

Refervedores do tipo *Kettle* – Uma nova abordagem de projeto: *Set-trimming*

Guilherme de Magalhães Sales

Monografia em Engenharia Química

Orientadores

Prof. Eduardo Mach Queiroz, D.Sc

Prof. André L. H. Costa, D.Sc

Prof. Miguel J. Bagajewicz, Ph.D

Janeiro de 2021

REFERVEDORES DO TIPO KETTLE – UMA NOVA ABORDAGEM DE PROJETO: *SET-TRIMMING*

Guilherme de Magalhães Sales

Monografia em Engenharia Química submetida ao Corpo Docente da Escola de Química, como parte dos requisitos necessários à obtenção do grau de Bacharel em Engenharia Química.

Aprovado por:

Tânia Suaiden Klein, D. Sc.

Marcellus Guedes Fernandes de Moraes, M. Sc.

Orientado por:

Eduardo Mach Queiroz, D. Sc.

André L. H. Costa, D. Sc.

Miguel J. Bagajewicz, Ph. D.

Rio de Janeiro, RJ – Brasil

Janeiro de 2021

Ficha Catalográfica

Sales, Guilherme de Magalhães.

Refervedores do tipo Kettle – Uma nova abordagem de projeto: Set-trimming /
Guilherme de Magalhães Sales. Rio de Janeiro: UFRJ/EQ, 2020.

vii, 51 p.; il.

Monografia – Universidade Federal do Rio de Janeiro, Escola de Química, 2020.
Orientadores: Eduardo Mach e André L. H. Costa e Miguel J. Bagajewicz.

1. Refervedor. 2. Trocador de calor. 3. *Set-trimming*. 4. Monografia (Graduação –
UFRJ/EQ). 5. Eduardo Mach, André L. H. Costa, Miguel J. Bagajewicz.

AGRADECIMENTOS

Aos meus orientadores, Eduardo e André, que tiveram a dedicação e comprometimento de me guiar através do caminho – até então desconhecido – de uma nova área do conhecimento.

Aos meus pais, Luciana e Márcio, que nunca deixaram de incentivar minha busca por conhecimento e educação.

Aos meus amigos, que foram capazes de fazer uma jornada longa e árdua parecer um simples passeio.

À Ana Carolina, minha companheira, que me mostrou que nenhum desafio é tão grande que não se possa vencer.

À UFRJ, o IFRJ e o sistema público de ensino que, apesar das dificuldades, mudam a vida de muitos por meio de educação acessível e de qualidade.

Por fim, a todos que cruzaram meu caminho e compartilharam experiências, fazendo da minha realização pessoal um trabalho em grupo.

Resumo da Monografia apresentada à Escola de Química como parte dos requisitos necessários para obtenção do grau de Bacharel em Engenharia Química.

REFERVEDORES DO TIPO KETTLE – UMA NOVA ABORDAGEM DE PROJETO: *SET-TRIMMING*

Guilherme de Magalhães Sales

Janeiro, 2021

Orientadores: Prof. Eduardo Mach, D. Sc.

Prof. André L. H. Costa, D. Sc.

Prof. Miguel J. Bagajewicz, Ph. D.

Refervedores do tipo *kettle* são trocadores de calor utilizados principalmente em sistemas de destilação, com o intuito de fornecer energia térmica à corrente de fundo da coluna, causando sua ebulição e mantendo a funcionalidade do equipamento.

O projeto de um refervedor tem como objetivo o detalhamento de um conjunto de variáveis geométricas que descrevem a construção do equipamento, garantindo através dos modelos termofluidodinâmicos que o serviço térmico requerido no processo será cumprido. Metodologias de projeto mais tradicionais são a escolha principal da prática industrial, envolvendo algoritmos iterativos fundamentados por heurísticas. É inerente a esse tipo de trabalho a dependência da experiência do engenheiro, bem como a impossibilidade de afirmar que a solução encontrada é a melhor possível dentre todas as alternativas viáveis, isto é, a solução ótima.

O estudo de métodos de otimização no âmbito de projeto de equipamentos de processo é motivado por essas desvantagens dos métodos heurísticos, desencadeando uma busca por desenvolver e estudar algoritmos computacionais que sejam capazes de, a partir da formulação de um problema, retornar as características do melhor equipamento possível para a função desejada.

Este trabalho apresenta como o projeto de *kettles* pode ser abordado como um problema de otimização utilizando o método *set-trimming* – uma técnica baseada em enumeração que utiliza operações sucessivas com subconjuntos do espaço de busca para obter, com garantia de otimalidade global, o melhor equipamento possível para o serviço térmico requerido.

Descrevendo toda a modelagem e considerações termofluidodinâmicas do projeto, o trabalho mostra a aplicabilidade do *set-trimming* como uma nova abordagem para o projeto de *kettles*, centrada na busca pela solução ótima global, comparando seu desempenho com outros métodos otimizadores no que tange a sua performance.

ÍNDICE

1.	Introdução	1
1.1.	Escopo da Monografia	1
1.2.	Organização da monografia	2
2.	Visão geral de refervedores e seu projeto	3
2.1.	Trocadores de calor	3
2.2.	Refervedores	4
2.2.1.	<i>Kettle</i>	4
2.2.2.	Termossifões horizontais.....	5
2.2.3.	Termossifões verticais (lado dos tubos)	6
2.2.4.	Termossifões verticais (lado do casco)	7
2.2.5.	Refervedores internos.....	8
2.2.6.	Refervedores de circulação forçada	9
2.3.	Projeto de trocadores de calor	10
2.4.	Métodos de otimização: Uma visão geral	12
2.4.1.	Linearidade.....	13
2.4.2.	Continuidade	13
2.4.3.	Convexidade.....	14
2.4.4.	Classificação do método de otimização	15
2.5.	Organização da monografia	16
3.	Fundamentos e modelo para o projeto de <i>kettles</i>	18
3.1.	Descrição dos processos de vaporização.....	18
3.1.1.	Mecanismos de ebulição	18
3.1.2.	Ebulição em piscina	21
3.1.3.	Ebulição convectiva	23
3.2.	Equação da taxa de troca térmica	24
3.3.	Termofluidodinâmica no lado do casco	26
3.4.	Termofluidodinâmica no lado do tubo	28
3.5.	Coefficiente global de troca térmica.....	30
3.6.	Considerações de projeto e restrições	31
3.6.1.	Razão entre comprimento dos tubos e diâmetro do casco.....	31
3.6.2.	Fluxo crítico	31
3.6.3.	Velocidade de escoamento nos tubos	32
3.6.4.	Número de Reynolds mínimo no escoamento nos tubos.....	32
3.6.5.	Queda de pressão máxima nos tubos.....	32

3.6.6.	Área final requerida.....	33
3.7.	Avaliação econômica	33
4.	O projeto do <i>kettle</i> como um problema de otimização.....	37
4.1.	General Algebraic Modeling System (GAMS)	38
4.2.	O método <i>set-trimming</i>	39
4.2.1.	Declaração dos conjuntos.....	40
4.2.2.	Redução sucessiva do espaço de busca	42
5.	Estudos de caso	44
5.1.	Estudo de caso #1: Vaporização de butano puro.....	45
5.2.	Estudo de caso #2: Vaporização de mistura de hidrocarbonetos	48
5.3.	Discussão dos resultados	50
6.	Conclusões	52
7.	Referências	54
Apêndice A1.	Proposta de publicação.....	56

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1: Refervedor <i>kettle</i> . (adaptado de Serth, 2007)	4
Figura 2: Termossifão horizontal. (adaptado de Serth, 2007)	6
Figura 3: Termossifão vertical – vaporização no lado dos tubos. (adaptado de Serth, 2007)	7
Figura 4: Termossifão vertical - lado do casco. (adaptado de Palen, 2015).....	8
Figura 5: Refervedor interno. (adaptado de Serth, 2007).....	8
Figura 6: Refervedor de circulação forçada. (adaptado de Serth, 2007)	9
Figura 7: Representação gráfica do fluxo crítico. (SMITH, 2005) (adaptado)	11
Figura 8: Representações gráficas de uma função convexa (esq.) e de uma função côncava (dir.) (DUTTA, 2016).....	14
Figura 9: Função não-côncava ou não-convexa (próprio).....	15
Figura 10: Regimes de ebulição em piscina. (SMITH, 2005) (adaptado).....	20

ÍNDICE DE TABELAS

Tabela 1: Fatores de correção para material de construção (SMITH, 2005).....	35
Tabela 2: Fatores de correção para pressão (SMITH, 2005).....	35
Tabela 3: Fatores de correção para temperatura (SMITH, 2005).....	36
Tabela 4: Conjuntos de variáveis geométricas	41
Tabela 5: Dados Therminol 66 (EASTMAN, 2019).....	45
Tabela 6: Resultados – Exemplo #1	46
Tabela 7: Comparativo de resultados - Exemplo #1	47
Tabela 8: Resultados – Exemplo #2.....	49
Tabela 9: Comparativo de resultados - Exemplo #2	49

NOMENCLATURA

Símbolos	Descrição	Unidade (SI)
A	Área	m^2
BR	Faixa de ebulição	K
c_p	Capacidade calorífica	J/(kg·K)
C	Custo	\$
C_1	Coefficiente do arranjo de tubos	
D, d	Diâmetro	m
F	Conjunto de restrições de igualdade	
f_M, f_P, f_T	Fator de correção financeiro (material, pressão, temperatura)	
F_p, F_c, F_b	Fator de correção (pressão, mistura, ebulição convectiva)	
f	Fator de atrito de Darcy	
G	Conjunto de restrições de desigualdade	
g_c	Fator de conversão de massa para força	kg·m/(N·s ²)
g	Aceleração da gravidade	m/s ²
h	Coefficiente de transferência de calor por convecção	W/(m ² ·K)
i	Índice de preços	
k	Condutividade térmica	W/(m·K)
L	Comprimento	m
lay	Layout	
ltp	Passo do tubo	m
\dot{m}	Vazão mássica	kg/s
N_{pt}	Número de passes nos tubos	
N_{tt}	Número total de tubos	
Nu	Número de Nusselt	
P	Pressão	Pa
Pr	Número de Prandtl	
\dot{q}	Fluxo térmico	W/m ²
Q	Taxa de troca térmica	W
Q	Capacidade do equipamento (trocador de calor)	m ²
r_c	Raio do sítio ativo de nucleação	m

R	Resistência térmica	$m^2 \cdot K/W$
Re	Número de Reynolds	
rp	Razão de passo	
S	Espaço de busca	
s_{row}	Candidato a solução	
T	Temperatura	K
U	Coefficiente global de transferência de calor	$W/(m^2 \cdot K)$
\bar{v}	Volume específico	m^3/kg

Símbolos gregos	Descrição	Unidade (SI)
ΔH	Diferença de entalpia específica	J/kg
ΔP	Diferença de pressões ou queda de pressão	Pa
ΔT	Diferença de temperaturas	K
ϕ, ψ	Correlação geométrica	
λ	Calor latente específico de vaporização	J/kg
μ	Viscosidade dinâmica	Pa·s
ν	Viscosidade cinemática	m^2/s
ρ	Densidade	kg/m^3
σ	Tensão superficial	J/m^2

Subscritos	Descrição
1	Para um tubo
b	Banco de tubos
c	Crítico
$disp$	Disponível
e	De excesso (entre propriedade de parede e condição de saturação)
E	Equipamento
exc	Excesso (fator de segurança)
f	Depósito (<i>fouling</i>)
i	Entrada (<i>in</i>)
L	Líquido

<i>lm</i>	Média logarítmica
<i>macro</i>	Macroconvecção
<i>max</i>	Máximo
<i>micro</i>	Microconvecção
<i>min</i>	Mínimo
<i>nb</i>	Ebulição nucleada
<i>nc</i>	Convecção natural
<i>o</i>	Saída (<i>out</i>)
<i>r</i>	Reduzido
<i>req</i>	Requerido
<i>sat</i>	De saturação
<i>s</i>	Casco (<i>shell</i>)
<i>t</i>	Tubo
<i>te</i>	Externo do tubo
<i>ti</i>	Interno do tubo
<i>V</i>	Vapor
<i>vap</i>	De vaporização
<i>w</i>	Na parede (superfície de troca térmica)

1. Introdução

1.1. Escopo da Monografia

Projeto de equipamentos é o ramo da engenharia química que engloba a criação de planos e especificações de construção dos componentes de uma unidade industrial, bem como a previsão do resultado financeiro associado à implementação desta. (SINNOTT e TOWLER, 2020)

Sendo a indústria química uma atividade econômica de grande relevância, há uma motivação para estudar e desenvolver metodologias de projeto eficientes, que minimizem erros e permitam aumentar a rentabilidade esperada do empreendimento.

O processo de troca térmica entre fluidos de diferentes temperaturas separados por uma barreira sólida ocorre em diversas aplicações industriais. O equipamento responsável por realizar esse serviço é o trocador de calor, que apresenta um papel fundamental em muitos processos. Em uma operação de destilação, por exemplo, um trocador de calor – chamado de *refervedor* – tem a função de fornecer energia para a corrente de fundo da coluna e permitir que a separação dos componentes seja realizada. (INCROPERA, DEWITT, *et al.*, 2011) (SEADER e HENLEY, 2006)

Esse tipo de equipamento tem um projeto relativamente complexo, que requer experiência e conhecimento dos mecanismos de transferência de calor e modelos termofluidodinâmicos envolvidos.

O presente trabalho baseia-se nessa necessidade de estabelecer metodologias robustas, confiáveis e eficientes para apresentar uma nova abordagem de projeto aplicada a *refervedores* do tipo *kettle*, pautada na determinação do equipamento de menor custo de capital, que cumpra o serviço desejado, fazendo uso de uma técnica de otimização global denominada *set-trimming*. (COSTA e BAGAJEWICZ, 2019)

Passando pelos fundamentos da transferência de calor em processos de ebulição e pela apresentação de métodos otimizadores, a metodologia *set-trimming* é aqui demonstrada como uma alternativa às práticas tradicionais de projeto, amplamente utilizadas na indústria. O *set-trimming* se baseia em boas práticas de projeto e tem uma abordagem objetiva e eficiente. Aqui, sua performance e aplicabilidade é comparada com outros métodos otimizadores.

1.2. Organização da monografia

O presente trabalho está dividido a partir desse ponto em cinco principais capítulos. O Capítulo 2 fornece uma visão geral de todos os assuntos relevantes para o projeto de trocadores de calor, mais especificamente refervedores, com enfoque em metodologias que envolvem a obtenção de soluções ótimas.

O Capítulo 3 discute com mais detalhes os fundamentos dos processos de ebulição e como se aplicam à realidade dos trocadores de calor. Adicionalmente, apresenta o arcabouço matemático que compõe os modelos utilizados para o projeto de refervedores do tipo *kettle*, descrevendo e discutindo as principais equações relevantes para o cálculo das principais variáveis. Além disso, descreve o conjunto de restrições que são aplicáveis a esse tipo de projeto, baseadas em limitações operacionais e de projeto do refervedor. Considerações sobre avaliação econômica de equipamentos de processo, com ênfase em trocadores de calor, são apresentadas, substanciando algumas decisões em relação a como é conduzida a formulação do problema de otimização no projeto.

No Capítulo 4 é descrito como o projeto de um trocador de calor pode ser formulado como um problema de otimização. Nele são apresentados os objetivos e as variáveis de projeto do problema, bem como o GAMS – ferramenta computacional utilizada para formulação e solução do método otimizador adotado, o *set-trimming*. A descrição do método, seu funcionamento e uma visão geral da sua implementação também são apresentados nesse capítulo.

O Capítulo 5 é focado em apresentar dois estudos de caso de problemas de projeto, para os quais soluções ótimas de refervedores são obtidas por meio de três diferentes métodos, incluindo o *set-trimming*. Os resultados são discutidos levando em conta as diferenças entre os métodos em relação a indicadores específicos.

