

## Síntese de Redes de Trocadores de Calor com Modelagem Termodinâmica Adaptativa por Partes Lineares

Carlos Henrique Vassoler<sup>1</sup>, Mauro Antonio da Silva Sá Ravagnani<sup>2</sup>, Leandro Vitor Pavão<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Aluno do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química - Universidade Estadual de Maringá, Maringá, PR (carloshtvassoler@gmail.com)

<sup>2</sup>Professor do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química – Universidade Estadual de Maringá, Maringá, PR

**Resumo:** Este trabalho apresenta uma metodologia para síntese de redes de trocadores de calor baseada em uma modelagem termodinâmica adaptativa de divisão por partes lineares. A abordagem utiliza metaheurísticas para otimização, além de permitir mistura não isotérmica. No caso de estudo selecionado, mostrou-se que assumir propriedades constantes pode gerar desvios de até 14% no custo de capital. Por fim, os resultados obtidos se aproximaram das metas de projeto dadas pela Análise Pinch.

**Palavras-chave:** Integração Energética; Redes de Trocadores de Calor; Modelagem Termodinâmica por Partes Lineares; Otimização; Metaheurísticas.

### INTRODUÇÃO

Um dos passos essenciais na síntese de processos é a integração energética. Por meio dessa, é possível reduzir custos de investimento e operação para plantas industriais, além de impactos ambientais. A integração energética aborda a síntese de redes de trocadores de calor (RTC), bem como o dimensionamento detalhado das unidades de troca térmica, os chamados trocadores de calor (TC).

Métodos para a síntese de RTC são encontrados na literatura, e evoluíram de abordagens baseadas na experiência do projetista, para regras heurísticas e abordagens computacionais de otimização. Os estudos de Linnhoff e seus colaboradores, como em Linnhoff e Hindmarsh (1983), levaram ao desenvolvimento da Análise Pinch, que fornece metas energéticas para uma RTC, além de heurísticas para atingir essas metas.

Abordagens de otimização computacionais foram altamente exploradas, como a modelagem de superestrutura proposta por Yee e Grossmann (1990), chamada *Stage-Wise Superstructure* (SWS). Os estudos mais recentes usam principalmente de metaheurísticas, que apesar de não garantir um resultado ótimo global, fornecem resultados competitivos em tempo satisfatório, como os apresentados por Pavão et al. (2017).

Uma das principais considerações utilizada nos estudos acerca de RTC é que a relação temperatura-entalpia dos fluidos é linear, ou seja, considera-se que a capacidade calorífica específica ( $cp$ ) dos

mesmos é constante. Em muitos casos, considerar  $cp$  constante é razoável. Porém, para fluidos em regiões críticas, misturas em mudança de fase, entre outros casos, pode-se obter resultados não representativos.

Um dos métodos para modelar uma relação não-linear, como a de temperatura-entalpia, é a divisão por partes lineares. Com ele, a complexidade computacional é reduzida tanto na busca por um ponto específico na curva, quanto em cálculos específicos de TC, já que para cada parte linear, as equações de projeto de TC que consideram  $cp$  constante podem ser utilizadas.

Pavão et al. (2023) utilizaram a estratégia de divisão por partes lineares aplicada à Análise Pinch, a fim de determinar metas energéticas e custos para RTC, com resultados promissores. Os autores aplicaram os casos de estudo em simuladores de processo, determinando os pontos das curvas de temperatura-entalpia a partir de uma quantidade fixa de intervalos. Entretanto, como algumas correntes apresentavam comportamento aproximadamente linear, não havia necessidade de utilizar um número elevado de pontos para sua representação, o que aumentava desnecessariamente o esforço computacional e prejudicava a velocidade de execução do algoritmo.

A fim de obter resultados representativos e não idealizados, foi proposta neste trabalho uma modelagem adaptativa de divisão por partes lineares das curvas de temperatura-entalpia baseada no parâmetro estatístico  $R^2$  e aplicada na síntese e otimização de RTC. A abordagem considera a otimização por meio da hibridização de

metaheurísticas SARFO, proposta por Pavão et al. (2017). Finalmente, foi considerada a presença de múltiplas utilidades, bem como mistura não-isotérmica das divisões de correntes.

