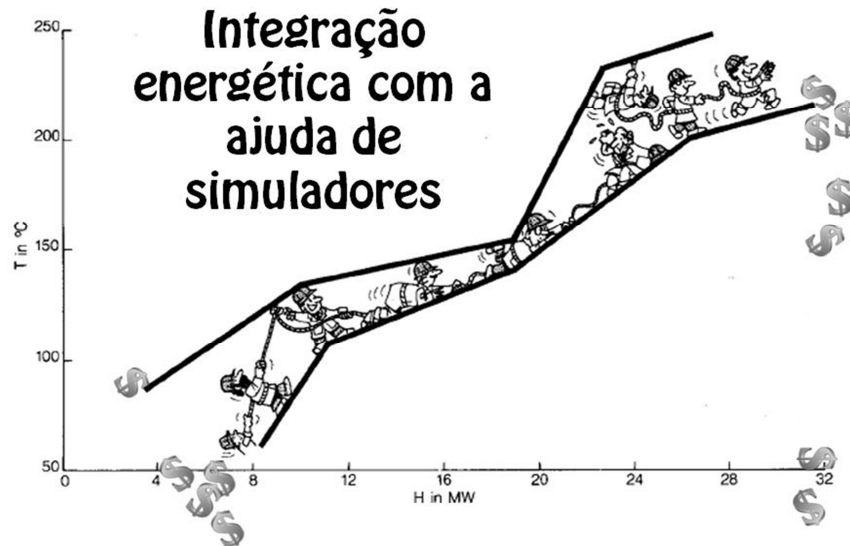




INSTITUTO SUPERIOR DE ENGENHARIA DE LISBOA

Área Departamental de Engenharia Química

ISEL



Aplicação de Ferramentas de Simulação de Processos

Jorge Miguel Barata Farinha Rafael
(Licenciado)

Trabalho Final de Mestrado para obtenção do grau de Mestre
em Engenharia Química

Júri:

Presidente:

Doutor José Augusto Paixão Coelho

Vogais:

Doutor Henrique Aníbal Santos de Matos (Arguente)

Doutor Rui Manuel Gouveia Filipe

Doutor João Miguel Silva (Orientador)

Mestre Teodoro José Trindade (Orientador)

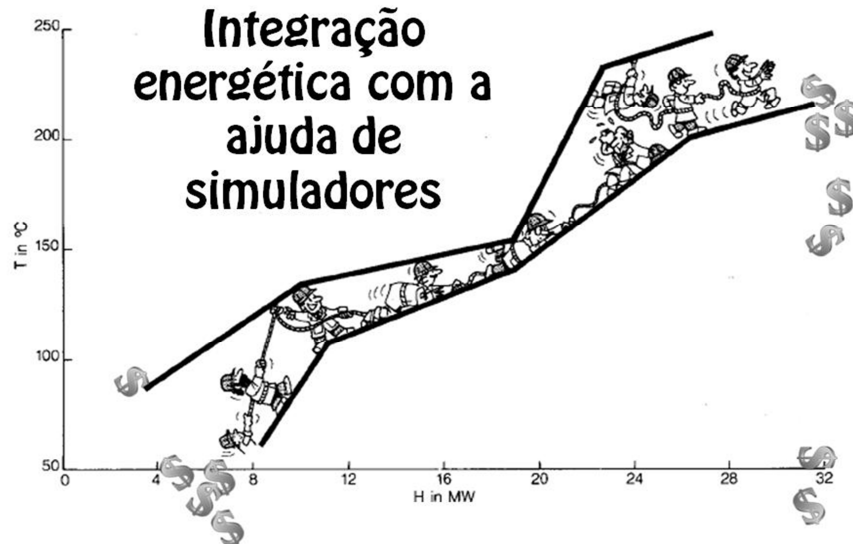
Setembro de 2011



ISEL

INSTITUTO SUPERIOR DE ENGENHARIA DE LISBOA

Área Departamental de Engenharia Química



Aplicação de Ferramentas de Simulação de Processos

Jorge Miguel Barata Farinha Rafael
(Licenciado)

Trabalho Final de Mestrado para obtenção do grau de Mestre
em Engenharia

Júri:

Presidente:

Doutor José Augusto Paixão Coelho

Vogais:

Doutor Henrique Aníbal Santos de Matos (Arguente)

Doutor Rui Manuel Gouveia Filipe

Doutor João Miguel Silva (Orientador)

Mestre Teodoro José Trindade (Orientador)

Setembro de 2011

Agradecimentos

Em primeiro lugar gostaria de agradecer à minha família por todo o apoio que permitiu a realização deste trabalho. Quero também agradecer aos meus orientadores, Professor João Silva e ao Professor Teodoro Trindade, pelo facto de estarem sempre dispostos a ajudar.

A todos o meu sincero obrigado.

Resumo

Este trabalho foi efectuado com o propósito de interpretar, compreender e explicar algumas ferramentas de simulação de processos, em particular o Aspen Energy Analyzer (AEA), o Aspen Economic Evaluation (AEE) e o seu funcionamento integrado com o Aspen Hysys (AH).

O AH é uma ferramenta de modelação de processos para a concepção de projectos de engenharia química, o AEA é uma ferramenta de modelação de redes de integração energética. O AEE integrado no AH é uma ferramenta que permite incorporar estudos económicos numa fase preliminar do desenvolvimento de um projecto de engenharia.

A abordagem a este trabalho foi efectuada através do estudo de Casos.

O Caso I foi baseado na resolução de um problema no AEA através da construção e optimização de uma rede de permutadores de calor. Os Casos II e III foram baseados na construção de um *flowsheet* de produção de Benzeno e de Cloreto de Vinil, respectivamente, e cada Caso foi dividido em dois cenários diferentes. Para o efeito foram utilizados os softwares AEA para a integração energética dos processos, o AH para construção do fluxograma do processo e o AEE para os estudos económicos dos diferentes cenários.

Finalmente, os Casos IV e V dizem respeito à resolução de um problema de integração energética. O Caso IV foi baseado num problema de optimização da rede de permutadores através do aumento da sua área. Já o Caso V foi baseado na informação inicial das correntes do caso anterior e em dois cenários diferentes, nos quais foi estudada a influência dos preços das utilidades na construção da rede de permutadores.

A conclusão foi que as ferramentas de modelação, particularmente o AH, o AEA e o AEE são uma mais-valia extraordinária para ajudar o utilizador na tomada de decisões em fases bastante preliminares da engenharia de processos.

Palavras-chave: Aspen Hysys, Aspen Energy Analyzer, Aspen Economic Evaluation, integração energética, modelação, simulação.

Abstract

This thesis aims to interpret, understand and explain some of the process simulation tools, in particular Aspen Energy Analyzer (EEA) and Aspen Economic Evaluation (AEE) integrated with the Aspen Hysys (AH).

AH is a modeling process tool for designing chemical engineering projects and AEA is a modeling tool for energy integration networks. The AEE integrated in AH allows the integration of rigorous economic studies at an early stage of the development of an engineering project.

This work comprises some case studies (examples).

Case I was based on solving a problem in AEA through the construction and optimization of a heat exchangers network. Cases II and III were based on the conception of a benzene and vinyl chloride flowsheet production, respectively, and each case was divided into two different scenarios. To this end we used the AEA softwares for process energy integration, AH to make a flow diagram process and AEE for economic studies of different scenarios.

Finally in Cases IV and V we try to solve an energy integration problem. Case IV was based on a hypothetical optimization problem of the heat exchangers network through the increase of its area. Case V was based on the initial information of the previous case streams and in two different scenarios, in which was studied the influence of utilities prices when making a heat exchangers network.

We conclude that modeling tools in particular AH, AEA and AEE are an extraordinary added value that helps the user in the decision-making process at an early stage of engineering processes.

Keywords: Aspen Hysys, Aspen Energy Analyzer, Aspen Economic Evaluation, heat integration, modeling, simulation.

Índice

Agradecimentos.....	3
Resumo	4
Abstract.....	5
Índice de Tabelas	7
Índice de Figuras	9
Lista de Símbolos	11
1. Introdução.....	12
1.1 Panorama energético actual.....	12
1.2 Integração energética (uma forma eficiente de utilizar energia)	15
1.3 Modelação/simulação na engenharia química	16
1.4 Aspen Hysys.....	17
1.5 Aspen Energy Analyzer	17
1.6 Aspen Economic Evaluation (Aspen Process Economic Analyzer)	18
2. Estudo de Casos	19
2.1. Objectivo	19
2.2. Caso I.....	20
2.3. Caso II.....	36
2.4. Caso III.....	55
2.5. Caso IV	63
2.6. Caso V	71
3. Conclusão.....	78
4. Referências.....	80
5. ANEXOS.....	82
5.1 Objectivos	82
5.2 Teoria e algoritmos.....	88
5.3 Casos.....	90

Índice de Tabelas

Tabela 1	Informação das correntes do processo do Caso I.....	21
Tabela 2	Informação das utilidades disponíveis do Caso I.....	21
Tabela 3	Parâmetros da lei de custos para os permutadores.....	21
Tabela 4	Custo das utilidades.....	21
Tabela 5	Descrição da função “Open Optimization View”.....	31
Tabela 6	Valores para o custo total anualizado do melhor design e poupanças através da opção de otimização.....	33
Tabela 7	Valores para o custo total anualizado do melhor design e poupanças através da opção de otimização.....	35
Tabela 8	Valores dos objectivos (“targets”) para as diferentes ΔT_{\min} do Caso II, Cenário A.....	39
Tabela 9	Objectivos energéticos para o cenário A e B.....	41
Tabela 10	Objectivos para as áreas de permuta para o cenário A e B.....	42
Tabela 11	Objectivos para o número de permutadores para o cenário A e B.....	43
Tabela 12	Objectivos para os custos do cenário A e B.....	43
Tabela 13	RPC “A_Design0” do cenário A.....	44
Tabela 14	Custos para a RPC “A_Design0-O” do cenário A.....	44
Tabela 15	Custos para a RPC “Design0-O” do cenário A.....	46
Tabela 16	Características de algumas correntes do processo para o cenário A.....	47
Tabela 17	Custos para a RPC inicial “Design0” do cenário B	47
Tabela 18	Custos para a RPC otimizada “Design0-O” do cenário B	47
Tabela 19	Custos para a RPC otimizada “Design0-O_Benzeno B” do cenário B.....	48
Tabela 20	Características de algumas correntes do processo para o cenário B	50
Tabela 21	Descrição dos ícones relativos à avaliação económica integrada.....	51
Tabela 22	Descrição do tipo de equipamento e material dos permutadores de calor	52
Tabela 23	Descrição do tipo de vasos e reactores.....	52
Tabela 24	Descrição do tipo de bombas e compressores.....	52
Tabela 25	Componentes da coluna de destilação T-101, tipo e material de construção.....	53
Tabela 26	Descrição do tipo de equipamento utilizado para cálculo integrado dos custos para cenário A.....	53
Tabela 27	Dados económicos para o cenário A, Caso II.....	53
Tabela 28	Descrição do tipo de equipamento utilizado para cálculo integrado dos custos para cenário B.....	54
Tabela 29	Dados económicos para o cenário B, Caso II.....	54
Tabela 30	Características de algumas correntes do processo de produção de cloreto de vinil.....	55
Tabela 31	Utilidades do caso III.....	56
Tabela 32	Custos para a RPC otimizada “Design2-O” para o Caso III.....	58
Tabela 33	Reactores, tipo e material de construção para o caso de estudo.....	59
Tabela 34	Permutadores, tipo e material de construção para o caso de estudo.....	60
Tabela 35	Componentes da coluna de destilação T-100, tipo e material de construção.....	60
Tabela 36	Componentes da coluna de destilação T-102, tipo e materiais de construção.....	60
Tabela 37	Estrutura de custos para equipamento que represente mais de 6% dos custos totais do cenário A.....	61
Tabela 38	Dados económicos para o cenário A, Caso III.....	61
Tabela 39	Materiais sugeridos para trabalho contínuo na presença de cloreto de hidrogénio gás.....	62
Tabela 40	Componentes da coluna de destilação T-100, tipo e material de construção do cenário B..	62
Tabela 41	Dados económicos para o cenário B, Caso III	62
Tabela 42	Custos directos totais para os cenários A e B.....	63
Tabela 43	Poupança/redução de custos do cenário B.....	63

Tabela 44	Temperaturas das correntes quentes do processo e as suas capacidades caloríficas médias.....	64
Tabela 45	Temperaturas das correntes frias do processo e as suas capacidades caloríficas médias..	64
Tabela 46	Permutadores existentes no processo do Caso IV.....	64
Tabela 47	Dados para o design 1-1A gerado em “retrofit mode”, com 10 mil € de investimento (Cenário A).....	67
Tabela 48	Poupança em custos operacionais e período de “payback”.....	67
Tabela 49	Dados para o design 1-9A gerado em “retrofit mode”, com 90 mil € de investimento (Cenário A).....	68
Tabela 50	Poupança em custos operacionais e período de “payback”.....	68
Tabela 51	Poupança em custos operacionais e período de “payback”, cenário A.....	68
Tabela 52	Custos relativos aos diversos investimentos para o cenário A.....	69
Tabela 53	Permutadores existentes para o projecto “Design 1-3A” do cenário A.....	70
Tabela 54	Comparação entre o Design 1 e o Design 1-3 A.....	70
Tabela 55	Preços das utilidades para o cenário A e B.....	71
Tabela 56	Objectivos entálpicos cenário A.....	71
Tabela 57	Objectivos para a área cenário A.....	71
Tabela 58	Objectivos n.º de unidades cenário A.....	71
Tabela 59	Objectivos para os custos cenário A.....	72
Tabela 60	Índice de custo da RPC “A_Design1_O” do cenário A.....	72
Tabela 61	Performance da RPC “A_Design1_O” do cenário A.....	72
Tabela 62	Permutadores entre correntes quentes e frias do design “A_Design1_O”, cenário A.....	73
Tabela 63	Objectivos entálpicos cenário B.....	74
Tabela 64	Objectivos para a área cenário B.....	74
Tabela 65	Objectivos n.º de unidades cenário B.....	75
Tabela 66	Objectivos para os custos cenário B.....	75
Tabela 67	Índice de custo da RPC “A_Design1_O” do cenário B.....	75
Tabela 68	Performance da RPC “A_Design1_O” do cenário B.....	75
Tabela 69	Permutadores da RPC do cenário A (utilidades mais caras).....	76
Tabela 70	Permutadores da RPC do cenário B (utilidades mais baratas).....	77
Tabela 71	Dados das utilidades para o Caso II, cenários A e B.....	88
Tabela 72	Preços das matérias-primas e dos produtos para o Caso II, cenários A e B.....	88
Tabela 73	Dados das utilidades para o Caso III, cenários A e B.....	88
Tabela 74	Preços das matérias-primas e dos produtos para o Caso III, cenários A e B.....	88

Índice de Figuras

Figura 1	Procura mundial de energia por combustível no cenário de referência 12.....	13
Figura 2	Emissões de CO2 por combustível e por região no cenário considerado.....	13
Figura 3	Evolução do preço do petróleo e previsões até 2035.....	14
Figura 4	Esquema do processo químico do Caso I.....	20
Figura 5	Pasta do Aspen Energy Analyzer e a sequência de pastas até ao “template”.....	22
Figura 6	Ícone do Aspen Energy Analyzer.....	22
Figura 7	Tela ao aceder ao Aspen Energy Analyzer.....	22
Figura 8	Tela do Aspen Energy Analyzer em modo “HI case”.....	23
Figura 9	Ícones existentes no AEA para extracção de dados.....	23
Figura 10	Tela após extracção da informação para o AEA no separador “Process Stream”.....	24
Figura 11	Tela do separador “Utility Streams”, onde se adicionam os parâmetros das utilidades disponíveis.....	24
Figura 12	Tela do separador “Economics”, onde se adicionam os parâmetros económicos dos permutadores de calor.....	24
Figura 13	Tela do separador “Options”.....	25
Figura 14	Tela de conversão para projecto de integração energética.....	25
Figura 15	Tela de projecto “Heat Integration Case I” do Aspen Energy Analyzer.....	26
Figura 16	Tela do cenário “Sem divisão de correntes” do projecto “Heat Integration Case I”.....	26
Figura 17	Parte da janela do cenário “Sem divisão de correntes” do projecto “Heat Integration Case I” para o separador “Targets”.....	27
Figura 18	Tela do cenário “Sem divisão de correntes” no momento de gerar redes de permuta automáticas.....	28
Figura 19	Janela do separador “Designs”.....	28
Figura 20	Tela do primeiro design gerado para o cenário “Sem divisão de correntes”.....	29
Figura 21	Página “Summary” para o primeiro caso gerado automaticamente.....	29
Figura 22	Página “Heat Exchanger” para o primeiro design gerado automaticamente.....	30
Figura 23	Página “Utilities” para o primeiro design gerado automaticamente.....	30
Figura 24	Página do Separador “Worskheet” do primeiro design.....	30
Figura 25	Separador “Heat exchanger”.....	31
Figura 26	Página do separador “Targets” do primeiro design.....	31
Figura 27	Painel para clonar um cenário.....	32
Figura 28	Painel para gerar redes de permutadores de calor.....	33
Figura 29	Valores dos custos totais anualizados para os melhores designs.....	34
Figura 30	Evolução da RPC desde o “A_Design0 até ao “A_Design0-OO”.....	34
Figura 31	Evolução da RPC desde o “A_Splitdesign0” até ao “A_Splitdesign0-O”.....	35
Figura 32	Integração energética das correntes processuais para o melhor design do Caso I.....	35
Figura 33	Fluxo do processo para a produção de benzeno.....	36
Figura 34	Fluxo do processo no separador de gás para o cenário A e B.....	36
Figura 35	Fluxograma do processo (PDF) de produção de benzeno para o cenário A.....	37
Figura 36	Fluxograma do processo (PDF) de produção de benzeno para o cenário B.....	37
Figura 37	Variação do custo total em função do $\Delta T_{mín}$ para o cenário A.....	38
Figura 38	Variação do custo total em função do $\Delta T_{mín}$ para o cenário B.....	38
Figura 39	Curva composta para o Cenário A, para $\Delta T_{mín}$ de 10 °C.....	40
Figura 40	Curva composta para o Cenário B, para $\Delta T_{mín}$ de 10 °C.....	41

Figura 41	Curva composta para o Cenário A, para ΔT_{\min} de 10 °C e representação gráfica dos objectivos energéticos.....	42
Figura 42	RPC inicial gerada pelo AEA, "A_Design0".....	45
Figura 43	RPC inicial otimizada gerada pelo AEA, "A_Design0-O".....	45
Figura 44	RPC final otimizada gerada pelo AEA, "Design0-O_BenzenoA".....	46
Figura 45	Projecto de integração energética para o cenário A.....	46
Figura 46	RPC inicial gerada pelo AEA, "Design0".....	48
Figura 47	Eliminação de um permutador do ciclo inicial gerada pelo AEA, "Design0".....	48
Figura 48	Percurso de relaxação do "Design0-O", para acerto do ΔT_{\min}	49
Figura 49	RPC final obtida através do uso do software AEA, "Design0-O_Benzeno_B".....	49
Figura 50	Projecto de integração energética para o cenário B.....	49
Figura 51	Análise energética e económica como parte integrante do Aspen Hysys.....	50
Figura 52	Fluxograma simples do processo de produção de cloreto de vinil.....	55
Figura 53	Fluxograma do processo de produção de cloreto de vinil.....	56
Figura 54	RPC gerada pelo AEA para o Caso de estudo III e otimizada pelo software, com identificação de um ciclo.....	57
Figura 55	RPC gerada pelo AEA para o Caso de estudo III e otimizada pelo software, com identificação do percurso de relaxação.....	57
Figura 56	Rede de permutador de calor final para o caso de produção de cloreto de vinil.....	58
Figura 57	Fluxograma do processo de produção de cloreto de vinil, com integração energética.....	58
Figura 58	Rede de permutadores de calor do processo em estudo.....	64
Figura 59	Vista para criação de um projecto de integração de calor ("HI project").....	65
Figura 60	Vista durante a introdução da informação das correntes, com o ícone "retrofit mode" sinalizado.....	65
Figura 61	Vista durante a introdução da informação das utilidades.....	66
Figura 62	Vista após a introdução dos permutadores existentes.....	66
Figura 63	Ícone para o aumento da área.....	66
Figura 64	Ícone para adicionar o montante máximo de investimento.....	67
Figura 65	Ícone do "Unlock retrofit mode".....	69
Figura 66	Rede de permutadores otimizada para o cenário A.....	73
Figura 67	Rede de permutadores otimizada para o cenário B.....	74

Lista de Símbolos

$A_{permuta}$ - Área de transferência de calor do permutador
a - Custo da instalação do permutador
AEA – Aspen Energy Analyzer
AEE – Aspen Economic Evaluation
AH – Aspen Hysys
AIE – Agência Internacional de Energia
b,c - Coeficientes que relacionam energia/ área do permutador
CC – Custo de capital (€), (“capital cost”)
CCB – Curva composta balanceada
CCF – Curva composta fria
CCQ – Curva composta quente
 C_{cu} – Custo da utilidade fria (€/kW ano)
 C_{hu} - O custo da utilidade quente (€/kW ano)
CO – Custos operatórios (€/ano), (“operating cost”)
 C_p – Calor específico médio
Duty – Quantidade de energia transferida no permutador
Fouling Factor – Factor de incrustação
Gt - Giga tonelada
H – Coeficiente de transferência de calor
IRR- Taxa interna de retorno (“Internal rate of return”)
LMTD – Média logarítmica entre as diferenças de temperatura (“Log mean temperature difference”)
LP – Programação linear (“Linear Programming”)
M – Caudal mássico
MCp – Capacidade calorífica média
MER – Energia mínima requerida (“Minimum Energy Required”)
MILP – Programação linear inteira mista (“Mixed integer linear programming”)
MINLP – Programação não linear inteira mista (“Mixed integer non linear programming”)
Nshell – Número de shells no permutador
OC - Custos operatórios, custo da energia para o funcionamento do equipamento (€/ano)
OCDE - Organização para a Economia Cooperação e Desenvolvimento
PDF – fluxograma do processo (“Process flow diagram”)
PL – Anos de vida da finalidade do investimento
 $Q_{cu,min}$ – Objectivo para a necessidade de utilidade fria (kW)
 $Q_{hu,min}$ – Objectivo para a necessidade de utilidade quente (kW)
ROR – razão de retorno (percentagem de capital)
RPC – Rede de permutadores de calor
TAC – Custo total anualizado, (“total annualized cost”)
 T_f – Temperatura final
 T_i – Temperatura inicial
USD – Dolar Americano (“United States Dolar”)
WAR – Waste reduction algorithm
 Λ - Factor de anualização (1/ano)

1. Introdução

1.1 Panorama energético actual

O mundo enfrenta duas grandes ameaças no que diz respeito ao panorama energético global. Por um lado, a obtenção da energia a preços competitivos e, por outro, os efeitos negativos no meio ambiente pela sua crescente procura e consumo.

A necessidade de conter o crescimento da procura de energia fóssil, de aumentar a diversidade geográfica e de abastecimento de combustível, e de atenuar as emissões de dióxido de carbono para atmosfera é cada vez mais urgente. A ideia global é que é necessário criar cenários energéticos alternativos e estratégias para uma energia mais limpa e competitiva no futuro. Se os países implementarem pacotes de políticas e medidas neste sentido, poder-se-á reduzir a taxa de procura dos combustíveis fósseis e emissões e, para além disso, o custo económico destas políticas seria ultrapassado pelos benefícios económicos de utilizar e produzir energia de forma mais eficiente.

De acordo com as actuais tendências energéticas, as emissões de dióxido de carbono vão acelerar. Prevê-se um aumento de emissões de dióxido de carbono em 55%, entre 2004 e 2030 (cerca de 1,7% por ano). Neste cenário, os países desenvolvidos serão responsáveis pelo aumento de três quartos das emissões de CO₂ no período referido.

O caminho mais sustentável pode ser viável se os governos tomarem medidas para uma maior segurança a nível energético, atenuando as emissões de CO₂. Estas políticas trariam eficiência à produção energética, maior confiança nos combustíveis não-fósseis, e seriam um suporte para a oferta de petróleo e gás doméstico nos países importadores de energia. (WEO 2006)

O cenário 450 é referenciado no “World Energy Outlook” como sendo um compromisso assumido pelos governos a longo prazo para o limite da concentração dos gases com efeito de estufa na atmosfera a 450 ppm de CO₂ equivalente.

As projecções para o cenário em causa são feitas assumindo um vasto leque de factores que influenciam a oferta e a procura de energia, tais como o crescimento da população, as tendências macroeconómicas, o preço da energia, o desenvolvimento tecnológico e as políticas governamentais.

O cenário referenciado não é, antes de mais, uma previsão, mas sim uma linha de base para a evolução do mercado global de energia, caso os governos não mudem as suas políticas.

Segundo a Agência Internacional de Energia (AIE), a procura de energia irá aumentar 1,5% por ano entre 2007 e 2030, o que na totalidade representará um aumento total de 40%.

A China e a Índia continuam a ser os principais países motores de crescimento na procura mundial de energia, e os combustíveis fósseis mantendo-se como fontes dominantes de energia para os próximos 30 anos.