Por fim, as conclusões se dão no Capítulo 6, explicitando a aplicabilidade de soluções ótimas globais para projeto de equipamentos de processo e como o *set-trimming* se posiciona em relação às demais alternativas de métodos de otimização no caso específico do presente estudo.

2. Visão geral de refervedores e seu projeto

2.1. Trocadores de calor

Trocadores de calor são uma categoria de equipamentos de processo responsáveis por transferir energia em situações específicas, nas quais calor deve ser provido ou removido de uma determinada corrente de processo e/ou de serviço. A nomenclatura “trocador de calor” se aplica de forma genérica aos equipamentos térmicos que promovem essa transferência de energia de forma direta sem que haja a mistura física das correntes, situação que caracteriza um conjunto de equipamentos térmicos chamado de “recuperadores”.

Com correntes disponíveis com temperaturas diferentes, o princípio de funcionamento consiste em fornecer área suficiente para permitir uma determinada transferência de calor entre elas.

Existem diversas classes de trocadores de calor, que diferem entre si no que se refere principalmente ao seu tipo de construção. Cada tipo geralmente é mais adequado a aplicações específicas e varia quanto ao seu formato e arranjo espacial.

Trocadores de calor do tipo casco-e-tubo, por exemplo, são amplamente utilizados, pois proporcionam um coeficiente de troca térmica razoável, com construção relativamente simples e podendo ser construídos com uma grande gama de materiais.

Para situações nas quais o espaço físico é um limitante, trocadores de calor de placas são geralmente empregados, visto que conseguem atingir uma grande área de troca térmica por unidade de volume e também possibilitam baixas resistências térmicas. Estes são normalmente utilizados para cumprir requerimentos térmicos de processos em unidades industriais pequenas, como alimentícias e farmacêuticas. (INCROPERA, DEWITT, *et al.*, 2011)

Um tipo especial de trocador de calor casco e tubos – que será o foco desse estudo – é o refervedor (*reboiler*). Ele tem por objetivo promover a evaporação de uma corrente em um ambiente que propicie uma fluidodinâmica peculiar. Utilizado principalmente em colunas de destilação, o refervedor é usado para prover energia térmica suficiente à corrente de fundo da coluna, causando *boil-up* e mantendo as fases líquida e vapor em contracorrente no interior do equipamento.

2.2. Refervedores

Refervedores são, essencialmente, trocadores de calor casco e tubo especializados em mudança de fase, bem específicos no que tange às suas aplicações e projetos.

Existem alguns tipos de refervedores mais amplamente utilizados na indústria, classificados principalmente pela sua orientação e tipo de circulação do fluido de processo utilizada. Cada tipo apresenta especificidades que os tornam mais adequados para certas aplicações, variando em termos de custo de implementação, operação, característica do processo que receberá a carga térmica e disponibilidade de utilidades. A seguir são apresentados alguns dos tipos mais comuns de refervedores, suas características e especificidades. (PALEN, 2015)

2.2.1. Kettle

Objeto principal da presente monografia, o refervedor do tipo *kettle* é caracterizado principalmente pelo seu casco aumentado que permite a separação do vapor da fase líquida. A Figura 1 mostra uma representação esquemática de um *kettle* na operação de uma coluna de destilação.

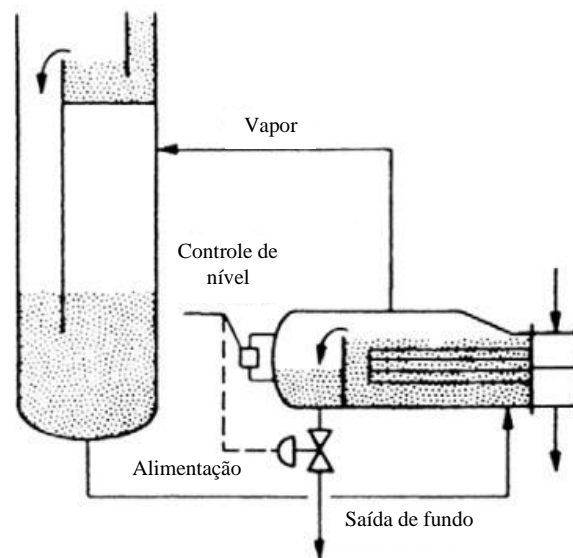


Figura 1: Refervedor *kettle*. (adaptado de Serth, 2007)

O produto de fundo da coluna alimenta o casco do kettle, cujo nível é regulado sempre acima do banco de tubos, que tem um número par de passes. Um casco do tipo TEMA-K é utilizado, caracterizado principalmente pelo seu diâmetro superdimensionado para que haja espaço disponível no casco para garantir a separação líquido-vapor no seu

interior, de modo que há ausência de escoamento bifásico na tubulação de saída, reduzindo assim a complexidade hidráulica do projeto.

Além da maior simplicidade de projeto, a separação entre as fases faz com que a hidrodinâmica no lado do casco não seja um fator preponderante na operação do equipamento, permitindo uma grande flexibilidade em termos de faixa de pressão, podendo operar tanto em vácuo como em pressões altas. As condições de ebulição no casco também permitem a obtenção de altos fluxos de calor tanto em diferenças de temperatura altas como baixas, principalmente em fluidos com faixa de ebulição estreita. (PALEN, 2015)

Apesar das vantagens supracitadas, existem aplicações nas quais o emprego de *kettles* é desfavorável. É recomendável, por exemplo, a utilização desse tipo de trocador para evaporar fluidos “limpos”, uma vez que a vaporização no casco causa um acúmulo de materiais não-voláteis, que pode se reverter em deposição. Esse fenômeno reduz o tempo que o equipamento pode operar sem necessitar de limpeza e manutenção no caso de correntes com concentração significativa de compostos que possam reduzir a troca térmica de maneira considerável. (PALEN, 2015)

2.2.2. Termossifões horizontais

São caracterizados por um banco de tubos de um ou mais passes, disposto na horizontal, e permitem a utilização de diversos tipos de casco, a depender do tipo de serviço. O fluido a ser aquecido é disposto no lado do casco, onde é vaporizado e flui pela saída do trocador em um escoamento bifásico. A força motriz do escoamento nomeia o equipamento – a menor densidade do fluido bifásico no interior do trocador e na tubulação em relação ao produto de fundo da coluna causa uma diferença de pressão que garante a circulação no trocador de calor.

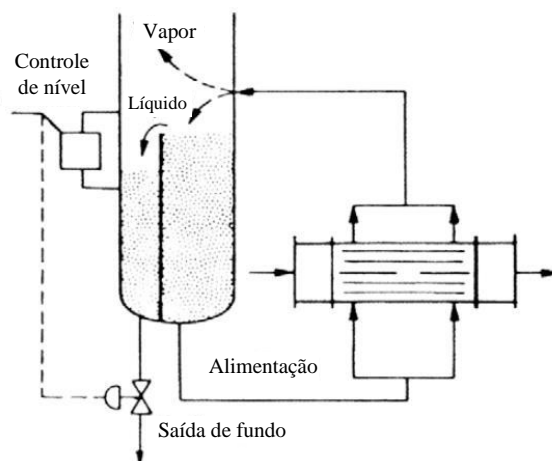


Figura 2: Termossifão horizontal. (adaptado de Serth, 2007)

A expressiva circulação nesse tipo de trocador, associada à turbulência gerada por chicanas, garante um coeficiente convectivo de troca térmica significativo em baixas diferenças de temperatura. A ebulição parcial, notória pelo escoamento bifásico na saída, permite que o fluido seja vaporizado sem um aumento significativo em sua temperatura, aumentando a diferença de temperatura para misturas com faixas de ebulição amplas. (PALEN, 2015)

O projeto desse tipo de equipamento pode ser uma tarefa complexa. A necessidade de utilização de chicanas pode resultar em escoamentos que concentrem troca térmica em alguns pontos, resultando em fluxos térmicos locais muito altos, causando ebulição em filme localizada ou até mesmo zonas secas. A necessidade de escoamento bifásico na saída requer um projeto cauteloso, visto que o tamanho da tubulação pode ter implicações na estabilidade do sistema. (PALEN, 2015)

2.2.3. Termossifões verticais (lado dos tubos)

De forma similar ao termossifão horizontal, é caracterizado por escoamento bifásico na saída e mecanismo de circulação oriundo da diferença de densidades causada por essa mistura líquido-vapor e o fluido de entrada. (PALEN, 2015)

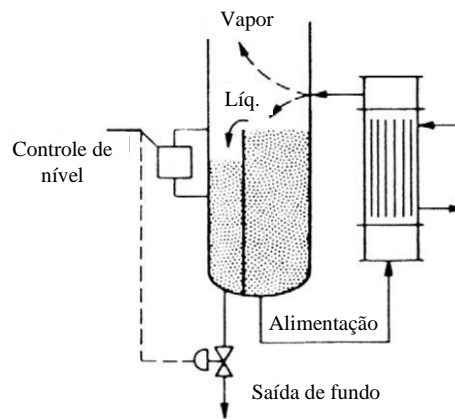


Figura 3: Termossifão vertical – vaporização no lado dos tubos. (adaptado de Serth, 2007)

A operação desse tipo de equipamento garante um escoamento rápido e com alto cisalhamento nas paredes, o que minimiza significativamente a formação de depósitos, sendo uma alternativa adequada para serviços cujo fluido contém material sólido não-volátil, que possa se aderir nas paredes. O depósito, caso ocorra, seria preferencialmente no lado dos tubos, resultando em uma maior facilidade de limpeza e manutenção, dado que basta a remoção do cabeçote para executá-las.

Adicionalmente, o tipo de casco utilizado na construção – TEMA E – é relativamente barato, sendo uma alternativa com baixo custo de capital associado.

Em contrapartida, o projeto de termossifões verticais com ebulição nos tubos é uma tarefa difícil em pressões extremas (muito altas ou vácuo). Ao contrário de sua alternativa horizontal, esse tipo de trocador não opera bem com misturas de faixa de ebulição larga nem com fluidos relativamente viscosos.

Além disso, quando operando em diferenças de temperatura muito altas ou baixas, esse tipo de unidade pode apresentar ebulição em filme e dificuldade de recirculação, respectivamente.

2.2.4. Termossifões verticais (lado do casco)

Utilizados mais especificamente quando o fluido quente é de difícil compatibilidade com o material do casco, que é usualmente mais caro, necessitando de sua alocação nos tubos. O projeto deve atentar especialmente para evitar zonas mortas que podem causar acúmulo de vapor e conseqüente superaquecimento.

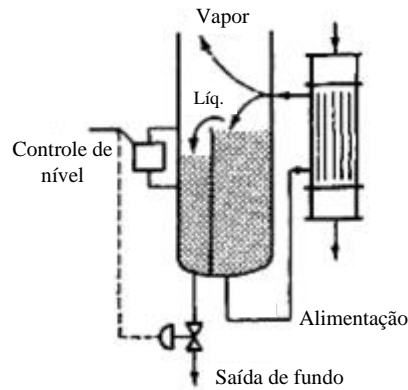


Figura 4: Termostato vertical - lado do casco. (adaptado de Palen, 2015)

2.2.5. Refervedores internos

Consistem em um banco de tubos inserido diretamente no fundo da coluna de destilação, como descrito na Figura 5.

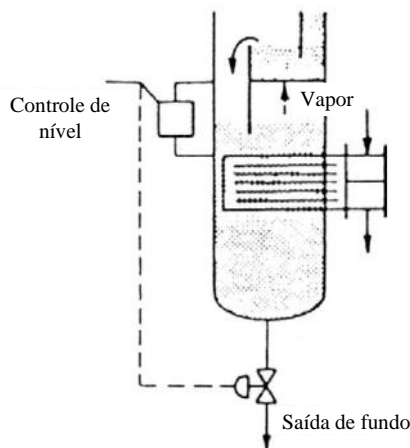


Figura 5: Refervedor interno. (adaptado de Serth, 2007)

Suas aplicações ótimas são muito similares às de um refervedor do tipo *kettle*, com um custo de capital associado muito menor, dado que não possui casco, e com menos problemas com a deposição, pois o material sedimentado é coletado na corrente de fundo da coluna.

Entretanto, a aplicação desse tipo de refervedor é associada a severas limitações de projeto, uma vez que a geometria do banco de tubos é dependente do diâmetro da coluna de destilação que recebe a carga térmica. Esse fator, em certas ocasiões, inviabiliza a aplicação desse tipo de trocador de calor devido à necessidade de diâmetros ineficazes para o banco de tubos para atingir a área de troca térmica necessária mediante a limitação no comprimento dos tubos. (PALEN, 2015)

A manutenção desse tipo de sistema também é um ponto de atenção para a sua utilização – a limpeza ou reparo de refeedores internos implica, necessariamente, em uma parada na operação da coluna, reduzindo a flexibilidade operacional da unidade, fator que deve ser levado em conta a depender das características do fluido de fundo da coluna e do regime de operação da unidade de destilação. (NITSCHKE e GBADAMOSI, 2016)

2.2.6. Refervedores de circulação forçada

Esse tipo de unidade, que pode ser vertical ou horizontal, utiliza uma bomba para promover a circulação do fluido no trocador.

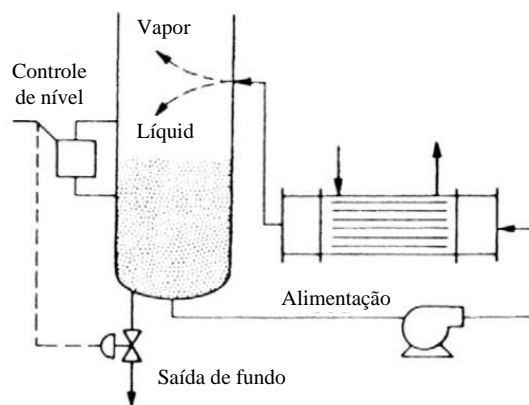


Figura 6: Refeedor de circulação forçada. (adaptado de Serth, 2007)

Nessa classe de refeedor, utiliza-se o mesmo casco do tipo TEMA-E utilizado em termosifões. Esse tipo de sistema é caracterizado por altas velocidades nos tubos e frações de vaporização baixas, de modo a reduzir problemas em correntes suscetíveis a promover depósito e possibilitar operação com fluidos viscosos (SERTH e LESTINA, 2007). Em contrapartida das vantagens de possibilitar a operação com fluidos incompatíveis com refeedores de circulação natural, o sistema de circulação forçada apresenta custos elevados com energia devido à alta taxa de circulação necessária e também alto custo de implementação oriundo do projeto e instalação da bomba e tubulação específica desse tipo de sistema (NITSCHKE e GBADAMOSI, 2016). Esse alto custo associado torna esse tipo de sistema específico para a situação em que outros tipos de refeedores não podem ser utilizados.

2.3. Projeto de trocadores de calor

O projeto de trocadores de calor de uma forma geral envolve a determinação de todas as variáveis físicas e geométricas, garantindo que os requisitos termofluidodinâmicos impostos pelo processo sejam cumpridos. Utiliza-se o conhecimento dos dados físico-químicos das correntes de processo e das condições de operação desejadas para obter um conjunto de variáveis geométricas que servem de base para a construção do trocador de calor. Esse procedimento é tradicionalmente realizado através de um algoritmo de tentativa e erro, no qual uma estimativa inicial é feita e avaliada, averiguando se os requisitos termofluidodinâmicos são cumpridos. Esse tipo de método é executado iterativamente utilizando heurísticas como base e leva em conta algum tipo de análise econômica, de forma a buscar uma solução factível com um custo relativamente baixo (geralmente supondo que o custo de implementação e operação varia monotonicamente com a área de troca térmica).

