

1 2 9 0



UNIVERSIDADE D  
COIMBRA

Vítor Hugo Rebelo de Sousa

**PROJETO ÓTIMO DA REDE DE PRODUÇÃO E  
ABASTECIMENTO DE HIDROGÉNIO A  
GRANDES CONSUMIDORES INDUSTRIAIS  
EM PORTUGAL**

Dissertação no âmbito do Mestrado Integrado em Engenharia  
Química orientada pelo Professor Doutor Fernando Pedro Martins  
Bernardo e pelo Doutor Arnaldo José Carvalho Tomás ao  
Departamento de Engenharia Química da Faculdade de Ciências e  
Tecnologias da Universidade de Coimbra

Coimbra, Setembro de 2021



*"Vision without execution is just hallucination."*

-Henry Ford



## **Agradecimentos**

A todos aqueles que se cruzaram no meu caminho e que contribuíram para chegar até aqui, desde já o meu sincero obrigado.

Aos meus professores que durante todo o meu percurso académico me transmitiram conhecimento e ensinamentos para a vida, um enorme sentimento de gratidão.

Deixo o meu especial e sincero agradecimento:

Aos meus orientadores, Prof. Dr. Fernando Bernardo e Dr. Arnaldo Tomás, por terem aceite este desafio e me acompanharem ao longo de toda esta jornada. Sem a vossa ajuda e disponibilidade, este trabalho não teria sido possível. Foi um gosto aprender convosco.

Aos meus amigos, Beatriz Marona, Daniela Pereira, Hugo Ferreira, Inês Moura, João Coutinho, João Lopes, José Campos, Paula Oliveira, Rodrigo Paredes, Rúben Gariso, Sofia Leão, Vanessa Silva, Vasco Araújo por terem feito parte do meu percurso académico. Por estarem presentes nos bons e maus momentos, sem a vossa presença não seria imaginável!

A todos os meus amigos de longa data que de alguma forma me ajudaram a ser a pessoa que sou hoje e que partilharam histórias e momentos que jamais cairão no esquecimento.

À minha namorada que sempre lutou pelos meus objetivos e me apoiou nos momentos em que estes pareciam mais distantes. Fizeste Coimbra ter outro encanto!

Por fim, à minha mãe, irmã e família por serem os meus pilares e me darem o ânimo e coragem nos momentos mais desafiantes desta etapa. Um obrigado é pouco por tudo que fizeram por mim!



## Resumo

Nesta dissertação propõem-se a modelação e otimização de uma rede de produção e distribuição de hidrogénio a consumidores industriais em Portugal com os objetivos de definir as localizações ótimas de cada nodo produtor, as tecnologias a utilizar em cada etapa da rede e os fluxos de hidrogénio a trocar entre nodos produtores e consumidores.

Como metodologia, recolheu-se dados económicos e definiu-se as tecnologias mais viáveis de utilização. Quanto à modelação, esta é realizada tratando um Mixed-Integer Linear Problem (MILP) em que se minimiza o custo médio final do hidrogénio. Neste modelo considerou-se evoluções de economia de escala.

Analisou-se a estrutura ótima para cada um dos cenários estipulados na Estratégia Nacional para o Hidrogénio, alinhando a otimização da rede com a transição energética prevista para Portugal. Foram feitas comparações económicas entre o custo médio final do hidrogénio e o preço do gás natural, bem como previsões de preços e custos com o aumento da taxa de carbono. Além disso, realizou-se uma análise de sensibilidade de alguns dados de entrada, nomeadamente o preço da eletricidade, o preço da água e os custos de armazenamento.

Por fim, concluiu-se que, para produção de hidrogénio como matéria-prima, o Steam Methane Reforming (SMR) continua a ser a tecnologia preferencial para os próximos, mesmo com o aumento do preço do gás natural e da taxa de carbono. Quanto ao “hidrogénio verde”, a diminuição dos custos de investimento e de operação da eletrólise PEM tornará, num futuro próximo, esta tecnologia a mais viável face à eletrólise alcalina. O amoníaco e o dibenziltolueno (DBT) apenas serão opções para o transporte de hidrogénio em longas distâncias e com uma evolução da economia de escala dos custos de investimento das infraestruturas necessárias. O transporte por gasoduto com mistura de hidrogénio com gás natural é o método preferencial para a distribuição em Portugal devido à rede já existente e às quantidades transportadas serem mais elevadas do que os restantes meios. A subsidiação de projetos de produção e distribuição de “hidrogénio verde” é a forma mais imediata de o tornar competitivo face ao gás natural, sendo necessário um apoio de 83% e 95% para os custos de investimento e operação, respetivamente.

