

Integração de calor e trabalho com cálculo rigoroso de propriedades termodinâmicas via interface Python-Aspen Plus para fluidos próximos ao ponto crítico.

Igor Gabriel Rossato^{a,*}, Mauro Antonio da Silva Sá Ravagnani^{a,b}, Caliane Bastos Borba Costa^{a,b},

Leandro Vitor Pavão^{a,b}

^a Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química (PEQ), Universidade Estadual de Maringá (UEM),

^b Departamento de Engenharia Química, Universidade Estadual de Maringá (UEM), Maringá-PR, Brasil

*pg55951@uem.br

RESUMO

Este trabalho apresenta a aplicação da Análise Pinch integrada à otimização por PSO (*Particle Swarm Optimization*) para o estabelecimento de metas de integração de calor e trabalho em um caso de estudo com fluidos próximos ao ponto crítico. As propriedades termodinâmicas são calculadas via Aspen Plus com a equação de estado de Peng-Robinson, por meio de interface direta com Python, e um operador de Análise Pinch estima simultaneamente os custos de integração energética. Dois cenários são comparados: no cálculo rigoroso, o perfil T-H de cada corrente é discretizado em intervalos de 5 K; no cálculo simplificado, cada corrente é representada apenas por seus pontos inicial e final. Os resultados indicam diferenças de 5,0% no custo total anualizado, 13,8% na área de troca térmica hipotética e na distribuição entre utilidades quentes, evidenciando o impacto da abordagem de cálculo das propriedades termodinâmicas sobre os resultados do estabelecimento de metas.

Palavras-chave: Integração de Calor e Trabalho; Análise Pinch; Meta-heurísticas; Cálculo Rigoroso de Propriedades Termodinâmicas; Simulação de Processos.

1. Introdução

A demanda energética mundial tem crescido de forma contínua, e as fontes não renováveis permanecem predominantes na matriz energética global, apesar do avanço das fontes renováveis. Essa dependência está associada a elevadas emissões de CO₂, que intensificam o efeito estufa e contribuem para o aquecimento global. O setor industrial figura entre os maiores consumidores de energia, de modo que a conservação energética nesse setor é fundamental. Nesse contexto, a integração energética de processos industriais representa uma estratégia relevante para a redução simultânea de custos financeiros, consumo energético e impacto ambiental, abrangendo tanto a integração de calor quanto, mais recentemente, a integração de trabalho.

A integração de calor e trabalho busca maximizar a recuperação de energia em processos que envolvem correntes com variações simultâneas de temperatura e pressão. A Análise Pinch, estabelecida por Linnhoff & Hindmarsh (1983), constitui a abordagem padrão para o estabelecimento de metas de integração de calor, fornecendo as necessidades mínimas de utilidades e a área de troca térmica previamente à síntese de uma rede detalhada. No contexto da integração de trabalho, Razib et al. (2012) propuseram uma das primeiras formulações para a síntese de redes de troca de trabalho baseadas em unidades de turbinas e compressores acoplados em eixo único (TCAEU). Onishi et al. (2014) estenderam essa abordagem para a síntese simultânea de redes de integração de calor e trabalho, demonstrando reduções de custos de capital e operacional em função da integração energética. Pavão et al. (2020) apresentaram um modelo simplificado para as etapas iniciais da síntese, combinando Análise Pinch para estimativa dos custos de integração de calor com otimização meta-heurística híbrida baseada em SA e PSO para a definição das rotas de manipulação de pressão, com resultados próximos aos de projetos detalhados. Hamedi et al. (2020) propuseram a primeira metodologia baseada em simulação para a síntese de redes de integração de calor e trabalho em processos subambientais, integrando PSO ao simulador Aspen HYSYS para eliminar simplificações termodinâmicas em condições criogênicas.