## MATERIAL E MÉTODOS

Esta seção apresenta a formulação matemática e abordagem de otimização proposta para este trabalho. A modelagem termodinâmica de propriedades é pautada no coeficiente de determinação ( $R^2$ ), enquanto a RTC é modelada considerando a SWS. Por fim, a abordagem de otimização foi desenvolvida com base no SARFO.

A Figura 1 representa o procedimento de divisão de uma curva em partes lineares. Os pontos da curva são adicionados sequencialmente enquanto o valor mínimo para o parâmetro  $R^2$  é atendido. Quando essa condição deixa de ser satisfeita, o intervalo é encerrado e um novo é iniciado a partir do último ponto válido, garantindo a continuidade da curva. O processo é repetido até sua completa segmentação.

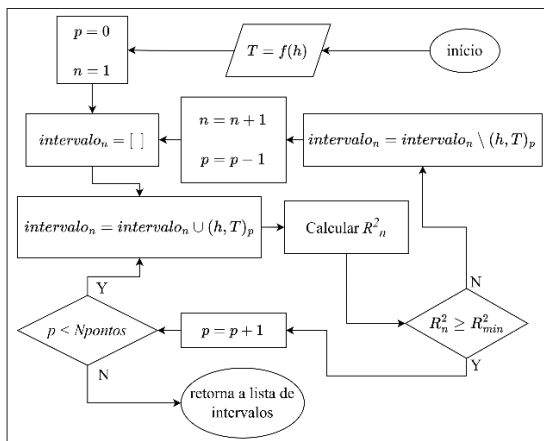


Figura 1. Diagrama ilustrando a divisão por partes lineares de uma curva.

A Figura 2 representa o procedimento de interpolação linear por partes (LPI). Dado um valor  $x$  no domínio de uma curva, objetiva-se determinar o respectivo  $y$  na sua imagem em tempo satisfatório. Para isso, é necessário conhecer os limites superior e inferior dos intervalos ( $ub$  e  $lb$ , respectivamente).

Com essa estratégia, mesmo utilizando uma grande quantidade de pontos para cada fluido nos casos de estudo, o tempo de execução continua baixo, visto que o número de iterações é determinado pela quantidade de intervalos lineares, e não por todos os pontos da curva.

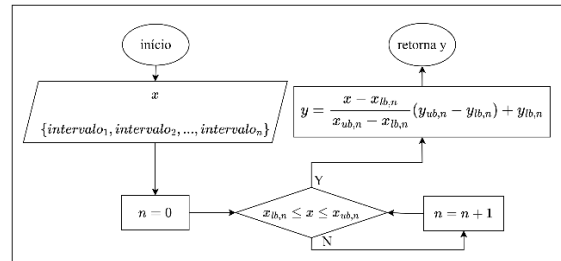


Figura 2. Diagrama da interpolação por partes lineares.

O processo representado na Figura 2 é utilizado para o cálculo da temperatura pós troca térmica, tanto em um TC específico, quanto em um estágio da SWS. Dada uma temperatura de entrada, sua entalpia específica é obtida por meio da LPI na curva de  $h = f(T)$ . A esse valor, adiciona-se a variação da entalpia específica na troca térmica, dada pela Eq. (1). Por fim, obtida a entalpia específica após a troca térmica, utiliza-se novamente uma LPI, agora na curva de  $T = f(h)$ .

$$\Delta h = \frac{Q}{w F} \quad (1)$$

onde  $\Delta h$  é a variação de entalpia,  $Q$  é a carga térmica,  $w$  é a vazão molar e  $F$  a fração da vazão molar da corrente no estágio.

Para a variação de entalpia em estágios,  $Q$  é a soma das cargas térmicas de todos os TC da corrente no estágio, enquanto  $F$  é igual a 1. Por fim, para correntes quentes, utiliza-se uma variação de entalpia negativa, enquanto para as frias, positiva.

Após as trocas de calor entre correntes de processo, elas podem não ter atingido a temperatura objetivo. Nesses casos, as demandas energéticas podem ser supridas com utilidades, e esse valor é calculado utilizando a Eq. (2).

$$Qu = w|h_0 - h_f| - \sum Q \quad (2)$$

onde  $Qu$  é a demanda a ser suprida/exaurida com utilidades,  $h_0$  e  $h_f$  são, respectivamente, as entalpias de abastecimento e objetivo da corrente.