Fonte: World Energy Outlook 2009

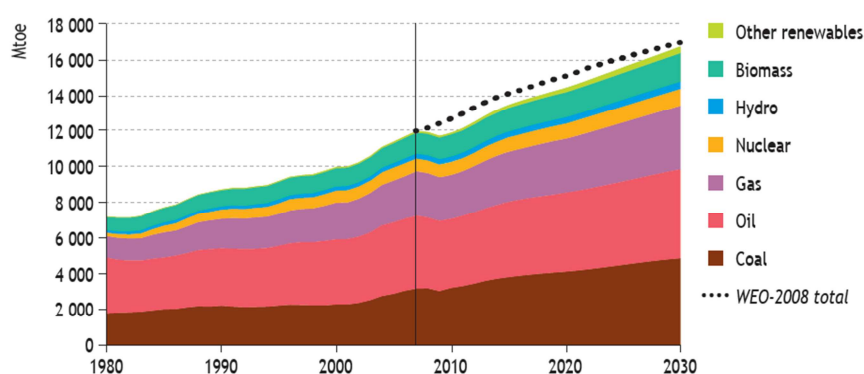


Figura 1 – Procura mundial de energia por combustível no cenário de referência

No cenário considerado pela AIE, as emissões de CO₂ continuarão a aumentar, resultado da procura global pela energia fóssil. Em 1990, a emissão de CO₂ foi de 20,9 Gt, e de 28,8 Gt em 2007, calculando-se que em 2030 será de 40,2 Gt, com uma média de crescimento de 1,5% por ano (ver figura 2).

Fonte: World Energy Outlook 2009

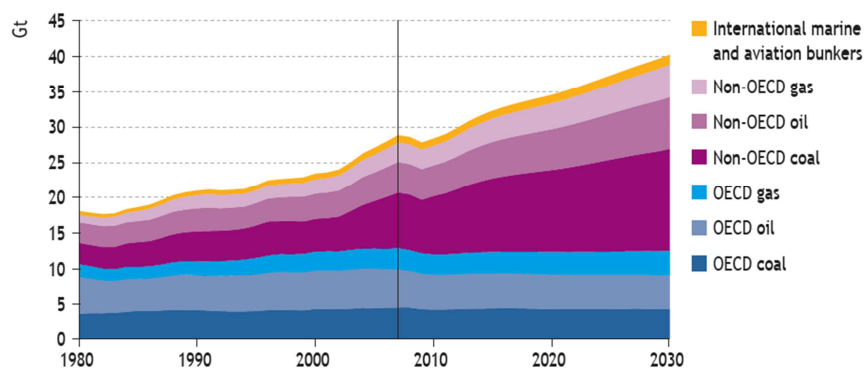


Figura 2 – Emissões de CO₂ por combustível e por região no cenário considerado

O conjunto dos países não pertencentes à OCDE será o responsável por este aumento, já que para os países pertencentes à OCDE o valor global das emissões de CO₂ deverá diminuir devido, principalmente, aos avanços na eficiência energética e ao aumento da utilização de energia nuclear e de energias renováveis, consequência das políticas adoptadas para mitigar as alterações climáticas.

A razão de crescimento das emissões de CO₂ é menor que o projectado anteriormente devido à crise financeira que drasticamente afectou o crescimento da economia mundial.

O sector energético, que representa 84% do total de emissões de CO₂ e 64% do total dos gases com efeito de estufa, deve ser o “coração” da transformação. Não é um simples caso de redução de emissões mas, sim, uma mudança fundamental na abordagem de produzir e consumir energia. Ou seja, é reorientar a produção de energia para as energias renováveis e para a energia nuclear em detrimento dos combustíveis fósseis, maximizando a eficiência dos veículos, utensílios, casas, indústrias, ou desenvolvendo tecnologias revolucionárias. (WEO 2009)

Fonte: World Energy Outlook 2010



Figura 3 – Evolução do preço do petróleo e previsões até 2035

Todas estas projecções foram elaboradas tendo em conta determinados factores e cenários que influenciam a oferta/procura de energia. Recentemente, um *tsunami* devastador causou um acidente nuclear no Japão (Fukushima), o que levou alguns países a equacionar a utilização da energia nuclear, sendo que a Alemanha já se comprometeu a abandonar este tipo de energia até 2022.

Perante este facto, novos estudos terão que ser efectuados e certamente que todas as projecções serão alvo de revisões e novos ajustes. As incertezas devido à crise financeira e também ao acidente nuclear são, agora, indubitavelmente maiores. E, se por um lado, a crise financeira poderá criar alguma pressão no preço da energia, por outro, o acidente nuclear e o abrandamento da procura por este tipo de energia fará aumentar os preços e a procura por combustíveis fósseis.

Por esta razão, a utilização da energia de forma mais eficiente é cada vez mais necessária e não se devem poupar esforços no recurso a tecnologias que contribuam para uma melhor utilização da energia disponível.

1.2 Integração energética (uma forma eficiente de utilizar energia)

Há algum tempo que têm vindo a ser feitos esforços significativos, quer a nível industrial quer a nível académico, no desenvolvimento de processos e metodologias de concepção que minimizem o desperdício de energia e de subprodutos.

A integração de processos é uma abordagem operacional ao *design* de processos que enfatiza a unidade do processo. Pode ser categorizada de integração de massa e de integração de energia, sendo que esta última está relacionada com a alocação global de energia, produção e troca de energia em todo o processo.

A integração mássica é a parte do processo relacionada com a minimização de material que circula no processo. Este tipo de integração utiliza o fenómeno da transferência de massa para as mudanças de concentração do sistema e trocadores de massa utilizados em processos como a absorção, a adsorção, a extracção e a lexiviação.

Muitos dos esforços nesta área foram direccionados para a integração e eficiência energética nos processos químicos.

Os permutadores de calor industriais são concebidos e dimensionados devido à sua particular importância nos processos de integração energética. As redes de permutadores de calor podem ser dimensionadas em combinação com os permutadores de calor utilizando diferentes métodos.

A tarefa fundamental na utilização da tecnologia de “pinch” é a optimização do número de permutadores e da área de permuta, com o intuito de minimizar os custos de capital, os custos de produção, os custos com utilidades, utilizando o calor disponível nas correntes do processo.

Alguns algoritmos matemáticos de optimização, tais como “nonlinear programming” (NLP) e “mixed integer nonlinear programming” (MINLP), são também utilizados no dimensionamento de redes de permutadores de calor. (Anastasovski, 2007)

O conceito de integração energética através das redes de permutadores de calor (RPC) foi introduzido em 1970 por Linnhoff and Flower (1978) e, uns anos mais tarde, Linnhoff and Hindmarsh (1983) indicaram que, tipicamente, conseguem-se reduzir os custos energéticos em cerca de 20/30% melhorando as redes de permutadores de calor. A optimização das redes de permutadores de calor consiste em encontrar a sequência viável dos permutadores de calor na qual pares de correntes são permutadas com o propósito de minimizar os custos totais, isto é, custos operacionais e de capital.

Normalmente opta-se entre diminuir a área total de transferência de calor para reduzir o custo de capital ou aumentar a área para reduzir os custos operacionais.

Um método simples para estimar a sensibilidade dos custos totais consiste na elaboração de várias redes de integração energética alternativas (se vários processos alternativos

exibem estruturas de custos similares, então pode-se optar pela simplicidade ou pela controlabilidade).

Com esta abordagem, não é garantido o óptimo, mas pode ajudar a compreender a importância económica da integração energética.

A redução da energia necessária e o tratamento de resíduos aumentam, de forma geral, os resultados económicos do processo. Contudo, um processo com menos desperdício não significa um menor impacto ambiental. Por esta razão, quando se constrói um processo químico, é importante avaliar o impacto ambiental dos diferentes processos alternativos.

Uma forma de avaliar o impacto ambiental é utilizando o algoritmo “WAR” (waste reduction algorithm) desenvolvido por Hilaly and Sikdar (1994), que introduz o conceito do balanço de poluição. (Mata T.,2003)

Antes de avaliar um processo ambientalmente é necessário conhecer os balanços de massa e de energia. Um método utilizado na criação de projectos de processos químicos altamente detalhados é a utilização de simuladores como o Aspen Hysys. Este software consegue ser bastante útil na análise rigorosa das diferentes alternativas de processo, aumentando a confiança e as certezas em relação ao processo.

1.3 Modelação/simulação na engenharia química

A modelagem de processos é uma solução importante para o desenvolvimento, dimensionamento e operabilidade de equipamento para a generalidade das indústrias químicas. (Chen, 2002)

Cada vez mais as indústrias químicas utilizam tecnologias de engenharia integradas, tais como a simulação em estado estacionário, a síntese de processos, a avaliação económica e a modelação detalhada de equipamento.

A utilização de computadores cada vez mais potentes veio tornar obsoleta a utilização de correlações empíricas simples, as quais foram progressivamente substituídas por modelos numéricos mais rigorosos (e complexos). (Trindade, 1997)

Actualmente, a simulação assistida por computador é uma das mais importantes ferramentas tecnológicas de processo, a qual é amplamente utilizada não só na fase de projecto mas também (e principalmente) durante a fase de operação das unidades.

A modelação e simulação são ferramentas bastante úteis para validar sistemas industriais antes de os ligar. A simulação em particular tem bastante utilidade para melhorar e otimizar processos já em funcionamento. Já as tecnologias de modelação desempenham um papel cada vez mais crítico nas operações industriais: os primeiros modelos de simulação têm um registo comprovado na optimização em tempo real (RTO) em muitos segmentos da indústria de processo e a modelação de programação linear (LP) no planeamento e actividades de gestão. (Sundaram, 2005)

A empresa alemã BASF estima atingir poupanças na ordem dos dois milhões de USD anualmente em energia através do seu *intelligent Total Cost Minimizer* (i-TCM), que faz a simulação de processos integrada com análise de custos e com modelação de dimensionamento do equipamento. (Beck , 2009)

1.4 Aspen Hysys

O Aspen Hysys é um óptimo software de simulação de processos químicos desenvolvido pela empresa Norte Americana AspenTech.

Os vários componentes que compõem o software fornecem uma abordagem extremamente rigorosa para a modelagem em estado estacionário de um processo.

Este software permite, depois de escolhidas as operações e as propriedades, modelar o processo com um certo nível de confiança, seguindo a abordagem dos graus de liberdade. Desde que as operações unitárias e os respectivos pacotes de propriedades tenham a informação necessária, o Aspen Hysys efectua os cálculos. Mas, ainda mais importante, é a ajuda que o programa dá ao analista na compreensão do processo. (Hysys Operation Guide V7.1, 2009)

O sucesso da modelização em qualquer software assim como no Hysys depende muito da descrição precisa das propriedades químicas, físicas, termodinâmicas e do comportamento das fases das substâncias envolvidas. (Chen, 2002)

A arquitectura baseada em “multi-flowsheets” é vital para a modelação, e a grande vantagem desta abordagem é a organização em processos de grande dimensão.

Este programa utiliza uma variedade de métodos para mostrar a informação do processo: PDF, databook, desempenho gráfico, tabela, entre outros.

1.5 Aspen Energy Analyzer

A competitividade nos mercados e o crescente interesse pela utilização da energia de uma forma mais eficiente exige um melhor dimensionamento das redes de permutadores de calor (RPC).

O Aspen Energy Analyzer (AEA) trabalha em conjunto com simuladores como o Aspen Hysys, sendo uma ferramenta bastante exacta para melhor dimensionar RPC e fazer a análise de “pinch”.

Podemos identificar como principais características deste software a capacidades de:

- Calcular os alvos energéticos e o investimento de capital;
- Melhorar/desenvolver projectos de integração de calor, reduzindo os custos operacionais, os custos de investimento, os custos de dimensionamento e minimizando o recurso a utilidades pelo sistema;
- Disponibilizar ferramentas para optimização de processos.

O AEA fornece alternativas de projecto e é óbvio que a solução obtida pode estar longe do óptimo. A tarefa de desenvolver uma RPC óptima (baseada em capital) pode ser bastante complexa. A solução passa então por identificar as melhores opções sem gastar grandes quantidades de recursos. O AEA ajuda a maximizar a quantidade de energia do sistema que se pode reutilizar com uma RPC óptima. As necessidades energéticas que não forem satisfeitas através da integração de calor do sistema terão que ser satisfeitas através do recurso a utilidades. Esta abordagem permite minimizar o impacte ambiental (Sítio da AspenTech).

1.6 Aspen Economic Evaluation (Aspen Process Economic Analyzer)

O novo fluxograma de economia integrado disponibilizado pela Aspen Tech permite a incorporação dos custos relativos nos projectos. Uma das vantagens deste módulo integrado no Hysys é a possibilidade de obtermos um processo que interliga capital e custos operatórios com parâmetros técnicos.

Este módulo permite que engenheiro de processo tenha um acesso rápido aos custos relativos de um determinado processo, proporcionando os meios para procurar a melhor alternativa baseada no equilíbrio entre factores ambientais, técnicos, económicos e de segurança. (McCarthy, 2011)

A integração da análise económica com o processo alavanca o rendimento e os benefícios. Os custos do processo são calculados e optimizados logo numa fase inicial do projecto, permitindo ao engenheiro compreender os resultados das suas decisões ao nível da concepção do projecto. (Beck, 2009).

Este trabalho encontra-se também em suporte informático.

2. Estudo de Casos

2.1. Objectivo

O objectivo deste capítulo é conhecer e compreender o funcionamento da ferramenta de integração energética e de avaliação económica integrada disponibilizada pela AspenTech, através do Aspen Hysys e do Aspen Energy Analyzer. Para isso, serão utilizados e resolvidos casos mais ou menos complexos, identificando e descrevendo os passos realizados para obter uma rede de permutadores de calor que apresente um equilíbrio entre os custos de capital e os custos operatórios, de modo a minimizar os custos totais, e sempre que seja possível incorporar os custos relativos nos estudos de modelação de processos através da ferramenta integrada de avaliação económica do Aspen Hysys.

O Caso I é baseado na integração energética das correntes de um processo químico através da ferramenta de simulação AEA, este serve essencialmente para familiarizar o leitor com o programa e ao mesmo tempo evidenciar as suas potencialidades.

O Caso II é baseado num processo de produção de Benzeno (em estado estacionário) e é dividido em dois cenários diferentes. O objectivo é demonstrar como funciona o Aspen Hysys integrado com o Aspen Energy Analyzer e o Aspen Economic Evaluation e ao mesmo tempo mostrar as potencialidades dos programas de modelação/simulação na tomada de decisões, em fases preliminares de um projecto químico.

O Caso III é baseado num processo de produção de Cloreto de Vinil e é composto também por dois cenários diferentes. Este caso pretende mostrar, tal como o caso anterior, as potencialidades dos programas ao funcionarem de um modo integrado e ao mesmo tempo evidenciar as facilidades com que o utilizador pode incorporar estudos económicos relacionados com parâmetros técnicos do processo, no projecto de engenharia ainda numa fase inicial.

O Caso IV e V são essencialmente casos de integração energética em que o caso IV é baseado numa RPC já existente onde é pretendido aumentar a área de permuta e para isso existe uma determinada quantia de capital. Através do Aspen Energy Analyzer, podemos otimizar a RPC existente calculando o capital necessário para aumentar a área da RPC de modo que o retorno seja o maior possível através do equilíbrio dos custos de capital com os operatórios. O caso V é baseado na informação das correntes do caso anterior, e o objectivo passa por evidenciar a influência do preço das utilidades na construção de uma RPC tendo por base a minimização do custo total.

2.2. Caso I

Este exemplo é baseado na integração energética e posterior construção de um conjunto de redes de permutadores através do simulador AEA de uma parte de um processo químico hipotético (adaptado de Gundersen (2002a)). Este exemplo consiste num reactor que recebe uma corrente de alimentação fresca, sendo submetida a um pré-aquecimento de 50°C até 210°C. O efluente reaccional é preparado numa coluna de destilação. A corrente de alimentação da coluna é previamente arrefecida desde a temperatura de reacção (270°C) até à temperatura de entrada na coluna (160°C). Ambos os produtos de topo e de fundo passam para etapas seguintes de produção. Devido ao gradiente de temperatura na coluna, o produto de fundo sai da coluna a 220°C e é arrefecido até 60°C. No topo da coluna o vapor sai a 130°C e passa ao condensador parcial, onde existe recirculação de uma fracção de líquido para a coluna. A fase gasosa segue para um processo de compressão, de onde sai a 160°C e é em seguida aquecida até 210°C, de modo a ser reciclada para o reactor.

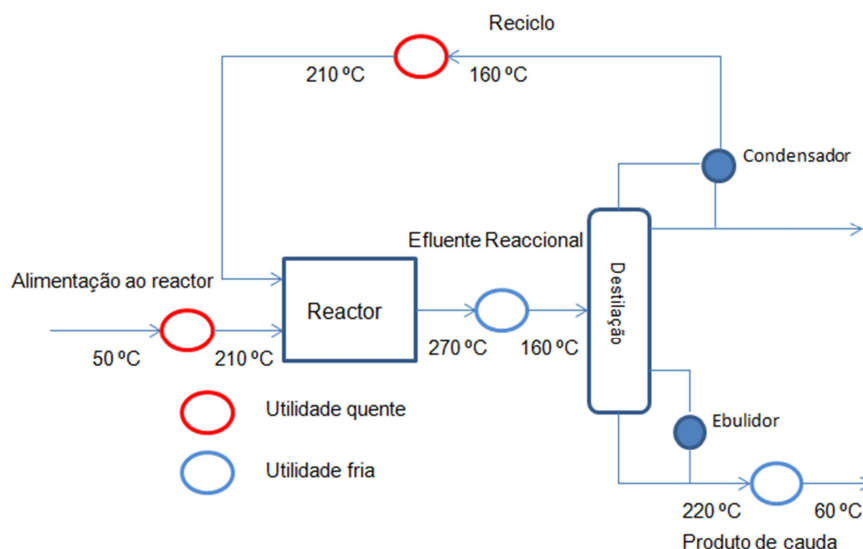


Figura 4 – Esquema do processo químico do Caso I

A informação das correntes do processo está descrita na tabela 1, as utilidades disponíveis na tabela 2 e a informação económica na tabela 3.

Também não são conhecidas limitações à integração energética relacionadas com questões operatórias, de segurança, distância entre correntes, etc.

Tabela 1 – Informação das correntes do processo do Caso I

Correntes	Descrição	T _i (°C)	T _f (°C)	MCp (KW/°C)	H (kW/m ² /°C)
Quente 1 (Q1)	Efluente Reaccional	270	160	18	0,5
Quente 2 (Q1)	Produto de Cauda	220	60	22	0,5
Fria 1 (F1)	Alimentação ao Reactor	50	210	20	0,5
Fria 2 (F2)	Recirculação	160	210	50	0,5

Tabela 2 – Informação das utilidades disponíveis do Caso I

Utilidades disponíveis	T _i (°C)	T _f (°C)	Q (kW)	H (kW/m ² /°C)
Vapor de alta pressão	250	249,5	5700	2,5
Água de refrigeração	15	20	5500	1

Tabela 3 - Parâmetros da lei de custo para os permutadores

Parâmetros da lei de custo para os permutadores	
a (€)	40816,33
b (€/m ² ^{0,8})	2755,10
c	0,80

Tabela 4 – Custo das utilidades

Custo das utilidades	€/kW.h
Vapor de alta pressão	0,02170
Água de refrigeração	0,00038

Parâmetros Económicos

Os parâmetros económicos utilizados para o cálculo do custo da rede de permutadores de calor dividem-se em três categorias: custo de capital, custos operatórios e custos totais anualizados.

A forma como os custos são tratados pelo Aspen Energy Analyzer é descrita em anexo.

Introdução dos dados no Aspen Energy Analyzer

Existem três formas de extrair a informação das correntes do processo para o software (AEA). Durante este trabalho iremos também utilizar estas diferentes formas de introduzir informação no programa.

Neste primeiro caso optou-se por guardar a informação numa folha de Excel (“template”), e posterior extracção da informação para o AEA.

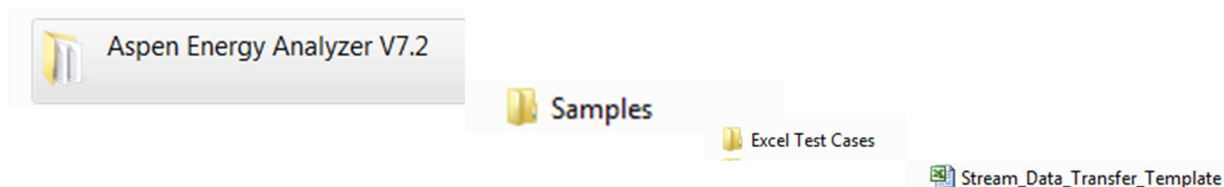


Figura 5 – Pasta do Aspen Energy Analyzer e a sequência de pastas até ao “template”

- I. No computador, para iniciar o programa deve clicar no ícone do Aspen Energy Analyzer que se encontra na pasta de programas do computador, ou então, no respectivo atalho do ambiente de trabalho do seu computador.

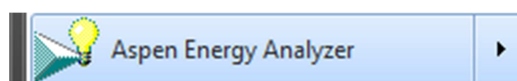


Figura 6 – Ícone do Aspen Energy Analyzer

- II. A área de trabalho é aberta no ecrã do seu computador e a barra de ferramentas está ampliada na figura 7. Assim, o ícone “create a new HI case” está mais visível de forma a facilitar a leitura deste procedimento.

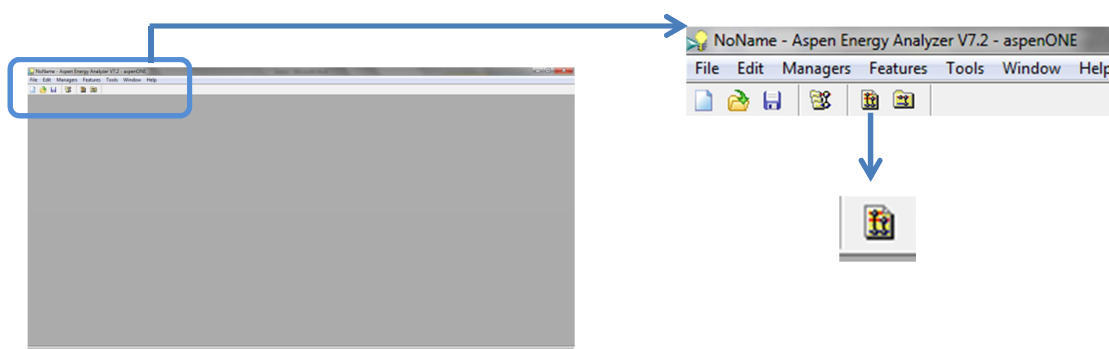


Figura 7 – Tela ao aceder ao Aspen Energy Analyzer

- III. Depois de clicar no ícone “create a new HI case” surge no ecrã o primeiro de cinco separadores onde podem ser introduzidos os dados das correntes do processo. Tal como foi referenciado, estes dados podem ser adicionados manualmente ou extraídos de

uma folha de cálculo como o Excel, existente no Aspen Energy Analyzer sob a forma de “template”.

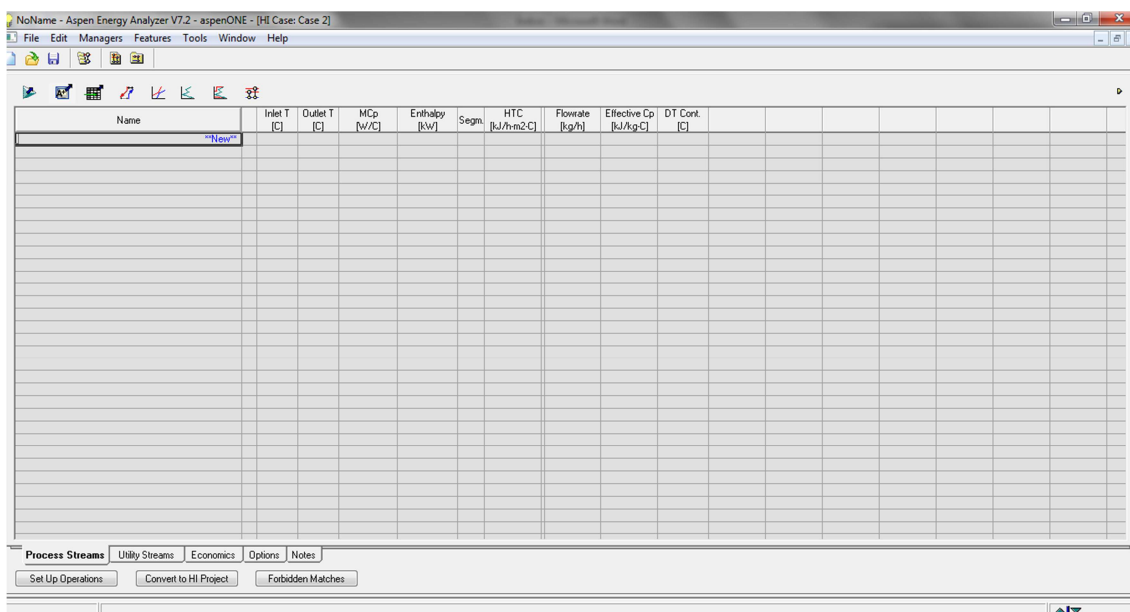


Figura 8 – Tela do Aspen Energy Analyzer em modo “HI case”

Na barra de ferramentas (figura 9) podemos escolher o modo como queremos importar os dados das correntes do processo através dos três primeiros ícones. Através do ícone mais à esquerda, podemos efectuar a extracção dos dados através do Aspen Hysys, no ícone ao centro através do Aspen Plus e por último através do Microsoft Excel.

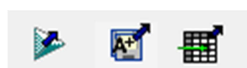


Figura 9 – Ícones existentes no AEA para extracção de dados

- IV.** Toda a informação das correntes do caso I foi extraída para o AEA através do Microsoft Excel, para o primeiro separador, com o nome de “Process Streams” como podemos visualizar na figura 8.
- V.** Neste separador podemos encontrar uma opção com o nome de “Forbidden Matches”. Esta opção permite que o utilizador possa impedir trocas de calor entre determinadas correntes, devido, por exemplo, ao distanciamento entre correntes que implica um grande custo de tubagens.