O procedimento tradicional de projeto envolve as seguintes etapas (SINNOTT e TOWLER, 2020):

1. Definir a carga térmica;
2. Coletar informações físico-químicas dos fluidos;
3. Calcular a diferença média de temperatura;
4. Estabelecer uma estimativa inicial para o coeficiente global (U);
5. Calcular a área requerida, com base U estimado;
6. Definir variáveis geométricas do projeto para área calculada;
7. Calcular os coeficientes de troca térmica individualmente;
8. Recalcular o coeficiente global e a área, e calcular as perdas de carga no trocador;
9. Repetir as etapas 5 a 8 até encontrar a menor área possível que satisfaça o serviço (carga térmica e perdas de carga);

O passo a passo descrito pode se aplicar para o projeto de virtualmente qualquer tipo de trocador de calor. Porém, é evidente que cada tipo, com seu propósito específico, possui seus próprios desafios e peculiaridades de projeto. Quando o trocador de calor envolve mudança de fase, como é o caso do *kettle*, há uma complexidade extra na determinação do coeficiente de troca térmica – a ebulição é um fenômeno complexo, de modo que modelos preditivos apresentam dificuldades para estimar os coeficientes com precisão.

Assim deve-se recorrer a dados experimentais ou a uma escolha criteriosa das equações utilizadas (SINNOTT e TOWLER, 2020).

Além disso, para satisfazer o serviço necessário não basta o trocador fornecer área suficiente para a troca térmica; devem-se cumprir também requisitos de pressão disponível para circulação dos fluidos e, no caso da presença de mudança de fase e especificamente vaporização, que é o caso dos refeedores, há de se garantir que o fluxo de troca térmica não é maior que o fluxo crítico a partir do qual há aumento significativo na resistência à transferência de calor o que causa também redução na transferência de calor em uma ampla faixa de excesso de temperatura¹ conforme pode ser visto no esboço mostrado na Figura 7.

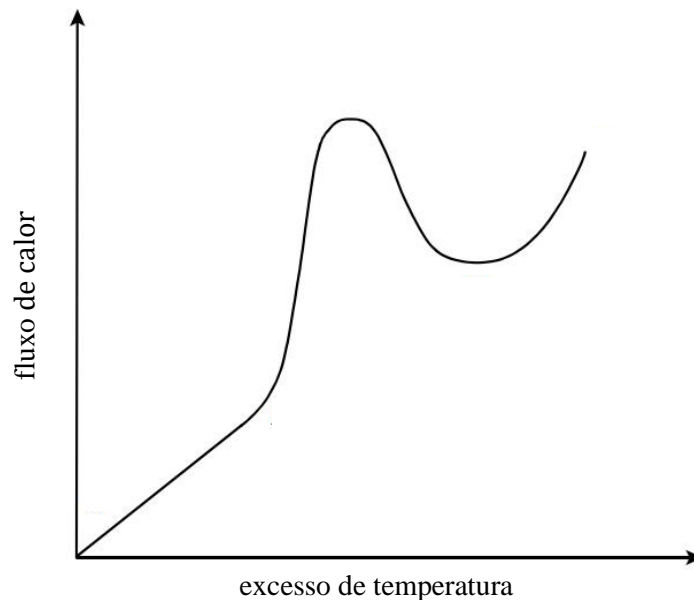


Figura 7: Representação gráfica do fluxo crítico. (SMITH, 2005) (adaptado)

De modo geral, a limitação mais evidente desse método iterativo é que ele não garante que a solução encontrada seja sequer próxima do mínimo global, por exemplo, no quesito área total, depende inteiramente da capacidade do engenheiro de projeto de tomar as decisões mais corretas ao longo das iterações. (COSTA e BAGAJEWICZ, 2019)

O projeto utilizando softwares comerciais acaba, de certa forma, também com a necessidade de intervenção do engenheiro de projeto, pois, não raro, são apresentadas

¹ Excesso de temperatura: diferença entre a temperatura da superfície de troca térmica e a temperatura de saturação do fluido na pressão de operação do refeedor.

algumas possibilidades de equipamentos para que o projetista escolha uma. Nestes softwares, como o HTRI (www.htri.net), há a vantagem da utilização de procedimentos, não disponíveis na literatura, que possibilitam o cálculo da termofluidodinâmica no escoamento no casco com maior precisão que nos métodos abertos na literatura.

Apesar do mercado estar habituado a esse tipo de procedimento, o desenvolvimento consistente na área de métodos de otimização e no poder computacional revelam uma tendência em mudar o paradigma dos projetos de engenharia de algoritmos heurísticos para algoritmos computacionais. A possibilidade de integrar esse tipo de técnica com os simuladores de processos – que são amplamente usados na indústria –, leva a certeza de obtenção de custos de capital ótimos e a redução da possibilidade de erro humano no projeto indicam uma oportunidade de aplicação de procedimentos de otimização computacional na engenharia de processos.

2.4. Métodos de otimização: Uma visão geral

Equipamentos industriais e seus projetos representam um importante campo de estudo dentro da engenharia de processos. É na etapa de projeto que considerações relacionadas a requerimentos de processo, segurança e custo são levados em conta, sendo este último tipicamente o foco da maioria dos métodos de otimização tradicionais.

O conceito de otimização é relevante sempre que a variação de um ou mais parâmetros do equipamento é permitida garantindo que os requisitos oriundos do processo para esse equipamento se mantenham satisfeitos. Matematicamente, isso significa que o modelo utilizado para o projeto tem um ou mais graus de liberdade após a avaliação dos parâmetros, isto é, surgem variáveis de projeto que podem assumir diversos valores e ainda assim manter o equipamento adequado ao processo. Apesar de quaisquer valores dentro desse conjunto poderem ser utilizados para construção do equipamento, algumas soluções terão custo-benefício maior ou menor que as demais, tornando a otimização – o conceito de encontrar a melhor solução dentro de um conjunto de possibilidades – aplicável.

Todo problema de otimização envolve duas etapas principais: a formulação do problema de otimização e a aplicação de algoritmo adequado para resolver a formulação proposta (GUENIN, KÖNEMANN e TUNÇEL, 2014).

A formulação envolve toda a modelagem matemática, que relaciona as variáveis físicas e químicas do sistema a ser otimizado, bem como as características geométricas dos equipamentos envolvidos, delimitando o contexto real no qual o algoritmo de otimização será aplicado através de restrições de igualdade e desigualdade, que delimitam o conjunto matemático no qual as variáveis podem assumir valores. Faz parte da formulação a definição do objetivo através de uma função que relacione numericamente a variável a ser otimizada (ex.: custo a ser minimizado) com as demais variáveis relevantes do modelo (ex.: dimensão do equipamento).

Um mesmo problema real pode ser formulado de diversas maneiras diferentes, sem perda de rigor, assim como problemas diversos podem apresentar diferentes características matemáticas quanto à sua linearidade e presença de variáveis discretas (COSTA e BAGAJEWICZ, 2019). Essa gama de peculiaridades encontrada nas formulações de problemas de otimização resulta, conseqüentemente, em diversas classificações, utilizadas para melhor guiar a seleção do algoritmo que vai operar de maneira mais satisfatória no problema em questão. A seguir são descritos alguns critérios principais para classificação de problemas de otimização.

2.4.1. Linearidade

Essa classificação é feita com base na estrutura matemática das equações do problema. Caso todas as equações sejam lineares, incluindo funções objetivo e restrições de igualdade ou desigualdade, o problema em questão é linear. A presença de uma ou mais equações não-lineares na formulação do problema incorre necessariamente em um problema não-linear.

Essa classificação direciona a decisão de utilizar um método otimizador que empregue programação linear (ex.: Simplex) ou não-linear (ex.: multiplicador de Lagrange) (DUTTA, 2016).

2.4.2. Continuidade

Um problema de otimização cujas variáveis de entrada no seu modelo podem assumir valores em um intervalo numérico contínuo é categorizado como um problema de otimização contínua.

Em contrapartida, alguns modelos envolvem decisões que não são representadas por um conjunto contínuo. Por exemplo, no caso de trocadores de calor, a decisão do diâmetro

dos tubos a ser utilizado está limitada as alternativas comerciais disponíveis, não possibilitando a escolha de um valor qualquer na reta dos números reais. Esse tipo de problema é denominado um problema de otimização discreta devido à natureza de suas variáveis.

Nota-se que as variáveis de entrada dos modelos não são o único critério para classificar um problema de otimização quanto à sua continuidade: a presença de funções descontínuas ou discretas, tanto no conjunto de restrições quanto na função objetivo, podem categorizar um problema como discreto.

A continuidade é um fator determinante na escolha do método otimizador a ser utilizado. Métodos de programação matemática podem ser específicos para problemas discretos, para problemas contínuos ou permitirem a otimização de problemas com ambos os tipos de funções e/ou variáveis através de métodos mistos como o MINLP (*mixed integer non-linear programming*) e o *set-trimming*, alvo do presente trabalho, que permite a sua utilização de qualquer classificação em relação a continuidade (e linearidade).

2.4.3. Convexidade

Uma função convexa é definida como aquela que possui apenas um ponto mínimo em seu intervalo de interesse, isto é, qualquer ponto ótimo corresponde a um ótimo global. Analogamente, a função côncava apresenta a mesma propriedade da função convexa, para um problema de maximização.

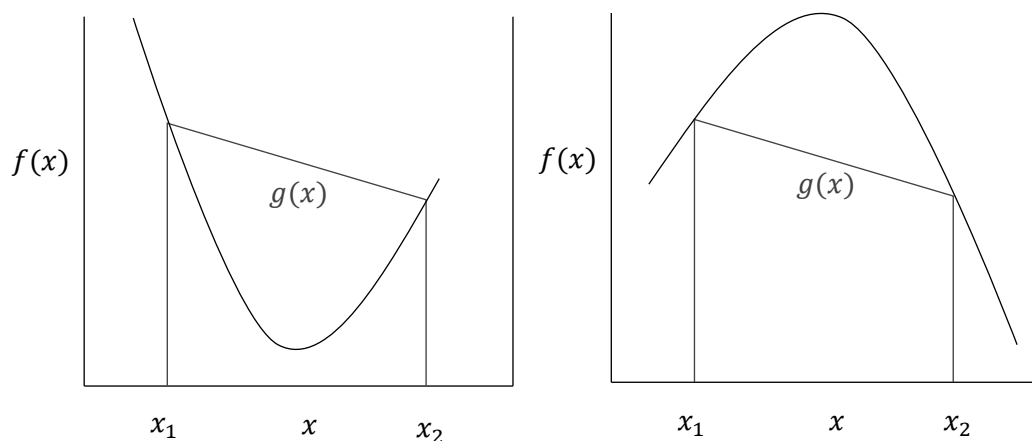


Figura 8: Representações gráficas de uma função convexa (esq.) e de uma função côncava (dir.)
(adaptado de DUTTA, 2016).

Mais formalmente, uma função convexa $f(x)$ é aquela em que a semirreta $g(x)$ que liga qualquer par (x_1, x_2) é maior que $f(x)$ em todos os pontos, sendo a definição análoga e invertida para a função côncava $-f(x)$. (DUTTA, 2016)

Convexidade e concavidade são características que representam uma maior facilidade para solução de problemas de otimização, pois qualquer ponto máximo ou mínimo representa um ponto ótimo global para funções com essas características.

Em funções não-côncavas ou não-convexas (Figura 9), a semirreta $g(x)$ pode tocar ou atravessar a função $f(x)$ em determinados pares (x_1, x_2) , o que pode representar dificuldades para a aplicação de alguns métodos de otimização. Métodos de programação matemática não-linear, por exemplo, utilizam algoritmos baseados em condições de otimalidade para atingir a solução, o que frequentemente pode resultar em um ponto ótimo local sendo retornado como solução, não atingindo a otimização global do sistema.

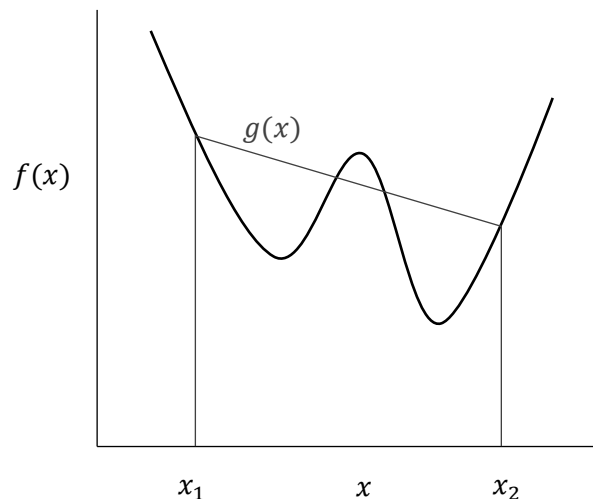


Figura 9: Função não-côncava ou não-convexa (próprio)

Nesse caso, é adequada a reformulação do problema de modo a reduzir as não-convexidades ou não-concavidades (ex.: transformação em um problema linear e/ou discreto). Em condições nas quais a estrutura do modelo matemático não permite tal reformulação é recomendável a substituição do método por algum que não seja pautado nas ditas condições de otimalidade, como métodos estocásticos ou o próprio *set-trimming*. (COSTA e BAGAJEWICZ, 2019)

2.4.4. Classificação do método de otimização

As categorias supracitadas são, de modo geral, associadas à formulação do problema e às características do seu modelo matemático. Por outro lado, a classificação dos métodos de otimização em si é fundamental para relacionar seu funcionamento com as propriedades da formulação, auxiliando assim na seleção do método adequado ao problema formulado. Métodos de otimização são classificados principalmente em **estocásticos**, **determinísticos** e **enumerativos**. (COSTA e BAGAJEWICZ, 2019; DUTTA, 2016)

Métodos **estocásticos** baseiam-se em processos de tentativa e erro suportados por um método de busca aleatória que se guia por heurísticas para orientar a solução a um valor mais próximo do ótimo ao longo das tentativas. Algoritmos desse tipo têm a vantagem de ser independentes de estimativas iniciais, mas não garantem a otimalidade da solução, além de necessitarem de um controle fino e trabalhoso dos parâmetros do algoritmo. Algoritmos genéticos (GA) e de otimização por enxame de partículas (PSO) são métodos conhecidos dessa abordagem. (DUTTA, 2016)

Algoritmos **determinísticos** definem as chamadas condições de otimalidade e guiam a solução até atingirem tais critérios ao longo das iterações, partindo de uma estimativa inicial. Esse tipo de método geralmente requer um conhecimento mínimo da topologia da função objetivo e, como já mencionado, possui a desvantagem de poder convergir para soluções que são pontos ótimos locais em vez de globais. Englobam principalmente métodos de programação matemática como o MINLP (*mixed integer non-linear programming*) e o ILP (*integer linear programming*). (DUTTA, 2016)

Por fim, métodos baseados em **enumeração** envolvem a exploração de múltiplas combinações de soluções, avaliando-as perante a função objetivo de modo a priorizar as alternativas que mais se aproximam do ótimo. Diferenciam-se entre si pelo recurso que o algoritmo utiliza para, sucessivamente, aproximar as alternativas do ponto ótimo. São em sua maioria guiados por heurísticas, característica que não garante a otimização global. O *set-trimming*, entretanto, pode ser classificado como uma técnica baseada em enumeração, porém, dada a maneira como as alternativas de solução são tratadas, é capaz de atingir o ponto ótimo global de maneira satisfatória, sem o esforço computacional de uma busca exaustiva da solução. (DUTTA, 2016)

2.5. Organização da monografia

O presente trabalho está dividido em cinco principais capítulos. O Capítulo 1 fornece uma visão geral de todos os assuntos relevantes para o projeto de trocadores de calor, mais especificamente refervedores, com enfoque em metodologias que envolvem a obtenção de soluções ótimas.

O Capítulo 2 discute com mais detalhes os fundamentos dos processos de ebulição e como se aplicam à realidade dos trocadores de calor. Adicionalmente, apresenta o arcabouço matemático que compõe os modelos utilizados para o projeto de refervedores do tipo *kettle*, descrevendo e discutindo as principais equações relevantes para o cálculo das principais variáveis. Além disso, descreve o conjunto de restrições que são aplicáveis a esse tipo de projeto, baseadas em limitações operacionais e de projeto do refervedor. Considerações sobre avaliação econômica de equipamentos de processo, com ênfase em trocadores de calor, são apresentadas, substanciando algumas decisões em relação a como é conduzida a formulação do problema de otimização no projeto.