A hipótese de capacidade calorífica constante, presente na Análise Pinch clássica, é adequada para correntes com comportamento termodinâmico aproximadamente linear, mas pode introduzir imprecisões

relevantes em correntes próximas ao ponto crítico ou misturas sujeitas a mudanças de fase, onde a entalpia varia de forma fortemente não linear com a temperatura. Pavão et al. (2023) demonstraram que a consideração da variação de C_p por meio de uma abordagem linear por partes resulta em alocações de utilidades distintas daquelas obtidas com a hipótese de C_p constante. Rossato et al. (2025) estenderam essa abordagem para sistemas de integração de calor e trabalho, integrando PSO e Análise Pinch com dados extraídos do simulador Aspen Plus para o cálculo rigoroso das propriedades termodinâmicas. O presente trabalho avança nessa direção ao realizar a integração direta entre o simulador e o otimizador via interface Python-Aspen Plus, eliminando a necessidade de extração prévia de tabelas termodinâmicas e permitindo o cálculo das propriedades em tempo de execução a cada avaliação da função objetivo. Embora a avaliação direta no simulador adicione um custo computacional superior em comparação a métodos offline baseados na interpolação de malhas de dados pré-calculadas, esta abordagem arquitetural elimina etapas intermediárias estáticas e as imprecisões numéricas inerentes aos métodos de interpolação em regiões de forte não-linearidade. Adicionalmente, a comunicação em tempo real confere alta flexibilidade ao framework, garantindo a extração rigorosa das propriedades de forma automatizada e permitindo alterações imediatas nas configurações do processo sem a necessidade de reprocessamento prévio do espaço de busca. A metodologia é aplicada a um caso de estudo envolvendo fluidos próximos ao ponto crítico, comparando os resultados obtidos com cálculo rigoroso das propriedades termodinâmicas, por meio da discretização do perfil T-H em intervalos de 5 K, com os obtidos pela abordagem simplificada de C_p constante por corrente.

2. Metodologia

O problema de integração de calor e trabalho consiste em um conjunto de correntes com condições de temperatura e pressão de suprimento e alvo conhecidas. Para cada corrente, são definidas as unidades de manipulação de pressão necessárias para atingir a pressão alvo. Todas as unidades de manipulação de pressão estão acopladas em uma unidade de turbinas e compressores acoplados em eixo único (TCAEU), e o déficit ou superávit líquido de trabalho no eixo é suprido por um motor auxiliar ou convertido em energia por um gerador auxiliar, respectivamente. A integração de calor entre as correntes é realizada por meio da Análise Pinch, que fornece metas de consumo de utilidades e de área de troca térmica hipotética sem a necessidade de especificar uma rede de trocadores de calor detalhada. O custo de capital da área de troca térmica é estimado a partir da área hipotética total obtida pela Análise Pinch, assumindo troca de calor vertical entre as correntes nas curvas compostas balanceadas.

As simulações termodinâmicas foram realizadas no Aspen Plus com a equação de estado de Peng-Robinson. Para cada avaliação da função objetivo, o simulador calcula as temperaturas de saída das unidades de manipulação de pressão, os trabalhos de compressão e expansão, e os perfis T-H das correntes de processo. Esses dados são extraídos via interface Python-Aspen Plus e fornecidos ao operador de Análise Pinch simultâneo. Diferente de abordagens sequenciais, este operador permite que a integração térmica (definição do $\Delta T_{\min}$ ótimo e alocação de utilidades) seja avaliada de forma estritamente simultânea à otimização das temperaturas de saída das unidades de manipulação de pressão. Dois cenários foram avaliados para o cálculo dos perfis T-H. No cenário de cálculo rigoroso, o perfil de cada corrente é discretizado em intervalos de 5 K, e cada segmento é tratado como uma subcorrente independente na Análise Pinch, permitindo incorporar a variação das propriedades termodinâmicas ao longo da faixa de temperatura. No cenário de cálculo simplificado, cada corrente é representada apenas por seus pontos inicial e final, equivalente à hipótese de C_p médio para corrente, que é a abordagem padrão da Análise Pinch clássica.