**Palavras-chave:** hidrogénio, gás natural, Portugal, consumidores industriais, otimização, transição energética.



## Abstract

This thesis proposes the modeling and optimization of a hydrogen production and distribution network to industrial consumers in Portugal, aiming the optimization of the locations of each producer node, the technologies to be used in each stage of the network and the hydrogen flows exchange between producer and consumer nodes.

As a methodology, economic data was collected and the most viable technologies for use were defined. In the modelling, a Mixed-Integer Linear Problem (MILP) was formulated to minimize the average final cost of hydrogen. In this model, scale economy evolutions are considered.

The optimal structure for each scenario stipulated in the National Strategy for Hydrogen was analyzed, aligning the optimization of the network with the energy transition forecasted for Portugal. Economic comparisons were made between the average final cost of hydrogen with the natural gas price, as well as price and cost forecasts with increasing carbon tax. In addition, a sensitivity analysis of some input data was carried out, namely electricity price, water price and storage costs.

Finally, it was concluded that, for the production of hydrogen as a raw material, Steam Methane Reforming (SMR) continues to be the favorite technology for the next, even with the increase in the price of natural gas and the carbon tax. As for “green hydrogen”, the reduction in investment and operating costs of PEM electrolysis will, in the near future, make this technology the most viable compared to alkaline electrolysis. Ammonia and dibenzyltoluene (DBT) will only be options for the transport of hydrogen over long distances and with an evolution of the economy of scale in the investment costs of the necessary infrastructure. Transport by pipeline with a hydrogen and natural gas mixture is the preferred method for distribution in Portugal due to the existing network and the amount transported being higher than the other means. Subsidizing “green hydrogen” production and distribution projects is the most instant way to make it competitive with natural gas, requiring a support of 83% and 95% for investment and operating costs, respectively.

**Keywords:** hydrogen, natural gas, Portugal, industrial consumers, optimization, energy transition.



# Índice

1. Introdução.....	1
1.1. Âmbito da dissertação.....	1
1.2. Objetivos da dissertação .....	3
1.3. Estrutura da dissertação .....	4
2. Revisão bibliográfica.....	5
2.1. Relevância do hidrogénio na atualidade .....	5
2.2. Enquadramento europeu .....	6
2.3. Enquadramento nacional.....	7
2.4. Moléculas de transporte .....	8
2.5. Modelação e otimização de redes de hidrogénio .....	8
3. Componentes do modelo.....	11
3.1. Procura.....	11
3.2. Superestrutura de possibilidades.....	12
3.3. Tecnologias de produção .....	12
3.4. Tecnologias de conversão.....	13
3.5. Tecnologias de armazenamento.....	13
3.6. Tecnologia de vaporização .....	14
3.7. Tecnologias de reconversão.....	14
3.8. Modos de transporte.....	14
3.9. Generalização da superestrutura e exemplificação .....	14
4. Recolha de dados.....	21
4.1. Matérias-primas e eletricidade.....	21
4.2. Produção .....	22
4.3. Conversão .....	23
4.4. Armazenamento .....	24
4.5. Vaporização .....	25
4.6. Distribuição.....	25