No Capítulo 3 é descrito como o projeto de um trocador de calor pode ser formulado como um problema de otimização. Nele são apresentados os objetivos e as variáveis de projeto do problema, bem como o GAMS – ferramenta computacional utilizada para formulação e solução do método otimizador adotado, o *set-trimming*. A descrição do método, seu funcionamento e uma visão geral da sua implementação também são apresentados nesse capítulo.

O Capítulo 4 é focado em apresentar dois estudos de caso de problemas de projeto, para os quais soluções ótimas de refervedores são obtidas por meio de três diferentes métodos, incluindo o *set-trimming*. Os resultados são discutidos levando em conta as diferenças entre os métodos em relação a indicadores específicos.

Por fim, as conclusões se dão no Capítulo 5, explicitando a aplicabilidade de soluções ótimas globais para projeto de equipamentos de processo e como o *set-trimming* se posiciona em relação às demais alternativas de métodos de otimização no caso específico do presente estudo.

3. Fundamentos e modelo para o projeto de *kettles*

Neste capítulo são apresentados os fundamentos e o modelo que descreve a operação de refervedores tipo *kettles*. No *kettle*, por simplicidade, será considerado no presente estudo que a corrente quente, o fluido de aquecimento, passa pelos tubos sem sofrer mudança de fase. Como observado amplamente na prática de projeto, o escoamento através dos tubos será considerado turbulento e as propriedades físicas do fluido supostas constantes.

Este capítulo discute inicialmente sobre a termofluidodinâmica de processos de vaporização, descrevendo mecanismos e modelos. Em seguida, levando em conta tais processos, é definido o modelo matemático utilizado para representação do *kettle* no âmbito de projeto, englobando equações características de trocadores de calor, correlações termofluidodinâmicas e balanços energéticos. Por fim, são estabelecidos modelos matemáticos e relações geométricas e heurísticas que restringem o projeto a uma região factível de construção e operação

3.1. Descrição dos processos de vaporização

Um processo de ebulição necessariamente envolve, em algum estágio, uma mistura bifásica de líquido e vapor. A existência desse tipo de sistema adiciona complexidade à análise térmica e hidráulica de refervedores, uma vez que diversos tipos de regimes de escoamento podem ser observados a depender das condições operacionais do trocador de calor e de suas características construção. (SERTH e LESTINA, 2014)

Dado que escoamentos bifásicos são difíceis de representar em equações fenomenológicas, correlações para coeficientes de projeto são amplamente utilizadas como recurso matemático para prever o comportamento de fluidos em ebulição em trocadores de calor. Tais previsões são fundamentais no projeto de refervedores, por exemplo, pois fornecem o coeficiente de troca térmica convectiva no fluido em ebulição, que integra a equação de projeto do equipamento. A seguir são apresentadas algumas características do processo de ebulição e formas de descrevê-lo, principalmente focando os refervedores tipo *kettle*.

3.1.1. Mecanismos de ebulição

Refervedores são equipamentos nos quais o fluido de processo, em situação de vaporização, é mantido em contato com uma superfície sólida com determinada

temperatura superficial de parede (T_w), que é controlada pelo fluido de aquecimento utilizado, que escoar no lado oposto ao do fluido de processo. É denominada ebulição nucleada a situação na qual a temperatura de parede excede a temperatura de saturação do líquido (T_{sat}), mas o líquido ainda mantém contato com a parede aquecida. Ocorre a vaporização em locais específicos da superfície, havendo assim a formação de bolhas. A formação das bolhas e sua posterior ascensão contribuem para a movimentação no líquido, havendo assim um processo de convecção na superfície superaquecida. Denomina-se excesso de temperatura (ΔT_e) a força motriz para transferência de calor nesse sistema, dada pela Equação (1).

$$\Delta T_e = T_w - T_{sat} \quad (1)$$

Essa grandeza é a principal variável que afeta o regime de ebulição preponderante no sistema. A Figura 10 esboça o comportamento do fluxo térmico com a variação do excesso de temperatura e elucida perfis de variação diversos, com regiões de aumento e de decréscimo, associadas aos diferentes mecanismos de ebulição observáveis no processo ocorrendo em piscina – ebulição em piscina (ocorre sem agentes externos à transferência de calor contribuindo para a movimentação do fluido).

Na região compreendida entre os pontos A e B ocorre apenas convecção natural, na qual o fluido é aquecido na parede, se movimenta por diferença de densidades e evapora na superfície do líquido.

Do ponto B ao C, a ebulição é denominada nucleada, regime para o qual a operação da maioria dos revedores é projetada. Nele, bolhas de vapor são formadas diretamente na superfície sólida de contato, rapidamente se despreendendo em direção à fase gasosa. Esse mecanismo combina fluxos térmicos viáveis para o cumprimento do serviço especificado pelo projeto com excessos de temperatura factíveis na prática industrial.

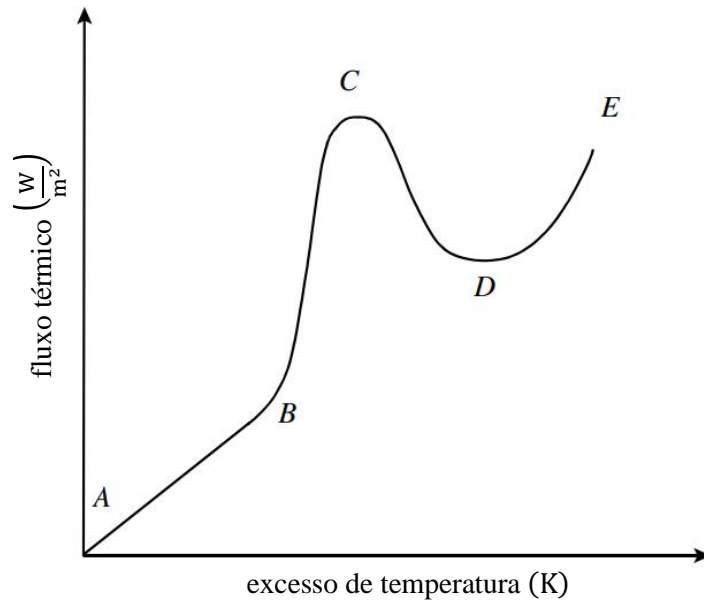


Figura 10: Regimes de ebulição em piscina. (SMITH, 2005) (adaptado)

O ponto representado por C identifica o chamado fluxo crítico e marca o início da região de transição. Nessa condição, as bolhas da ebulição nucleada coalescem e formam regiões contínuas de vapor que impedem o acesso do líquido à parede e por isso prejudicam a transferência de calor.

O ponto D é chamado ponto de Leidenfrost e corresponde ao início da ebulição em filme, regime no qual a transferência de calor por condução e radiação entre a parede e o líquido em mudança de fase predomina, necessitando assim de uma alta diferença de temperatura para atingir fluxos de calor compatíveis com o regime de ebulição nucleada (SERTH e LESTINA, 2014) (SMITH, 2005). Esse regime de ebulição no qual não há contato entre a superfície e o fluido é chamado de ebulição em filme ou película.

Em relação à movimentação do fluido próxima a superfície de troca térmica, a ebulição pode ser caracterizada como convectiva ou em piscina. A ebulição é denominada convectiva quando o escoamento do fluido ao longo da superfície de troca térmica tem mecanismos causadores além do processo de mudança de fase. A ebulição em piscina é caracterizada por ocorrer no seio de um volume de líquido no qual sua movimentação é causada predominantemente pelas bolhas em formação e em deslocamento. Além da região influenciada pelas bolhas o líquido se encontra estagnado.

A correta classificação do regime de ebulição é fundamental para a escolha do modelo mais adequado para a descrição do coeficiente de transferência de calor por convecção.

Esse parâmetro é calculado a partir de correlações que levam em conta propriedades físicas do fluido, regime de ebulição (convectiva ou piscina), condições operacionais do sistema, parâmetros que caracterizem a movimentação do fluido (quando convectiva), e uma variável relacionada à magnitude da transferência de calor, que pode ser o excesso de temperatura (ΔT_e) ou o fluxo térmico (\dot{q}).

3.1.2. Ebulição em piscina

Podendo ser definido como o regime de ebulição no qual a superfície aquecida permanece completamente imersa em um volume comparativamente grande de líquido estagnado, a ebulição em piscina é a classificação que melhor define a termofluidodinâmica no lado do casco no *kettle*. Fatores preponderantes nesse tipo de ebulição são a formação, crescimento e desprendimento de bolhas na superfície de aquecimento, fenômenos que causam a circulação do vapor para a interface entre as fases e promovem a turbulência na região de aquecimento, potencializando a transferência de calor.

As Equações (2) e (3) mostram uma forma geral das correlações para o coeficiente de transferência de calor em processos de ebulição em piscina, explicitando a dependência funcional do h_{nb} em relação, alternativamente, a \dot{q} ou a ΔT_e , bem como a constantes empíricas (c_1 e m) e fatores de correção (F_i), que levam em conta propriedades físicas do fluido puro ou da mistura, parâmetros operacionais, entre outras possibilidades. (PALEN, 2015)

$$h_{nb} = c_1 \dot{q}^m F_i \quad (2)$$

ou

$$h_{nb} = c_1 \Delta T_e^m F_i \quad (3)$$

Algumas correlações referentes a ebulição em piscina são descritas a seguir.

- Foster-Zuber

A correlação de Foster-Zuber é um método bastante tradicional para cálculo do h_{nb} , desenvolvida na década de 60, porém ainda utilizada como base para diversos métodos de projeto. (SCHLÜNDER, 1983)

$$h_{nb} = 0,00122 \left(\frac{k_L^{0,79} c_{p,L}^{0,45} \rho_L^{0,49} g_c^{0,25} \Delta P_e^{0,75}}{\sigma^{0,5} \mu_L^{0,29} \lambda^{0,24} \rho_V^{0,24}} \right) \Delta T_e^{0,24} \quad (4)$$

k_L : condutividade térmica do líquido
 $c_{p,L}$: capacidade calorífica do líquido
 ρ_L : densidade do líquido
 ρ_V : densidade do vapor
 μ_L : viscosidade do líquido
 g_c : fator de conversão de massa para força
 ΔP_e : diferença entre pressão de operação e pressão de saturação
 σ : tensão superficial
 λ : calor latente específico de vaporização

Essa equação utiliza o excesso de temperatura como principal variável, tendo como argumento diversas propriedades físicas dos fluidos do sistema. (SERTH e LESTINA, 2014)

- Mostinski

Utilizando um fator semi-empírico em sua constituição, a correlação de Mostinski utiliza da lei dos estados correspondentes, proposta por Van der Waals, para corrigir a influência da pressão nas propriedades termodinâmicas do elemento em ebulição. Essa lei observa que fluidos em condições reduzidas iguais (no caso, pressão reduzida) têm desvio da idealidade similar. (HARLACHER e BRAUN, 1970)

$$h_{nb} = 0,00417 P_c^{0,69} \dot{q} F_p \quad (5)$$

$$F_p = f(P_r) \quad (6)$$

A Equação (5) utiliza unidades no SI e a pressão em kPa. Nota-se que o fator de correção que leva em conta o estado termodinâmico é função da pressão reduzida ($P_r = P/P_c$) e pode assumir diferentes formas, dependendo do grau de precisão requerida pelo processo e condições de operação. É mais recomendada para vaporização de correntes puras, porém pode ser utilizada com boa aproximação para misturas com faixa de ebulição estreita, de forma que a aplicação para largas faixas de ebulição pode superestimar o coeficiente de convecção. (SMITH, 2005)

Essa correlação pode utilizar a temperatura de excesso como variável aplicando a relação $\dot{q} = h_{nb} \Delta T_e$ na Equação (5).

$$h_{nb} = 4,33 \cdot 10^{-8} P_c^{2,3} \Delta T_e^{2,333} F_p^{3,333} \quad (7)$$

- Ratiani & Shekriladze

Esta correlação foge do modelo tradicional anterior, que correlaciona h_{nb} com \dot{q} ou ΔT_e . Esta equação correlaciona o coeficiente de convecção com diversas variáveis, incluindo propriedades físicas do fluido (como densidade, temperatura de saturação e

tensão superficial) como também da superfície na qual a ebulição ocorre, característica distintiva dessa correlação, representada pelo raio do sítio ativo de nucleação² (r_c) (SCHLÜNDER, 1983).

$$\frac{h_{nb}r_c}{k_L} = 0,07 \left(\frac{\dot{q}r_c^2\lambda\rho_V}{\sigma T_{sat}k_L} \right)^{0,7} \left(\frac{\rho_L\sigma T_{sat}c_{p,L}}{\lambda^2\rho_V^2r_c} \right)^{\frac{1}{4}} \left(\frac{r_c[P(\bar{v}_V - \bar{v}_L)]^{\frac{1}{2}}}{\nu_L} \right)^{\frac{1}{4}} \quad (8)$$

k_L : condutividade térmica do líquido

$c_{p,L}$: capacidade calorífica do líquido

ρ_L : densidade do líquido

ρ_V : densidade do vapor

μ_L : viscosidade do líquido

r_c : raio do sítio ativo de nucleação

P : pressão de operação

\bar{v}_V : volume específico do vapor

\bar{v}_L : volume específico do líquido

ν_L : viscosidade cinemática do líquido

σ : tensão superficial

λ : calor latente específico de vaporização

Seu diferencial é sua capacidade de representar de forma acurada uma vasta gama de situações operacionais e fluidos, incluindo água, compostos orgânicos, fluidos de refrigeração e metais líquidos.

Essa versatilidade é compensada pela variedade de parâmetros que devem ser quantificados com precisão para garantir a estimativa adequada do coeficiente de convecção, sendo muitos deles inacessíveis ou imprecisos na literatura.

3.1.3. Ebulição convectiva

Na ebulição convectiva há contribuição de agente externo ao processo de transferência de calor para a movimentação do fluido em ebulição. Normalmente o processo de ebulição em piscina é descrito como uma combinação entre o mecanismo de convecção na ebulição em piscina, que pode ser chamado de microconvectivo, e o mecanismo chamado macroconvectivo, associado ao escoamento do fluido como um todo ao longo da superfície de aquecimento. Refervedores como termossifões ou de circulação forçada são exemplos de equipamentos nos quais esse tipo de modelagem é mais adequado,

² Sítios ativos de nucleação são cavidades na superfície aquecida intrínsecas da formação do material responsáveis pela formação de vapor dentro do líquido devido à exposição local de uma massa pequena de fluido a uma carga térmica suficiente para sua ebulição. A formação dessas microbolhas funciona como um gatilho para que o mecanismo de ebulição nucleada ocorra, nomeando o fenômeno.

devido à preponderância do escoamento do fluido para a convecção nesses casos. (CHEN, 1966)

Sob o preceito de que o mecanismo convectivo total é composto pela combinação dos fenômenos microconvectivos e macroconvectivos, define-se o coeficiente de transferência de calor por convecção (h_{nb}) na ebulição convectiva com predominância da ebulição nucleada como a soma da contribuição desses dois fatores.

$$h_{nb} = h_{macro} + h_{micro} \quad (9)$$

A macroconvecção pode ser modelada através de correlações para convecção forçada, porém corrigida para levar em conta fatores associados ao escoamento bifásico, como a não-homogeneidade das propriedades físicas. (CHEN, 1966)

Já o fenômeno de microconvecção se pauta em equações como as descritas na seção 3.1.2. Nessa condição, a formação de bolhas na superfície é afetada pelo escoamento do fluido, que pode facilitar o desprendimento de bolhas de volume pequeno ou reduzir a formação no geral, necessitando, portanto, aplicar uma correção para levar em conta esse fator. (CHEN, 1966)

3.2. Equação da taxa de troca térmica

Com objetivo de trabalhar de forma mais objetiva, a apresentação das equações a partir deste momento será feita já indicando quais grandezas serão tratadas como variáveis e quais como parâmetros no contexto da formulação do problema de otimização. Considera-se um **parâmetro** qualquer grandeza que é fixada anteriormente ao procedimento de otimização e apresenta sempre o mesmo valor ao longo do procedimento (ex.: requisitos básicos de processo, propriedades físicas das correntes, etc), já as **variáveis** correspondem de fato aos graus de liberdade do problema, que se alteram em função do método otimizador, de modo a buscar a solução ótima. Nas equações, os parâmetros e as demais grandezas calculadas apenas a partir de parâmetros são identificadas pelo símbolo “ $\hat{}$ ” (chapéu).