As variáveis de decisão da otimização são as temperaturas de saída dos aquecedores/resfriadores intermediários (T_{out} de H11, H21 e H31), que correspondem às temperaturas de entrada nas unidades de manipulação de pressão, o $\Delta T_{\min}$ e as frações de distribuição entre as utilidades disponíveis. A otimização foi conduzida pelo algoritmo de Otimização por Enxame de Partículas (PSO) (Kennedy & Eberhart, 1995), em sua variante PSO-LDW, em que LDW (*Linearly Decreasing Weight*) indica que o peso de inércia decresce linearmente ao longo das iterações, implementado via biblioteca Mealpy (Van Thieu & Mirjalili, 2023), com os seguintes parâmetros: 50 partículas, 60 iterações, $c_1=c_2=2,0$, $\omega_{\min}=0,2$ e $\omega_{\max}=0,8$. Os parâmetros do algoritmo foram definidos considerando o custo computacional de cada avaliação da função objetivo no simulador. O acompanhamento da convergência foi feito a partir do valor final da função objetivo ao término de cada execução, uma vez que a biblioteca Mealpy disponibiliza o histórico de iterações apenas como saída no console, sem exportação estruturada. As simulações foram executadas em um computador equipado com processador AMD Ryzen 9 6900HS e 40 GB de RAM.

O custo total anualizado (CTA) é a função objetivo minimizada, definido pela Equação (1):

$$CTA = CO_{IT} + CO_{IC} + AF \cdot (CC_{IT} + CC_{IC}) \quad (1)$$

onde AF é o fator de anualização, CC_{IT} e CC_{IC} são os custos de capital da rede de trabalho e da área de troca térmica hipotética, respectivamente, CO_{IT} é o custo operacional associado ao consumo de eletricidade do motor auxiliar e CO_{IC} é o custo operacional das utilidades térmicas, sendo IT referente à integração de trabalho e IC referente à integração de calor. As funções de custo de capital dos equipamentos são apresentadas na Tabela 1, baseadas em Pavão et al. (2020), onde A é a área de troca térmica em m^2 e W é o trabalho em kW.

Tabela 1: Funções de custo de capital para diferentes unidades.

Unidade	Função de custo (\$)
Trocador de Calor (TC)	$71.337,07 + 747,9931 A$
Compressor TCAEU	$51.104,85 W^{0,62} - 985,47 W^{0,62}$
Turbina TCAEU	$2.585,47 W^{0,81} - 985,47 W^{0,62}$
Motor/gerador auxiliar	$985,47 W^{0,62}$

3. Caso de estudo e resultados

O caso de estudo consiste em três hidrocarbonetos em condições próximas ao ponto crítico: n-butano e isopentano como correntes quentes e n-pentano como corrente fria, cujos dados são apresentados na Tabela 2. As correntes quentes devem ser comprimidas de 1 bar até suas respectivas pressões críticas, enquanto a corrente fria deve ser expandida da sua pressão crítica até 1 bar. Para cada corrente, foi atribuída a quantidade mínima necessária de unidades de manipulação de pressão: um compressor para o n-butano (C11), um compressor para o isopentano (C21) e uma turbina para o n-pentano (T31), todos acoplados em um mesmo eixo. O balanço líquido de trabalho no eixo resulta em um déficit, de modo que um motor auxiliar é necessário para suprir a diferença. As utilidades disponíveis para o caso de estudo são apresentadas na

Tabela 3. O desempenho da otimização não constituiu o foco principal deste trabalho, centrado no estabelecimento de metas de integração de calor e trabalho a partir do cálculo rigoroso de propriedades termodinâmicas. As soluções finais obtidas em ambos os cenários atenderam às restrições do problema de otimização, com custo de penalização nulo.

Tabela 2: Informações das correntes.

Tipo e nº da corrente	Composto	Vazão molar (mol/s)	Temperatura de suprimento (K)	Temperatura alvo (K)	Pressão de suprimento (bar)	Pressão alvo (bar)	h (kW/(m ² ·K))
1 - Baixa pressão, Quente	n-butano	45,0	500,0	400,0	1,0	38,0	0,1
2 - Baixa pressão, Quente	isopentano	35,0	500,0	400,0	1,0	33,9	0,1
3 - Alta pressão, Fria	n-pentano	100,0	390,0	490,0	33,7	1,0	0,1