O procedimento para cálculo da área de troca térmica dos TC está representado na Figura 3. Inicialmente, avaliam-se os intervalos lineares das correntes quente e fria na extremidade fria do trocador. Quando os

intervalos possuem diferentes cargas térmicas, o de maior valor é subdividido, permitindo a aplicação da equação de projeto para cada par de segmentos lineares equivalentes. O procedimento é repetido sucessivamente até que toda a carga térmica do trocador seja percorrida, sendo a área total obtida pela soma das áreas calculadas em cada intervalo.

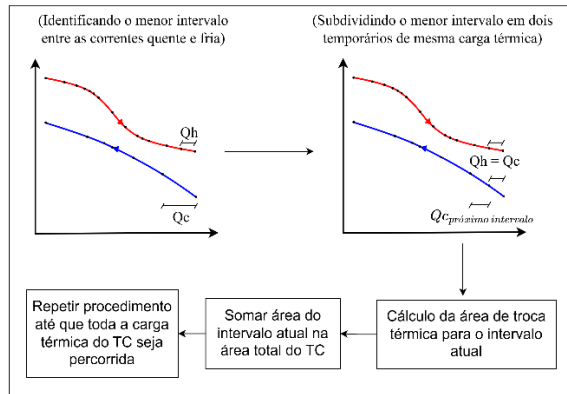


Figura 3. Diagrama para cálculo de área de troca térmica.

Para o cálculo de área de troca térmica ( $A$ ), utiliza-se a Eq. (3), com o coeficiente global de troca térmica ( $U$ ) dado pela Eq. (4), e a média logarítmica das diferenças de temperatura ( $MLDT$ ) pelas Eq. (5) e (6).

$$A = \frac{Q}{U MLDT} \quad (3)$$

$$U = \left( \frac{1}{hh} + \frac{1}{hc} \right)^{-1} \quad (4)$$

Quando as diferenças de temperaturas no terminal quente ( $\Delta T_1$ ) e frio ( $\Delta T_2$ ) não são iguais, utiliza-se a Eq. (5) para o cálculo da  $MLDT$ .

$$MLDT = \frac{\Delta T_1 - \Delta T_2}{\ln \frac{\Delta T_1}{\Delta T_2}} \quad (5)$$

Caso contrário, a fim de evitar indeterminações matemáticas, utiliza-se a Eq. (6).

$$MLDT = \Delta T_1 \quad (6)$$

onde  $hh$  e  $hc$  são os coeficientes de película das correntes quente e fria, respectivamente.

Para o cálculo dos custos de capital ( $CC$ ), utiliza-se a Eq. (7), que considera um custo fixo de instalação  $b$ , um coeficiente de área  $c$  e um expoente de área  $\beta$ .

$$CC = b + c A^\beta \quad (7)$$

Já os custos operacionais ( $COP$ ) são dados pela Eq. (8), que considera um fator de custo operacional ( $C$ ) específico para cada utilidade.

$$COP = Qu C \quad (8)$$

A abordagem de otimização visa minimizar o custo total anualizado ( $TAC$ ) da RTC, dado pela soma dos  $CC$  de todos os TC, bem como os  $COP$  das utilidades. A função objetivo foi representada na Eq. (9).

$$\min: TAC = \sum CC + \sum COP \quad (9)$$

A garantia da viabilidade dos resultados foi feita utilizando restrições e penalizações lineares na função objetivo quando elas fossem quebradas. As restrições consistem em limites para as variáveis de fração de divisão dos ramos, que deve se situar entre 0 e 1, somatório das frações dos ramos de cada corrente em cada estágio, que deve ser igual a 1 e diferença de temperaturas nos terminais dos intervalos maior que 0, para garantir a força motriz de troca térmica.

A topologia da RTC é proposta no nível externo utilizando-se o método Simulated Annealing (SA), por meio da adição, remoção ou substituição de TC TC em posição aleatória a cada iteração. Nesta, as variáveis contínuas são otimizadas utilizando-se o Rocket Fireworks Optimization (RFO). Dessa forma, cada topologia proposta via SA é avaliada com as melhores variáveis contínuas possíveis. Vale ressaltar que, caso a adição do TC não seja suficiente para que todas as correntes atinjam sua temperatura objetivo, as demandas energéticas restantes são supridas com utilidades.