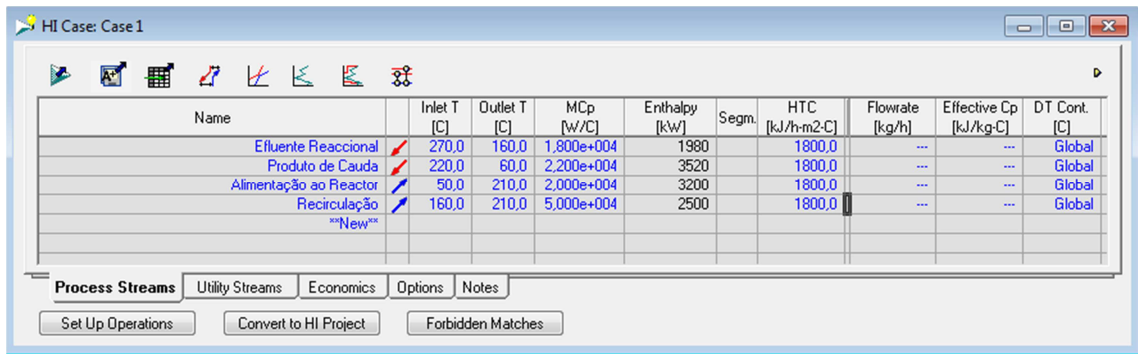


Figura 10 – Tela após extracção da informação para o AEA no separador “Process Stream”

VI. No segundo separador podemos adicionar os dados relativos às utilidades disponíveis e no separador relativo à parte económica, podemos adicionar os parâmetros dos permutadores de calor.

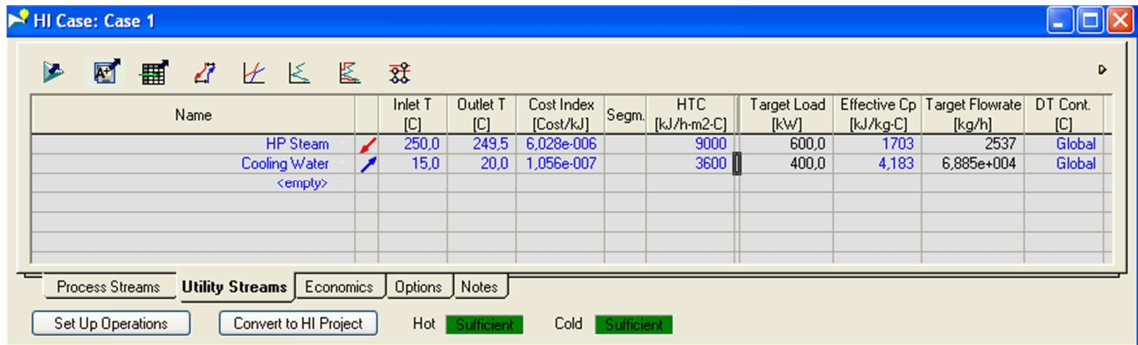


Figura 11 – Tela do separador “Utility Streams”, onde se adicionam os parâmetros das utilidades disponíveis

No separador “Economics”, para além dos parâmetros económicos relativos aos permutadores calor, podemos também adicionar a taxa de retorno anualizada, a vida útil do projecto e as horas de operação durante um ano de trabalho.

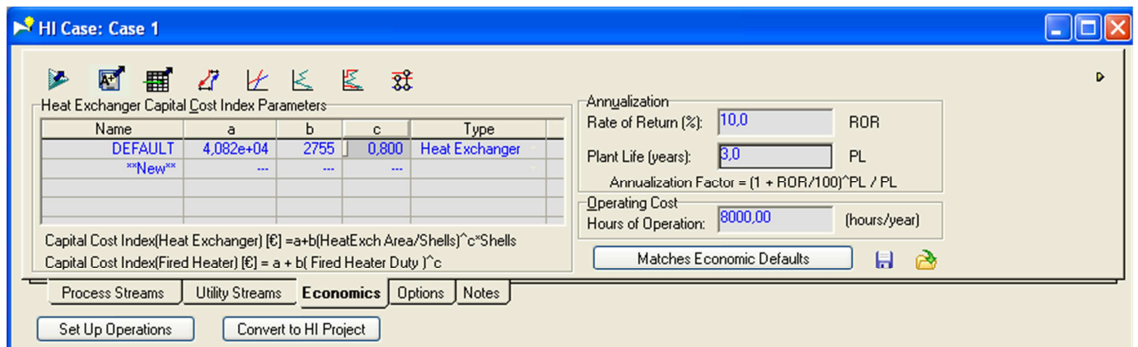


Figura 12 – Tela do separador “Economics”, onde se adicionam os parâmetros económicos dos permutadores de calor

VII. O separador “Options” contém algumas opções relativas ao algoritmo utilizado no cálculo dos objectivos da área de permuta, o método utilizado para a alocação das utilidades e as bases de dados relativas aos coeficientes de transferência de calor e das utilidades.

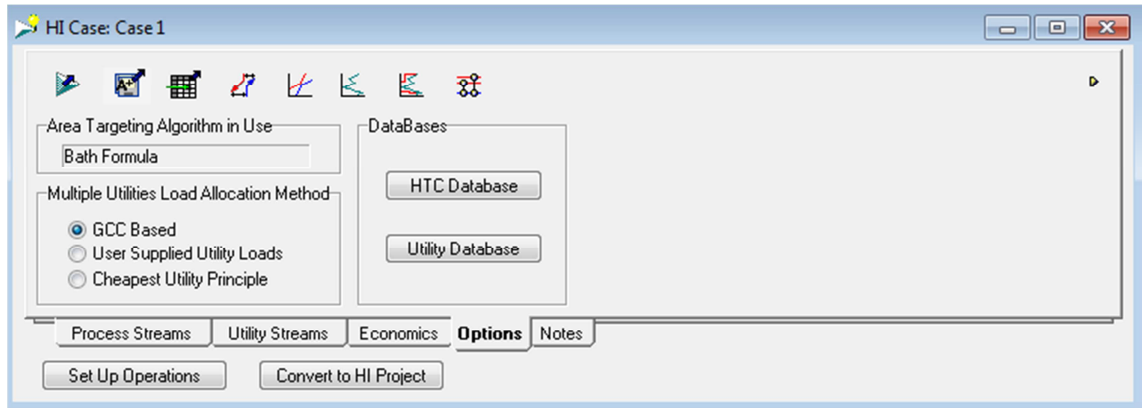


Figura 13 – Tela do separador “Options”

O algoritmo “Bath Formula” utilizado para o cálculo da área de permuta é baseado nas curvas compostas balanceadas (CCBs) que são divididas verticalmente em vários intervalos de potência térmica.

Mas caso existam trocas impossíveis ou “Forbidden Matches” no caso em estudo, o programa vai utilizar um método mais complexo de cálculo do objectivo da área de permuta através de programação linear (LP).

O separador seguinte, “Notes”, é utilizado para gravar ou anotar toda a informação que o utilizador ache pertinente.

VIII. Depois de adicionar toda a informação do caso em estudo, podemos converter o caso num projecto de integração de energia clicando na opção “Convert to HI Project” e a partir do momento em que o caso esteja convertido em projecto, não poderá voltar ao caso que deu origem ao projecto. Então irá aparecer a seguinte janela (figura 14), e caso se queira realmente converter o caso num projecto deve-se clicar no botão de “OK”

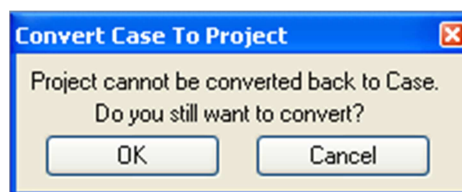


Figura 14 – Tela de conversão para projecto de integração energética

De seguida aparece no ecrã a janela do projecto de integração com uma pasta HIP1 (“Heat integration project 1”), e clicando com o botão direito do rato em cima da pasta HIP1, podemos adicionar outro cenário ou alterar o nome do projecto, como podemos

verificar nas figuras seguintes, onde o nome do projecto foi alterado para “Heat Integration Case I” (figura 15). Para além do nome do projecto, podemos também adicionar o nome do autor, data, comentários e/ou notas que o utilizador ache pertinente.

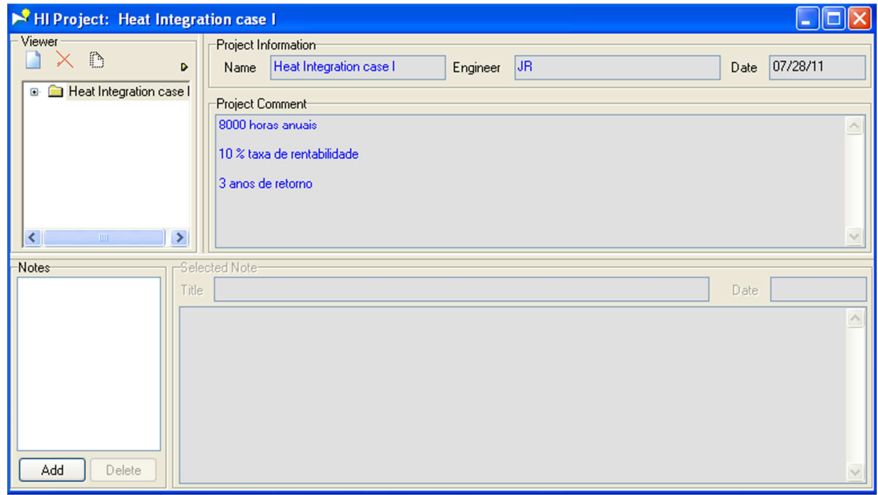


Figura 15 – Tela de projecto “Heat Integration Case I” do Aspen Energy Analyzer

Clicando na pasta “Heat Integration Case I”, aparece uma sub-pasta (cenário) de nome “Case I” que foi alterada para “Sem divisão de correntes” devido ao facto de este caso comportar dois cenários diferentes, um com divisão de correntes e outro sem divisão de correntes, assim o primeiro cenário será sem divisão de correntes. Na figura seguinte podemos observar a “tela” do programa relativa ao cenário “Sem divisão de correntes”, onde temos informação sobre as correntes do processo, sobre as utilidades disponíveis e sobre os parâmetros económicos. Estes dados podem ser alterados para que o utilizador possa experimentar cenários diferentes, como por exemplo alterar a temperatura das correntes ou das utilidades.

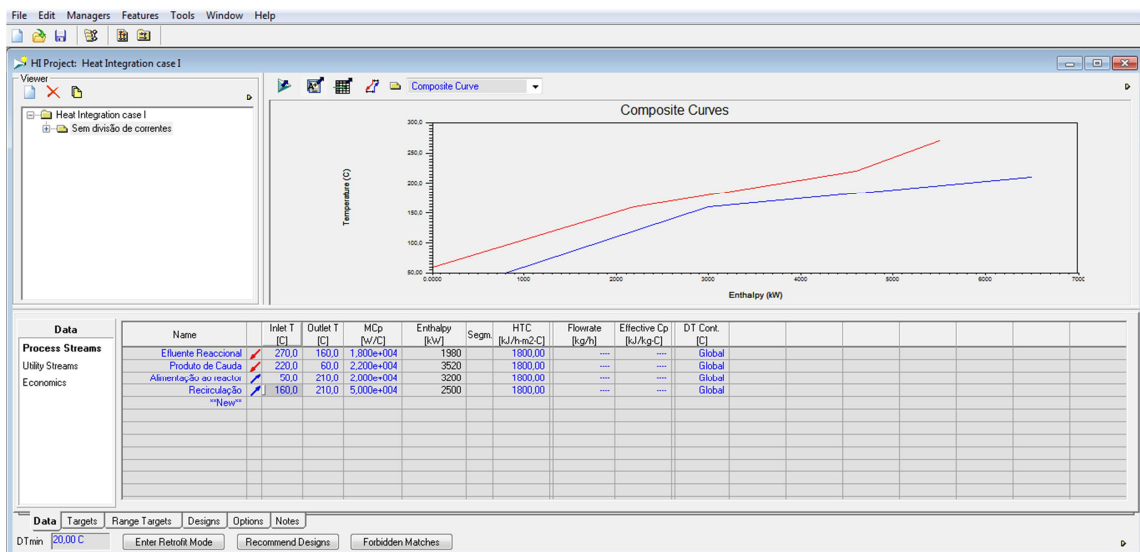


Figura 16 – Tela do cenário “Sem divisão de correntes” do projecto “Heat Integration Case I”

Podemos visualizar os gráficos da curva composta, da grande curva composta e na parte inferior da janela podemos verificar que para além do separador “Data” correspondente à informação das correntes do processo, podemos também verificar mais separadores, nomeadamente, “Targets”, “Range Targets”, “Designs”, “Options” e “Notes”.

No separador “Targets”, figura 17, podemos ver os objectivos energéticos (necessidades de aquecimento e de arrefecimento), o número mínimo de permutadores, o número mínimo de permutadores para a rede MER, os objectivos das áreas de permuta, os custos de capital, os custos operacionais, os custos totais anualizados e as temperaturas de “Pinch”.

Na parte esquerda da janela podemos seleccionar ainda “Utility Targets”, objectivos das utilidades e “Plots/Tables”, gráficos e tabelas de dados.

Nos objectivos das utilidades podemos recolher informação, sobre as necessidades energéticas e os respectivos custos em função da utilidade e do seu preço, bem como os custos operacionais totais. Na opção “Plots/Tables” podemos ter acesso a tabelas contendo as temperaturas e respectivas entalpias para diferentes “curvas”, como por exemplo curva composta, curva composta balanceada e a grande curva composta. Também podemos visualizar os diferentes gráficos das curvas referidas anteriormente.

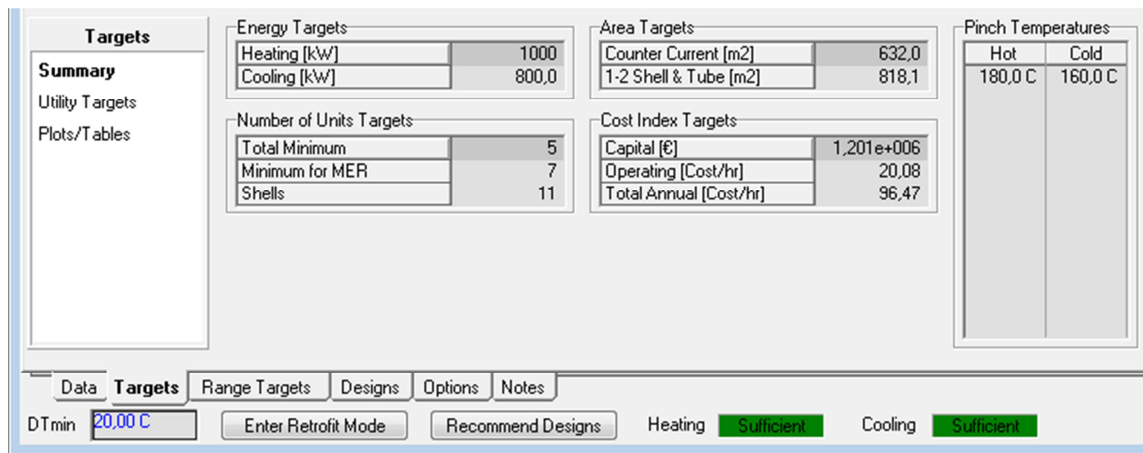


Figura 17 – Parte da janela do cenário “Sem divisão de correntes” do projecto “Heat Integration case I” para o separador “Targets”

No separador “Range Targets” podemos ter acesso a gráficos de estudo e tabelas, onde podemos estudar e visualizar o comportamento, por exemplo, dos custos em função do ΔT_{min} , o que pode ser bastante útil para escolher o ΔT_{min} de funcionamento.

O separador “Designs”, veremos mais adiante a sua grande utilidade quando temos vários “designs” concebidos.

- IX.** No final da página do caso “sem divisão de correntes” temos um botão com o nome “Recommended Designs”. Ao clicar neste botão é permitido ao utilizador ter acesso a um conjunto de RPC próximos do óptimo. O software nunca repete redes já geradas por si

próprio. A teoria e o algoritmo são explicados em pormenor no anexo, mas basicamente é utilizada programação LP numa primeira fase e depois numa segunda fase MILP.

Ao clicar no botão “Recommended Designs” surge uma janela “Stream Split Options” que é composta por dois separadores, “General” que é a página principal onde podemos escolher o número máximo de divisões em cada corrente (“Max Split Branches”) e também o número máximo de designs, o segundo separador “Tips” contém ajudas para obter RPC mais próximas do óptimo.

Na figura seguinte podemos verificar a janela do ecrã, exactamente depois de clicar no ícone “Recommended Designs”.

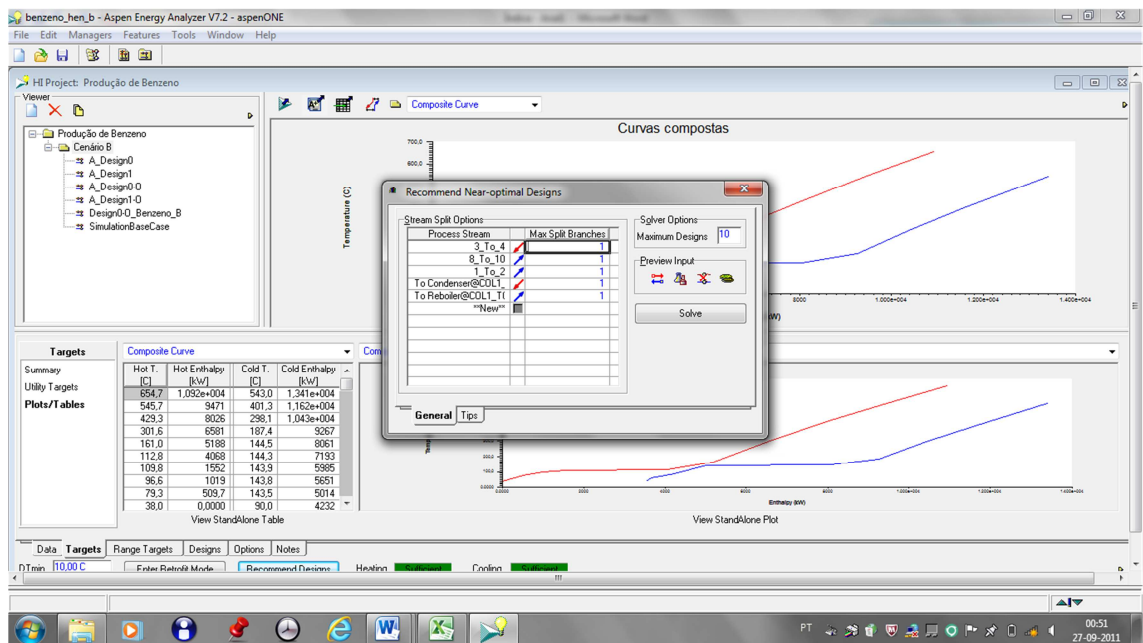


Figura 18 – Tela do cenário “Sem divisão de correntes” no momento de gerar redes de permuta automáticas

- X. Depois de obter as redes automáticas de permuta designadas pelo programa de “A_Design”, onde o “A” é sinónimo de automático, temos acesso a uma grande e útil quantidade de informação. Podemos visualizar no cenário “Sem divisão de correntes” o separador “Designs”, onde temos os resultados dos designs gerados concentrados numa tabela, para melhor comparar os resultados, tal como podemos ver na figura seguinte.

Design	Total Cost Index [Cost/hr]	Area [m2]	Units	Shells	Cap. Cost Index [€]	Heating [kW]	Cooling [kW]	Op. Cost Index [Cost/hr]
A_Design3	120,9	396,1	4	5	6,102e+005	3720	3520	82,06
A_Design1	114,7	850,3	7	12	1,260e+006	1567	1367	34,52
A_Design2	111,0	584,6	5	8	8,781e+005	2500	2300	55,12
Targets	96,47	818,1	7	11	1,201e+006	1000	800,0	20,08

Figura 19 – Janela do separador “Designs”

Nesta tabela podemos comparar os resultados dos designs automáticos entre eles e também com os objectivos (“targets”). O objectivo principal na criação de uma rede de permutadores de calor é a minimização do capital e dos custos operatórios e representam a performance de uma rede de permutadores de calor ideal para permutadores do tipo “Shell & Tube”.

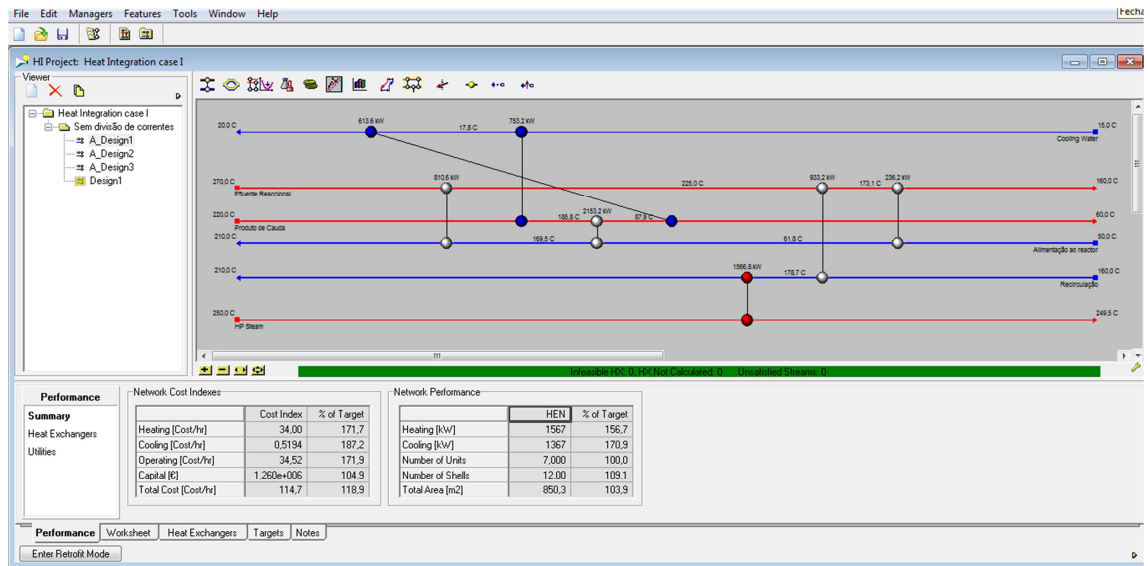


Figura 20 – Tela do primeiro design gerado para o cenário “Sem divisão de correntes”

Podemos constatar que a página é constituída por cinco separadores, sendo que todos eles têm em comum à esquerda o painel de visualização das pastas do projecto e à direita a rede de permutador correspondente ao design seleccionado no painel de visualização.

O separador performance é constituído por três páginas, “Summary”, “Heat Exchangers” e “Utilities”.

Na figura 21, correspondente à página “Summary”, podemos visualizar os custos de aquecimento de arrefecimento, operatórios, os custos de capital e os custos totais, bem como as percentagens de desvios em relação aos objectivos.

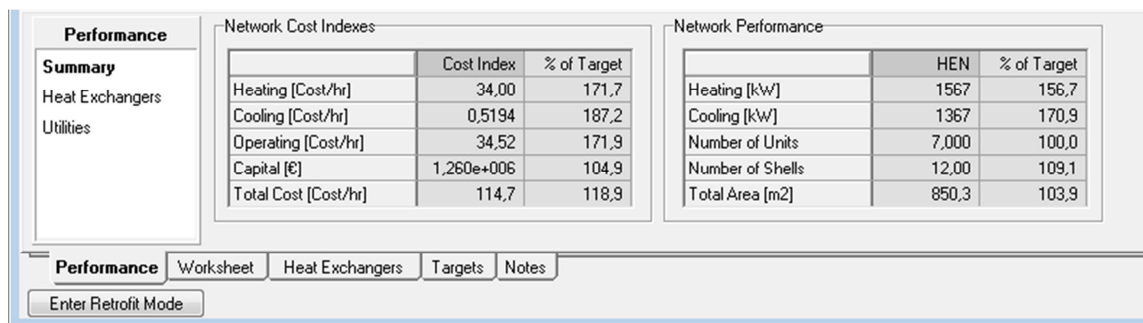


Figura 21 – Página “Summary” para o primeiro caso gerado automaticamente

Na figura 22 podemos ver a página “Heat Exchangers” onde está representada uma tabela com os permutadores da rede seleccionada no painel de visualização e os respectivos custos, áreas, “Shells” e entalpia.

Heat Exchanger	Cost Index [€]	Area [m2]	Shells	Load [kW]
E-101	1,230e+00€	69,76	1	1567
E-106	8,728e+004	34,18	1	613,6
E-103	5,997e+00€	511,9	5	2153
E-105	5,616e+004	8,556	1	236,2
E-100	1,160e+00€	62,37	1	810,6
E-102	6,113e+004	12,15	1	753,2
E-104	2,163e+00€	151,3	2	933,2
Total	1,260e+00€	850,3	12,00	7067

Figura 22 – Página “Heat Exchanger” para o primeiro design gerado automaticamente

Na figura 23 está representada a página “Utilities”, a qual é composta por uma tabela onde estão representadas as utilidades, bem como os seus custos.

Utility	Cost Index [Cost/hr]	Load [kW]	% of Target
HP Steam	34,00	1567	156,7
Cooling Water	0,5194	1367	170,9
Total	34,52	---	---

Figura 23 – Página “Utilities” para o primeiro design gerado automaticamente

Na figura 24, podemos ver o separador “Worksheet” que é composto apenas por uma página, onde se vê uma tabela que representa as correntes quentes e respectivas correntes frias em cada permutador, bem como as temperaturas envolvidas, áreas de permuta, entalpias e ΔT mínimos envolvidos em cada permutador.