ElCost=455,04 \$/(kWano); ElRev=364,03 \$/(kWano); $\eta_c=0,7$; $\eta_r=0,7$

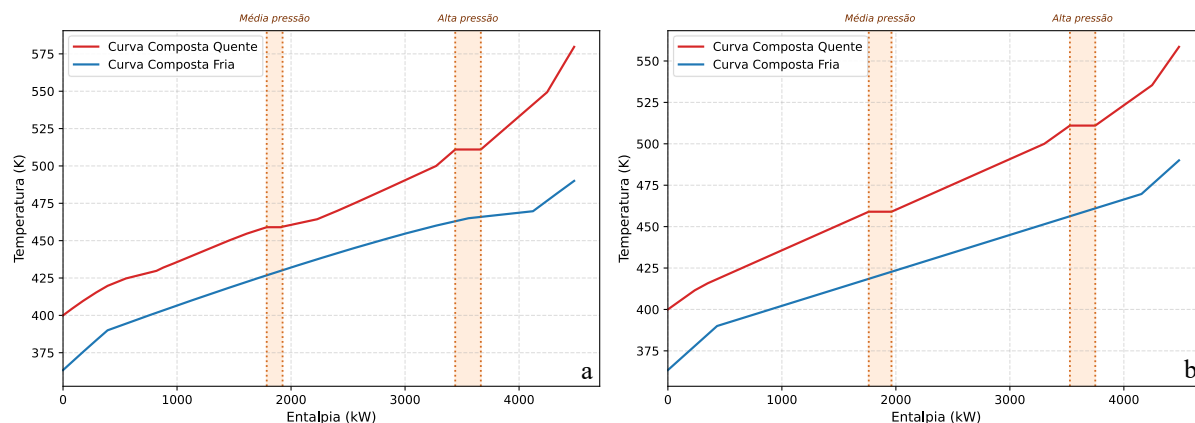
Tabela 3: Dados das utilidades disponíveis.

Utilidade	Pressão (bar)	Temperatura suprimento (K)	Temperatura final (K)	Custo \$(/kWano))
Vapor de alta pressão	32,04	511	511	193,882
Vapor de média pressão	11,36	459	459	126,023
Vapor de baixa pressão	4,46	421	421	73,846
Água gelada	1,01	277,6	315	94,09
Água de resfriamento	1,01	305,4	340	5,332

Dois cenários foram avaliados para a Análise Pinch. No cenário de cálculo rigoroso, as correntes de processo foram discretizadas em intervalos de 5 K, capturando a variação das propriedades termodinâmicas ao longo do perfil de temperatura. No cenário de cálculo simplificado, empregando-se o mesmo *framework*, cada corrente é representada apenas por seus pontos inicial e final, equivalente à hipótese de propriedades constantes por segmento. Em ambos os cenários, as propriedades termodinâmicas foram calculadas via Aspen Plus. O otimizador utilizado foi o PSO-LDW integrado à Análise Pinch. O tempo de otimização foi de 10.098 s (2 h 48 min 18 s) para o cenário rigoroso e de 7.870 s (2 h 11 min 10 s) para o cenário simplificado, uma diferença relativa de aproximadamente 22%. Essa diferença relativamente pequena decorre da arquitetura do *framework*: os dois cenários dependem de uma única chamada ao Aspen Plus por avaliação, para obter os dados dos compressores e turbinas, diferindo apenas no número de pontos do perfil T-H extraídos por corrente, um por corrente no cenário simplificado e um a cada 5 K no rigoroso. Embora não seja possível apontar com certeza a causa exata do aumento observado no cenário rigoroso, ele é provavelmente decorrente desse maior número de subcorrentes, que afeta diretamente o custo da Análise Pinch e, possivelmente de forma mais discreta, o tempo de simulação no Aspen Plus, sem que a magnitude desse último efeito tenha sido isolada neste trabalho. Em problemas de maior escala, com mais correntes de processo, o custo computacional deve crescer tanto pelo maior tempo de cada chamada ao simulador quanto pelo custo adicional da Análise Pinch.