Para verificar a aplicabilidade da metodologia desenvolvida, foi selecionado um caso de estudo de Pavão et al. (2023), São cinco correntes de processo compostas por misturas binárias de hidrocarbonetos em região de mudança de fase, além de duas utilidades. Seus dados foram representados na Tabela 1.3

Tabela 1. Dados das correntes do caso de estudo.

| Corrente/<br>Mistura | Composição                        | w<br>(mol/s) | P<br>(bar) | T0<br>(K) | Tf<br>(K) |
|----------------------|-----------------------------------|--------------|------------|-----------|-----------|
| 1                    | 90% n-heptano<br>10% n-octadecano | 12           | 3          | 505       | 415       |
| 2                    | 5% n-butano<br>95% n-heptano      | 35           | 4          | 415       | 370       |
| 3                    | 50% etano<br>50% n-heptano        | 13           | 2          | 370       | 225       |
| 4                    | 10% etano<br>90% n-heptano        | 10           | 8          | 355       | 495       |
| 5                    | 10% etano<br>90% n-heptano        | 15           | 2          | 210       | 400       |
| UQ                   | H <sub>2</sub> O (vapor)          | -            | 32         | 511       | 510       |
| UF                   | H <sub>2</sub> O (líquido)        | -            | 1          | 305       | 320       |

Para cada corrente, foram gerados 4001 pontos para a curva de  $T = f(h)$ , utilizando o software Aspen Plus V10. Para tal, a fim de comparar os resultados com os obtidos por Pavão et al. (2023), utilizou-se o pacote termodinâmico *Soave-Redlich-Kwong* para correntes de processo, e IAPWS-95 para as utilidades.

Os dados foram extrapolados em 100 K além da temperatura objetivo, a fim de atender os casos de divisões de corrente que fazem um ramo ultrapassar essa temperatura, mas retornar aos limites após o misturador. Já para a consideração de  $c_p$  constante, não houve extrapolação de dados, apenas foram gerados pontos nas temperaturas de abastecimento e objetivo.

O parâmetro definido para  $R^2_{min}$  foi de 0,99 para os intervalos com menos de 150 pontos, e 0,9999 para os demais. Essa estratégia permite que se obtenham intervalos com grande número de pontos apenas em casos de alta confiabilidade, mas também evita divisão excessiva, favorecendo o tempo de execução de algoritmos.

Por fim, os parâmetros de otimização aplicados na metodologia SARFO foram representados na Tabela 2, e foram determinados baseado em experiências anteriores com outros casos de estudo.

Tabela 2. Parâmetros de otimização.

| SA                             | CSA                            | PSO                  |
|--------------------------------|--------------------------------|----------------------|
| <b>T0</b> 10.000               | <b>T0</b> 10.000               | <b>Partículas</b> 50 |
| <b>Tf</b> 100                  | <b>Tf</b> 7.000                | <b>Iterações</b> 20  |
| <b>L</b> 200                   | <b>L</b> 20                    | <b>c1</b> 1,1        |
| <b><math>\alpha</math></b> 0,5 | <b><math>\alpha</math></b> 0,5 | <b>c2</b> 1,1        |

## RESULTADOS E DISCUSSÃO

Os dados gerados no simulador, bem como a divisão por partes lineares obtida estão representadas na Figura 4. Nela, as linhas de menor opacidade representam a consideração de  $c_p$  constante.

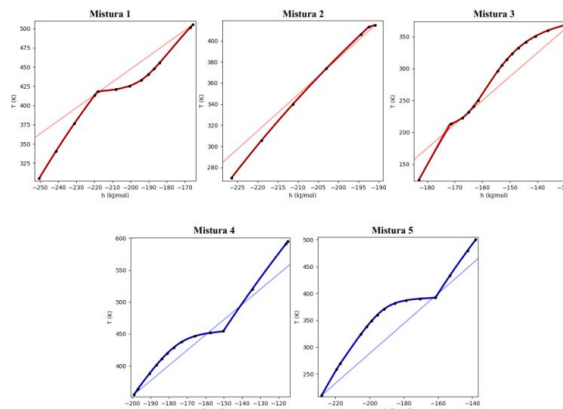


Figura 4. Curvas de  $T = f(h)$  para os fluidos do caso de estudo.

