analysis and Design procedure utilizing pressure based exergy for subambient cooling. **Applied Thermal Engineering**, v. 27, n. 16, p. 2633–2649, nov. 2007.
- ATHIER, G. et al. Process optimization by simulated annealing and NLP procedures. Application to heat exchanger network synthesis. **Computers & Chemical Engineering**, v. 21, p. S475–S480, 20 maio 1997.
- BJÖRK, K.-M.; WESTERLUND, T. Global optimization of heat exchanger network synthesis problems with and without the isothermal mixing assumption. **Computers & Chemical Engineering**, v. 26, n. 11, p. 1581–1593, nov. 2002.
- COUPER, J. R.; PENNEY, W. R.; FAIR, J. R. **Chemical process equipment : selection and design**. 3. ed. Oxford: Elsevier/Butterworth-Heinemann, 2012.
- DOLAN, W. B.; CUMMINGS, P. T.; LEVAN, M. D. Process optimization via simulated annealing: Application to network design. **AIChE Journal**, v. 35, n. 5, p. 725–736, 1 maio 1989.
- FLOUDAS, C. A.; CIRIC, A. R.; GROSSMANN, I. E. Automatic synthesis of optimum heat exchanger network configurations. **AIChE Journal**, v. 32, n. 2, p. 276–290, 1986.
- FU, C.; GUNDERSEN, T. Integrating expanders into heat exchanger networks above ambient temperature. **AIChE Journal**, v. 61, n. 10, p. 3404–3422, out. 2015a.
- FU, C.; GUNDERSEN, T. Integrating compressors into heat exchanger networks above ambient temperature. **AIChE Journal**, v. 61, n. 11, p. 3770–3785, 1 nov. 2015b.
- FU, C.; GUNDERSEN, T. Sub-ambient heat exchanger network design including expanders. **Chemical Engineering Science**, v. 138, p. 712–729, dez. 2015c.
- FU, C.; GUNDERSEN, T. Sub-ambient heat exchanger network design including compressors. **Chemical Engineering Science**, v. 137, p. 631–645, dez. 2015d.
- FU, C.; GUNDERSEN, T. Heat and work integration: Fundamental insights and applications to carbon dioxide capture processes. **Energy Conversion and Management**, v. 121, p. 36–48, ago. 2016a.
- FU, C.; GUNDERSEN, T. Correct integration of compressors and expanders in above ambient heat exchanger networks. **Energy**, v. 116, p. 1282–1293, dez. 2016b.
- FU, C.; VIKSE, M.; GUNDERSEN, T. Work and heat integration: An emerging research area. **Energy**, v. 158, p. 796–806, set. 2018.
- GUNDERSEN, T.; BERSTAD, D. O.; ASPELUND, A. Extending pinch analysis and Process

- integration into Pressure and Fluid phase considerations. **Chemical Engineering Transactions**, v. 18, p. 33–38, 2009.
- HOLIASTOS, K.; MANOUSIOUTHAKIS, V. Minimum hot/cold/electric utility cost for heat exchange networks. **Computers & Chemical Engineering**, v. 26, n. 1, p. 3–16, 15 jan. 2002.
- HUANG, K.; KARIMI, I. A. Work-heat exchanger network synthesis (WHENS). **Energy**, v. 113, p. 1006–1017, 2016.
- INTERNATIONAL ENERGY AGENCY. **World Energy Balances 2018**. Paris, France: OECD, 2018.
- KENNEDY, J.; EBERHART, R. **Particle swarm optimization**. Proceedings of ICNN'95 - International Conference on Neural Networks. **Anais...IEEE**, 1995. Disponível em: <<http://ieeexplore.ieee.org/document/488968/>>
- KIRKPATRICK, S.; GELATT, C. D.; VECCHI, M. P. Optimization by Simulated Annealing. **Science**, v. 220, n. 4598, p. 671–680, 13 maio 1983.
- LEWIN, D. R. A generalized method for HEN synthesis using stochastic optimization — II.: The synthesis of cost-optimal networks. **Computers & Chemical Engineering**, v. 22, n. 10, p. 1387–1405, 20 set. 1998.
- LINNHOFF, B.; DHOLE, V. R. Shaftwork targets for low-temperature process design. **Chemical Engineering Science**, v. 47, n. 8, p. 2081–2091, 1 jun. 1992.
- LINNHOFF, B.; HINDMARSH, E. The pinch design for the heat exchanger networks. **Chemical Engineering Science**, v. 38, n. 5, p. 745–763, 1982.
- NAIR, S. K.; NAGESH RAO, H.; KARIMI, I. A. Framework for work-heat exchange network synthesis (WHENS). **AIChE Journal**, v. 64, n. 7, p. 2472–2485, 1 jul. 2018.
- ONISHI, V. C. et al. Multi-objective synthesis of work and heat exchange networks: Optimal balance between economic and environmental performance. **Energy Conversion and Management**, v. 140, p. 192–202, maio 2017.
- ONISHI, V. C. et al. Optimal synthesis of work and heat exchangers networks considering unclassified process streams at sub and above-ambient conditions. **Applied Energy**, v. 224, p. 567–581, ago. 2018.
- ONISHI, V. C.; RAVAGNANI, M. A. S. S.; CABALLERO, J. A. Simultaneous synthesis of heat exchanger networks with pressure recovery: Optimal integration between heat and work. **AIChE Journal**, v. 60, n. 3, p. 893–908, mar. 2014a.
- ONISHI, V. C.; RAVAGNANI, M. A. S. S.; CABALLERO, J. A. Simultaneous synthesis of work exchange networks with heat integration. **Chemical Engineering Science**, v. 112, p. 87–107, jun. 2014b.