4.7.	Reconversão .....	26
5.	Formulação do modelo .....	29
5.1.	Pressupostos .....	29
5.2.	Conjuntos, parâmetros e variáveis .....	30
5.3.	Transporte de hidrogénio .....	36
5.4.	Reconversão de hidrogénio .....	37
5.5.	Transporte de moléculas portadoras de hidrogénio .....	37
5.6.	Vaporização de hidrogénio .....	38
5.7.	Armazenamento de hidrogénio .....	38
5.8.	Conversão de hidrogénio .....	39
5.9.	Produção de hidrogénio .....	40
5.10.	Compra de matérias-primas .....	41
5.11.	Restrições Big-M e Low-L .....	41
5.12.	Modelo linear de economias de escala .....	42
5.13.	Função objetivo .....	44
6.	Exemplo de solução .....	45
7.	Discussão de resultados .....	47
7.1.	Incorporação de hidrogénio na rede de consumo .....	47
7.2.	Evolução temporal do preço do gás natural e do custo final médio da mistura .....	64
7.3.	Evolução temporal do preço da energia e do custo final médio do hidrogénio .....	65
7.4.	Comparação entre o preço da água com o custo final médio do hidrogénio .....	66
7.5.	Avaliação do impacto dos custos de armazenamento no custo final médio de hidrogénio .....	67
8.	Conclusões .....	69
9.	Trabalhos futuros .....	71
10.	Bibliografia .....	73

## Lista de figuras

Figura 1 - Evolução da potência instalada de energias renováveis ao longo dos últimos anos..	7
Figura 2 - Localização geográfica da procura para combustível (esquerda) e da procura para matéria-prima (direita).....	12
Figura 3 - Superestrutura de produção e distribuição de hidrogénio.....	17
Figura 4 - Exemplo de caso possível de rede de produção e distribuição de hidrogénio.....	19
Figura 5 - Evolução do custo de investimento unitário de produção com a potência instalada. ....	43
Figura 6 - Aproximação da economia de escala através de uma função por escalões lineares. ....	43
Figura 7 - Resultados das variáveis otimizadas $x^{\text{prod}}$ (esquerda) e $x^{\text{arm}}$ (direita.) .....	45
Figura 8 - Diagrama de fluxo do Cenário A.....	49
Figura 9 - Interações entre nodos adjacentes nos Cenários A e B.....	50
Figura 10 - Custo final do produto à porta do consumidor no Cenário A.....	51
Figura 11 - Diagrama de fluxo do Cenário C.....	53
Figura 12 - Interações entre nodos adjacentes nos Cenários C e D.....	54
Figura 13 - Custo final do produto à porta do consumidor no Cenário C.....	55
Figura 14 - Diagrama de fluxo do Cenário E.....	57
Figura 15 - Interações entre nodos adjacentes nos Cenários E e F.....	58
Figura 16 - Custo final do produto à porta do consumidor no Cenário E.....	59
Figura 17 - Diagrama de fluxo do Cenário G.....	61
Figura 18 - Interações entre nodos adjacentes nos Cenários G e H.....	62
Figura 19 - Custo final do produto à porta do consumidor no Cenário G.....	63
Figura 20 - Evolução temporal do preço do gás natural, do custo final médio da mistura e da taxa de emissão de CO <sub>2</sub> .....	64
Figura 21 - Variação do preço da energia elétrica com a evolução do preço da energia solar e eólica.....	65
Figura 22 - Evolução temporal do preço da energia e do custo final médio de hidrogénio.....	66
Figura 23 - Comparação entre o preço da água com o custo final médio do hidrogénio.....	67
Figura 24 - Custo de armazenamento total e diário num horizonte temporal para armazenamento gasoso e liquefeito.....	67
Figura 25 - Variação do custo final médio de H <sub>2</sub> para diferentes tipos de armazenamento num horizonte temporal.....	68



## Lista de tabelas

Tabela 1 - Procura de combustível e de matéria-prima em Portugal.....	11
Tabela 2 – Propriedades dos compostos utilizados. ....	21
Tabela 3 - Preços das matérias-primas e eletricidade.....	21
Tabela 4 - Custos associados à produção. ....	22
Tabela 5 - Custos associados à conversão. ....	23
Tabela 6 - Custos associados ao armazenamento. ....	25
Tabela 7 - Custo associado à vaporização. ....	25
Tabela 8 - Custos associados à distribuição. ....	26
Tabela 9 - Custos associados à reconversão. ....	27
Tabela 10 – Dimensões, tempo de computação e tolerância relativa do exemplo analisado. ..	45
Tabela 11 - Objetivos de incorporação de hidrogénio na rede de consumo.....	47
Tabela 12 - Fluxos de troca entre origens e destinos nos Cenários A e B.....	48
Tabela 13 - Fluxos de troca entre origens e destinos nos Cenários C e D.....	52
Tabela 14 - Fluxos de troca entre origens e destinos nos Cenários E e F. ....	56
Tabela 15 - Fluxos de troca entre origens e destinos no Cenários G e H.....	60