Heat Exchanger	Cold Stream	Cold T in [C]	Tied	Cold T out [C]	Tied	Hot Stream	Hot T in [C]	Tied	Hot T out [C]	Tied	Load [kW]	Area [m2]	dT Min Hot [C]	dT Min Cold [C]
E-101	Recirculação	178,7	✓	210,0	✓	HP Steam	290,0	■	249,5	■	1567	69,755	40,00	70,84
E-106	Cooling Water	17,76	■	20,00	■	Produto de Cauda	87,89	✓	60,00	✓	613,6	34,177	67,89	42,24
E-103	Alimentação ao reactor	61,81	✓	169,5	✓	Produto de Cauda	185,8	✓	87,89	✓	2153	511,95	16,30	26,08
E-105	Alimentação ao reactor	50,00	✓	61,81	✓	Efluente Reaccional	173,1	✓	160,0	✓	236,2	8,5568	111,3	110,0
E-100	Alimentação ao reactor	169,5	✓	210,0	✓	Efluente Reaccional	270,0	✓	225,0	✓	810,6	62,366	60,00	55,50
E-102	Cooling Water	15,00	■	17,76	■	Produto de Cauda	220,0	✓	185,8	✓	753,2	12,150	202,2	170,8
E-104	Recirculação	160,0	✓	178,7	✓	Efluente Reaccional	225,0	✓	173,1	✓	933,2	151,32	46,30	13,12

Figura 24 – Página do Separador “Worksheet” do primeiro design

No separador “Heat exchanger”, podemos ver uma tabela com os permutadores envolvidos e os respectivos valores de entalpia, custos, áreas, “Shells”, LMTD, coeficientes globais de transferência de calor e “Fouling Factor”.

Heat Exchanger	Load [kW]	Cost Index [€]	Area [m ²]	Shells	LMTD [C]	Overall U [kJ/s-m ² -C]	Ffactor	Fouling [C-m ² /kW]	Hot Stream	Hot T in [C]	Hot T out [C]	Cold Stream	Cold T in [C]
E-101	1557	1.227e+005	69.41	1	53.87	0.4167	0.9991	0.0000	HP Steam	260.0	249.5	Reciculação	178.9
E-106	1367	1.129e+005	69.20	1	69.63	0.3333	0.9989	0.0000	Produto de Cauda	121.7	60.0	Cooling Water	15.0
E-103	943.3	1.593e+005	109.0	1	39.43	0.2500	0.8779	0.0000	Efluente Reaccional	237.4	185.0	Reciculação	160.0
E-105	450.2	6.653e+004	16.31	1	111.2	0.2500	0.9924	0.0000	Efluente Reaccional	185.0	160.0	Alimentação ao reactor	50.0
E-100	586.5	9.588e+004	42.26	1	58.36	0.2500	0.9513	0.0000	Efluente Reaccional	270.0	237.4	Alimentação ao reactor	180.7
E-104	2163	2.985e+005	221.0	3	44.06	0.2500	0.8886	0.0000	Produto de Cauda	220.0	121.7	Alimentação ao reactor	72.5

Figura 25 – Separador “Heat exchanger”

No separador “Targets” visualizamos os objectivos do processo no que respeita às entalpias, número de permutadores, área e custos, assim como um gráfico com diversas opções de visualização, como podemos verificar na figura 26.

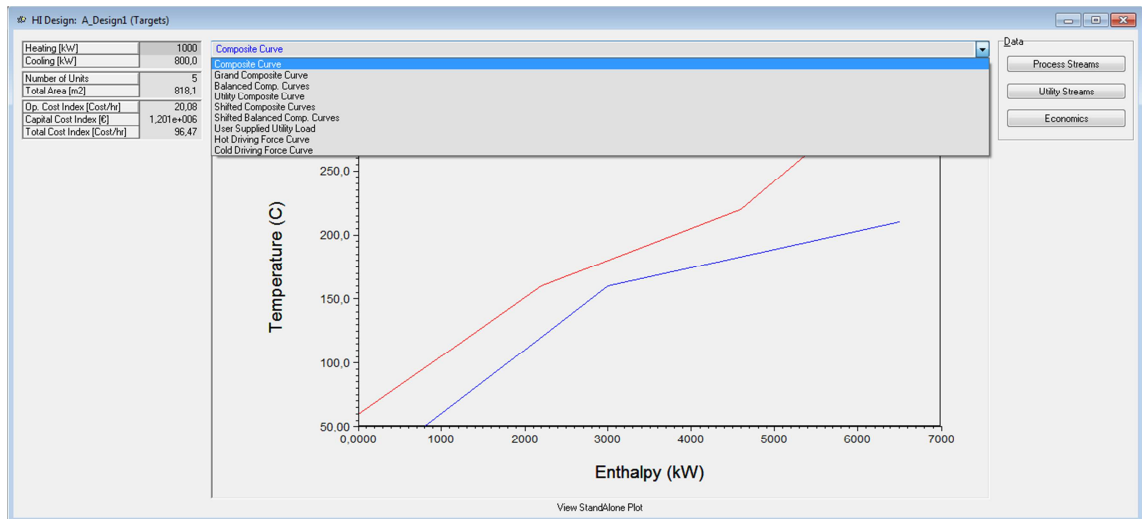


Figura 26 – Página do separador “Targets” do primeiro design

XI. Depois de obtidas as RPC geradas pelo programa AEA, podemos utilizar uma função da barra de ferramentas que é a optimização da rede. Os resultados do novo design serão identificados com “-O”.

XII. Tabela 5 – Descrição da função “Open Optimization View”*

Ícone	Descrição
	Permite ao utilizador optimizar a RPC, minimizando o custo total anualizado ou minimizando a área total de permuta.

* Para mais informação acerca do algoritmo de optimização consulte o anexo em Optimização paramétrica

Depois de optimizadas as RPC, podemos comparar e estudar os resultados para tomar uma decisão.

XIII. Depois de concluído todo o processo de construção de RPC para o caso em estudo, mas sem divisão de correntes (sem “splits”), vamos utilizar o software para gerar redes de permutadores de calor onde a divisão de correntes seja permitida.

Para isso, podemos utilizar uma funcionalidade do Aspen Energy Analyzer, que é a clonagem da informação das correntes, utilidades e parâmetros económicos. Assim, basta clicar com o botão direito do rato em cima do cenário que se pretende clonar e escolher a opção “Clone Scenario”.

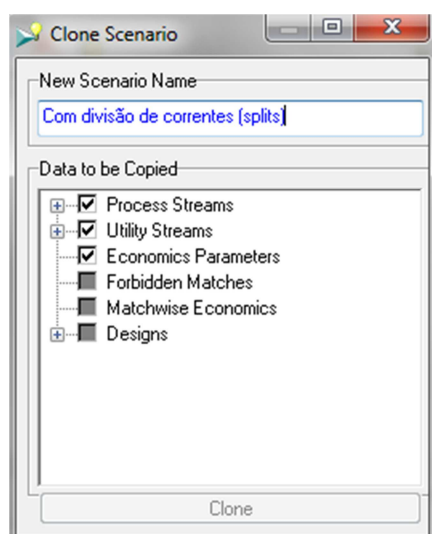


Figura 27 – Painel para clonar um cenário

Neste momento existe um novo cenário com o nome de “Com divisão de correntes (splits)” sem nenhum design gerado. Clicando no ícone “Recommend Designs” reaparece a figura 28, onde temos a opção de escolher o número máximo de divisão de correntes (“Max split Branches”) que neste exemplo foi de dois, como ilustra a figura seguinte.

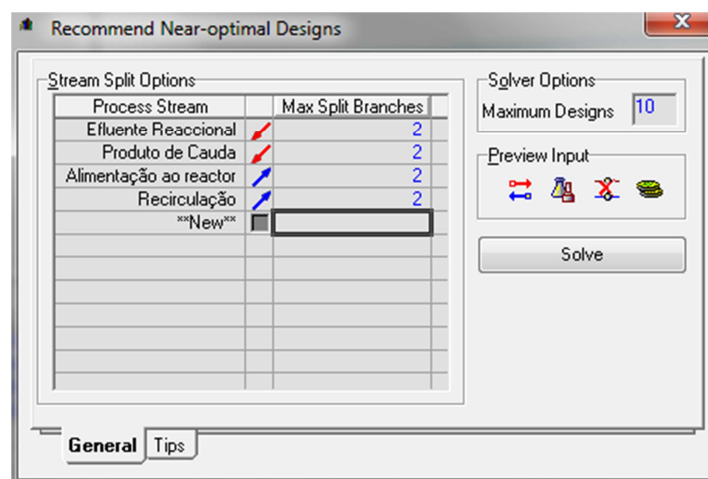


Figura 28 – Painel para gerar redes de permutadores de calor

Análise e resultados do Caso I

Para o Caso I e para o cenário “Sem divisão de correntes” foram gerados três designs, sendo posteriormente todos otimizados até não se evidenciarem melhorias, tendo como função objectivo a minimização dos custos totais anualizados. Foram obtidos um total de nove designs, o que equivale a duas optimizações para cada design gerado no cenário “Sem divisão de correntes”. Para o cenário “Com divisão de correntes (splits)”, foram gerados dois designs, os quais foram optimizados apenas uma vez cada um, obtendo um total de quatro designs, os resultados estão em anexo sob a forma de tabelas. Os designs optimizados uma vez são identificados com um “-O”, os designs com duas optimizações sucessivas são identificados com “-O-O”. Verificou-se neste caso particular que o facto de permitir divisão de correntes não melhorou os resultados, pois mesmo quando foi utilizada a função de optimização da RPC para o cenário “com divisão de correntes (splits)”, o que aconteceu foi a eliminação dos “splits” por parte do software.

Melhor Design no Cenário “Sem divisão de correntes”

Tabela 6 – Valores para o custo total anualizado do melhor design e poupanças através da opção de optimização

Design	TAC (€/ano)	Redução em valor absoluto (€)	Redução Total (%TAC)	Redução Relativa (%TAC)
A_Design0	1.005.000			
A_Design0-O	780.300	224.700	22,4	22,4
A_Design0-O-O	777.500	227.500	22,6	0,37

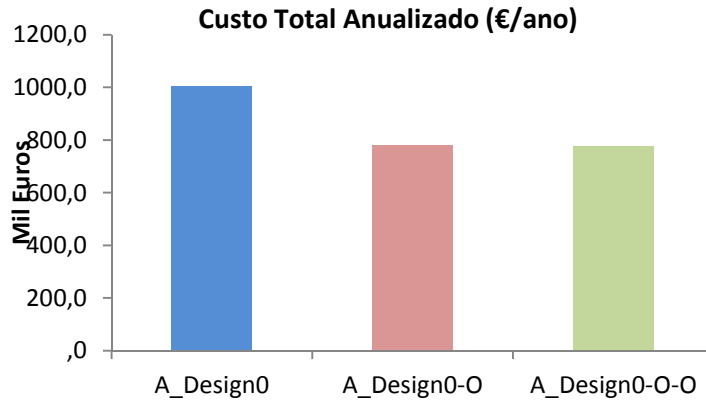


Figura 29 – Valores dos custos totais anualizados para os melhores designs

O AEA para o cenário “Sem divisão de correntes” gerou a primeira rede de permutadores de calor com o nome “A_Design0” e através de duas otimizações sucessivas obteve-se a melhor rede de permutadores tendo em consideração o custo total anualizado.

Nas figuras em baixo podemos ver a evolução da rede de permutadores a partir do caso inicialmente gerado, “A_Design0”.

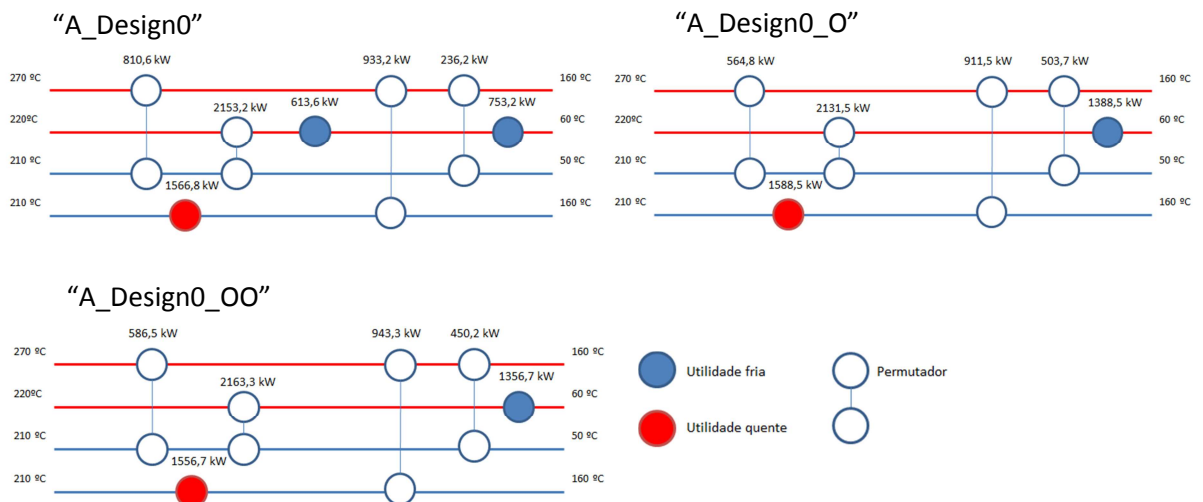


Figura 30 – Evolução da RPC desde o “A_Design0” até ao “A_Design0-OO”

Melhor Design no Cenário “Com divisão de correntes (splits)”

Para o Cenário “com divisão de correntes (splits)” foi dada uma ordem para o programa gerar casos, em que no máximo, cada corrente pudesse ser dividida por dois, ou seja, que permitisse no máximo dois “split branches”.

Foram gerados dois designs, que posteriormente foram otimizados através da função “Optimizing a Network”. Na tabela 7 estão representadas os valores dos custos totais anualizados para o melhor design gerado para o cenário “Com divisão de correntes (splits)”.

Tabela 7 – Valores para o custo total anualizado do melhor design e poupanças através da opção de otimização

Design	TAC (€/ano)	Redução em valor absoluto (€)	Redução Total (%TAC)
A_Splitdesign0	1.055.280		
A_Splitdesign0-O	790.032	265.248	25,14

Na figura 30 podemos verificar a evolução da RPC, para o cenário em causa

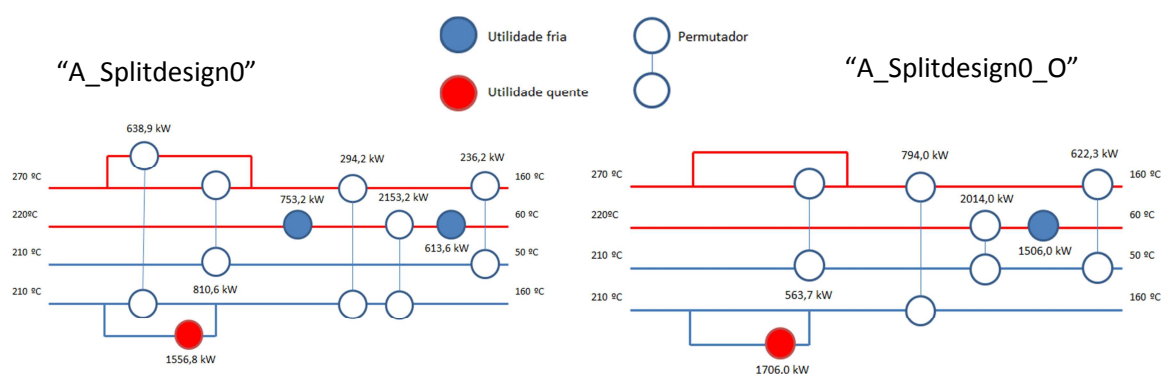


Figura 31 – Evolução da RPC desde o “A_Splitdesign0” até ao “A_Splitdesign0-O”

Para todas as redes geradas e ilustradas neste trabalho, os círculos a azul representam utilidades frias, os círculos a vermelho as utilidades quentes e os círculos a branco os permutadores entre correntes.

De todas as RPC geradas para os dois casos, foi o “A_Design0-OO” do cenário “sem divisão de correntes” o que apresentou o menor valor de custo total anualizado. Na figura 32 está representado o esquema do processo químico com a respectiva integração energética das correntes.

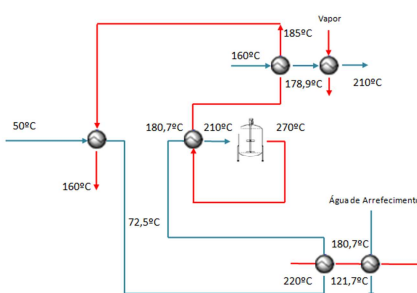


Figura 32 – Integração energética das correntes processuais para o melhor design do Caso I

2.3. Caso II

Produção de Benzeno

Este exemplo é baseado num caso amplamente detalhado no livro “Analysis, Synthesis, and Design of Chemical Processes” (Turton, 1998) e não pretende ser uma cópia ou reprodução, mas sim um ponto de partida para a construção de um processo para futura integração energética e avaliação económica.

O fluxograma processual está representado na figura 33 de uma forma simples e é composto por duas correntes de alimentação frescas, uma de hidrogénio e outra de tolueno, um reactor adiabático, uma fase de separação e uma coluna de destilação.

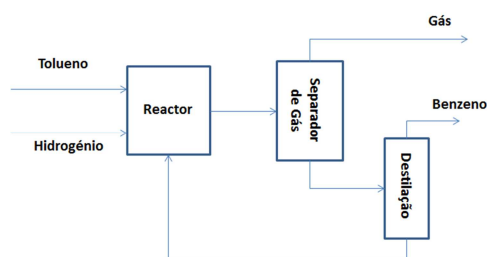


Figura 33 – Fluxo do processo para a produção de benzeno

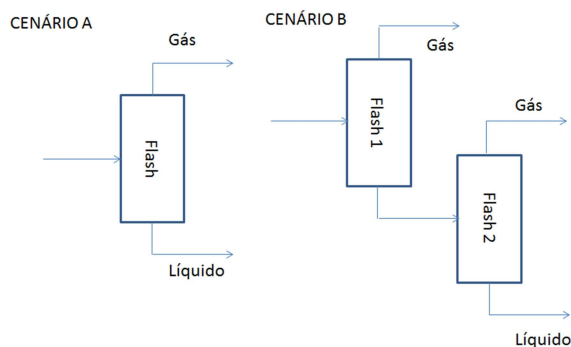


Figura 34 – Fluxo do processo no separador de gás para o cenário A e B

A alimentação fresca designada de hidrogénio é composta por 286 kmol/h de hidrogénio e de 15 kmol/h de metano. A corrente de alimentação fresca de tolueno é composta por 108,7 kmol/h.

O processo foi simulado em Aspen Hysys e na figura 34 e 35 podemos ver o fluxograma do processo mais detalhado, com as correntes mais importantes do processo identificadas de 1 a 10.

A corrente 1 é aquecida dos 62,16 até aos 543 °C, para depois entrar no reactor. A reacção seguinte desenvolve-se no reactor de conversão (%C = 75).



À saída do reactor (corrente 3) a temperatura é de 654,8 °C, que depois é arrefecida para os 38 °C. A corrente 4 entra na fase de separação que é composta por separadores tipo “flash” seguida de uma coluna de destilação. O(s) separadore(s) “flash” servem para remover praticamente todo o metano que se forma bem como o hidrogénio em excesso. A fase de separação é composta por dois cenários, o cenário A composto apenas por um separador tipo “flash” e o cenário B, onde a fase de separação é composta por dois separadores tipo “flash” (figura 34).

Depois uma coluna de destilação constituída por 25 pratos onde o condensador e o ebulidor trabalham a uma pressão de 2,5 bar é responsável pela restante separação dos componentes que circulam no processo. O condensador separa o benzeno dos componentes mais voláteis que ainda restam. Todos as correntes gasosas provenientes dos separadores e da coluna de destilação são posteriormente juntas e enviadas para venda. No resíduo da coluna de destilação sai uma corrente de tolueno que depois é reciclado.

Cenário A

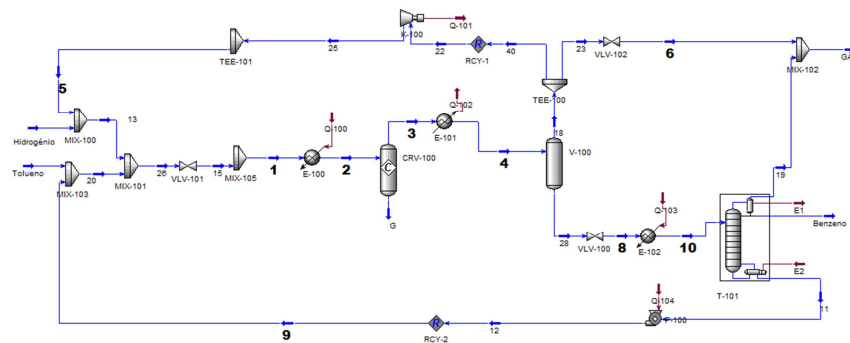


Figura 35 – Fluxograma do processo (PDF) de produção de benzeno para o cenário A

Cenário B

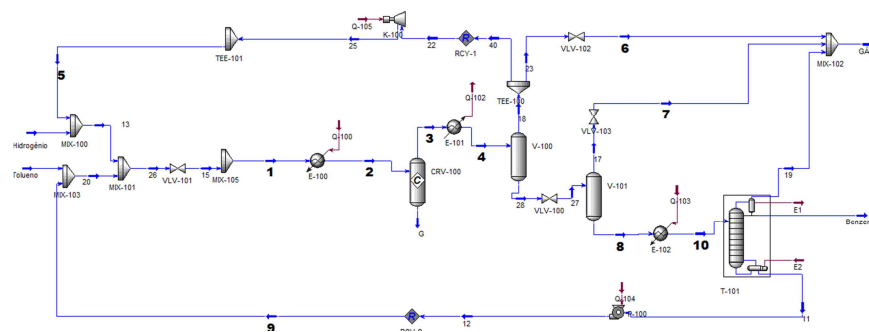


Figura 36 – Fluxograma do processo (PDF) de produção de benzeno para o cenário B

Integração energética dos Cenários A e B

Seleção da temperatura mínima óptima de funcionamento

Através do separador “Range Targeting” pertencente ao cenário respectivo do painel de visualização do AEA, temos acesso a uma variedade de gráficos e aos respectivos valores tabelados para os objectivos correspondentes a um ΔT_{\min} de funcionamento. A escolha do ΔT_{\min} de funcionamento é de extrema importância, porque todos os custos (capital e operacional) são influenciados pela temperatura mínima de funcionamento.

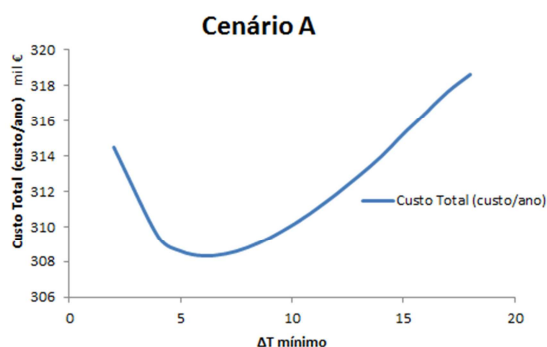


Figura 37 – Variação do custo total em função do ΔT_{\min} para o cenário A

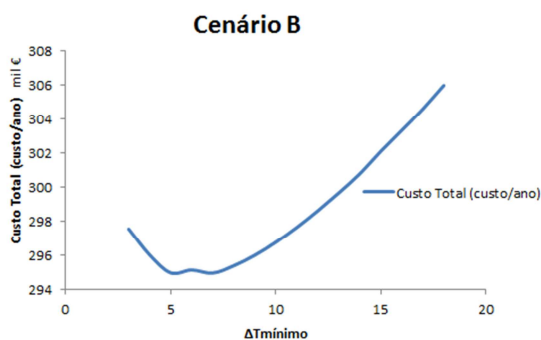


Figura 38 – Variação do custo total em função do ΔT_{\min} para o cenário B

O valor de $\Delta T_{\min}=6^{\circ}\text{C}$ apresenta um custo total mínimo para os dois cenários. No entanto o valor escolhido para temperatura mínima de funcionamento foi de 10 °C que corresponde a um custo total anualizado de 310,1 mil € para o cenário A e de 296,8 mil € para o B.

Para a integração energética deste processo foram considerados cinco anos de vida do projecto, 8765,76 horas de operação por ano e uma taxa de rentabilidade (ROR) de 10 % e um $\Delta T_{\min}= 10^{\circ}\text{C}$

Consumos mínimos de energia

O conceito de curvas compostas quente e fria aparece associado às representações efectuadas sobre um diagrama temperatura *versus* potência térmica disponível das correntes quentes e frias do processo. Através delas podemos avaliar as necessidades entálpicas dos processos, tais como:

- Quantidade máxima de energia que é possível recuperar através da integração de correntes do processo.
- Quantidades mínimas de calor a fornecer e/ou a retirar do processo
- Localização do ponto de estrangulamento, para um ΔT_{\min} , correspondente às temperaturas de maior aproximação das curvas compostas.

Os gráficos da figura 39 e 40, foram construídos com valores retirados do AEA, tabelados no separador “Targets” do painel de visualização do cenário A e B, donde podemos retirar os valores para construir as curvas compostas, a grande curva composta e as curvas compostas balanceadas.

Para a transferência de calor ser possível é necessário que a curva composta quente (CCQ) se posicione em toda a gama de temperaturas de integração, acima da curva composta fria (CCF) e é necessário que exista um valor mínimo de diferença de temperaturas, de modo a garantir uma força motriz à transferência de calor. O valor de ΔT_{\min} é a menor diferença de temperaturas permitida entre duas correntes, uma quente e uma fria.

Uma análise à variação do ΔT_{\min} permite chegar à conclusão que quanto menor for, menor será a necessidade de utilidades exteriores, pois a integração entre correntes será maior e maior será a área de transferência de calor, assim como será maior também o custo associado ao equipamento. Como podemos verificar, a título de exemplo na tabela 8, retirada do AEA, Cenário A, Caso II.