- ONISHI, V. C.; RAVAGNANI, M. A. S. S.; CABALLERO, J. A. Retrofit of heat exchanger networks with pressure recovery of process streams at sub-ambient conditions. **Energy Conversion and Management**, v. 94, p. 377–393, abr. 2015.
- PAPOULIAS, S. A.; GROSSMANN, I. E. A structural optimization approach in process synthesis-II. Heat recovery networks. **Computers and Chemical Engineering**, v. 7, n. 6, p. 707–721, 1983.
- PAVÃO, L. V. et al. Large-scale heat exchanger networks synthesis using simulated annealing and the novel rocket fireworks optimization. **AIChE Journal**, v. 63, n. 5, p. 1582–1601, maio 2017.
- PAVÃO, L. V.; COSTA, C. B. B.; RAVAGNANI, M. A. DA S. S. Automated heat exchanger network synthesis by using hybrid natural algorithms and parallel processing. **Computers & Chemical Engineering**, v. 94, p. 370–386, nov. 2016.
- PAVÃO, L. V.; COSTA, C. B. B.; RAVAGNANI, M. A. S. S. Heat Exchanger Network Synthesis without stream splits using parallelized and simplified simulated Annealing and Particle Swarm Optimization. **Chemical Engineering Science**, v. 158, p. 96–107, fev. 2017.
- PAVÃO, L. V.; COSTA, C. B. B.; RAVAGNANI, M. A. S. S. An Enhanced Stage-wise Superstructure for Heat Exchanger Networks Synthesis with New Options for Heaters and Coolers Placement. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 57, n. 7, p. 2560–2573, 21 fev. 2018.
- PAVÃO, L. V.; COSTA, C. B. B.; RAVAGNANI, M. A. S. S. A new framework for work and heat exchange network synthesis and optimization. **Energy Conversion and Management**, v. 183, p. 617–632, mar. 2019.
- POSADA, A.; MANOUSIOUTHAKIS, V. Heat and Power Integration of Methane Reforming Based Hydrogen Production. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 44, n. 24, p. 9113–9119, nov. 2005.
- RAVAGNANI, M. A. S. S. et al. Heat exchanger network synthesis and optimisation using genetic algorithm. **Applied Thermal Engineering**, v. 25, n. 7, p. 1003–1017, maio 2005.
- RAZIB, M. S.; HASAN, M. M. F.; KARIMI, I. A. Preliminary synthesis of work exchange networks. **Computers & Chemical Engineering**, v. 37, p. 262–277, fev. 2012.
- SHI, Y.; EBERHART, R. C. Parameter selection in particle swarm optimization. In: Berlin, Heidelberg: Springer, Berlin, Heidelberg, 1998. p. 591–600.
- TOWNSEND, D. W.; LINNHOFF, B. Heat and power networks in process design. Part I: Criteria for placement of heat engines and heat pumps in process networks. **AIChE Journal**, v. 29, n. 5, p. 742–748, set. 1983.

TURTON, R. et al. **Analysis, Synthesis and Design of Chemical Processes**. Upper Saddle River, New Jersey, United States: Prentice Hall, 2012.

WECHSUNG, A. et al. Synthesis of heat exchanger networks at subambient conditions with compression and expansion of process streams. **AIChE Journal**, v. 57, n. 8, p. 2090–2108, 1 ago. 2011.

YEE, T. F.; GROSSMANN, I. E. Simultaneous optimization models for heat integration—II. Heat exchanger network synthesis. **Computers & Chemical Engineering**, v. 14, n. 10, p. 1165–1184, out. 1990.

YOON, H.-J. A. **Heat and work integration in the synthesis of chemical plants**. Tese de Doutorado em Engenharia Química. Massachusetts Institute of Technology, 1990.

ZAMORA, J. M.; GROSSMANN, I. E. A comprehensive global optimization approach for the synthesis of heat exchanger networks with no stream splits. **Computers & Chemical Engineering**, v. 21, p. S65–S70, maio 1997.

ZHAOYI, H. et al. Simultaneous synthesis of structural-constrained heat exchanger networks with and without stream splits. **Canadian Journal of Chemical Engineering**, v. 91, n. 5, p. 830–842, 2013.