Conforme mostrado, há um comportamento não linear bem pronunciado para a maioria dos fluidos. Nas regiões de maior não-linearidade, nota-se um aumento na densidade de intervalos. Além disso, nos dados extrapolados, que vão além da mudança de fase, há um comportamento linear, conforme esperado.

A rede de modelagem rigorosa obtida com aplicação da metodologia SARFO foi representada na Figura 5.

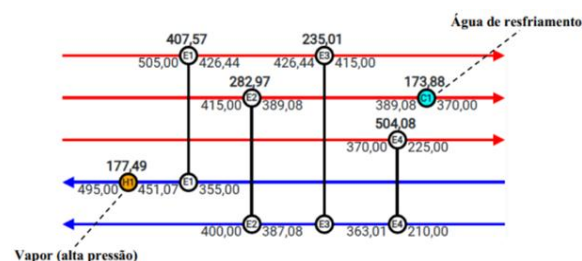


Figura 5. RTC obtidas para o caso de estudo.

O algoritmo desenvolvido em linguagem de programação Python e executado em um computador equipado com um processador Ryzen 5 5500 e com 32 GB de RAM resultou em tempos de execução de até 10 minutos para esse caso de estudo, com convergência atingida nos primeiros 3 minutos. Isso mostra que os parâmetros de otimização representados na Tabela 2 foram superdimensionados, de modo que o resultado foi obtido antes da metade da execução do algoritmo.

Para o resultado apresentado, obteve-se um CC de \$111.320/ano e um COP de \$35.339/ano, e, portanto, um TAC de \$146.659/ano. Os dados dos trocadores de calor da Figura 5 estão representados na Tabela 3.

Tabela 3. Dados dos TC da RTC obtida.

| TC           | Q<br>(kW) | A<br>(m <sup>2</sup> ) | CC<br>(\$/ano) | COP<br>(\$/ano) | TAC<br>(\$/ano) |
|--------------|-----------|------------------------|----------------|-----------------|-----------------|
| E1           | 407,57    | 194,25                 | 18.885         | 0               | 18.885          |
| E2           | 282,97    | 626,36                 | 27.527         | 0               | 27.527          |
| E3           | 235,01    | 110,05                 | 17.201         | 0               | 17.201          |
| E4           | 504,08    | 512,74                 | 25.255         | 0               | 25.255          |
| H1           | 177,49    | 88,89                  | 10.889         | 34.412          | 45.301          |
| C1           | 173,88    | 52,12                  | 11.563         | 927             | 12.490          |
| <b>TOTAL</b> | <b>-</b>  | <b>-</b>               | <b>111.320</b> | <b>35.339</b>   | <b>146.659</b>  |

O melhor resultado por Análise Pinch obtido por Pavão et al. (2023) foi de \$132.202/ano, que é 10% menor do que o obtido neste trabalho. Uma das justificativas para tal diferença é que a Análise Pinch considera que a área de troca térmica se distribui igualmente entre as unidades de troca térmica. Porém, conforme demonstrado na Tabela 3, essa distribuição é altamente desigual.

Além disso, com a modelagem não-linear de temperatura-entalpia, pode haver cruzamento de temperaturas no interior dos equipamentos, mesmo que nos terminais do TC não haja, diferente do caso ideal.

Uma vez que a síntese da RTC se torna uma tarefa mais complicada com a modelagem rigorosa, atingir as proximidades da solução de máxima recuperação energética obtida pela Análise Pinch é dificultada.

A Figura 6 representa o perfil de cada um dos TC obtidos para a RTC da Figura 5. Nela, a metodologia de cálculo de área utilizando divisão por partes foi demonstrada satisfatoriamente, de forma que são visualizados cada par de intervalos quente e frio de

mesma carga térmica, e as temperaturas de seus terminais, que tornam possível, portanto, o cálculo da área de troca térmica pela equação de projeto de TC.