Tabela 8 – Valores dos objectivos (“targets”) para diferentes ΔT_{\min} do Caso II, Cenário A

ΔT_{\min}	Aquecimento (kW)	Arrefecimento (kW)	CC (€)	OC (€/ano)	TAC(€/ano)
2	2459	3538	296419	194445	314474
4	2506	3584	275166	197983	309407
5	2529	3608	268796	199753	308597
6	2552	3631	263773	201522	308332
7	2575	3654	259658	203291	308435
8	2598	3677	256193	205061	308802
9	2622	3701	253214	206830	309365
10	2645	3724	250613	208599	310081

Os valores para a construção dos gráficos da Curvas Composta foram retirados do AEA, do separador “Targets”, na página plots/tables nos respectivos Cenários A e B. Podemos verificar, através de uma ampliação do gráfico, o valor da temperatura de estrangulamento, para a corrente fria e para a corrente quente.

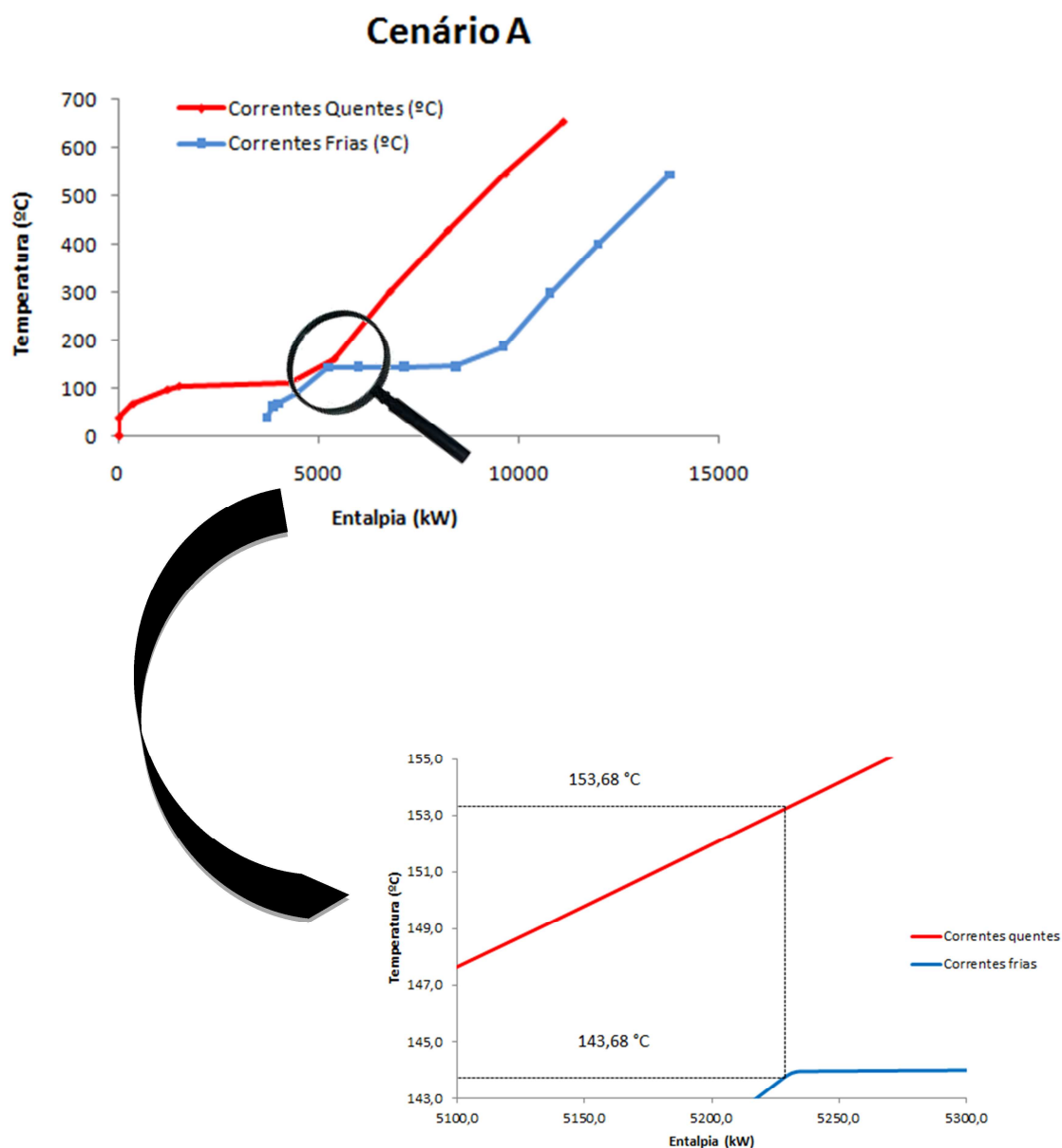


Figura 39 – Curva composta para o Cenário A, para ΔT_{\min} de 10 °C

Para o Cenário B, o procedimento para construir a curva composta, foi o mesmo que para o Cenário A, e podemos visualizar as temperaturas de estrangulamento (“pinch”). Ver figura 40.

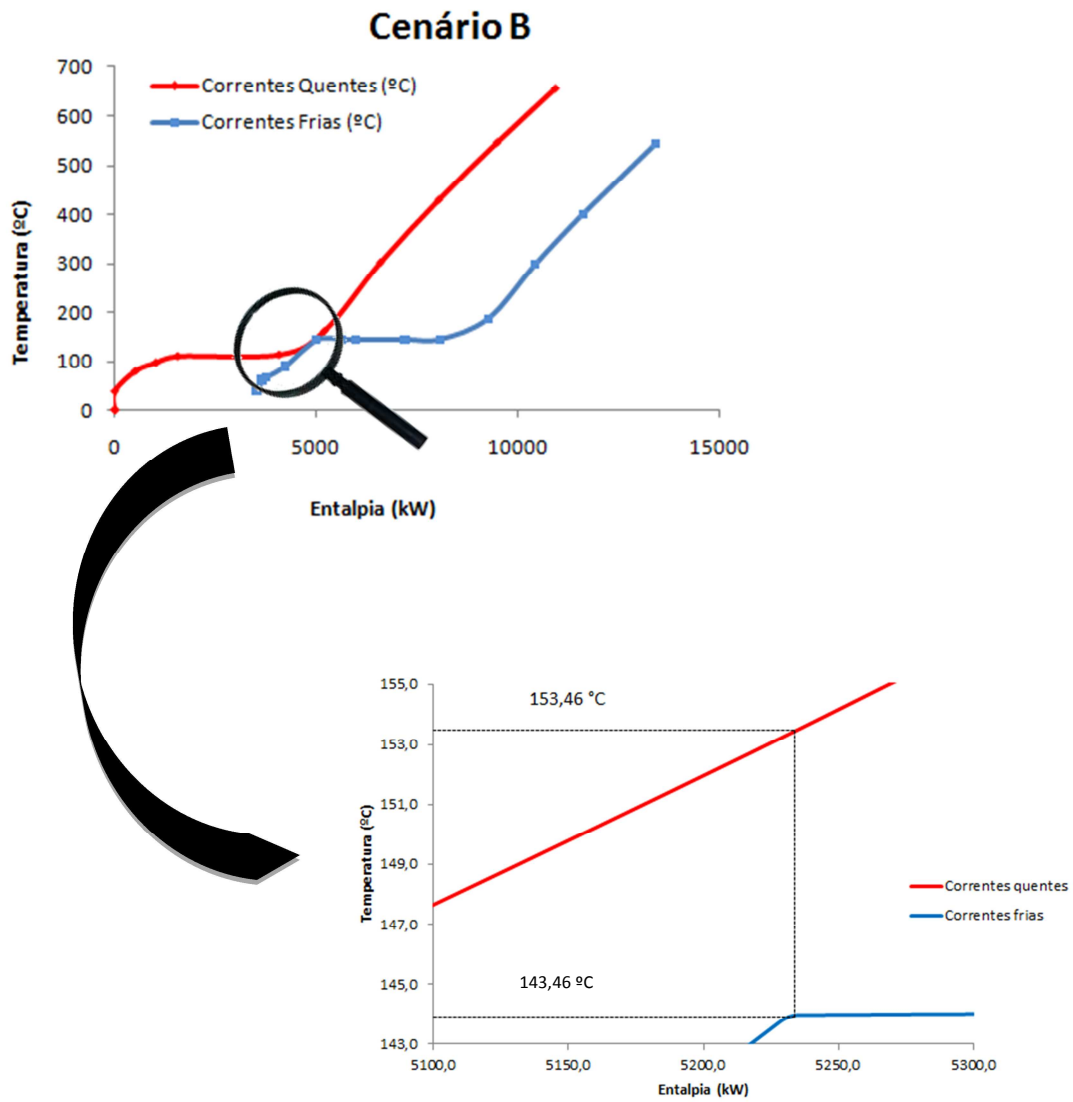


Figura 40 – Curva composta para o Cenário B, para ΔT_{\min} de 10 °C

Tabela 9 – Objectivos energéticos para o cenário A e B

Objectivos energéticos (kW)		
	Cenário A	Cenário B
Aquecimento	2645	2498
Arrefecimento	3724	3537
Calor recuperado	7395	7379

Os objectivos energéticos são definidos como a quantidade mínima de utilidades necessárias para satisfazer as necessidades do processo para um determinado ΔT_{\min} . A título de exemplo podemos verificar na figura 41 a representação das necessidades energéticas assim como a energia máxima que poderá ser recuperada para o correspondente ΔT_{\min} para o Cenário A do Caso II.

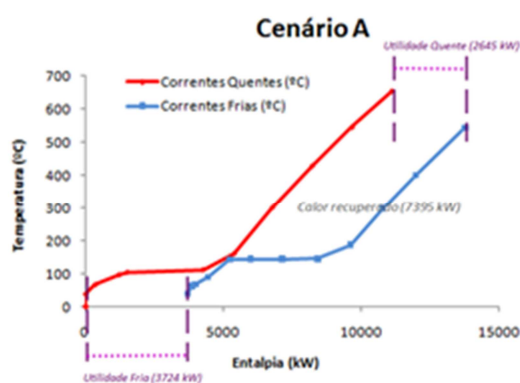


Figura 41 – Curva composta para o Cenário A, para ΔT_{\min} de 10 °C e representação gráfica dos objectivos energéticos.

Objectivo para as áreas de permuta

O objectivo da área de permuta é a quantidade de área de permuta requerida para as correntes quentes e frias numa RPC para atingirem os valores de temperatura especificados e é calculada segundo a fórmula de Bath, explicado em anexo (anexo 4.1 – área de permuta).

Tabela 10 – Objectivos para as áreas de permuta para o cenário A e B

Objectivos de área de permuta (m2)		
	Cenário A	Cenário B
Contra corrente	597,9	586,6
Shell & tube	771,5	758,2

Objectivo para o número de permutadores

O objectivo para o número mínimo de permutadores considerando o “pinch” é calculado da seguinte forma:

$$N_{u,min} = (N_A - 1) + (N_B - 1)$$

Onde: $N_{u,min}$ – Objectivo do número mínimo de permutadores

N_A – Número de correntes de processo e de utilidades acima do “pinch”

N_B – Número de correntes de processo e de utilidades abaixo do “pinch”

O objectivo para o número de “Shells” depende da configuração do permutador e/ou da restrição da área máxima por “Shell”.

Tabela 11 – Objectivos para o número de permutadores para o cenário A e B

Objectivo número de permutadores		
	Cenário A	Cenário B
Mínimo total	6	6
Mínimo MER	7	7
Shells	12	12

Objectivo para os custos

Os custos operacionais da RPC é o custo requerido para operar o processo, e neste caso envolve apenas o custo das utilidades e a quantidade de potência térmica disponibilizada. O custo de capital da RPC é um investimento feito de uma só vez para construção da RPC, que depois pode ser anualizado, tal como está referido em anexo, (anexo 4.1 – Objectivo Custos).

Tabela 12 – Objectivos para os custos do cenário A e B

Objectivos custos (€)		
	Cenário A	Cenário B
Capital (€)	250.600	246.000
Operacionais (custo/ano)	208.600	197.100
Total anual (custo/ano)	310.100	296.800

Etapas e evolução da rede de permutador de calor para o cenário A e B

Cenário A

Depois de criado o projecto de integração do processo com o nome de “Produção de benzeno” no AEA através da extracção da informação das correntes do Aspen Hysys, podem ser desenvolvidos designs automáticos gerados pelo software, tal como foi exemplificado no caso I.

Mediante a temperatura mínima de funcionamento escolhida, que neste caso foi de 10°C, o software gerou apenas dois casos próximos do óptimo, o “A_Design0” e o “A_Design1”.

O “A_Design0” foi aquele que apresentou resultados mais ambiciosos e estão descritos na tabela seguinte:

Tabela 13 – Custos para a RPC “A_Design0” do cenário A

Índice de custo da RPC “A_Design0”		
	Custo (€)	% do Objectivo
Aquecimento (custo/ano)	175.704	95,68
Arrefecimento (custo/ano)	24.202	96,93
Custos operatórios (custo/ano)	199.906	95,83
Capital (€)	275.078	109,76
Custo Total (custo/ano)	311.294	100,39

O “A_Design0” foi posteriormente sujeito a uma optimização da função objectivo (minimização do custo total) e foi obtido uma RPC (“A_design0-O”), através de uma reorganização (optimização) da transferência de calor nos permutadores. Os resultados do índice de custo da nova RPC estão descritos na tabela 14.

Tabela 14 - Custos para a RPC “A_Design0-O” do cenário A

Índice de custo da RPC A_Design0-O		
	Custo (€)	% do Objectivo
Aquecimento (custo/ano)	177.461	96,64
Arrefecimento (custo/ano)	24.372	97,61
Custos operatórios (custo/ano)	201.833	96,76
Capital (€)	262.971	104,93
Custo Total (custo/ano)	308.319	99,43

A rede de permutadores resultantes desta optimização cujo os valores dos custos e os respectivos desvios aos objectivos estão demonstrados na tabela anterior, contém um permutador que não respeita o ΔT_{\min} , deste modo será necessário ao utilizador acertar os

Tabela 16 – Características de algumas correntes do processo para o cenário A

Nome	Pressão [atm]	Temperatura [C]	Caudal Mássico [kg/h]	Fracção de Vapor
Tolueno	25,46	59,00	10015,70	0,00
Hidrogénio	25,17	25,00	827,68	1,00
1	24,67	62,15	14813,40	0,72
2	24,67	543,00	14813,40	1,00
3	24,67	654,80	14812,90	1,00
4	23,59	38,00	14812,90	0,72
5	25,17	44,99	633,44	1,00
6	2,47	35,19	2533,77	1,00
8	2,86	38,35	11645,70	0,02
9	25,46	146,28	3336,53	0,00
10	2,57	90,00	11645,70	0,05
Benzeno	2,47	66,77	8148,90	0,00
Gás	2,47	35,99	2694,06	1,00

Cenário B

À semelhança do cenário A, o cenário B foi sujeito ao mesmo processo no sentido de obter a RPC que apresente os custos totais menores respeitando a temperatura mínima de aproximação entre as correntes do processo.

Tabela 17 - Custos para a RPC inicial "Design0" do cenário B

Índice de custo da RPC A_Design0		
	Custo (€)	% do Objectivo
Aquecimento (custo/ano)	165.384	95,36
Arrefecimento (custo/ano)	22.940	96,72
Custos operatórios (custo/ano)	188.324	95,52
Capital (€)	284.454	115,64
Custo Total (custo/ano)	303.508	102,28

Tabela 18 - Custos para a RPC otimizada "Design0-O" do cenário B

Índice de custo da RPC A_Design0-O		
	Custo (€)	% do Objectivo
Aquecimento (custo/ano)	167.038	96,31
Arrefecimento (custo/ano)	23.099	97,40
Custos operatórios (custo/ano)	190.137	96,44
Capital (€)	260.678	105,98
Custo Total (custo/ano)	295.694	99,64

Tabela 19 - Custos para a RPC otimizada “Design0-O_Benzeno B” do cenário B

Índice de custo da RPC Design0-O_Benzeno_B		
	Custo (€)	% do Objectivo
Aquecimento (custo/ano)	178.694	103,03
Arrefecimento (custo/ano)	24.225	102,14
Custos operatórios (custo/ano)	202.919	102,93
Capital (€)	244.781	99,51
Custo Total (custo/ano)	302.039	101,78

Os resultados dos objectivos relativamente aos custos para o cenário B estão ilustrados nas figuras anteriores, onde podemos verificar a evolução dos custos associados ou relativos às redes de permutadores de calor geradas pelo software e finalmente ajustadas pelo utilizador.

Na figura 46 podemos ver a melhor RPC gerada para o cenário B do mesmo processo, que depois irá evoluir no sentido de obter a RPC final para o respectivo cenário.

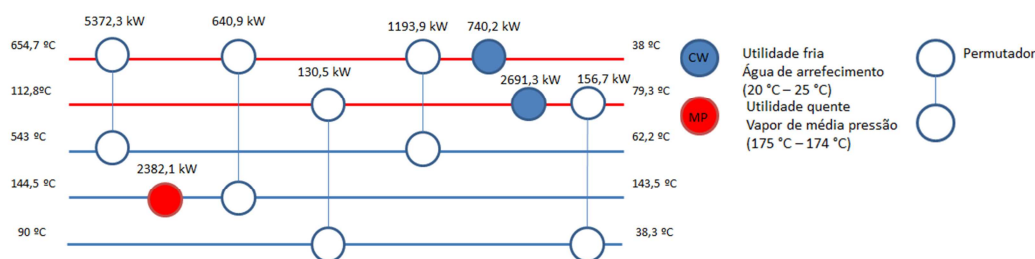


Figura 46 – RPC inicial gerada pelo AEA, “Design0”

Na figura 47 observamos o ciclo que o software irá utilizar na eliminação do permutador de calor que permuta menos energia, sendo que a entalpia do permutador eliminado irá ser adicionada ao outro permutador que faz parte do ciclo, como podemos ver na figura 46 e 47.

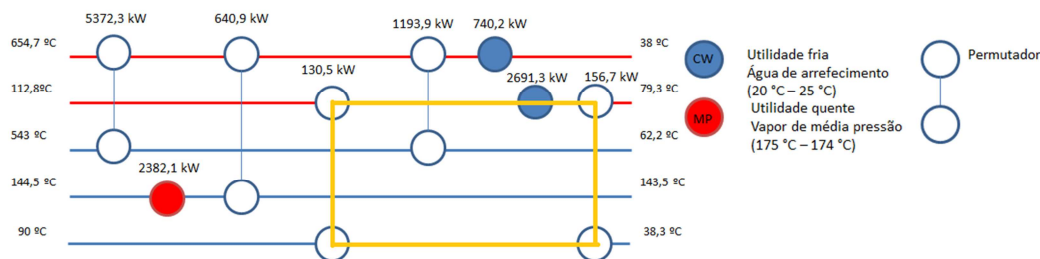


Figura 47 – Eliminação de um permutador do ciclo inicial gerada pelo AEA, “Design0”

Na figura 48 podemos finalmente ver a RPC otimizada pelo software, no entanto à semelhança do caso anterior, o permutador que faz parte do percurso de relaxação existente não cumpre a temperatura mínima de aproximação entre correntes.

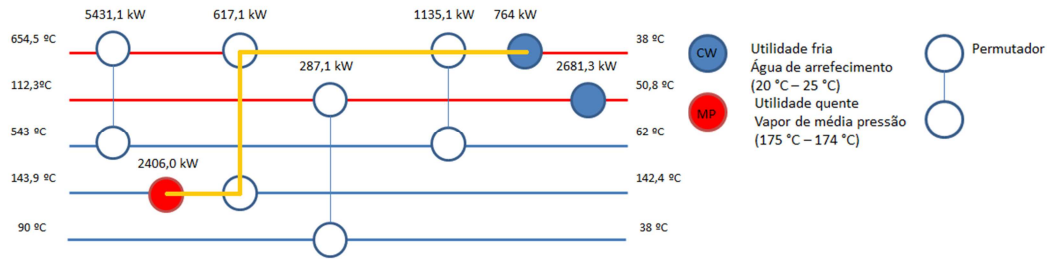


Figura 48 – Percurso de relaxação do “Design0-O”, para acerto do ΔT_{\min}

Depois de ajustado o calor pelas utilidades através do percurso de relaxação para que o permutador cumpra o ΔT_{\min} , obtemos finalmente a RPC final.

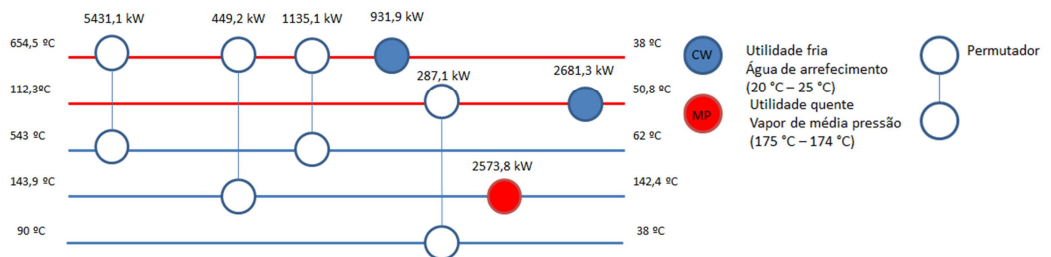


Figura 49 – RPC final obtida através do uso do software AEA, “Design0-O_Benzeno_B”

O projecto final para a rede de integração energética para o cenário B do processo de produção de benzeno construído no software de simulação Aspen Hysys, é ilustrado na figura seguinte

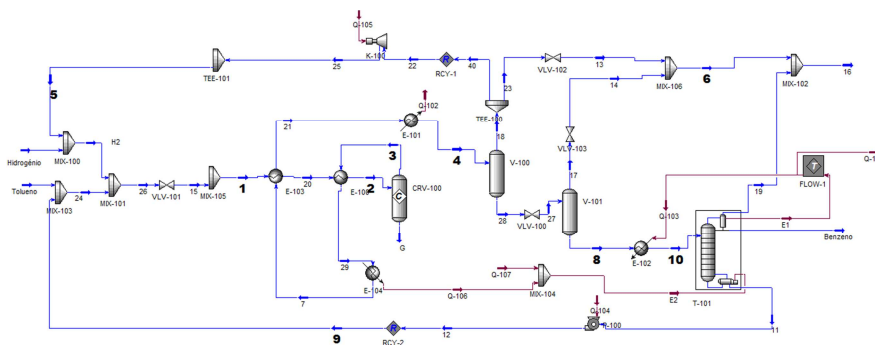


Figura 50 – Projecto de integração energética para o cenário B

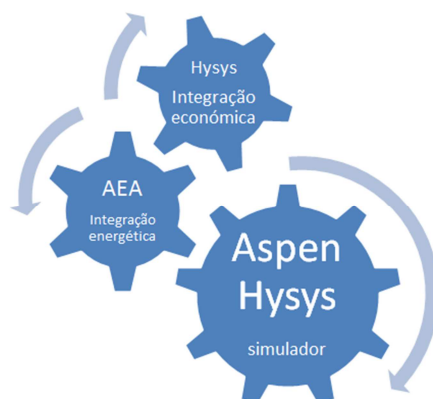
Tabela 20 – Características de algumas correntes do processo para o cenário B

Nome	Pressão [atm]	Temperatura [C]	Caudal Mássico [kg/h]	Fracção de Vapor
Tolueno	25,46	59,00	10015,70	0,00
Hidrogénio	25,17	25,00	827,68	1,00
1	24,67	62,16	14831,50	0,72
2	24,67	543,00	14831,50	1,00
3	24,67	654,70	14831,10	1,00
4	23,59	38,00	14831,10	0,72
5	25,17	44,99	633,43	1,00
6	2,47	35,23	2597,39	1,00
8	2,86	38,35	11600,20	0,00
9	25,46	145,99	3354,67	0,00
10	2,57	90,00	11600,20	0,00
Benzeno	2,47	79,34	8213,21	0,00
Gás	2,47	35,43	2629,75	1,00

Avaliação Económica Integrada

Através dos projectos de integração energética para os cenários A e B construídos no software Aspen Energy Analyzer e depois materializados no Aspen Hysys, onde as necessidades de aquecimento e arrefecimento são substituídas pelas utilidades disponíveis, e o calor recuperado através da integração energética é efectuado com a inclusão de permutadores de calor, podemos numa fase preliminar do projecto como esta, utilizar uma função disponível no Aspen Hysys, a avaliação económica integrada para facilitar uma possível tomada de decisão.










A ferramenta de integração económica disponível no Aspen Hysys permite aos modeladores de processo incorporar os custos relativos nos seus estudos de modelação. Oferece também a vantagem de poder balancear os custos de capital, os custos operatórios juntamente com aspectos técnicos do processo.

**Figura 51** – Análise energética e económica como parte integrante do Aspen Hysys

A utilização desta ferramenta torna-se quase intuitiva com a ajuda do Aspen Icarus Reference Guide (V7.1 2009), onde se pode consultar o tipo de equipamento e a sua descrição, intervalos de temperatura para o funcionamento, tipo de material de construção (MOC), pressão de funcionamento, entre outros.

Etapas importantes da Integração Económica

Tabela 21 – Descrição dos ícones relativos à avaliação económica integrada

Ícone	Função
	Abre o sumário das operações unitárias
	Activa e desactiva a avaliação económica
	Carrega a informação da simulação
	Ligação das operações unitárias ao equipamento
	Dimensiona o equipamento
	Avaliação económica (custo de capital e custos operatórios)
	Abre o sumário do equipamento
	Desactiva a avaliação integrada; remove ficheiros
	Cria o relatório de análise económica em Excel

A análise económica integrada do Aspen Hysys escolhe o tipo de equipamento para cada operação unitária e dimensiona o equipamento. Por vezes, é necessário que o utilizador corrija algum tipo de erro que possa surgir no equipamento que o software escolhe por defeito.