Para representar a carga térmica é adotado o método da média logarítmica da diferença de temperatura (LMTD), que fornece a Equação (10) para relacionar os requisitos térmicos com a geometria do trocador de calor (GONÇALVES, COSTA e BAGAJEWICZ, 2016):

$$\hat{Q} = UA_{req}\Delta\hat{T}_{lm} \quad (10)$$

na qual \widehat{Q} é a carga térmica a ser transferida, U é o coeficiente global de troca térmica, A_{req} é a área requerida para o trocador de calor e $\widehat{\Delta T}_{lm}$ é a média logarítmica dos diferenciais de temperatura ao longo da área de transferência de calor (LMTD). Em *kettles*, considera-se que o fluido em ebulição se encontra totalmente misturado, o que confere valor constante de sua temperatura ao longo da área. Desta forma, o procedimento para calcular a LMTD não necessita de correções em função de possíveis múltiplas passagens nos tubos, podendo-se usar a Equação (11), na qual os subscritos o , i , s e t representam, respectivamente, saídas, entradas, corrente no lado do casco e corrente no lado dos tubos. Lembrando que por simplificação no cálculo do coeficiente de transferência de calor no lado do fluido quente, no presente estudo adota-se a hipótese de que o fluido quente não muda de fase no interior do *kettle*, o que leva à utilização da Equação (11) para determinação desta média de temperaturas:

$$\widehat{\Delta T}_{lm} = \frac{(\widehat{T}_{ot} - \widehat{T}_s) - (\widehat{T}_{it} - \widehat{T}_s)}{\ln \frac{(\widehat{T}_{ot} - \widehat{T}_s)}{(\widehat{T}_{it} - \widehat{T}_s)}} \quad (11)$$

As chamadas equações de balanço energético são utilizadas para calcular o calor recebido no lado do casco (frio) e o fornecido a partir do lado dos tubos (quente), respectivamente:

$$\widehat{Q}_s = \Delta \widehat{H}_{s,vap} \widehat{m}_{s,vap} \quad (12)$$

$$\widehat{Q}_t = \widehat{m}_t \widehat{c}_{p,t} (\widehat{T}_{it} - \widehat{T}_{ot}) \quad (13)$$

Na Equação (12), $\widehat{m}_{s,vap}$ corresponde à vazão mássica de vapor que é gerada no *kettle*, diretamente vinculada à carga térmica demandada pelo processo. Nestas equações há a hipótese, aqui adotada, de que não há troca de calor sensível no lado do casco, sendo todo o calor trocado responsável pela mudança de fase do fluido no casco (calor latente).

De forma que, pelo balanço energético global no equipamento, a taxa total trocada no *kettle* é representada por:

$$\widehat{Q} = \widehat{Q}_s = \widehat{Q}_t \quad (14)$$

A área total de troca térmica (A) é dada pela área de um único tubo multiplicada pelo número total de tubos (usada como referência a área externa dos tubos):

$$A = N_{tt}\pi d_{te}L \quad (15)$$

Para levar em conta quaisquer fatores imprevisíveis, é uma boa prática projetar o trocador de calor considerando um percentual de excesso de área (\hat{A}_{exc}), levado em consideração da seguinte forma:

$$A \geq \left(1 + \frac{\hat{A}_{exc}}{100}\right) A_{req} \quad (16)$$

3.3. Termofluidodinâmica no lado do casco

Com objetivo de evitar a necessidade do cálculo da temperatura da superfície da área de transferência de calor em contato com o fluido em ebulição, correlações para ebulição nucleada do tipo da equação de Mostinski são aqui usadas para descrever a relação entre os parâmetros importantes no lado do casco. Com a consideração de mistura ideal no casco, a queda de pressão no casco é considerada desprezível e, portanto, não há necessidade de modelo para descrever a dinâmica deste escoamento. (PALEN, 2015) (PALEN, 2015)

No casco há então ebulição em piscina, com seu coeficiente de convecção descrito pela correlação de Mostinski. (PALEN, 2015)

$$h_{nb1} = 0,00417\hat{P}_c^{0,69}\dot{q}^{0,7}\hat{F}_pF_c \quad (17)$$

A Equação (17) calcula o coeficiente de convecção para ebulição nucleada no exterior de um tubo circular na posição horizontal em função da pressão crítica do fluido (\hat{P}_c), do fluxo de troca térmica (\dot{q}) e de dois fatores de correção. O fator de pressão (\hat{F}_p) leva em conta a influência da pressão na troca térmica da ebulição, representada de forma simplificada pela Equação (18). O fator F_c corrige o coeficiente para incluir os efeitos associados a misturas, sendo calculado pela Equação (19), na qual \widehat{BR} corresponde à faixa de ebulição do fluido.

$$\hat{F}_p = 1,8\left(\frac{\hat{P}}{\hat{P}_c}\right)^{0,17} \quad (18)$$

$$F_c = (1 + 0.023\dot{q}^{0.15}\widehat{BR}^{0.75})^{-1} \quad (19)$$

Devido à constante na Equação (17) não ser adimensional, as unidades das variáveis e parâmetros devem ser: \hat{P}_c em kPa e \dot{q} em W/m², se estendendo para as Equações (18) e (19). \widehat{BR} deve ser representado em K ou °C.

Na Equação (20) é feita a correção do coeficiente de convecção para ebulição nucleada em apenas um tubo para um banco de tubos, utilizando um fator de correção e um coeficiente extra para levar em conta os efeitos da convecção natural na região da matriz tubular (h_{nc}), que é constante e associado ao tipo de fluido que está sendo vaporizado (ex.: 250 W/(m²·K) para hidrocarbonetos, em boa aproximação).

$$h_s = h_{nb,1}F_b + \hat{h}_{nc} \quad (20)$$

O fator de correção F_b é referente à contribuição da ebulição convectiva para a troca térmica, expressa na Equação (21).

$$F_b = 1 + 0,1 \left[\frac{0,785D_b}{C_1 r p^2 d_{te}} - 1 \right]^{0,75} \quad (21)$$

na qual D_b corresponde ao diâmetro do banco de tubos, $r p$ é a razão de passo, d_{te} é o diâmetro externo do tubo e C_1 é uma constante relacionada ao arranjo dos tubos (quadrado = 1; triangular = 0,866).

Um parâmetro importante no que acionamento da ebulição em piscina, pois representa um limite máximo operacional, é o fluxo de troca térmica máximo que o sistema suporta sem que o mecanismo de transferência de calor se altere do regime nucleado para ebulição em filme, o que reduz drasticamente a eficiência do equipamento. Esse fluxo máximo, ou uma fração dele, deve então ser adotado como um valor limite para esta variável (restrição de desigualdade no processo de otimização). As Equações (22) a (25) são baseadas na correlação de Mostinski e seguem o mesmo procedimento de cálculo do fluxo para um único tubo e correção posterior para o banco de tubos através de um fator (que é função da geometria e arranjo do banco) (PALEN, 2015).

$$\dot{q}_{1,max} = 367 \hat{P}_c \left(\frac{\hat{P}}{\hat{P}_c} \right)^{0,35} \left(1 - \frac{\hat{P}}{\hat{P}_c} \right)^{0,9} \quad (22)$$

$$\dot{q}_{b,max} = q_{1,max} \phi_b \quad (23)$$

$$\phi_b = 3,1 \psi_b \quad (24)$$

$$\psi_b = \frac{\pi D_b L}{A} \quad (25)$$

sendo D_b o diâmetro do banco de tubos, definido por:

$$D_b = D_s \widehat{K}_{N_{pt}} \quad (26)$$

na qual $K_{N_{pt}} = \sqrt{0,90}$ para trocadores de calor com mais de um passe nos tubos, característica que foi adotada no presente estudo para o *kettle*, e D_s é o diâmetro do casco³.

Uma relação importante para a descrição geométrica do banco de tubos permite o cálculo do número total de tubos (N_{tt}) a partir de D_b e do passo nos tubos (ltp), dado por: (KAKAÇ e LIU, 2002)

$$N_{tt} = \text{round} \left(\frac{\pi D_b^2}{4 ltp^2 C_1} \right) \quad (27)$$

A função round presente na Equação (27) corresponde ao arredondamento do valor obtido no argumento para o número inteiro mais próximo.

Como já comentado, a queda de pressão no escoamento no lado do casco é considerada desprezível no presente estudo, sendo uma hipótese comum na modelagem de *kettles*.

Como já comentado, para fluido quente adota-se no presente trabalho a presença de um escoamento sem mudança de fase, o que implica em mudança de temperatura deste fluido ao longo da área de troca térmica. Por outro lado, os modelos citados anteriormente para a ebulição em piscina têm como pressuposto temperatura constante na superfície onde há a vaporização. Cabe então ressaltar que a utilização destas equações no modelo aqui proposto é justificada pela ordem de grandeza típica das resistências convectivas, visto que a resistência convectiva na vaporização é muito menor do que na convecção forçada, o que permite a hipótese de que a temperatura superficial em contato com o fluido mudando de fase pode ser considerada próxima à temperatura deste fluido, que em função da hipótese de mistura ideal é constante.

3.4. Termofluidodinâmica no lado do tubo

Com a hipótese de não mudança de fase no escoamento no lado dos tubos, as equações termofluidodinâmicas para o lado dos tubos no *kettle* são análogas às usadas em trocadores casco e tubo sem mudança de fase.

³ Nota-se que o *kettle* possui casco expandido para desprendimento de vapor, significativamente maior que o feixe de tubos. A variável D_s utilizada é um valor de referência, utilizado na restrição de L/D com base heurística (Seção 3.6.1), não representando o diâmetro total do casco expandido.

As correlações típicas para este tipo de escoamento são apresentadas usando números adimensionais e baseadas para o escoamento no interior de tubos cilíndricos. O coeficiente de convecção na forma adimensional é representado pelo número de Nusselt:

$$Nu_t = \frac{h_t d_{ti}}{\hat{k}_t} \quad (28)$$

O número de Prandtl é essencialmente uma função das propriedades físicas do fluido que percorre o lado dos tubos:

$$\widehat{Pr}_t = \frac{\widehat{c}_{p,t} \widehat{\mu}_t}{\widehat{k}_t} \quad (29)$$

O número de Reynolds do escoamento no interior dos tubos aborda considerações fluidodinâmicas e geométricas da seguinte forma:

$$Re_t = \frac{d_{ti} v_t \widehat{\rho}_t}{\widehat{\mu}_t} \quad (30)$$

$$v_t = \frac{4 \widehat{m}_t}{\left(\frac{N_{tt}}{N_{pt}}\right) \pi \widehat{\rho}_t d_{ti}^2} \quad (31)$$

nas quais \widehat{m}_t e $\widehat{\rho}_t$ são, respectivamente, a vazão total e densidade da corrente que escoam pelo interior dos tubos.

A correlação de Dittus-Boelter relaciona os números adimensionais supracitados, permitindo o cálculo do número de Nusselt (GONÇALVES, COSTA, *et al.*, 2017) a partir do conhecimento dos parâmetros que caracterizam o escoamento:

$$Nu_t = 0.023 Re_t^{0.8} \widehat{Pr}_t^n \quad (32)$$

na qual n é um parâmetro igual a 0.4 para aquecimento e 0.3 para resfriamento do fluido escoando. Essa equação é aplicável apenas para valores de $Re_t \geq 10000$.

A perda de carga no lado dos tubos pode ser uma restrição importante para o problema de otimização. Seu valor tem relação com os custos de bombeamento do fluido que escoam pelos tubos e valores superiores têm como contrapartida coeficientes maiores e áreas menores. Assim, essa grandeza ao ser levada em conta, permite adicionar ao problema de otimização esse compromisso entre custo de bombeamento e tamanho do equipamento. A perda de carga neste escoamento é modelada pela Equação (33) (GONÇALVES, COSTA e BAGAJEWICZ, 2016):

$$\frac{\Delta P_t}{\hat{\rho}_t \hat{g}} = \frac{f_t N_{pt} L v_t^2}{2 \hat{g} d_{ti}} + \frac{K N_{pt} v_t^2}{2 \hat{g}} \quad (33)$$

na qual ΔP_t é a queda de pressão no escoamento no lado dos tubos. K é um parâmetro que pode ser 0.9 para um passe nos tubos e 1.6 para dois ou mais passes. O fator de atrito de Darcy (f_t) pode ser calculado pela seguinte expressão (GONÇALVES, COSTA e BAGAJEWICZ, 2016), considerando tubo liso:

$$f_t = 0,014 + \frac{1,056}{Re_t^{0,42}} \quad (34)$$

3.5. Coeficiente global de troca térmica

O coeficiente global de troca térmica (U) é dado por (GONÇALVES, COSTA e BAGAJEWICZ, 2016):

$$\frac{1}{UA} = \frac{1}{h_s A_s} + \frac{1}{h_t A_t} + R'_w + \frac{\hat{R}_{fs}}{A_s} + \frac{\hat{R}_{ft}}{A_t} \quad (35)$$

A variável R'_w e os parâmetros \hat{R}_{fs} e \hat{R}_{ft} representam, respectivamente, a resistência que a parede do tubo oferece à condução térmica e as resistências de depósitos (no lado do casco e lado do tubo), causada pelo acúmulo de alguma substância ou impureza na parede do trocador, que dificulta a transferência de calor.

Usando como referência o lado do casco (área externa), $UA = U_s A_s$. Tomando como base um tubo, as áreas são expressas por:

$$A_s = \pi d_{te} L \quad (36)$$

$$A_t = \pi d_{ti} L \quad (37)$$

e a resistência condutiva na parede do tubo (R'_w) é dada por:

$$R'_w = \frac{\ln\left(\frac{d_{te}}{d_{ti}}\right)}{2\pi L \hat{k}_t} \quad (38)$$

na qual \hat{k}_t é a condutividade térmica do material da parede do tubo e L o comprimento dos tubos.

Aplicando as Equações (36) a (38) em (35), resulta em:

$$\frac{1}{U_s (\pi d_{te} L)} = \frac{1}{h_s (\pi d_{te} L)} + \frac{1}{h_t (\pi d_{ti} L)} + \frac{\ln\left(\frac{d_{te}}{d_{ti}}\right)}{2\pi L \hat{k}_{tube}} + \frac{\hat{R}_{fs}}{(\pi d_{te} L)} + \frac{\hat{R}_{ft}}{(\pi d_{ti} L)} \quad (39)$$

que, após remanejamento, fornece a Equação (40):

$$U_s = \left[\frac{1}{h_s} + \frac{d_{te}}{h_t d_{ti}} + \frac{d_{te} \ln \left(\frac{d_{te}}{d_{ti}} \right)}{2 \hat{k}_t} + \hat{R}_{fs} + \frac{d_{te} \hat{R}_{ft}}{d_{ti}} \right]^{-1} \quad (40)$$

3.6. Considerações de projeto e restrições

Com as equações de projeto definidas nos itens anteriores, neste item são apresentadas considerações de projeto e restrições que não deixam de ser regras heurísticas usadas no projeto do equipamento. Normalmente estas informações são transformadas em restrições de desigualdade no formalismo do problema de otimização.