O problema caracteriza-se como do tipo *threshold* (problema limiar), uma vez que o processo requer apenas utilidades quentes, com consumo de utilidades frias essencialmente nulo em ambos os cenários. A partir da aplicação do método pinch, verificou-se que o calor a ser removido das correntes quentes supera integralmente o calor absorvido pela expansão do n-pentano, de modo que toda a carga térmica residual é atendida por utilidades de aquecimento. As curvas compostas balanceadas de ambos os cenários são apresentadas na Figura 1. No cenário simplificado, as curvas apresentam perfil linear, reflexo da representação de cada corrente por apenas dois pontos. No cenário rigoroso, as curvas exibem variações locais mais pronunciadas ao longo do perfil de entalpia, decorrentes da discretização em intervalos de 5 K e do cálculo rigoroso das propriedades termodinâmicas.

Figura 1: Curvas compostas balanceadas para os cenários de (a) cálculo rigoroso e (b) cálculo simplificado.



Em relação à seleção de utilidades quentes, o vapor de alta pressão foi predominante no cenário rigoroso, respondendo por 64,2% do consumo total (349,37 kW), com o vapor de média pressão respondendo pelos 35,8%

restantes. No cenário simplificado, a distribuição foi mais equilibrada: vapor de alta pressão com 52,8% e vapor de média pressão com 47,2% do total de 421,44 kW. O vapor de baixa pressão não foi utilizado em nenhum dos cenários. A diferença na distribuição entre os cenários possivelmente decorre da forma como cada corrente é representada. No cálculo rigoroso, a discretização em intervalos de 5 K pode alterar o perfil T-H local das correntes, influenciando a quantidade de calor disponível em cada faixa de temperatura e, consequentemente, a proporção de cada utilidade selecionada pelo algoritmo.

A área total de troca é de 2.460 m² no cenário rigoroso e de 2.121 m² no simplificado, uma diferença de 13,8%, o que implica maior custo de capital da área de troca térmica hipotética no cenário rigoroso. O trabalho líquido no eixo é de 887,88 kW no cenário rigoroso e de 815,79 kW no simplificado, implicando também maior custo operacional associado ao motor auxiliar no cenário rigoroso.

O CTA total do cenário simplificado (2.007.051 \$/ano) é 5,0% inferior ao do cenário rigoroso (2.112.556 \$/ano). A maior parcela do custo total em ambos os cenários é o custo de capital da rede de trabalho, que representa 57,3% e 58,6% do CTA total nos cenários rigoroso e simplificado, respectivamente. O custo operacional é dominado pelo consumo de eletricidade do motor auxiliar, enquanto os compressores e a turbina possuem apenas custos de capital, pois o trabalho trocado entre eles ocorre internamente no eixo. O custo da área de troca térmica hipotética representa uma parcela menor, de 23,5% e 22,9% do CTA total nos cenários rigoroso e simplificado, respectivamente. A Tabela 4 apresenta os custos anualizados por componente para os dois cenários.

Tabela 4. Custos anualizados por componente para os dois cenários do caso de estudo de fluidos próximos ao ponto crítico.

Unidade	CC Rig. (\$/ano)	CO Rig. (\$/ano)	Total Rig. (\$/ano)	CC Simp. (\$/ano)	CO Simp. (\$/ano)	Total Simp. (\$/ano)
Comp1	632.131	-	632.131	611.539	-	611.539
Comp2	510.751	-	510.751	497.862	-	497.862
Turb1	55.469	-	55.469	55.504	-	55.504
Motor	12.430	404.020	416.450	11.795	371.218	383.012
IT	1.210.782	404.020	1.614.801	1.176.700	371.218	1.547.918
IC Pinch	438.502	59.253	497.754	390.931	68.203	459.133
ISCT	1.649.283	463.272	2.112.556	1.567.630	439.420	2.007.051

Em casos limite como o caso de estudo avaliado, com correntes próximas ao ponto crítico, ou em misturas sujeitas a mudança de fase, não abordadas neste trabalho, a hipótese de C_p constante tende a introduzir erros que comprometem a validade da solução simplificada. A subestimação da área de troca térmica no cenário simplificado indica que uma rede dimensionada a partir desse cenário tende a ficar subdimensionada frente ao perfil T-H real dessas correntes, o que pode comprometer sua realização física ou exigir retrabalho na etapa de projeto detalhado.