Neste caso de estudo (produção de benzeno), todo o equipamento será escolhido pelo software por defeito, à excepção das seguintes características dos equipamentos referenciados nas tabelas (22 a 23).

Na tabela 22 podemos visualizar que o tipo de permutador “Float Head” foi escolhido por defeito pelo software. O material de construção (MOC) também foi utilizado por defeito, apenas no permutador E-103, devido ao facto de trabalhar a temperaturas superiores a 500°C, foi escolhido um material mais apropriado para as condições.

Tabela 22 – Descrição do tipo de equipamento e material dos permutadores de calor

Permutadores	Tipo	Material de Construção	
		Shell	Tube
E-101	FLOAT HEAD	A285C	A214
E-102	FLOAT HEAD	A285C	A214
E-103	FLOAT HEAD	SS304	304S
E-104	FLOAT HEAD	A285C	A214
E-105	FLOAT HEAD	A285C	A214

Na tabela 23 podemos visualizar os tipos de tanques (reactor e “flashes”) e os seus materiais de construção. Tanto o tipo de equipamento como o material de construção, para este equipamento, foram escolhidos pelo utilizador.

Tabela 23 – Descrição do tipo de vasos e reactores

Vasos/Reactores	Tipo	Material de Construção	
		Shell	Camisa
CRV-100	Tanque vertical	SS316	NA*
V-100	Tanque vertical	CS	NA*
V-101 (apenas cenário B)	Tanque vertical	CS	NA*

*NA – Não aplicável

Na tabela 24, tanto o tipo como o material de construção foram seleccionados por defeito, pelo próprio software.

Tabela 24 – Descrição do tipo de bombas e compressores

Bombas/Compressores	P-100	K-101	T-101 reflux pump
Material	CS	CS	CS

Na tabela 25, são descritos os componentes da coluna de destilação e, também neste caso, foram seleccionados por defeito pelo próprio software.

Tabela 25 - Componentes da coluna de destilação T-101, tipo e material de construção

Coluna de Destilação T-101		Material de Construção	
Designação	Tipo	Tube	Shell
Torre	Single diameter tower (TW)	NA*	A285C
Ebulidor	"U tube"	A214	A285C
Bateria de refluxo	Tanque horizontal ("Horiz Drum")	NA*	CS
Condensador	"Fixed TS"	A214	A285C
Bomba de refluxo	Bomba centrífuga		CS

*NA – Não aplicável

Na tabela 26 podemos visualizar todo o equipamento e os custos associados a cada um, para o cenário A, do Caso II.

Tabela 26 – Descrição do tipo de equipamento utilizado para cálculo integrado dos custos para cenário A

Nome	Tipo	Custos Equipamento	Custos Directos Totais [USD]
CRV-100	DVT CYLINDER	180.500	392.400
E-101	DHE FLOAT HEAD	14.900	71.900
E-102	DHE FLOAT HEAD	9.500	61.100
E-103	DHE FLOAT HEAD	444.900	939.500
E-104	DHE FLOAT HEAD	9.800	58.700
E-105	DHE FLOAT HEAD	55.400	174.500
K-101	DGC CENTRIF	841.800	952.500
P-100	DCP CENTRIF	42.300	72.200
T-101-cond	DHE FIXED T S	18.000	84.500
T-101-cond acc	DHT HORIZ DRUM	15.000	95.600
T-101-reb	DRB U TUBE	60.000	148.700
T-101-reflux pump	DCP CENTRIF	5.800	38.100
T-101-tower	DTW TRAYED	172.000	402.400
V-100	DHT HORIZ DRUM	24.700	100.900

Na tabela 27 encontram-se os resultados correspondentes ao cenário A do Caso II, onde podemos verificar, entre vários dados, a taxa interna de retorno (IRR).

Tabela 27 – Dados económicos para o cenário A, Caso II

Nome	Sumário
Custo de capital total $\times 10^6$ [USD]	9,351
Custos operatórios totais $\times 10^6$ [USD/ano]	189,931
Custos totais de matérias primas $\times 10^6$ [USD/ano]	173,497
Vendas totais [USD/ano] $\times 10^6$	217,129
Custo total com utilidades $\times 10^6$ [USD/ano]	0,930
IRR [percentagem]	35,3
Período de "Payout" [ano]	5,8
Taxa de retorno desejável [Percentagem/ano]	20

Na tabela 28 podemos visualizar todo o equipamento e os custos associados a cada um, para o cenário B, do Caso II.

Tabela 28 – Descrição do tipo de equipamento utilizado para cálculo integrado dos custos para cenário B

Nome	Tipo	Custos de equipamento	Custos Directos Totais [USD]
CRV-100	DVT CYLINDER	180.500	392.400
E-101	DHE FLOAT HEAD	14.800	71.800
E-102	DHE FLOAT HEAD	9.500	61.100
E-103	DHE FLOAT HEAD	445.000	939.600
E-104	DHE FLOAT HEAD	9.800	58.700
E-105	DHE FLOAT HEAD	68.600	188.400
K-101	DGC CENTRIF	841.800	952.500
P-100	DCP CENTRIF	42.300	72.200
T-101-cond	DHE FIXED T S	17.300	83.800
T-101-cond acc	DHT HORIZ DRUM	15.000	95.900
T-101-reb	DRB U TUBE	56.800	141.900
T-101-reflux pump	DCP CENTRIF	5.800	38.100
T-101-tower	DTW TRAYED	172.000	402.400
V-100	DHT HORIZ DRUM	24.700	100.900
V-101	DHT HORIZ DRUM	17.600	113.800

Na tabela 29 encontram-se os resultados correspondentes ao cenário B do Caso II, onde podemos verificar, que a taxa interna de retorno é de 36,1% ligeiramente superior ao do cenário A. Deste modo, podemos concluir que o projecto do cenário B seria ligeiramente mais ambicioso que o cenário A.

Tabela 29 – Dados económicos para o cenário B, Caso II

Nome	Sumário
Custo de capital total $\times 10^6$ [USD]	9,683
Custos operatórios totais $\times 10^6$ [USD/ano]	189,886
Custos totais de matérias-primas $\times 10^6$ [USD/ano]	173,497
Vendas totais $\times 10^6$ [USD/ano]	218,158
Custo total com utilidades $\times 10^6$ [USD/ano]	0,8869
IRR [percentagem]	36,1
Período de “Payout” [ano]	5,7
Taxa de retorno desejável [Percentagem/ano]	20

Para o cálculo dos custos das matérias-primas foi considerado um preço igual para os dois cenários que foi para o tolueno 2 \$/kg, para o hidrogénio 2 \$/kg e para o cálculo das vendas totais foi considerado o preço de 3 \$/kg para o Benzeno e 1 \$/kg para o gás, (O preço das matérias-primas e dos produtos foram determinados de forma a que o processo fosse rentável).

2.4. Caso III

Produção de Cloreto de Vinil

Ao contrário do caso de estudo anterior composto por dois cenários A e B, em que foi feita a integração energética através do AEA e a análise económica integrada disponível no Aspen Hysys dos dois cenários de modo a facilitar uma tomada de decisão, o caso de estudo actual pretende utilizar as ferramentas disponíveis do software para construir o fluxograma (“PDF”), com a respectiva integração energética e, através da economia integrada do Aspen Hysys, estudar a influência do tipo de material de construção (MOC) no processo.

Este exemplo é baseado num caso perfeitamente descrito e detalhado no livro “Product & Process Design Principles” (Seader, 2003).

O fluxograma do processo de produção de cloreto de vinil está representado, de uma forma bastante simples, na figura 52.

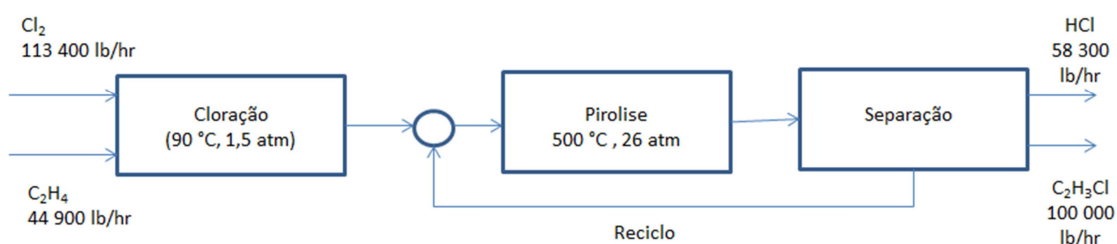


Figura 52 – Fluxograma simples do processo de produção de cloreto de vinil

Existem diversas reacções para a produção de cloreto de vinil, a reacção utilizada para este caso de estudo é a cloração directa do etileno.



Com posterior cracking térmico do dicloroetano proveniente da cloração directa do etileno.



Esta reacção de pirólise dá-se a uma temperatura de 500 °C e a uma pressão de 26 atm, depois disso o vapor é condensado, e à pressão de 12 atm entra na primeira coluna de destilação onde se retira como destilado o HCl, sendo o resíduo novamente sujeito a uma nova destilação para obter o cloreto de vinil como destilado e o dicloroetano como resíduo para posterior reciclagem.

Tabela 30 – Características de algumas correntes do processo de produção de cloreto de vinil

Nome	Pressão [atm]	Temperatura [C]	Caudal Mássico [kg/h]	Fase Vapor
C2H4	1,50	25,00	20366,50	1,00
Cl2	1,50	25,00	51476,10	1,00
3	1,50	90,00	71842,90	0,00
4	1,50	90,04	119738,00	0,00
5	26,00	91,39	119738,00	0,00
7	26,00	500,00	119738,00	1,00
8	26,00	170,00	119733,00	1,00
9	26,00	6,02	119733,00	0,00
10	12,00	6,50	119733,00	0,00
HCl	12,00	-26,18	26467,90	1,00
12	12,00	95,48	93265,20	0,00
13	4,80	58,24	93265,20	0,22
VC	4,80	32,34	45369,80	0,00
16	1,50	90,11	47895,30	0,00

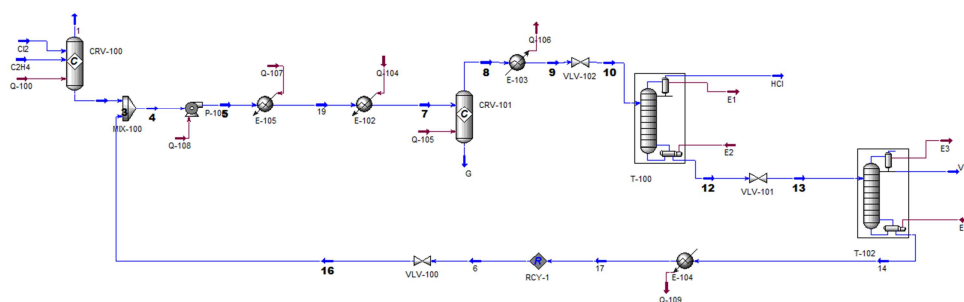


Figura 53 – Fluxograma do processo de produção de cloreto de vinil

Integração energética do Caso III

Para a integração energética deste processo foram considerados cinco anos de vida do projecto, 8765,76 horas de operação por ano e uma taxa de rentabilidade (ROR) de 10 % e um $\Delta T_{min} = 10 \text{ }^\circ\text{C}$. Na tabela 31 podemos ver as temperaturas das utilidades.

Tabela 31 – Utilidades do caso III

Utilidade	$T_i \text{ (}^\circ\text{C)}$	$T_f \text{ (}^\circ\text{C)}$
Refrigerante 2	-40,0	-39,0
Água de arrefecimento	15,0	20,0
Refrigerante 1	-25,0	-24,0
Vapor de baixa pressão	125,0	124,0
Vapor de alta pressão	250,0	249,0
Fired Heat (1000)	1000,0	400,0
Vapor de média pressão	175,0	174,0

A evolução da rede de permutadores de calor com a ajuda do software é representada nas figuras seguintes, onde podemos identificar a amarelo um ciclo.

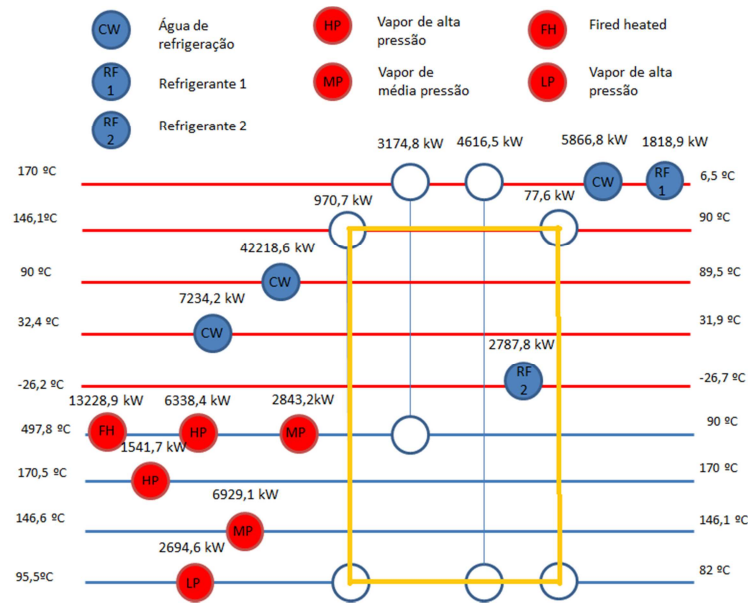


Figura 54 – RPC gerada pelo AEA para o Caso de estudo III e otimizada pelo software, com identificação de um ciclo

Posteriormente foi eliminado o ciclo na RPC, identificado com uma linha amarela na figura 54 através da remoção do permutador que troca menos energia (77,6 kW).

Foi obtida a seguinte RPC (ver figura 55) onde, através do percurso de relaxação, podemos acertar as temperaturas mínimas de aproximação, ou seja, eliminar as transgressões ao ΔT_{min} .

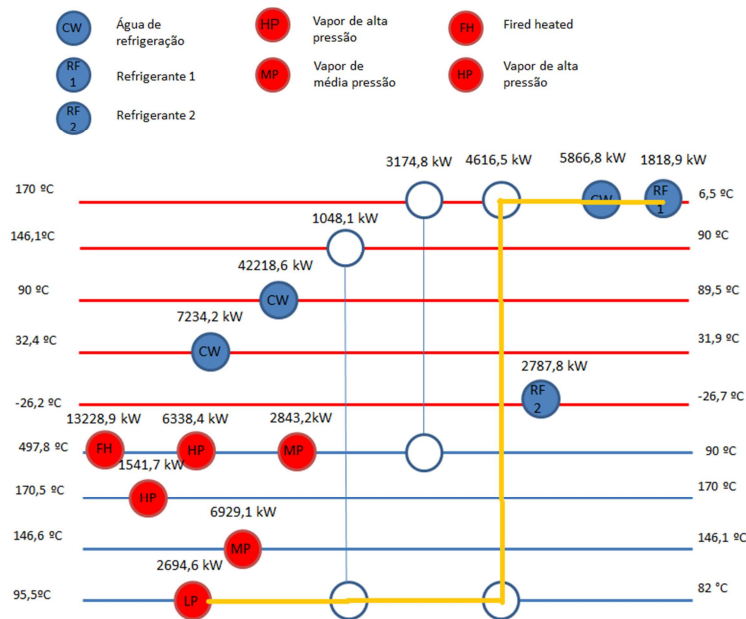


Figura 55 – RPC gerada pelo AEA para o Caso de estudo III e otimizada pelo software, com identificação do percurso de relaxação

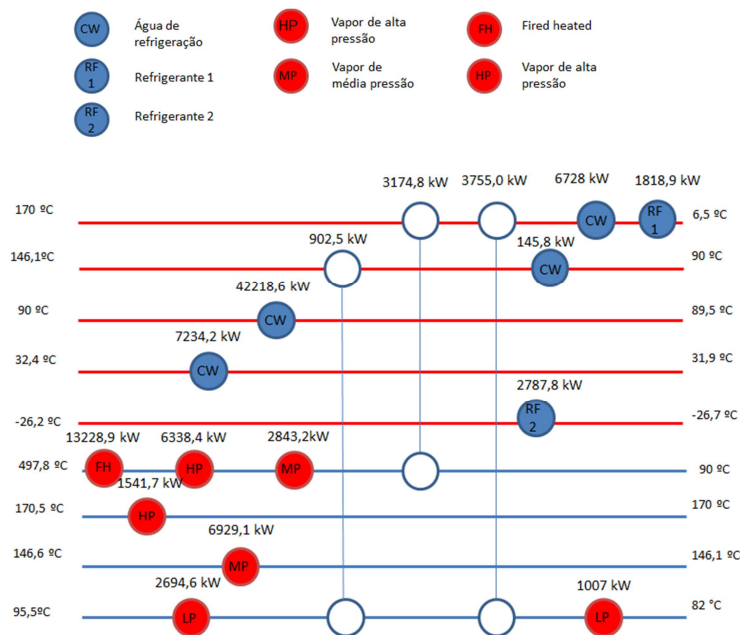


Figura 56 – Rede de permutador de calor final para o caso de produção de cloreto de vinil

Os custos da rede de permutador de calor (RPC) e a percentagem do objectivo atingido estão representados na tabela seguinte

Tabela 32 – Custos para a RPC otimizada “Design2-O” para o Caso III

Índice de custo da RPC Design2-O(2)		
	Custo (€)	% do Objectivo
Aquecimento (custo/ano)	3.295.991	100,09
Arrefecimento (custo/ano)	839.484	100,16
Custos operatórios (custo/ano)	4.135.474	100,10
Capital (€)	2.781.621	105,90
Custo Total (custo/ano)	5.261.844	101,29

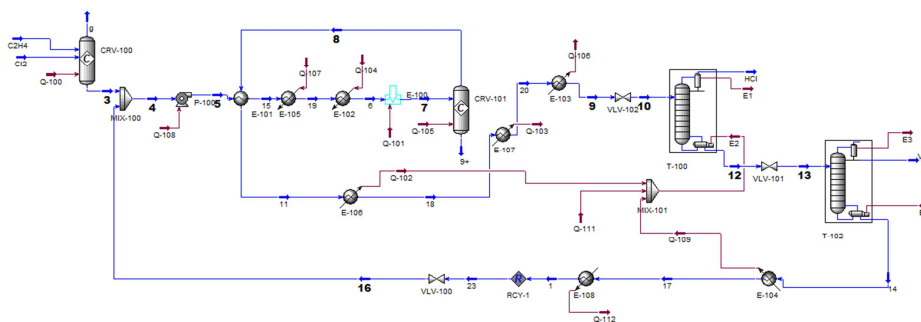


Figura 57 – Fluxograma do processo de produção de cloreto de vinil, com integração energética

Avaliação económica do Caso III

Para a avaliação económica do caso de estudo foi utilizada, mais uma vez, a ferramenta disponível do Aspen Hysys (avaliação económica integrada). O tipo de equipamento e o material de construção (MOC) foram seleccionados com a ajuda do Aspen Icarus Reference Guide V7.1 (2009) e estão descritos nas tabelas seguintes.

Este estudo é composto por dois cenários, A e B. O cenário A é composto pela avaliação económica simples do projecto por aplicação de um determinado material, enquanto o cenário B é baseado numa redução de custos do cenário anterior através da localização e selecção dos pontos críticos para uma reavaliação de custos quanto ao material de construção que podem ser alvo de melhoramento.

Cenário A

Para os reactores foram escolhidos tanques verticais com camisa. O material de construção foi diferente para cada reactor devido aos reagentes e aos produtos de reacção. Foi escolhido um material de construção mais resistente (SS316) para o reactor CRV-101 devido à formação de ácido clorídrico no seu interior, e para o reactor CRV-100 foi escolhido o material indicado no guia de referência do Aspen Icarus V7.1 (2009).

Tabela 33 – Reactores, tipo e material de construção para o caso de estudo

Reactores	Tipo	Material de Construção	
		Shell	Camisa
CRV-100	Tanque vertical encamisado	A515	CS
CRV-101	Tanque vertical encamisado	SS316	CS

Para os permutadores de calor foram utilizados, na maioria, permutadores do tipo “Floated Head”, sendo as excepções apenas o E-100, que é uma unidade de pirólise e o E-108 que, devido à sua pequena diferença de temperaturas entre os fluidos de permuta é do tipo “Fixed TS”.

O material de construção escolhido para os permutadores são descritos por defeito para os respectivos equipamentos no guia de referência do Aspen Icarus (2009).

Tabela 34 – Permutadores, tipo e material de construção para o caso de estudo

Permutadores	Tipo	Material de Construção	
		Shell	Tube
E-100	Unidade de pirólise	NA*	CS
E-101	"Float head"	A285C	A214
E-102	"Float head"	A285C	A214
E-103	"Float head"	A285C	A214
E-104	"Float head"	A285C	A214
E-105	"Float head"	A285C	A214
E-106	"Float head"	A285C	A214
E-107	"Float head"	A285C	A214
E-108	"Fixed TS"	A285C	A214

*NA – Não aplicável

A coluna de destilação T-100 retira todo o ácido clorídrico sob a forma gasosa e, como o cloreto de hidrogénio no seu estado puro é corrosivo, o material de construção escolhido para a coluna de destilação foi o Ni-201, uma liga recomendada para o cloreto de hidrogénio a temperaturas inferiores a 510 °C (Davis, 1996).

Tabela 35 – Componentes da coluna de destilação T-100, tipo e material de construção

Coluna de Destilação T-100		Material de Construção	
Designação	Tipo	Tube	Shell
Torre	Single diameter tower (TW)	NA*	NI201
Ebulidor	"U tube"	NI201	NI201
Bateria de refluxo	Tanque horizontal ("Horiz Drum")	NA*	NI201
Condensador	"Fixed TS"	NI201	NI201
Bomba de refluxo	Bomba centrífuga		CS

*NA – Não aplicável

Para a coluna T-102, o material de construção seleccionado foi o mencionado por defeito para o equipamento escolhido no guia de referência da Aspen Icarus V7.1 (2009).

Tabela 36 – Componentes da coluna de destilação T-102, tipo e materiais de construção

Coluna de Destilação T-102		Material de Construção	
Designação	Tipo	Tube	Shell
Torre	Single diameter tower (TW)	NA*	A 515
Ebulidor	"U tube"	A214	A285C
Bateria de refluxo	Tanque horizontal ("Horiz Drum")	NA*	A515
Condensador	"Fixed TS"	A214	A285C
Bomba de refluxo	Bomba centrífuga		CS

*NA – Não aplicável

Podemos verificar, através da tabela seguinte, os custos mais relevantes ou os que mais pesam nos custos totais com o equipamento do projecto (acima de 10% do custo total). Facilmente se detecta que a torre de destilação juntamente com o seu condensador e ebulidor representam a maior parte dos custos directos totais.

Tabela 37 – Estrutura de custos para equipamento que represente mais de 10% dos custos totais do cenário A

Nome	Tipo	Custo do equipamento [USD]	Custos directos totais [USD]	% do Custo total
T-100-cond	DHE FIXED T S	3.757.400	4.714.200	14,48
T-100-reb	DRB U TUBE	18.470.700	18.919.200	58,10
T-100-tower	DTW TRAYED	3.049.300	3.648.400	11,20
Total			27.281.800	83,78

Através desta ferramenta (avaliação económica) podemos facilmente localizar os equipamentos que mais encarecem o projecto e, conseqüentemente, seleccionar os alvos onde se poderá tentar reduzir os custos, modificando o material de construção ou até, o tipo de equipamento.

Na tabela anterior podemos verificar que 83,78 % dos custos totais representam 27.281.800 USD e representam apenas três equipamentos: o condensador e ebulidor da coluna de destilação e a torre de destilação. Já os custos directos totais da globalidade de todos os equipamentos ascendem a 32.563.600 USD.

Tabela 38 – Dados económicos do cenário A, Caso III

Nome	Sumário
Custo de capital total ×10 ⁶ [USD]	54,426
Custos operatórios totais ×10 ⁶ [USD/ano]	23.822,400
Custos totais de matérias-primas ×10 ⁶ [USD/ano]	574,750
Vendas totais ×10 ⁶ [USD/ano]	29.248,900
Custo total com utilidades ×10 ⁶ [USD/ano]	21.479,900
IRR [percentagem]	81,8
Período de “Payout” [ano]	3,3
Taxa de retorno desejável [Percentagem/ano]	20

Cenário B

Para o cenário B considerou-se igual ao cenário A para todos os equipamentos, à excepção do material de construção da coluna de destilação, onde o material NI201 foi substituído por outro.

A temperatura máxima aconselhada para o material NI201 na presença de Cloreto de Hidrogénio é de 510 °C. Como a temperatura de trabalho da coluna de destilação é substancialmente mais baixa (95.48 e -27.18 °C), podemos utilizar o material CS, indicado para temperaturas abaixo de 260 °C.