3.6.1. Razão entre comprimento dos tubos e diâmetro do casco

Esse parâmetro é amplamente utilizado como referência no projeto de trocadores de calor casco e tubos. Ele se pauta no fato de que equipamentos mais longos normalmente implicam em um menor custo por área de troca térmica, porém trocadores com razão L/D muito alta podem ter problemas estruturais e requerer chicanas ou outras formas de sustentação. O equilíbrio entre essas duas boas práticas de projeto fornece limites superior e inferior para esse parâmetro. Trata-se de uma relação matematicamente simples que permite eliminar geometrias candidatas sem muito esforço computacional. (GONÇALVES, COSTA e BAGAJEWICZ, 2016) (SCHLÜNDER, 1983)

$$\frac{L}{D_s} \geq 3 \quad (41)$$

$$\frac{L}{D_s} \leq 15 \quad (42)$$

3.6.2. Fluxo crítico

Como discutido na Seção 3.3, as equações termofluidodinâmicas utilizadas para o cálculo do coeficiente de convecção no lado do casco são aplicáveis para o regime de ebulição nucleada. O fluxo crítico estabelece o limite máximo para o qual esse mecanismo de ebulição se mantém, de forma que o impor como uma restrição garante que o modelo usado é válido. Isso é importante, pois, mediante uma transição de mecanismo de ebulição nucleada para ebulição em piscina, há uma queda drástica no coeficiente de troca térmica, tornando o *kettle* incapaz de fornecer aquela carga.

$$\dot{q}_{b,max} \cdot F_{qmax} \geq \frac{\hat{Q}}{A} \quad (43)$$

A Equação (43) representa uma restrição na qual o fluxo crítico ($\dot{q}_{b,max}$) calculado pela Equação (23) impõe um limite superior ao fluxo térmico no qual o refeedor opera. O fator F_{qmax} , é um fator (entre 0 e 1) que pondera o fluxo crítico, de modo que o limite máximo de fluxo térmico adotado pode ser uma fração de $\dot{q}_{b,max}$. Para esse estudo, considera-se $F_{qmax} = 0,7$.

3.6.3. Velocidade de escoamento nos tubos

A velocidade deve ser controlada para garantir que não haja potencialização de efeitos causados por escoamentos muito extremos. Velocidades baixas, por exemplo, podem favorecer o depósito de impurezas, depreciando o trocador de calor e/ou aumentando frequência de manutenção e limpeza. Velocidades muito altas, por sua vez, podem depreciar a estrutura do trocador, causando vibração e desgaste.

Assim, são definidos dois parâmetros limites para a velocidade média dos tubos, $\hat{v}_{t,min}$ e $\hat{v}_{t,max}$, valores mínimo e máximo, respectivamente, que geram então as seguintes relações de desigualdade:

$$v_t \geq \hat{v}_{t,min} \quad (44)$$

$$v_t \leq \hat{v}_{t,max} \quad (45)$$

com v_t definido pela Equação (31).

3.6.4. Número de Reynolds mínimo no escoamento nos tubos

Tem a função de garantir que o modelo termofluidodinâmico adotado se aplica ao escoamento em questão, certificando a sua correta previsibilidade. O limite mínimo de Reynolds é estabelecido com base no regime de escoamento válido para o modelo escolhido, que no presente estudo foi o regime turbulento de escoamento.

$$\frac{4m_t}{\left(\frac{N_{tt}}{N_{pt}}\right) \pi \mu_t d_{ti}} \geq \widehat{Re}_{min} \quad (46)$$

3.6.5. Queda de pressão máxima nos tubos

Garante que o sistema de bombeamento que suporta o escoamento nos tubos seja compatível com a perda de carga que este causa na corrente. Representado pelo modelo de queda de pressão adotado correlacionado a um valor máximo de queda de pressão que o sistema consegue fornecer ao escoamento.

$$\frac{f_t \hat{\rho}_t N_{pt} L v_t^2}{2 d_{ti}} + \frac{K \hat{\rho}_t N_{pt} v_t^2}{2} \leq \widehat{\Delta P}_{t,disp} \quad (47)$$

3.6.6. Área final requerida

Por fim, a restrição de área final requerida leva em conta todas as características termofluidodinâmicas dos escoamentos para garantir que o conjunto de parâmetros geométricos selecionados (expressos no lado esquerdo da equação) supre a carga térmica requerida pelo problema (expressa no lado direito da equação). Nota-se a presença do termo no início que leva em conta o excesso de área considerado para eventuais fatores imprevisíveis.

$$\pi N_{tt} d_{te} L \geq \left(\frac{100 + \hat{A}_{exc}}{100} \right) \cdot \frac{\hat{Q}}{\widehat{\Delta T}_{lm}} \left[\frac{1}{h_s} + \frac{d_{te}}{h_t d_{ti}} + \frac{d_{te} \ln \left(\frac{d_{te}}{d_{ti}} \right)}{2 \hat{k}_t} + \hat{R}_{fs} + \frac{d_{te} \hat{R}_{ft}}{d_{ti}} \right] \quad (48)$$

3.7. Avaliação econômica

O custo de capital necessário para construção é, na maioria dos casos, o fator preponderante a ser avaliado no projeto de um equipamento. A busca pelo equipamento de menor custo que cumpra os requisitos do processo é, muitas vezes, uma tarefa difícil e pouco direta, sendo sujeita a imprecisões e variabilidades. (SMITH, 2005)

O custo de capital associado pode definir a geometria de escolha de um equipamento, seu material de construção, seu princípio de funcionamento, entre diversos outros fatores. Esse parâmetro pode ser determinante na implementação de um projeto ou até mesmo na viabilidade de um investimento em uma planta produtiva.

Dada a criticidade e complexidade desse tipo de avaliação, métodos de previsão do custo de capital associado a um equipamento são fundamentais na fase de projeto, tanto para o engenheiro projetista, que deve fornecer uma estimativa coerente do custo do equipamento, quanto para o engenheiro do processo, que a partir desse conhecimento pode fornecer ao fabricante um direcionamento do equipamento que mais o atenda, dentro da disponibilidade de orçamento.

A presente seção tem foco definido em trocadores de calor casco e tubo, por serem os mais empregados em serviços de ebulição, objeto principal do trabalho.

Estimativas grosseiras para o custo de trocadores de calor são geralmente baseadas na área superficial de troca térmica e no comprimento dos tubos, sendo avaliados em base de custo por área unitária. (SCHLÜNDER, 1983)

Uma abordagem usual para esse tipo de estimativa é utilizar valores relativos. De forma simplificada, é comum comparar o custo de dois trocadores de calor projetados pela sua área disponível para troca térmica, parâmetro calculado em qualquer projeto de trocador. Usa-se como base o pressuposto de que um trocador de calor com área maior tem maior custo de capital associado, mantendo-se constantes os materiais de construção e os tipos de cabeçotes, cascos, tubos e conexões, sendo esse preceito utilizado como guia principal para avaliação econômica preliminar durante o projeto, visto que as demais escolhas costumam ser definidas a priori conforme necessidades de processo e experiência do projetista.

Não limitada a trocadores de calor, a Equação (49) fornece uma estimativa de custo (C_E) para um equipamento de capacidade Q com base em um equipamento B de custo C_B e capacidade Q_B . O expoente M é específico do equipamento a ser analisado e fornece um parâmetro empírico que representa a dependência do custo relativo com a capacidade relativa.

$$C_E = C_B \left(\frac{Q}{Q_B} \right)^M \quad (49)$$

Nota-se que capacidade é a grandeza que define a utilidade do equipamento, por exemplo, volume total em tanques de estocagem, potência fornecida em caso de bombas e, para trocadores de calor, área superficial disponível para troca térmica. Smith (2005) exemplifica como base para trocadores de calor um expoente $M = 0,68$, determinando como base um trocador casco e tubo de área $Q_B = 80 \text{ m}^2$ e $C_B = 32800 \text{ USD}$ construído em aço-carbono, permitindo através da Equação (49) uma estimativa do custo de qualquer trocador de calor na faixa de 80 a 4000 m^2 nesse mesmo material (como definido pela base de dados).

Os dados apresentados por Smith (2005) são do ano 2000, isto é, não são aplicáveis diretamente para representar um projeto atual, sendo necessária a atualização dos valores pela Equação (50).

$$\frac{C_1}{C_2} = \frac{i_1}{i_2} \quad (50)$$

Essa simples equação relaciona os custos 1 e 2 com seus respectivos índices, i_1 e i_2 . Tais índices são utilizados como base comparativa para atualizar custos a seu valor presente. Alguns índices conhecidos são o Chemical Engineering Index e o Marshall and Swift Cost Index. O cálculo baseia-se em obter o custo C_1 do equipamento de interesse a partir do custo conhecido C_2 , utilizando os índices para correção, dado que são provenientes da mesma fonte. (SMITH, 2005)

Ressalta-se que essa abordagem leva em conta principalmente a inflação da categoria, de modo que para a correção entre um período extenso esta estimativa se torna imprecisa, uma vez que negligencia as mudanças tecnológicas que interferem no custo do equipamento.

É comum utilizar, como parte da estimativa, fatores de correção referentes a materiais e condições de operação extremas, como pode ser visto na Equação (51), uma modificação da Equação (49).

$$C_E = C_B \left(\frac{Q}{Q_B} \right)^M f_M f_P f_T \quad (51)$$

É comum obter, em bases de dados, os custos para equipamentos padrão, construídos em aço carbono e projetados para operação em pressões e temperaturas comuns. Serviços mais específicos como materiais mais especializados e condições de operação extremas requerem a aplicação dos fatores da Equação (51).

As Tabela 1 a Tabela 3 (SMITH, 2005) exemplificam fatores utilizados para esse tipo de ajuste.

Tabela 1: Fatores de correção para material de construção (SMITH, 2005)

Material	Fator de correção (f_M)
Aço carbono (casco e tubos)	1.0
Aço carbono (casco), alumínio (tubos)	1.3
Aço carbono (casco), Monel (tubos)	2.1
Aço carbono (casco), aço inoxidável de baixo grau (tubos)	1.7
Aço inoxidável de baixo grau (casco e tubos)	2.9

Tabela 2: Fatores de correção para pressão (SMITH, 2005)

Pressão de operação (bar)	Fator de correção (f_P)
0,01	2,0
0,1	1,3
0,5 a 7	1,0
50	1,5

Temperatura de operação (°C)	Fator de correção (f_T)
0 a 100	1.0
300	1.6
500	2.1

A utilização desses fatores permite se levar em conta especificidades de projeto sem a necessidade de uma avaliação econômica muito complexa.

4. O projeto do *kettle* como um problema de otimização

Como descrito na Seção 3.7 sobre avaliação econômica, fica evidente que, mantendo-se constantes as demais características de construção do trocador de calor (ex.: material de construção, modelo, cabeçotes, etc.), a área de troca térmica é o indicador principal do custo de capital do equipamento, sendo este uma função monotônica da área. Sob esses preceitos, entende-se que minimizar essa variável, no contexto de um projeto de um trocador de calor, significa minimizar o custo de capital do equipamento.

Desta forma, em relação ao *kettle*, entende-se como objetivo principal de qualquer método tradicional de projeto, obter o equipamento de menor área que cumpra a carga térmica demandada. Isso caracteriza o projeto como uma atividade que se beneficia de um procedimento sistemático para encontrar o equipamento de área mínima – um método de otimização.

Formula-se então um problema de otimização – mais especificamente o projeto de um trocador de calor – da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \min \quad & A(S) \\ \text{sujeito a} \quad & F(S) = 0 \\ & G(S) \leq 0 \end{aligned} \tag{52}$$

em que a área A do equipamento é a função objetivo definida e conseqüentemente a variável a ser minimizada. F é um conjunto de restrições de igualdade, mais precisamente a coleção de equações que compõem o modelo do equipamento, para o caso do *kettle* descritas nas Seções 3.2 a 3.5. G é um conjunto de restrições de desigualdade, representado no caso do *kettle* pelas inequações da Seção 3.6, que limitam a operação do equipamento a uma região de condições factíveis na prática.

Nota-se que todos os conjuntos descritos são funções de S , definido como o espaço de busca do problema de otimização: todas as variáveis que podem ser alteradas livremente ao longo da otimização de modo a levar o sistema a seu ponto ótimo, no caso, o conjunto de variáveis geométricas que compõem o projeto do *kettle*. São elas: diâmetro dos tubos (d), diâmetro do casco (D_s), número de passes dos tubos (N_{pt}), razão de passo dos tubos (rp), comprimento dos tubos (L) e layout dos tubos (lay).

A modelagem descrita no Capítulo 3 caracteriza o projeto de *kettles* como um problema de otimização não-linear e não-convexo. As variáveis de projeto supracitadas são naturalmente contínuas, por se tratar de comprimentos, excetuando-se o layout dos tubos e o número de passes. Porém, no âmbito comercial, os componentes do equipamento não estão disponíveis em todos diâmetros e comprimentos, de modo que faz sentido assumir um conjunto de valores discretos para cada uma dessas variáveis de projeto. Isso caracteriza o projeto de *kettles* como um problema de otimização discreto, atributo que se converte em uma vantagem para aplicação do método *set-trimming*, que se aproveita do fato do espaço de busca ser completamente discreto para trabalhar em um conjunto de candidatos a solução através de uma representação combinatória conveniente dessas variáveis.

A escolha do método é muito associada com as ferramentas computacionais disponíveis para executar o algoritmo do método de forma eficiente e que apresente sintaxe adequada para representar de forma elegante o problema. A seguir, serão apresentadas a linguagem de programação escolhida para implementação do método otimizador adotado, bem como os detalhes da utilização do *set-trimming*.

4.1. General Algebraic Modeling System (GAMS)

O GAMS é uma linguagem de programação de alto nível categorizada como uma linguagem de modelagem algébrica (AML), caracterizada por permitir a descrição de modelos matemáticos computacionalmente com robustez e similaridade com a notação matemática usual. Uma característica marcante desse tipo de linguagem é a sua capacidade de dissociar a formulação do modelo do seu método de solução (*solver*), permitindo que o programador foque na descrição do seu modelo na AML ciente da flexibilidade que a linguagem fornece na escolha posterior do *solver*. Desta forma, a linguagem de modelagem foca em definir qual o problema a ser resolvido, em contraste com linguagens algorítmicas (como FORTRAN, C e Java, por exemplo) que possuem foco em definir como o problema deve ser resolvido. (KALLRATH, 2004)

A motivação principal para o desenvolvimento dessa linguagem é o crescimento da visão de que a otimização é um caminho promissor para a solução de problemas reais nos campos da economia, da ciência e da engenharia. (KALLRATH, 2004)

A aplicabilidade do GAMS para problemas de otimização reside no fato de que, por ser uma AML, é possível descrever modelos na forma da Equação (52). Essa característica permite definição de modelos sujeitos a conjuntos de dados amplos e/ou esparsos com combinações numerosas, sem que o algoritmo de solução seja uma preocupação inicial.

Desta forma, o modelo é todo formulado utilizando conjuntos e parâmetros indexados, de modo que as expressões matemáticas utilizam como argumento os conjuntos definidos. (KALLRATH, 2004)

4.2. O método *set-trimming*

Com as equações do modelo proposto é possível avaliar um *kettle* para quaisquer combinações das variáveis geométricas de projeto supracitadas. Entretanto, há uma gama de alternativas comerciais no que diz respeito a essas variáveis, de forma que inúmeras possibilidades de geometrias podem ser construídas, cada uma com seus respectivos parâmetros de processo. A vasta maioria dessas possibilidades não atenderia o projeto, caso fossem implementadas, por não contemplarem as restrições impostas na Seção 3.6, que funcionam como pré-requisitos para a aplicação adequada do equipamento no processo (sem necessariamente estarem associadas a otimização).

A solução trivial para identificar quais desses equipamentos possíveis têm potencial de atender ao processo seria utilizar as restrições propostas anteriormente para avaliar, para cada uma das combinações possíveis, se o *kettle* é ou não factível. Esse método é chamado de busca exaustiva e sua limitação fica clara frente à quantidade de combinações disponíveis e a complexidade matemática das equações do modelo, inviabilizando sua aplicação devido ao alto poder computacional demandado.