# 1. Introdução

## 1.1. Âmbito da dissertação

Os recursos fósseis são atualmente a maior fonte de energia desde a revolução industrial, sendo utilizados nos mais diversos setores energéticos. Estes recursos, devido ao seu elevado ritmo de consumo, designam-se como uma fonte de energia não-renovável. Por outro lado, a energia destes compostos é extraída através de combustão onde se libertam gases com efeito de estufa (p.e. CO<sub>2</sub>), originando problemas ambientais inerentes a este tipo de combustível.

Neste contexto, definiram-se acordos ambientais para a descarbonização, abrindo-se horizontes energéticos para fontes mais sustentáveis: energias renováveis. As energias renováveis surgem como a principal alternativa aos combustíveis fósseis, conseguindo-se gerar energia através de fontes “ilimitadas” (p.e. energia eólica, hidráulica, solar, etc).

Este tipo de fontes de energia apesar de promissoras, apresentam a dificuldade de transporte e armazenamento da energia gerada, utilizando-se fontes comuns de armazenamento (p.e. baterias, pilhas) que poluem o ambiente. Assim surge a possibilidade de armazenamento na forma de energia potencial química, tal como nos combustíveis fósseis, através do hidrogénio. O hidrogénio, H<sub>2</sub>, é uma molécula diatómica gasosa com um potencial energético elevado (poder calorífico inferior de 33,6 kWh/kg) <sup>[1]</sup> e uma massa volúmica baixa em condições normais de pressão e temperatura <sup>[2]</sup>. Embora no nosso planeta este composto seja pouco abundante na sua forma molecular, encontra-se em imensos compostos (p.e. H<sub>2</sub>O, CH<sub>4</sub>) na sua forma elementar, podendo ser produzido através de reações químicas, como seja a eletrólise da água. De forma a garantir que o hidrogénio seja “verde” utiliza-se eletricidade produzida de forma renovável, promovendo-se a transição para este tipo de combustível através da implementação de energias limpas.

A União Europeia estabeleceu várias metas para cumprir com a redução de emissões tendo como objetivo a neutralidade carbónica. Para isto, propõe-se atingir até 2030 os 40 GW de potência instalada em eletrolisadores de água <sup>[3]</sup>.

Como membro desta comunidade, Portugal insere-se nestes planos de transição energética, tendo áreas e recursos naturais privilegiados devido à sua geografia, apresentando elevada exposição solar e capacidade eólica, imensos recursos hídricos e disponibilidade de energia geotérmica. Com esta disponibilidade energética e com os projetos de implementação de unidades de produção de hidrogénio em território nacional, Portugal encontra-se numa posição favorável neste mercado emergente.

Este mercado será primeiramente interno, visando diminuir as importações e garantindo maior independência energética. Para isso, é necessário garantir uma produção suficiente de hidrogénio, bem como uma rede de distribuição capaz de chegar aos diversos setores consumidores, nomeadamente o industrial <sup>[4]</sup>. Desta forma, surge o tema desta dissertação com o intuito de modelar e otimizar uma rede de produção e distribuição de hidrogénio a grandes consumidores industriais em Portugal.

### 1.2. Objetivos da dissertação

Nesta dissertação propõem-se a modelação e otimização de uma rede de produção e distribuição de hidrogénio a consumidores industriais em Portugal. Para este modelo, têm-se como objetivo a pesquisa e recolha de dados económicos, bem como a definição das tecnologias mais adequadas a implementar ao longo da rede para o caso português. A modelação será realizada com base no clássico problema de transportes, com nodos que representam várias alternativas de produção, transporte, conversão e reconversão de hidrogénio, e arcos que representam as quantidades transportadas entre nodos, desde as potenciais localizações de produção até junto dos grandes consumidores industriais (para queima, substituindo o gás natural, ou consumidores de hidrogénio como matéria-prima para processos químicos).