Tabela 39 – Materiais sugeridos para trabalho contínuo na presença de cloreto de hidrogénio gás*

Material	Temperatura (°C)
Platinum	1200
Gold	870
Nickel201	510
Inconel600	480
HastelloyB	450
HastelloyC	450
316SS	430
310Cb SS	430
304SS	400
CS	260
Monel 400	230
Silver	230
Cast iron	200
Copper C11000	90

*Fonte: Davis, 1996, pag.444

Tabela 40 – Componentes da coluna de destilação T-100, tipo e material para o cenário B

Designação	Coluna de Destilação T-100 Tipo	Material de Construção	
		Tube	Shell
Torre	Single diameter tower (TW)	NA*	CS
Ebulidor	"U tube"	CS	CS
Bateria de refluxo	Tanque horizontal ("Horiz Drum")	NA*	CS
Condensador	"Fixed TS"	CS	CS
Bomba de refluxo	Bomba centrífuga		CS

* Não aplicável

Tabela 41 – Dados económicos do cenário B, Caso III

Nome	Sumário
Custo de capital total $\times 10^6$ [USD]	21,658
Custos operatórios totais $\times 10^6$ [USD/ano]	23.820,400
Custos totais de matérias primas $\times 10^6$ [USD/ano]	574,750
Vendas totais $\times 10^6$ [USD/ano]	29.248,900
Custo total com utilidades $\times 10^6$ [USD/ano]	21.479,900
IRR [percentagem]	85,1
Período de "Payout" [ano]	3,3
Taxa de retorno desejável [Percentagem/ano]	20

No cenário B, modificando o material de construção da coluna de destilação (equipamento de maior custo relativo) obteve-se como custos totais directos de todos os equipamentos, o valor de 10.686.500 USD, ou seja, uma redução de 21.877.100 USD.

Tabela 42 – Custos directos totais para os cenários A e B

Custos Directos Totais [USD]	
Cenário A	32.563.600
Cenário B	10.686.500

Tabela 43 – Poupança/redução de custos do cenário B

Poupança [USD]	% de Redução
21.877.100	67,2

Para o cálculo dos custos das matérias-primas foi considerado o preço igual para os dois cenários que foi para o etileno 1 \$/kg, para o cloro 1 \$/kg e para o cálculo das vendas totais foi considerado o preço de 1 \$/kg para o cloreto de hidrogénio e 80 \$/kg para o cloreto de vinil, (O preço das matérias-primas e dos produtos foram determinados de forma a que o processo fosse rentável).

2.5. Caso IV

O objectivo do presente caso de estudo é explorar as capacidades do “retrofitting mode” do Aspen Energy Analyzer de modo a melhorar uma rede de permutador de calor.

Para isso, vamos utilizar a informação de um caso real onde a informação das correntes quentes e frias é descrita nas tabelas seguintes, onde existem cinco correntes quentes, sete correntes frias e quatro permutadores a permutar um total de 443,7 kW.

Supondo que a empresa dispõe de 90 mil € para gastar na RPC no sentido de aumentar a área dos permutadores já existentes, e admitindo que, devido a constrangimentos, não se pode alterar a RPC (ou seja, é impossível adicionar, retirar ou mover permutadores), a consequência natural será a diminuição do ΔT_{\min} e dos custos operacionais. No entanto, os custos de capital tenderão a aumentar. Vamos para isso considerar um aumento de 10 mil € no investimento de cada vez, para cada design, até ao montante máximo de 90 mil € destinados ao aumento da área da RPC.

Através do software Aspen Energy Analyzer em “Retrofit mode” a empresa poderá com maior acuidade, saber o montante a investir no aumento da área da RPC, de modo a que o retorno do investimento seja o maior ou seja optimizando o investimento.

Na tabela 44 podemos verificar a informação relativa às correntes quentes.

Tabela 44 – Temperaturas das correntes quentes do processo e as suas capacidades caloríficas médias

Correntes quentes	0917	1005	1011	10A24	1108
T inicial (°C)	80	60	49	104	90
T final (°C)	45	52	36	66	35
MCp (W/°C)	7090	8670	8530	3867	7160

Na tabela 45 podemos verificar a informação relativa às correntes frias.

Tabela 45 – Temperaturas das correntes frias do processo e as suas capacidades caloríficas médias

Correntes frias	0903	PW	1001	1014	10A02	10A10	1102
T inicial (°C)	29	26	45	36	35	48	50
T final (°C)	90	88	62	45	62	75	85
MCp (W/°C)	7260	1720	7020	7840	680	4630	7240

Na tabela 46 estão descritos os permutadores existentes no processo relativo ao Caso IV.

Tabela 46 – Permutadores existentes no processo do Caso IV

Permutador	09E02		10E03		10E08		11E03	
	0903	0917	10A02	1005	10A10	10A24	1102	1108
Correntes	0903	0917	10A02	1005	10A10	10A24	1102	1108
T _{inicial} (°C)	29,00	80,00	35,00	60,00	48,00	104,00	50,00	90,00
T _{final} (°C)	47,00	61,57	50,00	58,82	67,01	81,24	80,00	70,00
ΔT _{min} (°C)	32,57		10,00		33,24		10,00	
Área (m ²)	42,14		6,48		26,73		108,4	
Q (kW)	130,7		10,2		88		138,9	
Total (m ²)	183,75							
Total (kW)	443,7							

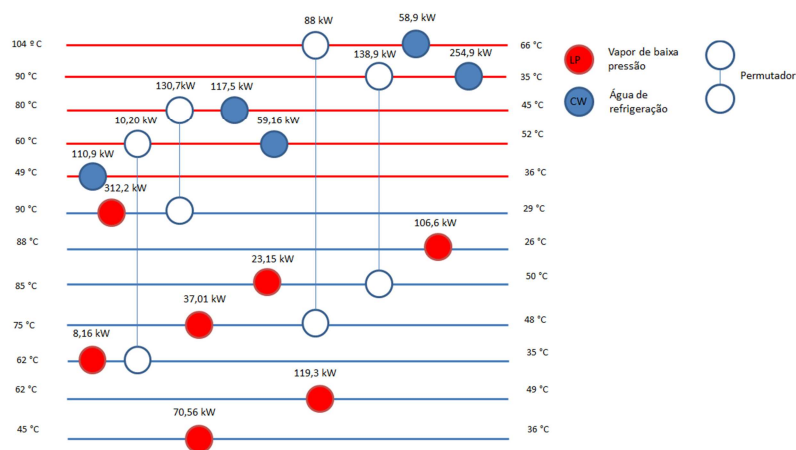


Figura 58 – Rede de permutadores de calor do processo em estudo

A rede de permutadores de calor da figura 58 será sujeita a melhoramento através da função “Heat Exchanger Network Retrofit” do Aspen Energy Analyzer.

1. Criar um “Heat Integration project”

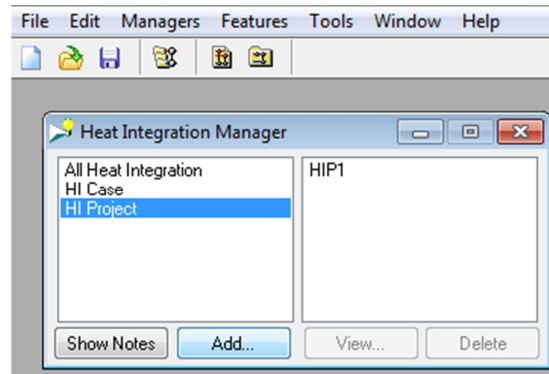


Figura 59 – Vista para criação de um projecto de integração de calor (“HI project”)

2. Introdução da informação das correntes no projecto de integração energética

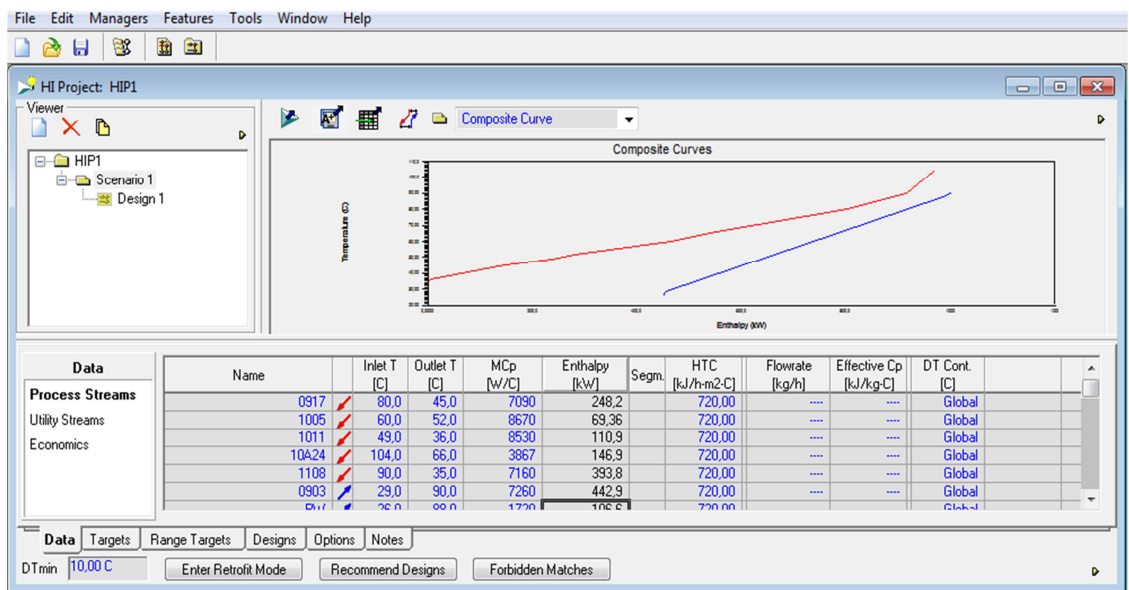


Figura 60 – Vista durante a introdução da informação das correntes, com o ícone “retrofit mode” sinalizado

3. Introdução das utilidades disponíveis no processo. Para este caso de estudo a utilidade fria é água de arrefecimento a uma $T_{inicial}$ de 25 °C e uma T_{final} de 30 °C, e a utilidade quente vapor de baixa pressão (“LP steam”) a 135 °C.

Name	Inlet T [C]	Outlet T [C]	Cost Index [Cost/kW-h]	Segm.	HTC [kJ/h-m2-C]	Target Load [kW]	Effective Cp [kJ/kg-C]	Target FlowRate [kg/h]
Cooling Water	25,00	30,00	7,648e-004		13500,00	146,7	4,183	25257,66
LP Steam	135,0	134,0	6,840e-003		21600,00	222,4	2196	364,55
<empty>								

Figura 61 – Vista durante a introdução da informação das utilidades

4. Introdução dos permutadores do processo no Aspen Energy Analyzer, correspondente à figura 61.

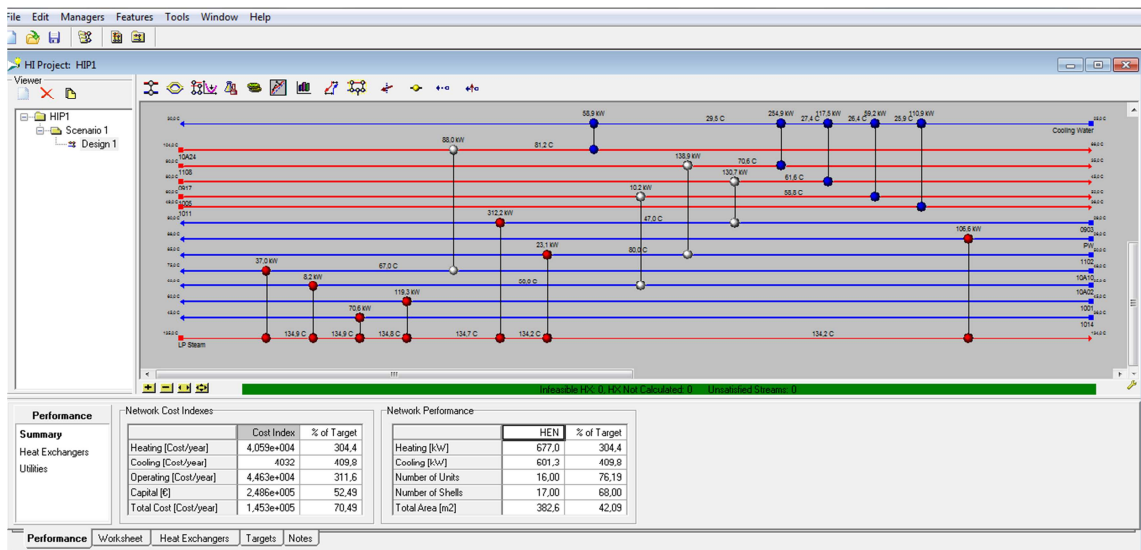


Figura 62 – Vista após a introdução dos permutadores existentes

Os parâmetros económicos considerados foram 10% para a taxa de rentabilidade (“ROR”), cinco anos para a vida do projecto (“PL”) e 8765,76 horas por ano. Os valores dos coeficientes globais de transferência de calor (“HTC”) são utilizados pelo software por defeito.

O estudo será efectuado em dois montantes de 10 mil €, até atingir os 90 mil €, para o cenário A.

5. Para adicionar área à RPC, o utilizador deve clicar no ícone (“Add área”) existente na barra de ferramentas.



Figura 63 – Ícone para o aumento da área

- Posteriormente introduz-se o montante disponível para gastar no aumento da área da RPC já existente, como se pode visualizar na figura 64.

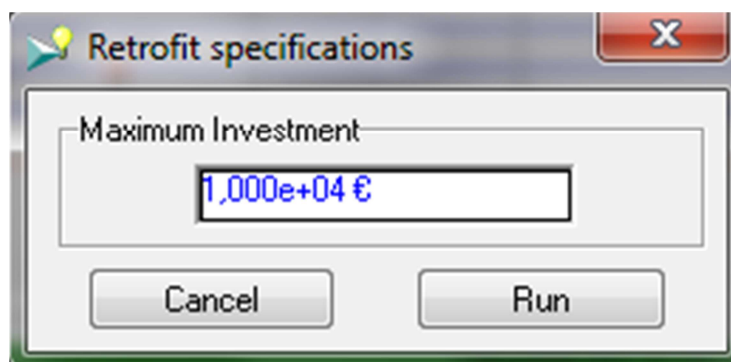


Figura 64 – Ícone para adicionar o montante máximo de investimento

Na tabela 47 verificamos que para um montante de 10 mil € de investimento, o software através do “retrofit mode” aumenta a área do permutador 10E08 em 28 m² e, para isso, 9178 € são suficientes.

Tabela 47 – Dados para o design 1-1A gerado em “retrofit mode”, com 10 mil € de investimento (Cenário A)

Design 1-1A					
Permutador	Área (m2)	Entalpia (kW)	Área Adicionada (m ²)	Entalpia Adicionada (kW)	Custo Investimento (€)
10E03	6,484	10,20	0,00	0,00	0
11E03	108,4	138,90	0,00	0,00	0
10E08	54,81	119,4	28,08	31,4	9178
09E02	42,14	130,7	0,00	0,00	0
Total			28,08	31,4	9178

Tabela 48 – Poupança em custos operacionais e período de “payback”

Design 1-1A	Custos Operacionais (€/ano)
Poupança	2096
Período de "payback"	5,996 Anos

Na tabela 49 podemos ver em que permutador foi adicionada área, as novas trocas de energia e os custos de investimento para cada permutador. Para este design, o montante máximo de investimento foi de 90 mil €.

Tabela 49 – Dados para o design 1-9A gerado em “retrofit mode”, com 90 mil € de investimento (Cenário A)

Design 1-9A					
Permutador	Área (m ²)	Entalpia (kW)	Área Adicionada (m ²)	Entalpia Adicionada (kW)	Custo Investimento (€)
10E03	37,24	16,87	30,75	6,67	27257
11E03	108,38	138,90	0,00	0,00	0,00
10E08	50,25	124,84	23,52	36,84	15924
09E02	194,22	247,89	152,09	117,19	43414
Total			206,36	160,70	86595

Tabela 50 – Poupança em custos operacionais e período de “payback”

Design 1-2A	Custos Operacionais (€/ano)
Poupança	10713,12
Período de "payback"	10,20 anos

Como se pode verificar nas tabelas anteriores construídas através de valores retirados do Aspen Energy Analyzer, com 10 mil € de investimento obtemos uma poupança de 2096 €/ano em custos operacionais e um período de “payback” de seis anos. Para o investimento máximo de 90 mil €, a poupança em custos operacionais é de 10713 €/ano e um período de “payback” de 10 anos.

A tabela 51 mostra a poupança em custos operacionais e o respectivo “payback” para os níveis de investimento descritos na mesma tabela.

Tabela 51 – Poupança em custos operacionais e período de “payback”, cenário A

Custo Investimento (€)	Poupança (€/ano)	Payback (anos)
9997	2096	6,0
20000	3306	7,6
29990	5851	6,4
39990	7319	6,9
50000	9183	6,8
60000	10290	7,3
64590	10620	7,6
76700	10700	9,0
86910	10710	10,2

Tivemos informação que nos permite balancear o aumento de área da RPC (custo de investimento ou custos de capital) com os custos operatórios. Mas e em relação aos Custos Totais anualizados?

Ou seja, o que nos permite tomar uma decisão entre que quantia se deve gastar em aumento de área da RPC para que os custos totais sejam minimizados?

Depois de clicar em “Unlock Retrofit Mode”, no canto inferior esquerdo do painel de visualização, voltamos à apresentação normal do Aspen Energy Analyzer onde, no separador “Designs”, temos acesso aos custos totais de cada design gerado em “retrofit mode”.



Figura 65 – Ícone do “Unlock retrofit mode”

Os custos totais são apresentados na tabela em baixo, onde podemos verificar que o “Design 1-3A” é o que apresenta valores inferiores de custos totais e representa apenas 30 mil € de investimento.

Ou seja, com o aumento da área de transferência de calor, diminui o ΔT_{\min} , e como consequência aumenta o custo associado ao equipamento.

Tabela 52 – Custos relativos aos diversos investimentos para o cenário A

	Custo Total (€/dia)	Área (m ²)	Custo Capital (€)	Custos Operatórios (€/dia)	Investimento (€)
Design 1-3A	394,9	433,20	260458	106	29990
Design 1-4A	395,1	436,42	264255	102	39990
Design 1-2A	395,7	405,21	254864	113	20000
Design 1-1A	397,2	405,76	253212	116	9997
Design 1	397,7	382,60	248600	122	0
Design 1-5A	398,6	474,55	271978	97	50000
Design 1-6A	404,7	519,43	280223	94	60000
Design 1-7A	407,6	530,86	283634	93	64590
Design 1-8A	413,3	545,32	289014	93	76700
Design 1-9A	415,4	548,29	290968	93	89910

Também sabemos que, quanto menor for o valor do ΔT_{\min} , maior é a transferência de calor entre correntes e, conseqüentemente, menor é o consumo de utilidades exteriores. Logo os custos operacionais são menores.

Assim, é necessário um equilíbrio entre os custos de capital (investimento) e os custos operatórios. Daí que o investimento máximo de 90 mil € não se revelou ser a melhor opção.

A opção de um investimento máximo de 30 mil € representou um custo total de 394,9 €/dia, sendo por isso o que apresentou melhor resultado.

No entanto, relativamente ao design da RPC inicial, representou uma redução efectiva de 2,8 €/dia em custo total.

Tabela 53 – Permutadores existentes para o projecto “Design 1-3A” do cenário A

Permutador	09E02		10E03		10E08		11E03	
Correntes	0903	0917	10A02	1005	10A10	10A24	1102	1108
T_{inicial} (°C)	29,00	80,00	35,00	60,00	48,00	104,00	50,00	90,00
T_{final} (°C)	54,02	54,38	50,01	58,82	74,96	71,72	80,00	70,60
ΔT_{min} (°C)	25,38		9,99		23,72		10,00	
Área (m²)	87,40		6,49		50,25		108,4	
Q (kW)	181,6		10,21		124,8		138,9	
Total (m²)					252,5			
Total (kW)					455,5			

Tabela 54 – Comparação entre o Design 1 e o Design 1-3A

Design 1				Design 1-3A			
Permutadores	ΔT _{min} (°C)	Área (m ²)	Entalpia (kW)	Permutadores	ΔT _{min} (°C)	Área (m ²)	Entalpia (kW)
10E08	33,24	26,73	88,00	10E08	23,72	50,25	124,80
11E03	10,00	108,40	138,90	11E03	10,00	108,40	138,90
09E02	32,57	42,14	130,70	09E02	25,38	87,40	181,6
10E03	10,00	6,48	10,20	10E03	9,99	6,49	10,21

Pode-se concluir que para este cenário a opção mais equilibrada seria um investimento de 30 mil €, pois apresenta um menor custo total de 394,9 €/dia, ou seja, uma poupança efectiva de 397,7 €/dia -394,9 €/dia = 2,8 €/dia. No entanto, não é um investimento atractivo visto que o valor investido é elevado para a redução que se obtém.

Contudo, se o preço das utilidades aumentar, a consequente poupança em custos operatórios pode ser de tal forma que seja compensatório um investimento na área da RPC.

2.6. Caso V

O presente caso de estudo tem como finalidade a utilização do software Aspen Energy Analyzer para construir um conjunto de RPC a partir apenas da informação das correntes anteriores. O caso será constituído por dois cenários, sendo que a grande e única diferença entre os cenários será o custo das utilidades. O principal objectivo deste caso é verificar como variam as RPC geradas pelo software em função dos diferentes preços das utilidades. No cenário A considerou-se um custo para as utilidades quatro vezes superior ao do cenário B.

Tabela 55 – Preços das utilidades para o cenário A e B

	Custo (€/kW.h)	
	Água de arrefecimento	Vapor de baixa pressão
Cenário B	0,0015	0,0175
Cenário A	0,006	0,07

Quanto aos parâmetros económicos relativos ao custo de capital dos permutadores, a taxa de rentabilidade (“ROR”), a duração do projecto e as horas de operação por ano foram os valores utilizados por defeito pelo AEA.

Tabela 56 – Objectivos entálpicos cenário A

Objectivos Entálpicos	
Aquecimento (kW)	222,4
Arrefecimento (kW)	146,7

Tabela 57 – Objectivos para a área cenário A

Objectivo para Área	
Contra corrente (m2)	686
1-2 Shell & Tube (m2)	909

Tabela 58 – Objectivos n.º de unidades cenário A

Objectivo n.º de Unidades	
Mínimo total	13
Mínimo MER	19
Shells	25

Tabela 59 – Objectivos para os custos cenário A

Objectivo Custos	
Capital (€)	457.666
Custos Operatórios (€/ano)	144.196
Custo total anual (€/ano)	329.520

Cenário A

Este cenário é composto por uma utilidade quente (vapor de baixa pressão), com a temperatura de entrada igual a 135 °C e de saída igual a 134 °C, e uma utilidade fria, água de arrefecimento com uma temperatura de entrada de 25 °C e de saída de 30 °C.

Foi gerado apenas um design e posteriormente otimizado em relação à função objectivo, ou seja, a minimização do custo total anualizado.

Na tabela seguinte estão representados os custos e os respectivos desvios ao objectivo, com os custos operatórios a atingir o objectivo e os custos de capital ligeiramente inferiores ao objectivo. A forma como são calculados estes objectivos pode ser consultada em anexo.

Tabela 60 – Índice de custo da RPC “A_Design1_O” do cenário A

	Custo	% do Objectivo
Aquecimento (€/ano)	136869	100,60
Arrefecimento (€/ano)	7751	100,91
Custos operatórios (€/ano)	144621	100,29
Capital (€)	389139	85,03
Custos totais (€/ano)	302196	91,71

A performance da RPC relativamente às necessidades energéticas, número de permutadores, número de shells e a área total, estão representadas na tabela seguinte.

Tabela 61 – Performance da RPC “A_Design1_O” do cenário A

	RPC	% do Objectivo
Aquecimento (kW)	223,05	100,29
Arrefecimento (kW)	147,38	100,43
N.º de unidades	16,00	84,21
N.º de Shells	21,00	84,00
Área Total (m2)	904,38	99,51

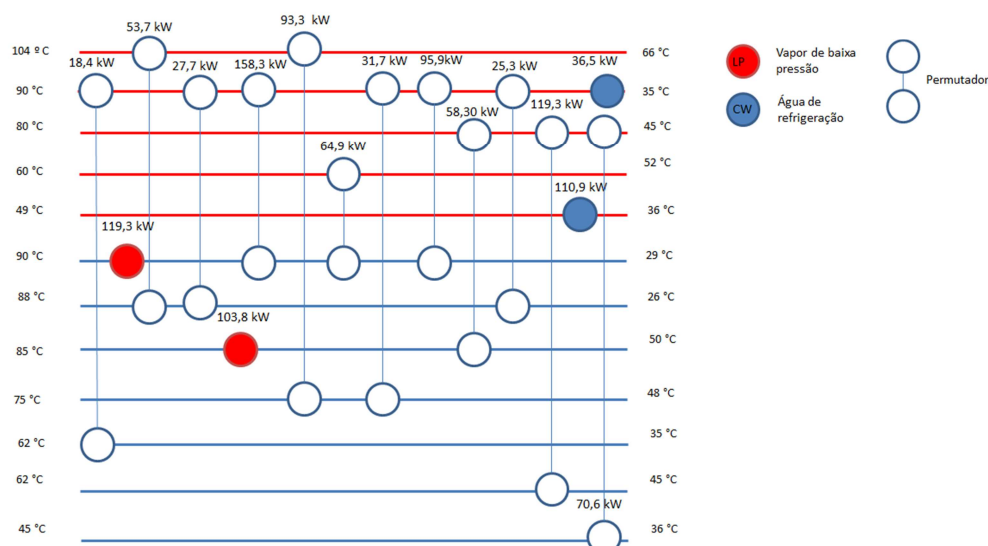


Figura 66 – Rede de permutadores otimizada para o cenário A

A rede gerada pelo AEA depois de otimizada está representada na figura anterior e podemos ver que as utilidades quentes (círculos a vermelho) trocam 223 kW com as correntes do processo, valor que está muito perto do objectivo. Quanto à utilidade fria são trocados 147,4 kW, valor também muito próximo do objectivo. Os objectivos energéticos são calculados segundo o método de alocação das utilidades e a temperatura de “pinch” (referenciado em anexo).