A técnica de *set-trimming*, proposta por Costa e Bagajewicz (2019), aplicada a esse problema, tem a função de restringir o conjunto de candidatos a solução (composto por todos os trocadores de calor que possam vir a ser construídos mediante as alternativas comerciais disponíveis) progressivamente, utilizando as restrições supracitadas para reduzir o conjunto inicial de possibilidades ao mínimo possível, resultando em um conjunto menor de equipamentos factíveis. Adicionalmente, devido à redução significativa do espaço de busca, normalmente é possível aplicar a busca exaustiva no conjunto restante para identificar qual dos equipamentos factíveis apresenta a menor

área, de forma a minimizar o custo associado do equipamento, otimizando assim o resultado do projeto.

Fica evidente, mediante o discutido na Seção 4.1, que a flexibilidade do GAMS para realizar operações com conjuntos corrobora com a sua escolha como linguagem a ser utilizada na implementação do *set-trimming*, método que envolve a manipulação de conjuntos extensos de dados, visto que o método lida com um volume considerável de alternativas possíveis para o equipamento.

O programa no GAMS é estruturado de forma a declarar inicialmente os conjuntos e parâmetros básicos a serem utilizados, seguido do cálculo das variáveis que são função dos parâmetros declarados previamente e, por fim, a manipulação do conjunto total de todos os equipamentos possíveis utilizando as restrições propostas na Seção 3.6 a fim de realizar os chamados cortes – reduções sucessivas na cardinalidade dos conjuntos por remoção dos candidatos não factíveis mediante as restrições.

Com o objetivo de reduzir o esforço computacional, a ordem dos cortes leva em consideração a complexidade matemática da restrição, deixando as inequações de estrutura mais complexa para o final, ponto em que há menos candidatos a serem avaliados. As etapas do procedimento computacional são detalhadas a seguir.

4.2.1. Declaração dos conjuntos

Inicialmente, o método declara conjuntos de variáveis associadas à geometria dos *kettles*, descritos na Tabela 4, para compor o espaço de busca (S). Como discutido anteriormente, apesar de serem inerentemente variáveis contínuas, os atributos geométricos do refeedor são melhor representados de forma discreta. Nota-se que livros e referências de projeto de trocadores de calor de uma forma geral apresentam tabelas extensas contendo alternativas comerciais de medidas para essas variáveis, sempre expressas como valores discretos. (SERTH e LESTINA, 2007) (SCHLÜNDER, 1983)

Além de se assemelhar à realidade, devido ao projeto ser feito pautado nos componentes disponíveis no mercado, assumir todas as variáveis geométricas como discretas permite delimitar o espaço de busca de forma combinatória, registrando todos os equipamentos possíveis de serem construídos com as alternativas comerciais declaradas.

Tabela 4: Conjuntos de variáveis geométricas

Conjunto	Variável geométrica	Alternativas comerciais
d	Diâmetro externo dos tubos (m) # de alternativas = 5	$d_{e,1} = 0,01905$ $d_{e,2} = 0,02540$ $d_{e,3} = 0,03175$ $d_{e,4} = 0,03810$ $d_{e,5} = 0,05080$
D_s	Diâmetro do casco (m) # de alternativas = 24	$D_{s,1} = 0,203$ $D_{s,13} = 0,787$ $D_{s,2} = 0,254$ $D_{s,14} = 0,838$ $D_{s,3} = 0,305$ $D_{s,15} = 0,889$ $D_{s,4} = 0,337$ $D_{s,16} = 0,940$ $D_{s,5} = 0,387$ $D_{s,17} = 0,991$ $D_{s,6} = 0,438$ $D_{s,18} = 1,067$ $D_{s,7} = 0,489$ $D_{s,19} = 1,143$ $D_{s,8} = 0,540$ $D_{s,20} = 1,219$ $D_{s,9} = 0,591$ $D_{s,21} = 1,295$ $D_{s,10} = 0,635$ $D_{s,22} = 1,372$ $D_{s,11} = 0,686$ $D_{s,23} = 1,448$ $D_{s,12} = 0,737$ $D_{s,24} = 1,524$
lay	Layout dos tubos (quadrado/triangular) # de alternativas = 2	$lay_1 = 1$ (quadrado) $lay_2 = 2$ (triangular)
N_{pt}	Número de passes nos tubos # de alternativas = 3	$N_{pt,1} = 2$ $N_{pt,2} = 4$ $N_{pt,3} = 6$
rp	Razão de passo # de alternativas = 3	$rp_1 = 1,25$ $rp_2 = 1,33$ $rp_3 = 1,50$
L	Comprimento do tubo (m) # de alternativas = 7	$L_1 = 1,2195$ $L_2 = 1,8293$ $L_3 = 2,4390$ $L_4 = 3,0488$ $L_5 = 3,6585$ $L_6 = 4,8768$ $L_7 = 6,0976$

A Tabela 4 foi construída utilizando como dados disponíveis alternativas comerciais utilizadas em outras aplicações de *set-trimming* no projeto de trocadores de calor casco e tubos e bases de dados encontradas em livros, utilizadas para solução de exemplos de projeto. (GONÇALVES, COSTA e BAGAJEWICZ, 2016) (SERTH e LESTINA, 2007)

Nota-se que a variável N_{pt} só assume alternativas pares devido ao fato da entrada e saída da corrente quente serem dispostas no mesmo lado do *kettle* (como possível observar na Figura 1). Um número ímpar de passes implicaria na necessidade de a saída dos tubos estar localizada no lado oposto da entrada, característica fora da construção tradicional do *kettle*.

Ressalta-se também que apenas as alternativas dos diâmetros externos (d_e) são descritas na Tabela 4, pois os diâmetros internos são calculados através da espessura (BWG) definida no projeto, associando-os a seus respectivos diâmetros externos.

Os diâmetros de casco (D_s) aqui representados não consistem em alternativas comerciais da medida do casco expandido do *kettle*, sendo uma referência baseada nas alternativas de equipamentos casco e tubo, principalmente para aplicação da razão L/D como restrição.

Um trocador de calor (factível ou não) é definido na estrutura de cálculo ao se seleccionar uma alternativa comercial para cada um desses conjuntos, ou seja, determinando os seis parâmetros geométricos que definem a estrutura do *kettle* a ser avaliado. O conjunto de todos os *kettles* possíveis mediante essas alternativas comerciais é gerado combinatoriamente, formando o espaço de busca S .

4.2.2. Redução sucessiva do espaço de busca

Definida a coleção de todos os equipamentos (candidatos a solução) como o espaço de busca do método otimizador, são executados os cortes sucessivos nos conjuntos seguindo as restrições da Seção 3.6. Representa-se como s_{row} uma combinação de variáveis geométricas que compõem um trocador de calor.

A ordenação dos cortes é um elemento essencial na execução do *set-trimming*. Por exemplo, a utilização de uma restrição matematicamente complexa nos primeiros cortes – quando ainda há muitos s_{row} disponíveis – exigiria um esforço computacional maior, aumentando o tempo de execução do programa. É por esse motivo que as restrições descritas na Seção 3.6 são aplicadas ao espaço de busca em ordem crescente de complexidade matemática, normalmente associada à quantidade de variáveis associadas a cada equação e realização de cálculos intermediários.

A seguir, descreve-se as operações que são realizadas sequencialmente nos conjuntos, referindo-se às restrições correspondentes. Nota-se que cada operação é executada no conjunto oriundo do corte anterior

- Passo 1 (corte geométrico, restrição 3.6.1)

$$S_{LDmin} = \{s_{row} \in S \mid L \geq 3D_s \text{ é satisfeita}\} \quad (53)$$

$$S_{LDmax} = \{s_{row} \in S_{LDmin} \mid L \leq 15D_s \text{ é satisfeita}\} \quad (54)$$

- Passo 2 (corte da velocidade nos tubos, restrição 3.6.3)

$$S_{v_t,min} = \{s_{row} \in S_{LDmax} | v_t \geq \hat{v}_{t,min} \text{ é satisfeita}\} \quad (55)$$

$$S_{v_t,max} = \{s_{row} \in S_{v_t,min} | v_t \leq \hat{v}_{t,max} \text{ é satisfeita}\} \quad (56)$$

- Passo 3 (corte do número de Reynolds nos tubos, restrição 0)

$$S_{Re_t,min} = \{s_{row} \in S_{v_t,max} | Re_t \geq \widehat{Re}_{t,min} \text{ é satisfeita}\} \quad (57)$$

- Passo 4 (corte do fluxo crítico, restrição 3.6.2)

$$S_{q,max} = \{s_{row} \in S_{Re_t,min} | q \leq q_{b,max} \text{ é satisfeita}\} \quad (58)$$

- Passo 5 (corte da queda de pressão nos tubos, restrição 3.6.5)

$$S_{\Delta P_t,max} = \{s_{row} \in S_{q,max} | \Delta P_t \leq \widehat{\Delta P}_{t,disp} \text{ é satisfeita}\} \quad (59)$$

- Passo 6 (corte da área requerida, restrição 3.6.6)

$$S_{A,min} = \{s_{row} \in S_{\Delta P_t,max} | A \geq \left(1 + \frac{\hat{A}_{exc}}{100}\right) \cdot A_{req} \text{ é satisfeita}\} \quad (60)$$

- Passo 7 (determinação do refervedor ótimo): nessa etapa, é executada uma busca exaustiva no conjunto $S_{A,min}$, que contém apenas trocadores de calor factíveis. O *kettle* de menor área é a solução ótima do problema.

$$s_{row,\acute{o}timo} = \min S_{A,min} \quad (61)$$

5. Estudos de caso

A abordagem de projeto utilizando *set-trimming* é exemplificada e testada mediante a solução de dois exemplos adaptados retirados da literatura.

Para validação completa da funcionalidade do método é recomendável para a comparação de resultados que os exemplos utilizados tenham outras soluções adotando o mesmo modelo termofluidodinâmico descrito nas Seções 3.2 a 3.5. Exemplos de artigos e livros-texto se mostraram insatisfatórios em cumprir todos os requisitos, de formar que a adaptação dos exemplos aqui utilizados foi necessária, bem como a sua solução com outros métodos de otimização para possibilitar comparações.

Por exemplo, as correntes quentes dos exemplos originais aqui usados como referência e retirados da literatura eram vapor saturado, condição facilmente modelada por um coeficiente de transferência de calor fixo. A substituição do vapor de água por um óleo térmico (Therminol 66), com temperaturas de entrada e de saída de 190°C e 130°C respectivamente, foi realizada para permitir a aplicação do modelo de coeficiente de troca térmica nos tubos adotado no presente trabalho.

Desta forma, verifica-se no presente estudo a efetividade do *set-trimming* no projeto de *kettles* utilizando problemas adaptados e definindo como base comparativa a solução dos mesmos problemas utilizando outros dois métodos otimizadores: (i) otimização por enxame de partículas (PSO) e (ii) evolução diferencial (DE). Essa abordagem permite a comparação dos resultados obtidos, validando a acurácia do método em determinar os parâmetros do trocador de calor ótimo, bem como avaliando a performance computacional do método de *set-trimming* em relação aos métodos alternativos.

Cada problema descrito nos estudos de caso foi resolvido pelo *set-trimming* e pelos métodos de PSO e DE supracitados. O algoritmo de PSO utilizado foi o módulo PySwarms (MIRANDA, 2018) e, para o DE, o módulo Scipy (VIRTANEN, GOMMERS, *et al.*, 2020). Tais algoritmos não garantem a obtenção de um resultado mínimo global, de modo que para avaliá-los de forma mais precisa, foram feitas dez corridas independentes, sujeitas a apresentar resultados diferentes.

Todos os programas foram executados em um computador com processador Intel™ i7 com 8GB de memória RAM.

Os dados das propriedades do óleo térmico (Therminol 66), usado em todas os procedimentos de cálculos aqui efetuados, são mostrados na Tabela 5.

Tabela 5: Dados Therminol 66 (EASTMAN, 2019)

Propriedade	Valor
Densidade ($\frac{kg}{m^3}$)	913,4
Capacidade térmica ($\frac{J}{kg^{\circ}C}$)	2050,5
Viscosidade dinâmica ($Pa \cdot s$)	1.5×10^{-3}
Condutividade térmica ($\frac{W}{m^{\circ}C}$)	0,109

A resistência de depósito considerada para o escoamento no lado dos tubos, escoamento do Therminol 66, tem o valor de $0,0006 \text{ m}^2 \text{ }^{\circ}\text{C}/\text{W}$, com base em referência geral, uma vez que não consta na ficha técnica do produto (KERN, 1965).

Alguns outros parâmetros utilizados nas soluções são: excesso de área (\hat{A}_{exc}) de 10%, diferencial de pressão disponível para o fluido quente ($\hat{\Delta P}_{t,disp}$) de 70 kPa e limites de velocidade no lado dos tubos ($\hat{v}_{t,min}$ e $\hat{v}_{t,max}$) mínimo e máximo de 1 m/s e 3 m/s, respectivamente, valores típicos de escoamentos em matrizes tubulares (GONÇALVES, COSTA e BAGAJEWICZ, 2016).

5.1. Estudo de caso #1: Vaporização de butano puro

Esse exemplo é apresentado em Smith (2016) e consiste no projeto de um refervedor tipo *kettle* que vaporize 5,8 kg/s de butano a 112°C e 1925 kPa. A resistência de depósito no lado do butano é de $0,0004 \text{ m}^2\text{K}/\text{W}$. Sua pressão crítica e entalpia de vaporização são, respectivamente, 3800 kPa e 233000 J/kg. A espessura da parede dos tubos é de 1,65 mm (BWG 16) e a condutividade térmica do material é de $45 \text{ W}/(\text{m}^{\circ}\text{C})$. De posse desses dados e os apresentados na introdução dessa seção, é possível solucionar o problema de otimização.

A Tabela 6 descreve as variáveis geométricas e outras relevantes que compõem a solução do problema utilizando o método de *set-trimming*, conforme o passo a passo apresentado na Seção 4.2.2, com o espaço de busca definido pelos conjuntos de variáveis mostrados na Tabela 4.

Tabela 6: Resultados – Exemplo #1

Variável	Resultado
Área de troca térmica (m ²)	117,1
Número total de tubos	321
Diâmetro do tubo (m)	0,01905
Comprimento do tubo (m)	6,0976
Número de passes dos tubos	6
Razão de passo	1,33
<i>Layout</i> do banco de tubos	Quadrado
Diâmetro do casco (m)	0,540
Queda de pressão no lado dos tubos (Pa)	55464,9
Coefficiente de troca térmica no lado dos tubos (W/(m ² °C))	745,1
Coefficiente de troca térmica no lado do casco (W/(m ² °C))	2453,8
Coefficiente global de troca térmica (W/(m ² °C))	312,8
Fluxo térmico (W/m ²)	11536,5
Fluxo crítico (W/m ²)	151164,1

A otimização pelos métodos estocásticos (PSO e DE), que não garantem o ótimo global, precisou ser executada em dez corridas independentes para cada método para melhor avaliação de seus comportamentos.

Nota-se que não é possível afirmar que o resultado obtido pelos métodos estocásticos é um ótimo global sem estabelecer um comparativo, visto que os algoritmos não são capazes de categorizar uma solução como ótima de forma autônoma. Comparando com os resultados obtidos pela execução independente dos métodos estocásticos e do *set-trimming* (Tabela 6), confirma-se pela coincidência das soluções encontradas que o melhor resultado encontrado entre as dez corridas dos métodos estocásticos é de fato um ótimo global.

Define-se então o percentual de sucessos como a proporção de resultados que atinge o ótimo global, sendo esse um indicador da performance do método otimizador. Para esse

exemplo específico nota-se a capacidade da evolução diferencial de retornar o resultado ótimo em todas as corridas. Em contrapartida, a otimização por enxame de partículas apresenta taxa de sucesso de 10%, um indicativo de baixa performance e confiabilidade em relação à otimalidade do resultado, em relação ao problema em questão. O *set-trimming* naturalmente garante que a condição de otimalidade seja obtida na solução encontrada.

Ressaltando que os três métodos encontraram, independentemente, as mesmas soluções ótimas para o problema, é possível validar também o resultado do método de *set-trimming* (ST), indicando ser uma formulação adequada do programa. Nesse ponto, é relevante a discussão de um comparativo da performance computacional dos três métodos, descrita na Tabela 7.