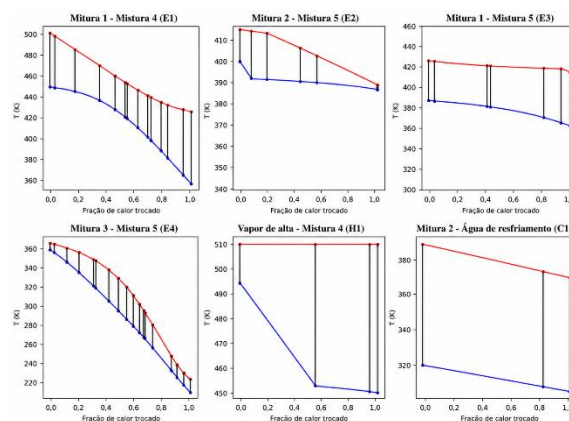


Figura 6. Perfis dos TC obtidos.

A mesma topologia e variáveis contínuas apresentada na Figura 5 foi submetida aos cálculos de RTC para a modelagem de  $cp$  constante. Com isso, obteve-se um CC de \$96.175/ano e mesmo COP, visto que a carga térmica das utilidades permanece inalterada. Portanto, para  $cp$  constante, obteve-se um TAC de \$131.514/ano.

O CC obtido considerando  $cp$  constante é \$15.145/ano menor do que para a modelagem de divisão por partes lineares, o que representa aproximadamente 14% em relação ao CC, e 10% em relação ao TAC.

Portanto, a modelagem rigorosa levou a aproximações das temperaturas das correntes nos TC da Figura 6, ou seja, houve diminuição na força motriz de troca térmica, que resultou em um aumento na área necessária para que as correntes atingissem a mesma temperatura final, e, portanto, um maior CC.

## CONCLUSÃO

Neste trabalho foi apresentada uma abordagem para a síntese de RTC que incorpora a modelagem não ideal das propriedades termodinâmicas por meio de divisões por partes lineares da curva de temperatura-entalpia, guiada pelo parâmetro estatístico  $R^2$ .

Por meio da hibridização de metaheurísticas SARFO, o método foi capaz de tratar de forma eficiente tanto os aspectos combinatórios quanto os contínuos do problema. Os resultados obtidos para o caso de estudo evidenciaram o impacto do comportamento não linear no projeto de RTC. Foi encontrada uma diferença de aproximadamente 14% para o CC e 10%



para o TAC quando comparados os resultados ideais e não ideais.

Além disso, a abordagem de otimização mostrou-se capaz de encontrar soluções com custos anuais totalizados (TAC) próximos às metas estabelecidas pela Análise Pinch. A integração da modelagem termodinâmica não apenas reduziu erros de aproximação, mas também proporcionou representações mais realistas de cenários industriais.

Dessa forma, a abordagem proposta representa um avanço no estado da arte da síntese de RTC ao equilibrar precisão e desempenho computacional. Os resultados reforçam a importância de considerar o comportamento termodinâmico em estudos de integração de processos e demonstram o potencial da hibridização de metaheurísticas para a resolução de problemas complexos em integração energética.

#### AGRADECIMENTOS

Os autores são gratos pelo apoio financeiro do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq), processos 406544/2023-9, 309026/2022-9, bem como da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) (Brasil; identificador ROR: 00x0ma614), código de financiamento 001.

#### REFERÊNCIAS

LINNHOFF, B.; HINDMARSH, E. The pinch design method for heat exchanger networks. **Chemical Engineering Science**, v. 38, n. 5, 1983.

PAVÃO, Leandro Vitor *et al.* Large-scale heat exchanger networks synthesis using simulated annealing and the novel rocket fireworks optimization. **AIChE Journal**, v. 63, n. 5, 2017.

PAVÃO, Leandro V.; COSTA, Caliane B. B.; RAVAGNANI, Mauro A. S. S. Multiple utilities targeting in energy integration considering rigorous temperature-enthalpy relations. **Chemical Engineering Science**, v. 276, 2023.

YEE, T. F.; GROSSMANN, I. E. Simultaneous optimization models for heat integration-II. Heat exchanger network synthesis. **Computers and Chemical Engineering**, v. 14, n. 10, 1990.