Tabela 62 – Permutadores entre correntes quentes e frias do design “A_Design1_O”, cenário A

	Custo (€)	Área (m2)	Entalpia (kW)
E-102	10175	4,75	18,36
E-105	11207	7,66	27,68
E-101	16798	26,79	53,66
E-107	17974	31,32	58,25
E-113	21206	37,36	25,30
E-111	21345	45,01	31,73
E-112	28562	77,16	95,94
E-106	32950	82,60	93,28
E-116	31857	92,88	70,56
E-109	32241	94,75	69,36
E-114	46123	140,22	119,34
E-108	58216	178,73	158,31
Total	328657	819,23	821,77

A energia trocada entre as correntes quentes e frias do processo pode ser consultada na tabela anterior, bem como as áreas de permuta necessárias e o respectivo custo da capital. O cálculo do custo do permutador E-111 está exemplificado em anexo.

Cenário B

O cenário B foi baseado no cenário anterior, tendo sido apenas reduzido quatro vezes o custo das utilidades. Foi gerado um design e posteriormente otimizado, tendo-se obtido a RPC representada na figura 67.

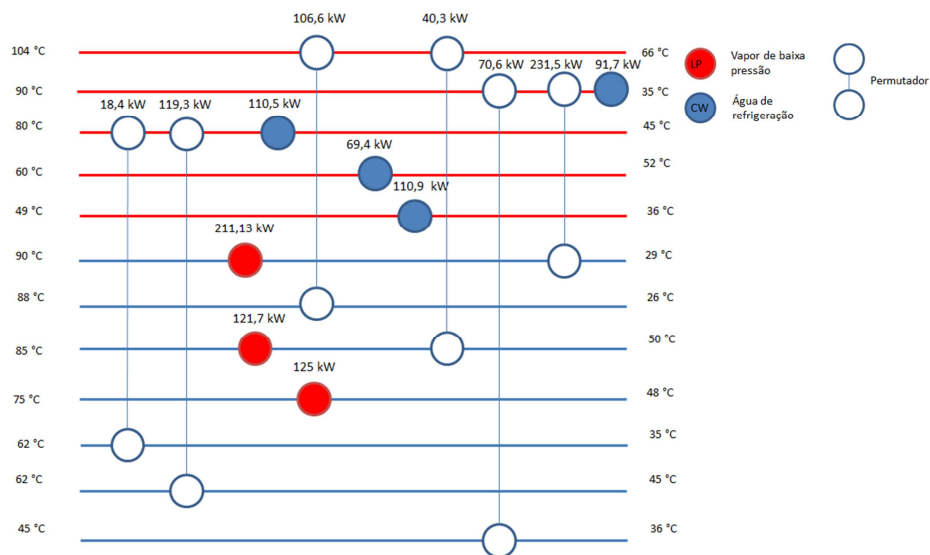


Figura 67 – Rede de permutadores otimizada para o cenário B

Objectivos para o cenário B

Tabela 63 – Objectivos entálpicos cenário B

Objectivos Entálpicos	
Aquecimento (kW)	222,4
Arrefecimento (kW)	146,7

Tabela 64 – Objectivos para a área cenário B

Objectivo para Área	
Contra corrente (m2)	686
1-2 Shell & Tube (m2)	909

Tabela 65 – Objectivos n.º de unidades cenário B

Objectivos n.º de Unidades	
Minimo total	13
Mínimo MER	19
Shells	25

Tabela 66 – Objectivos para os custos, cenário B

Objectivos Custos	
Capital (€)	457666
Custos Operatórios (€/ano)	36049
Custo total anual (€/ano)	221373

Tabela 67 – Índice de custo da RPC “A_Design1_O” do cenário B

	Custo	% do objectivo
Aquecimento (€/ano)	70274	103,44
Arrefecimento (€/ano)	5028	104,14
Custos operatórios (€/ano)	75302	208,89
Capital (€)	249028	54,41
Custos totais (€/ano)	176142	79,57

Para o cenário B, como as utilidades são mais baratas, a RPC otimizada irá usufruir mais das utilidades, o que implica custos operatórios maiores mas um custo de capital mais baixo devido ao menor número de permutadores.

Tabela 68 – Performance da RPC “A_Design1_O” do cenário B

	RPC	% do Objectivo
Aquecimento (kW)	458,09	205,96
Arrefecimento (kW)	382,42	260,61
N.º de unidades	13,00	68,42
N.º de Shells	15,00	60,00
Área Total (m2)	479,73	52,78

Como se pode verificar na tabela anterior, o design do cenário B afasta-se bastante do objectivo quanto às necessidades entálpicas das utilidades, mais precisamente, 205,96% para as necessidades de aquecimento e 260,61% para as necessidades de arrefecimento. Este facto deve-se ao custo mais baixo das utilidades.

Podemos verificar nas tabelas seguintes os permutadores das duas RPC correspondentes aos dois cenários em estudo onde se pode consultar o nome do permutador, o seu custo, a área e energia trocada. Facilmente se constata que pelas utilidades serem mais caras no cenário A, tal implica uma maior integração energética. Neste cenário a integração foi total para o ΔT_{\min} , escolhido pois foram atingidos os 100% das necessidades entálpicas de aquecimento e arrefecimento. Já para o cenário B, existem menos permutadores, contudo permutam mais energia entre eles, como podemos ver nas tabelas 69 e 70.

Tabela 69 – Permutadores da RPC do cenário A (utilidades mais caras)

Permutador	Custo (€)	Área (m ²)	Shells	Entalpia (kW)
E-111	21345	45,01	1,00	31,73
E-113	21206	37,36	2,00	25,30
E-102	10175	4,75	1,00	18,36
E-116	31857	92,88	1,00	70,56
E-104	11632	8,94	1,00	103,80
E-106	32950	82,60	2,00	93,28
E-112	28562	77,16	1,00	95,94
E-114	46123	140,22	2,00	119,34
E-101	16798	26,79	1,00	53,66
E-103	12542	11,79	1,00	119,25
E-115	20149	40,04	1,00	110,89
E-117	16160	24,39	1,00	36,49
E-107	17974	31,32	1,00	58,25
E-105	11207	7,66	1,00	27,68
E-109	32241	94,75	1,00	69,36
E-108	58216	178,73	3,00	158,31
Total	389139	904,38	21,00	1192,20

Tabela 70 – Permutadores da RPC do cenário B (utilidades mais baratas)

Permutador	Custo (€)	Área (m ²)	Shells	Entalpia (kW)
E-114	11652	9,00	1	125,01
E-110	16414	25,34	1	40,31
E-103	21651	38,93	2	106,64
E-105	10822	6,54	1	18,36
E-111	16515	25,72	1	110,45
E-106	14628	18,84	1	211,34
E-104	13797	15,95	1	70,56
E-108	46131	140,25	2	231,52
E-112	12872	12,85	1	69,36
E-115	18261	32,44	1	91,72
E-107	12031	10,17	1	121,74
E-109	33774	102,29	1	119,34
E-113	20480	41,40	1	110,89
Total	249028	479,73	15	1427,24

Assim, podemos concluir que o preço das utilidades tem uma grande influência na construção da rede de permutadores de calor, por esta razão uma flutuação no preço das utilidades pode afastar a RPC da configuração óptima, tal como seria de esperar já que a função objectivo é a minimização do custo total com a RPC.

3. Conclusão

O Aspen Hysys é uma ferramenta de modelação capaz de fazer uma representação exacta dos processos, fundamental no aumento da performance de qualquer empresa de processos químicos. Os seus benefícios são enormes pois permite reunir uma quantidade de informação necessária para otimizar a performance da empresa. As capacidades da simulação de processos do Aspen Hysys permitem ao utilizador avaliar rapidamente o mais seguro e lucrativo design industrial. Assim, o aumento da produtividade, bem como a exactidão e rapidez dos dimensionamentos em engenharia são benefícios da sua utilização. Uma das grandes potencialidades deste simulador é a sua capacidade para integrar vários tipos de soluções agregadas, tais como o Aspen Energy Analyzer ou a avaliação económica integrada.

A competitividade dos mercados, bem como a eficiência energética, requerem um melhor dimensionamento da integração energética de processos, contudo, a tarefa de desenvolver uma rede de permutadores de calor baseada na minimização de custos operatórios e de capital pode ser bastante complexa. A solução passa por identificar as melhores opções de forma rápida e sem recorrer a recursos proibitivos para o fazer.

O Aspen Energy Analyzer permite ao utilizador calcular de forma rápida os objectivos energéticos e de investimento de capital e, ao mesmo tempo, permite o desenvolvimento de projectos de integração energética reduzindo custos operatórios e de capital. É uma ferramenta que trabalha perfeitamente de uma forma integrada com simuladores de processo como o Aspen Hysys, mas também de uma forma isolada a partir apenas da informação das correntes do processo.

A avaliação económica integrada do Aspen Hysys permite ao utilizador aceder aos custos relativos de qualquer processo, proporcionando assim os meios para mitigar alternativas baseadas em factores técnicos, ambientais, de segurança e também económicos.

Para o caso I, das RPC geradas para os dois casos, foi o “A_Design0-OO” do cenário “sem divisão de correntes” o que apresentou o menor valor de custo total anualizado.

Para o caso II (produção de benzeno) o cenário B foi o que apresentou resultados mais ambiciosos. Para o caso III, através de uma melhor selecção do material de construção dos equipamentos mais dispendiosos do cenário B são atingidas poupanças na ordem dos 21 Milhões de dólares.

Para o caso IV, podemos verificar a poupança nos custos operacionais com um investimento no aumento da área de permuta de uma rede já existente. Finalmente para o caso V, ficou demonstrado que a construção de uma RPC tendo como objectivo a minimização do custo total vai depender muito do custo das utilidades.

Podemos então concluir que as ferramentas de modelação, particularmente o AH, o AEA e o AEE são uma mais-valia extraordinária para ajudar o utilizador na tomada de decisões em fases bastante preliminares da engenharia de processos.

Finalmente, seria fundamental dar continuidade à exploração do software no caso particular da função “operation mode”, uma ferramenta disponível no AEA para análise da performance de uma rede de permutadores quando as condições operatórias se alteram devido a um determinado acontecimento, como por exemplo, a limpeza de um determinado permutador.

Também seria interessante incluir num futuro trabalho o “Design” dos permutadores de calor através da utilização do módulo Aspen Muse, bem como a posterior simulação dinâmica dos processos para testar a sua controlabilidade.

Como principal limitação destaco apenas o relativo fraco desempenho do AEA, nos sistemas operacionais de 64 bits.

4. Referências

1. Anastasovski Aleksandar, Markovska Liljana, Meshko Vera, 2007. "Heat Integration of Ethanol and Yeast Manufacture". *Macedonian journal of Chemistry and Chemical Engineering*, Vol. 26, Nº 2, pp. 135-146.
2. Aspen Hysys, Operations guide. Version number V7.1. Janeiro 2009. Aspen Technology, Inc.
3. Aspen Icarus Reference Guide V7.1, 2009, Aspen Technology, Inc.
4. Beck Ron, Hockley Rob, 2009. "Engineering Models in Operations". *Chemical Engineering World*. 47.
5. Chen Chau-Chyun, Mathias Paul M., 2002 "Applied Thermodynamics for process modeling". *American Institute of Chemical Engineers Journal*, Vol.48, Nº2.
6. Davis JR, 1996, "ASM Specialty Handbook, Carbon and Alloy Steels", edited by Davis & Associates, ASM International.
7. Gundersen T., 2002 "A Process Integration PRIMER", 3rd edition, SINTEF Energy Research.
8. Hilaly AK, Sikdar SK, 1994."Pollution balance: a new method for minimizing waste production in manufacturing processes". *Air & Waste Management Association journal* Vol. 44, pp 1303-1308
9. Linnhoff B, Flower JR, 1978. "Synthesis of heat exchanger networks". *American Institute of Chemical Engineers Journal*, Vol. 24, N.º4, pp:633-54.
10. Linnhoff B, Hindmarsh E, 1983 "The Pinch design method for heat exchanger networks". *Chemical Engineering Science*, Vol. 38, N. º5, pp 745-763.
11. Mata M. Teresa, Smith L. Young Douglas Costa Carlos, 2003."Evaluating the environmental friendliness, economics and energy efficiency of chemical processes: heat integration". *Clean technologies and environmental policy journal*, Springer-Verlag, Vol. 5, N.º3-4, pp 302-309.
12. McCarthy Dan, Beck Ron, Dissinger Glenn, 2011"Getting Started with Relative Economics in Aspen HYSYS, A brief tutorial". Aspen Technology Inc.
13. AspenTech, 2011, <http://www.aspentech.com/products/aspen-hx-net.aspx>. Acedido em 17 de Agosto de 2011
14. Sundaram Suresh, 2005. "Simulation in operation". *Process Engineering Magazine*, consultado online, http://www.aspentech.com/publication_files/pe_october_20005_simulatio_in_operation.pdf.
15. Seider W. D., Seader J. D., Daniel R. Lewin, 2003. "Product & Process Design principles", John Wiley & Sons, 2ª edição..
16. Trindade T., Silva J., Palmeira V. e Anastácio P., 1997 "Introdução à simulação de processos (Módulo de Simulação)", *Disciplina Laboratórios Integrados 4*, ISEL

17. Turton R., Baille R. C., Whiting W., Shaeiwitz J., 1998 "Analysis, Synthesis, and Design of Chemical Processes". Prentice Hall
18. "World energy Outlook 2006", Agência Internacional de Energia
19. "World energy Outlook 2009", Agência Internacional de Energia

5. ANEXOS

5.1 Objectivos

Entálpicos

Os alvos energéticos são a quantidade mínima de utilidades para satisfazerem as necessidades das correntes do processo. No AEA, os objectivos energéticos são calculados dependendo do método de alocação de utilidades e da temperatura de “pinch”

Métodos de alocação de utilidades

Método baseado na GCC

Este método é baseado na Grande curva composta (GCC) para alocar as utilidades. A heurística geral é a maximização do uso da utilidade mais barata e é assumido que as utilidades menos caras são a corrente fria mais quente e a corrente quente mais fria. Neste programa, a utilidade é considerada barata não pelo seu custo mas pela sua temperatura.

Método baseado no fornecimento da quantidade de utilidade pelo utilizador

Seleccionado este método, podem-se alocar utilidades individualmente na RPC. Utilizado este método, o utilizador pode modificar a energia de permuta. Todas as permutas deverão ser termodinamicamente possíveis, caso contrário não serão aceites pelo programa.

Se houver permutas proibidas (“forbidden matches”) este método não estará disponível.

Princípio da utilidade mais barata

Este método é utilizado para decidir que utilidade deve ser implementada numa RPC, tendo em conta o investimento de capital e o custo da energia enquanto calcula os objectivos energéticos para as utilidades

Área de permuta

A utilização desta ferramenta torna-se quase intuitiva com a ajuda do Aspen Icarus Reference Guide, onde se pode consultar o tipo de equipamento e a sua descrição, intervalos de temperatura para o funcionamento, tipo de material de construção (MOC), pressão de funcionamento, etc.

$$A = \sum_i \left(\frac{1}{F_t \times \Delta T_{LM}} \right)_i \times \left[\sum_j (dT_h)_i \times \sum_{jh} \left(\frac{MC_p}{h} \right)_{ji} + (dT_c)_i \times \sum_{jc} \left(\frac{MC_p}{c} \right)_{jc} \right]$$

Onde:

A - Objectivo da área de permuta

F_t – Factor de correcção para quando o fluxo não é em contra-corrente

ΔT_{LM} – Média logarítmica da diferença de temperatura em cada intervalo

i - intervalo entálpico *i*

j - Corrente *j*

dT_h - A mudança de temperatura para as correntes quentes a cada intervalo entálpico

M - Fluxo de massa da corrente

C_p - Calor específico médio

h – Transferência de calor da corrente

dT_c – A mudança de temperatura para a corrente fria em cada intervalo entálpico

Os objectivos da área são utilizados no cálculo dos custos totais de capital dos permutadores. Existem duas formas diferentes para calcular os objectivos das áreas: a fórmula de Bath e através de formulação matemática (programação linear).

Quando existem permutas proibidas, “Forbidden Matches”, o método de cálculo do objectivo da área de permuta só pode ser de programação linear. Ao mesmo tempo o método de alocação das utilidades só pode ser baseado na CCG.

Número de permutadores

O objectivo do número de permutadores e de “shells” na rede de permutadores envolve o cálculo do número mínimo de permutadores. O cálculo é baseado no teorema de Euler.

$$N_{u,min} = N_s + N_l - N_i$$

Onde:

N_{u,min} – Número mínimo de permutadores

N_s – Número de correntes e utilidades do processo

N_l – Número de ciclos

N_i – Número de sistemas independentes

Esta equação calcula o número mínimo de permutadores na rede, não considerando o “pinch”.

O número mínimo de permutadores também pode ser expresso da seguinte forma:

$$N_{u,min} = N_s - 1$$

Onde:

$N_{u,min}$ – Número mínimo de permutadores

N_s – Número de correntes e utilidades no processo

Esta equação também não considera a existência de “pinch”, mas tendo em conta o máximo de energia recuperada, a existência de “pinch” deve ser considerada, e a temperatura de “pinch” no cálculo do número mínimo de permutadores. Considera-se a seguinte equação:

$$N_{u,min} = (N_A - 1) + (N_B - 1)$$

Onde:

$N_{u,min}$ – Número mínimo de permutadores

N_A – Número de correntes e utilidades acima do “pinch”

N_B – Número de correntes e utilidades abaixo do “pinch”

O objectivo do número de “shells” envolve o cálculo do número mínimo de “Shells” na rede de permutadores. Um permutador pode necessitar de mais que um “Shell”, dependendo da configuração do permutador ou da restrição da área por “Shell”.

Capital

Custo de capital

O custo de capital é o custo de comprar e instalar o permutador de calor. O software Aspen Energy Analyzer disponibiliza dois tipos de permutadores: “shell & tube” e “fired heater”. Cada tipo de permutador de calor tem a sua própria equação para cálculo do custo de capital.

Para o tipo de permutador “shell and tube”:

$$CC = a + b \left(\frac{A_{permuta}}{N_{shell}} \right)^c \times N_{shell}$$

E para o tipo “fired heater”:

$$CC = a + b(Duty)^c$$

Onde:

CC - Custo de Capital de instalar o permutador

a - Custo da instalação do permutador

b, c - Coeficientes que relacionam energia/ área do permutador

$A_{permuta}$ - Área de transferência de calor do permutador

N_{shell} - Número de shells no permutador

$Duty$ - Quantidade de energia transferida no permutador

Custos operatórios

Os custos operatórios são dependentes do tempo e representam o custo de energia para o equipamento funcionar.

$$CO = \sum (C_{hu} \times Q_{hu,min}) + \sum (C_{cu} \times Q_{cu,min})$$

Onde:

CO - Custos operatórios, custo da energia para o funcionamento do equipamento (€/ano)

C_{hu} - O custo da utilidade quente (€/kW ano)

$Q_{hu,min}$ - Objectivo para a necessidade de utilidade quente (kW)

C_{cu} - Custo da utilidade fria (€/kW ano)

$Q_{cu,min}$ - Objectivo para a necessidade de utilidade fria (kW)

Custo total anualizado

O custo total anualizado representa o custo de capital de todos os permutadores mais os custos operatórios, multiplicado por um factor de anualização.

$$TAC = \Lambda \times \sum CC + CO$$

Onde:

TAC - Custo total anualizado

CC - Custo de capital instalado de cada permutador (€)

CO - Custos operatórios (€/ano)

Λ - Factor de anualização (1/ano)

$$\Lambda = \frac{\left(1 + \frac{ROR}{100}\right)^{PL}}{PL}$$

Onde:

ROR – Taxa de rentabilidade (percentagem de capital)

PL – Anos de vida da finalidade do investimento ou período de retorno

Cálculos demonstrativos para o Caso V do cenário A

Objectivos

Custo da utilidade quente

$$C_{hu} = 0,07 \frac{\text{€}}{\text{kW.h}} \times 8765 \frac{\text{h}}{\text{ano}} = 613,5 \frac{\text{€}}{\text{kW.ano}}$$

Custo da utilidade fria

$$C_{cu} = 0,006 \frac{\text{€}}{\text{kW.h}} \times 8765 \frac{\text{h}}{\text{ano}} = 52,6 \frac{\text{€}}{\text{kW.ano}}$$

$$Q_{hu \min} = 222 \text{ kW} - \text{Necessidades de utilidades quente}$$

$$Q_{cu \min} = 146,7 \text{ kW} - \text{Necessidades de utilidades frias}$$

Custos Operatórios

$$CO = \sum(C_{hu} \times Q_{hu \min}) + \sum(C_{cu} \times Q_{cu \min}) = 613,5 \times 222 + 52,6 \times 146,7 = 143913 \text{ €/ano}$$

Tabela 69 – Permutadores da RPC do cenário A (utilidades mais caras)

Permutador	Custo (€)	Área (m2)	Shell	Entalpia (kW)
E-111	21345,48	45,01	1	31,73
E-113	21206,37	37,36	2	25,30
E-102	10175,16	4,75	1	18,36
E-116	31857,2	92,88	1	70,56
E-104	11632,02	8,94	1	103,80
E-106	32950,5	82,60	2	93,28
E-112	28562,3	77,16	1	95,94
E-114	46123,11	140,22	2	119,34
E-101	16798,46	26,79	1	53,66
E-103	12542,11	11,79	1	119,25
E-115	20148,64	40,04	1	110,89
E-117	16159,73	24,39	1	36,49
E-107	17973,88	31,32	1	58,25
E-105	11207,36	7,66	1	27,68
E-109	32241,04	94,75	1	69,36
E-108	58215,89	178,73	3	158,31
Total	389139,2	904,38	21	1192,20

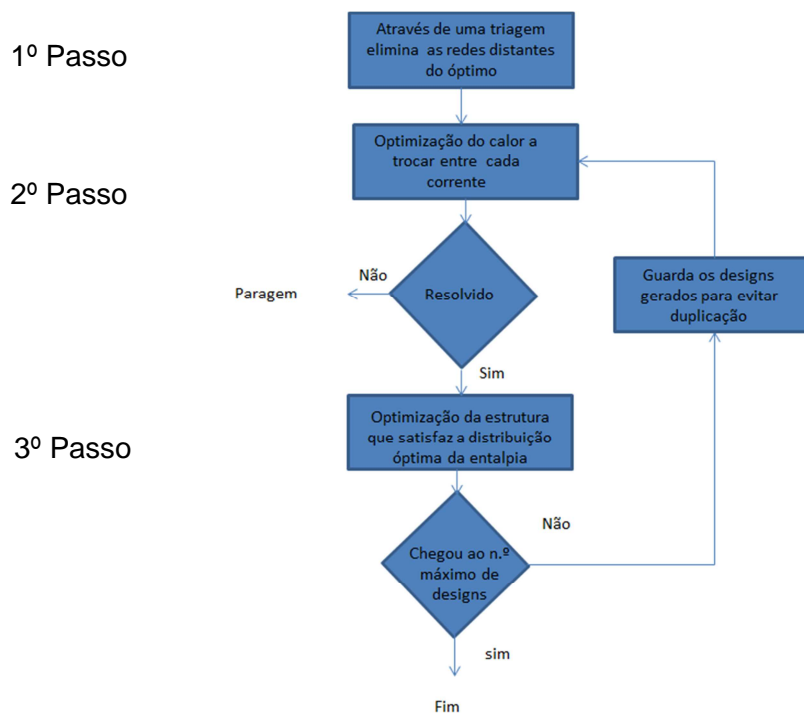
Cálculo exemplificativo do Custo de capital (CC) para o permutador E-111

$$CC = 7960 + \left[638 \times \left(\frac{45,01}{1} \right)^{0,8} \times 1 \right] = 21345,9 \text{ €}$$

5.2 Teoria e algoritmos

Redes geradas automaticamente (“Recommended Designs”)

Esta secção descreve em detalhe a sequência de cálculos para o procedimento de criação automática de redes de permutadores próximos do óptimo.



1º Passo

No primeiro passo um modelo de programação linear otimiza simultaneamente a área de permuta e a entalpia para cada utilidade. O objectivo para esta optimização é a eliminação dos casos que se afastam do óptimo.

2º passo

O modelo de programação linear (LP) no primeiro passo não tem em conta o número de permutadores de calor na função objectivo. Este pormenor é calculado no segundo passo utilizando um modelo de programação linear inteira mista (MILP), que simultaneamente otimiza o número de permutadores, a área de permuta e o calor trocado em cada utilidade. A solução disponibiliza o calor trocado em cada utilidade (no caso de múltiplas utilidades frias e quentes) e o calor trocado em cada permutador. Nesta fase sabe-se que quantidade

de calor deverá ser trocada em cada permutador mas não se conhece ainda a posição física de cada permutador.

3º Passo

No terceiro passo outro modelo de programação linear inteira mista (MILP) é formulado para identificar a rede de permutadores de calor que satisfaz a óptima distribuição de calor obtida no passo anterior.

Capacidades do automático “retrofiting”

Os dois métodos mais utilizados em “HEN retrofit” são o método de “pinch” e o método da programação matemática. O método de “pinch” é mais demorado e os resultados são baseados na experiência do utilizador, embora ofereça uma abordagem ao problema mais interactiva.

O método da programação matemática é menos demorado.

Optimização paramétrica

O Aspen Energy Analyzer utiliza um algoritmo para a optimização não linear das redes de permutadores de calor. Deve-se assegurar que o modelo a optimizar está correcto e completamente definido antes de optimizar a rede.

Algoritmo de optimização

O algoritmo identifica a existência de sub-redes e optimiza cada sub-rede independentemente. Para cada sub-rede, o algoritmo selecciona a entalpia e as divisões de correntes (“splits”) que serão optimizadas de modo a que minimize a função objectivo.

No modo design, o programa permite a optimização da entalpia em cada permutador e ao mesmo tempo a divisão das correntes mas, se for preferível, pode-se optimizar apenas uma delas. No modo “Retrofit” as duas variáveis são optimizadas ao mesmo tempo.

5.3 Casos