Tabela 7: Comparativo de resultados - Exemplo #1

Método otimizador	PSO	DE	ST
Menor área encontrada (m²)	117,1	117,1	117,1
Percentual de sucesso em obtenção de ótimo global (%)	10	100	100
Tempo computacional médio de uma rodada (s)	1,99	2,77	0,0079

A Tabela 8 mostra a evolução do tamanho do espaço de busca conforme foram aplicadas as restrições.

Tabela 8: Redução sucessiva do espaço de busca (Exemplo #1)

Restrição	Nº de elementos do conjunto
Espaço de busca (sem restrições)	15120
Razão L/D	9180
Velocidade nos tubos	1835
Número de Reynolds nos tubos	1811
Fluxo crítico	1738
Queda de pressão nos tubos	1552
Área requerida	4

5.2. Estudo de caso #2: Vaporização de mistura de hidrocarbonetos

Esse segundo estudo de caso tem como base um projeto apresentado em Serth e Lestina (2007). Avalia-se o projeto de um *kettle* cuja alimentação é 15% propano, 25% isobutano e 60% n-butano, em base molar. Segundo a referência, a mistura possui pontos de orvalho e de bolha de 96,4°C e 92,0°C, respectivamente. A carga térmica de vaporização especificada é de $1,59 \times 10^6$ W, com pressão de operação de 1724 kPa e temperatura da corrente vaporizada de 94,7°C. A resistência de depósito associada à mistura é de $8,8 \times 10^{-5}$ m²K/W e a pressão pseudo-crítica (por se tratar de uma mistura) dessa corrente é de 3829 kPa. A espessura dos tubos é de 2,11 mm (BWG 14), com condutividade térmica de 45 W/(m °C).

A Tabela 9 descreve a solução ótima encontrada para o problema de otimização.

Tabela 9: Resultados – Exemplo #2

Variável	Resultado
Área de troca térmica (m ²)	75,4
Número total de tubos	155
Diâmetro do tubo (m)	0,0254
Comprimento do tubo (m)	6,0976
Número de passes dos tubos	6
Razão de passo	1,25
<i>Layout</i> do banco de tubos	Triangular
Diâmetro do casco (m)	0,438
Queda de pressão no lado dos tubos (Pa)	68690
Coefficiente de troca térmica no lado dos tubos (W/(m ² °C))	891,4
Coefficiente de troca térmica no lado do casco (W/(m ² °C))	2611,9
Coefficiente global de troca térmica (W/(m ² °C))	386,5
Fluxo térmico (W/m ²)	21082,5
Fluxo crítico (W/m ²)	202955,7

Similarmente ao Exemplo #1, foram realizadas as dez corridas independentes, analisando da mesma forma os resultados ótimos obtidos. Nota-se que, apesar de não apresentar percentuais de sucesso tão baixos quanto 10%, os métodos PSO e DE apresentaram indicadores medianos (70% e 50%, respectivamente) que representam uma baixa performance do método e uma fonte de incerteza em relação à otimalidade da solução. Por comparação, nota-se que os resultados foram coerentes entre os três métodos, confirmando através do *set-trimming* que as melhores soluções encontradas são de fato soluções ótimas. O estudo de caso também é efetivo em demonstrar a implementação correta do *set-trimming*, dada a repetibilidade dos resultados.

Tabela 10: Comparativo de resultados - Exemplo #2

Método otimizador	PSO	DE	ST
Menor área encontrada (m ²)	75.4	75.4	75.4
Percentual de sucesso em obtenção de ótimo global (%)	70	50	100
Tempo computacional médio (s)	1.97	2.42	0,0090

A Tabela 11 mostra a redução do espaço de busca ao longo das restrições aplicadas.

Tabela 11: Redução sucessiva do espaço de busca (Exemplo #2)

Restrição	Nº de elementos do conjunto
Espaço de busca (sem restrições)	15120
Razão L/D	9180
Velocidade nos tubos	2130
Número de Reynolds nos tubos	2073
Fluxo crítico	1952
Queda de pressão nos tubos	1695
Área requerida	43

5.3. Discussão dos resultados

Um detalhe interessante que pode ser observado é o fator que a solução ótima explora para conseguir obter a menor área de troca térmica factível. Nota-se em ambos os exemplos que a queda de pressão nos tubos é próxima da pressão disponível para o serviço. O bom aproveitamento da pressão disponível resulta em uma velocidade de escoamento maior, que permite – dentro das demais restrições – a obtenção de um maior coeficiente de troca térmica e melhor utilização da área disponível. Essa análise explicita como o projeto baseado em otimização global atua em relação aos métodos puramente heurísticos: o *kettle* projetado opera em uma condição que, apesar de factível, se aproxima de um limite imposto pelas condições de processo que pode se encontrar em uma região de operação não explorada pelo projetista. A objetividade do software permite a redução de custos ao explorar esse tipo de vantagem.

Sob a ótica dos resultados, é necessário discutir a consideração do modelo utilizado de que a temperatura de parede (T_w) e a temperatura de saturação dos fluidos no casco (T_{sat}) são suficientemente próximas para supor $T_w = T_{sat}$. Os coeficientes de convecção no lado do casco (h_s) foram aproximadamente 3 vezes maiores que os do lado dos tubos (h_t) indicando que pode haver um gradiente de temperatura considerável entre a superfície aquecida e a região na qual o fluido em ebulição atinge de fato sua temperatura de saturação, devido à resistência de convecção no lado do casco não ser desprezível em relação às demais. Sendo uma análise preliminar, focada na aplicação do método otimizador, é válido utilizá-la para compreender quais considerações podem ou não ser feitas no contexto de um modelo que requeira maior precisão.

Ao comparar os métodos entre si, o primeiro ponto forte do *set-trimming* que fica notório é a sua capacidade de atingir resultados idênticos aos ótimos encontrados com as demais técnicas de otimização: isso valida a implementação do programa, garantindo que ele fornece resultados consistentemente acurados.

Dada essa comprovação, fundamental para a boa aplicação do programa, compara-se a performance e eficiência dos métodos. A garantia de obtenção do mínimo global coloca o *set-trimming* em uma posição de vantagem em relação aos outros métodos: seu resultado apresenta maior confiabilidade e não é sujeito à realização de uma grande quantidade de corridas para validar que um dado resultado é a solução ótima.

Como pode-se observar nos resultados obtidos com PSO e DE nos estudos de caso, percentuais de sucesso podem ser tão baixos como 10% por conta da natureza não-convexa dos modelos de trocadores de calor de uma forma geral, o que pode induzir os métodos estocásticos a atingirem critérios de otimalidade sem estarem necessariamente no ponto ótimo global. Essa característica incorre, além da incerteza em relação à real otimalidade global da solução encontrada, em um maior tempo de processamento necessário devido às múltiplas corridas necessárias para certificar-se que a solução adequada é encontrada.

Adicionalmente, nota-se a superioridade do *set-trimming* em relação ao tempo computacional dispendido quando comparado aos outros métodos. O tempo total de processamento pode ser até 99,7% menor que o dos métodos estocásticos, como observado no comparativo entre *set-trimming* e o DE no Exemplo #1. Essa diferença drástica configura uma clara vantagem do método aqui proposto em relação aos estocásticos, que, associada à dispensabilidade de realizar múltiplas corridas para obtenção do ótimo global, reduz de forma significativa o esforço computacional e tempo associado ao projeto.

Essa característica fica evidenciada na Tabela 8 e Tabela 11 nas quais é possível observar reduções drásticas no espaço de busca obtidas ao aplicar restrições matematicamente simples, de modo que as relações matemáticas complexas são aplicadas a conjuntos consideravelmente menores, tornando o procedimento de otimização menos oneroso computacionalmente.

6. Conclusões

O presente trabalho apresenta o *set-trimming* como um método para projeto de refeedores do tipo *kettle*, que garante a obtenção da solução ótima dentro do espaço de busca definido, necessitando apenas de uma corrida.

A vantagem da otimização computacional em relação aos métodos heurísticos tradicionais fica clara devido à independência da experiência do projetista e objetividade do programa em obter, de maneira sistemática, a melhor alternativa de trocador de calor frente às soluções factíveis e condições impostas. A formulação do projeto como um problema de otimização se mostra eficiente em obter trocadores de calor com menor custo de capital associado ao se definir como função objetivo a minimização da área, vista como a variável de capacidade para trocadores de calor nas correlações usuais para avaliação econômica.

O *set-trimming* dispensa a necessidade de estimativas iniciais, não sendo sujeito a soluções ótimas locais e soluciona os dois problemas de projeto apresentados em um tempo significativamente menor que os outros algoritmos apresentados: otimização por enxame de partículas e evolução diferencial. Essas vantagens em relação a outros métodos se tornam um diferencial para o *set-trimming*, especialmente em contextos de problemas de síntese de redes de trocadores de calor e otimização de fluxogramas inteiros de processos químicos.

Tarefas computacionais como essas geralmente envolvem a execução de diversos algoritmos simultaneamente, em muitos casos de maneira iterativa. Apesar de métodos como PSO e DE, aqui usados, apresentarem tempos computacionais baixos, a grande vantagem do *set-trimming* em relação a esse quesito se torna especialmente relevante nesse contexto, pois a eficiência computacional é um fator preponderante no desenvolvimento de softwares de síntese e simulação de processos. Uma rotina interna mais eficiente para projeto de refeedores e mesmo casco e tubos tradicionais, por exemplo, associada a outras boas práticas de programação, pode tornar um simulador de processos menos oneroso computacionalmente, dispensando a necessidade de computadores de alta performance ou simplesmente reduzindo o tempo necessário para obtenção de resultados.

Apesar das vantagens mencionadas para o método, é essencial para a formulação do *set-trimming* que o espaço de busca seja completamente discreto. Em diversas variáveis de projeto, como diâmetro dos tubos, layout e número de passes, que são variáveis discretas (inerentemente ou por motivos comerciais), isso não configura uma desvantagem. Entretanto, em casos como comprimento de tubos – que pode mais facilmente assumir valores contínuos na prática – essa característica pode se converter em uma desvantagem no caso específico em que a solução ótima real apresente um valor intermediário em relação às alternativas descritas no espaço de busca. Nesse caso, o software seleciona a alternativa mais próxima que atende à carga térmica requerida, naturalmente com maior área e conseqüentemente mais cara. Esse ponto de atenção não inviabiliza a aplicação do *set-trimming* de maneira alguma, mas evidencia a necessidade de selecionar um espaço de busca adequado e condizente com a situação modelada, sempre levando em conta o fato de que a utilização de uma variedade muito extensa de alternativas para as variáveis geométricas pode eventualmente incorrer em uma perda de eficiência computacional.

Mediante as discussões apresentadas ao longo do presente trabalho, fica evidenciado que o método de *set-trimming* possui um potencial para aplicação em soluções de projeto em diversos contextos, principalmente devido à garantia de obtenção da solução mínima global e o baixo esforço computacional requerido, sendo especialmente útil para integração em softwares de simulação e otimização de fluxogramas completos de processo.

O presente trabalho resultou na proposta de publicação do artigo *Globally Optimal Design of Kettle Vaporizers* (Apêndice A1) com coautoria de Guilherme de M. Sales, Eduardo M. Queiroz, André L. M. Nahes, Miguel J. Bagajewicz e André L. H. Costa.

7. Referências

- CHEN, J. C. Correlation for Boiling Heat Transfer to Saturated Fluids in Convective Flow. **I&EC Process Design and Development**, New York, v. 5, n. 3, Julho 1966.
- COSTA, A. L. H.; BAGAJEWICZ, M. J. 110th Anniversary: On the Departure from Heuristics and Simplified Models toward Globally Optimal Design of Process Equipment. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, 2019.
- DUTTA, S. **Optimization in Chemical Engineering**. Cambridge: Cambridge University Press, 2016. ISBN ISBN 978-1-107-09123-8.
- EASTMAN. **Therminol 66® Technical Bulletin**. [S.l.]. 2019.
- GONÇALVES, C. D. O.; COSTA, A. L. H.; BAGAJEWICZ, M. J. Shell and Tube Heat Exchanger Design Using Mixed-Integer Linear Programming. **AIChE Journal**, 2016.
- GUENIN, B.; KÖNEMANN, J.; TUNÇEL, L. **A Gentle Introduction to Optimization**. Cambridge: Cambridge University Press, 2014. ISBN ISBN 978-1-107-05344-1.
- HARLACHER, E. A.; BRAUN, W. G. A Four-Parameter Extension of the Theorem of Corresponding States. **Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.**, p. 479-483, 1970.
- INCROPERA, F. P. et al. **Fundamentals of Heat and Mass Transfer**. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2011.
- KAKAÇ, S.; LIU, H. **Heat Exchangers: Selection, Rating and Thermal Design**. 2nd. ed. Miami: CRC Press, 2002.
- KALLRATH, J. **Modeling Languages in Mathematical Optimization**. [S.l.]: Kluwer Academic Publishers, 2004.
- KERN, D. Q. **Process Heat Transfer**. [S.l.]: McGraw-Hill, 1965.
- MIRANDA, L. J. V. PySwarms: a research toolkit for Particle Swarm Optimization in Python. **The Journal of Open Source Software**, 2018.
- NITSCHKE, M.; GBADAMOSI, R. O. **Heat Exchanged Design Guide: A Practical Guide for Planning, Selecting and Designing of Shell and Tube Exchangers**. [S.l.]: Elsevier, 2016.
- PALEN, J. W. Introduction. In: SCHLÜNDER, E. U. **HEDH Multimedia - Heat Exchanger Design Handbook, Multimedia Edition**. [S.l.]: Begell House Inc., 2015.
- PALEN, J. W. Pressure drop. In: SCHLÜNDER, E. U. **HEDH Multimedia - Heat Exchanger Design Handbook, Multimedia Edition**. [S.l.]: Begell House Inc., 2015.
- PALEN, J. W. Thermal Design. In: SCHLÜNDER, E. U. **HEDH Multimedia - Heat Exchanger Design Handbook, Multimedia Edition**. [S.l.]: Begell House Inc., 2015.
- SCHLÜNDER, E. U. **Heat Exchanger Design Handbook**. [S.l.]: Hemisphere Publishing Corporation, 1983.

SERTH, R. W.; LESTINA, T. **Process heat transfer: Principles, applications and rules of thumb.** New York: Elsevier, 2007.

SERTH, R. W.; LESTINA, T. **Process heat transfer: Principles, applications and rules of thumb.** New York: Elsevier, 2014.

SINNOTT, R.; TOWLER, G. **Chemical Engineering Design.** [S.l.]: Butterworth-Heinemann, 2020.

SMITH, R. **Chemical Process Design and Integration.** 1nd. ed. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2005.

SMITH, R. **Chemical Process Design and Integration.** 2nd. ed. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2016.

VIRTANEN, P. et al. SciPy 1.0: fundamental algorithms for scientific computing in Python. **Nature Methods**, n. 17, p. 261-272, 2020.

APÊNDICE A1 – Proposta de publicação

Globally Optimal Design of Kettle Vaporizers

Guilherme de M. Sales^a, Eduardo M. Queiroz^a, André L. M. Nahes^b, Miguel J.
Bagajewicz^{b,c}, André L. H. Costa^{b,*}

^a Chemistry School, Federal University of Rio de Janeiro (UFRJ), Av. Athos da Silveira Ramos,
149, Rio de Janeiro - RJ, 21941-909, Brazil

^c Institute of Chemistry, Rio de Janeiro State University (UERJ), Rua São Francisco Xavier,
524, Maracanã, Rio de Janeiro, RJ, CEP 20550-900, Brazil

^b School of Chemical, Biological and Materials Engineering, University of Oklahoma, Norman,
Oklahoma USA 73019

Keywords: Kettle, Vaporizer, Design, Optimization

* Corresponding Author: E-mail address: andrehc@uerj.br (A. L. H. Costa)