4. Conclusão

Este trabalho apresentou a aplicação da Análise Pinch integrada à otimização por PSO-LDW para o estabelecimento de metas de integração de redes de calor e trabalho em um caso de estudo envolvendo fluidos próximos ao ponto crítico. Em ambos os cenários, as propriedades termodinâmicas das correntes e das unidades de manipulação de pressão foram calculadas via simulação no Aspen Plus. A distinção entre os cenários reside exclusivamente na forma como o perfil T-H das correntes é fornecido à Análise Pinch. No cenário de cálculo rigoroso, pontos são gerados a cada 5 K de variação de temperatura, enquanto no cenário de cálculo simplificado, cada corrente é representada apenas por seus pontos inicial e final, equivalente à abordagem padrão da Análise Pinch clássica, que assume um C_p médio por segmento.

Os resultados indicam que essa escolha influencia os resultados do estabelecimento de metas. O cenário simplificado resultou em um CTA total de 2.007.051 \$/ano, valor 5,0% inferior ao obtido no cenário rigoroso (2.112.556 \$/ano), com diferenças também na área de troca térmica hipotética (13,8%) e no trabalho líquido no eixo. Em ambos os cenários, o problema caracterizou-se como do tipo *threshold*, com demanda exclusiva de utilidades quentes. A distribuição entre as utilidades quentes disponíveis também diferiu entre os cenários, com o cenário simplificado apresentando uma divisão mais equilibrada entre vapor de alta pressão e vapor de média pressão em comparação ao cenário rigoroso. Os resultados obtidos constituem uma etapa de estabelecimento de metas para a integração de calor e trabalho.

Agradecimentos: Os autores agradecem ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico – CNPq (Brasil), processos 309026/2022-9, 406544/2023-9 e 307705/2025-0, e à Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brasil (CAPES), processo 88887.106619/2025-00 e Código de Financiamento 001.

Referências

- Hamed, H., Karimi, I. A., & Gundersen, T. (2020). Simulation-based approach for integrating work within heat exchange networks for sub-ambient processes. *Energy Conversion and Management*, 203. <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2019.112276>
- Kennedy, J., & Eberhart, R. (1995). Particle swarm optimization. *Proceedings of ICNN'95 - International Conference on Neural Networks*, 4, 1942–1948. <https://doi.org/10.1109/ICNN.1995.488968>
- Linnhoff, B., & Hindmarsh, E. (1983). The pinch design method for heat exchanger networks. *Chemical Engineering Science*, 38(5), 745–763. [https://doi.org/10.1016/0009-2509\(83\)80185-7](https://doi.org/10.1016/0009-2509(83)80185-7)
- Onishi, V. C., Ravagnani, M. A. S. S., & Caballero, J. A. (2014). Simultaneous synthesis of work exchange networks with heat integration. *Chemical Engineering Science*, 112, 87–107. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2014.03.018>
- Pavão, L. V., Caballero, J. A., Ravagnani, M. A. S. S., & Costa, C. B. B. (2020). A pinch-based method for defining pressure manipulation routes in work and heat exchange networks. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 131. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2020.109989>
- Pavão, L. V., Costa, C. B. B., & Ravagnani, M. A. S. S. (2023). Multiple utilities targeting in energy integration considering rigorous temperature-enthalpy relations. *Chemical Engineering Science*, 276. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2023.118763>
- Razib, M. S., Hasan, M. M. F., & Karimi, I. A. (2012). Preliminary synthesis of work exchange networks. *Computers & Chemical Engineering*, 37, 262–277. <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2011.09.007>
- Rossato, I. G., Costa, C. B. B., Ravagnani, M. A. da S. S., & Pavão, L. V. (2025). Optimization of pressure manipulation routes considering the rigorous calculation of thermodynamic properties. *Applied Thermal Engineering*, 265, 125548. <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2025.125548>
- Van Thieu, N., & Mirjalili, S. (2023). MEALPY: An open-source library for latest meta-heuristic algorithms in Python. *Journal of Systems Architecture*, 139. <https://doi.org/10.1016/j.sysarc.2023.102871>