Quanto à otimização, pretende-se obter uma rede ótima com base nos cenários previstos na Estratégia Nacional para o Hidrogénio <sup>[4]</sup>, realizando-se a posteriori uma análise de sensibilidade de determinados parâmetros de entrada do modelo. Assim, o modelo deverá ser capaz de determinar a localização ótima das unidades de produção de hidrogénio, as tecnologias a utilizar nas diversas etapas, desde a produção ao transporte, bem como as quantidades produzidas e distribuídas entre os nodos produtores e consumidores de forma a suprir a procura. A incorporação do hidrogénio será, como descrito anteriormente, baseada nos cenários da Estratégia Nacional para o Hidrogénio, promovendo uma transição energética gradual e permitindo a coexistência do hidrogénio com o gás natural.

### 1.3. Estrutura da dissertação

A presente dissertação encontra-se organizada em oito capítulos, sendo que no primeiro efetua-se uma revisão bibliográfica, abordando-se a importância do aparecimento do hidrogénio, o enquadramento europeu e nacional deste tema e os trabalhos já realizados na modelação e otimização de redes de produção e distribuição deste vetor energético. No segundo capítulo, explora-se as componentes do modelo, descrevendo-se as tecnologias que irão ser abordadas e demonstrando-se um panorama geral do que irá ser a rede a modelar. O terceiro capítulo resume os dados recolhidos que irão ser necessários no modelo. No quinto capítulo apresenta-se a formulação utilizada para modelar a rede, bem como os pressupostos e restrições utilizados. Quanto ao sexto capítulo, exemplifica-se uma solução do modelo, demonstrando-se as dimensões e os resultados obtidos na otimização. Já no sétimo capítulo apresenta-se a discussão dos resultados obtidos, bem como uma análise de sensibilidade de alguns parâmetros utilizados durante a otimização. Por fim, no oitavo e nono capítulo resumem-se as conclusões deste trabalho e apontam-se trabalhos a desenvolver no futuro, respetivamente.

## 2. Revisão bibliográfica

Neste capítulo descreve-se a necessidade de utilização de hidrogénio “verde” de origem renovável, bem como o enquadramento deste nos planos europeu e nacional. Também é feita uma breve revisão dos trabalhos já realizados em otimização de redes de hidrogénio e são destacadas as diferenças com o aqui apresentado.

### 2.1.Relevância do hidrogénio na atualidade

A dinâmica da procura de gás natural na UE tem vindo a mudar nos últimos anos. A redução da procura de gás natural observada ao longo da última década pode ser atribuída a uma série de fatores: i) redução da atividade industrial decorrente da crise económica; ii) o preço do gás natural comparado ao carvão e energias renováveis no setor de energia; iii) o aumento da integração de energias renováveis e armazenamento de eletricidade como resultado de políticas governamentais, redução de custos e desenvolvimento tecnológico. Isto criou incerteza sobre a procura futura de gás natural na UE, que se reflete na redução sucessiva das projeções de procura de gás natural para 2030 realizadas pela Comissão Europeia e pela Agência Internacional de Energia <sup>[5]</sup>.

Neste contexto aparece a oportunidade de produção e utilização do hidrogénio que pode ser usado como matéria-prima, combustível ou como molécula de transporte e armazenamento de energia, tendo muitas aplicações possíveis nos setores da indústria, transporte, energia e construção. De notar também que a combustão de hidrogénio não emite CO<sub>2</sub> nem polui de forma significativa quando usado. Com isto, apresenta-se como uma solução para descarbonizar processos industriais e setores económicos onde reduzir as emissões de carbono é urgente e difícil de conseguir <sup>[6]</sup>.

Por volta do ano 2000 houve picos de interesse no hidrogénio que acabaram por cair no esquecimento devido à inviabilidade económica das aplicações e pela falta de apoio por parte de instituições dedicadas ao tema. Atualmente, o rápido declínio dos custos das energias renováveis, os desenvolvimentos tecnológicos e a urgência em reduzir drasticamente as emissões de gases com efeito estufa, estão a abrir novas possibilidades. Além disso, como o hidrogénio pode substituir os combustíveis fósseis em alguns processos industriais intensivos em carbono, como nos setores siderúrgico ou químico, reduzindo as emissões de gases de efeito estufa e fortalecendo ainda mais a competitividade global dessas indústrias, este apresenta-se como um forte candidato à substituição do gás natural <sup>[6]</sup>.

## 2.2. Enquadramento europeu

O Pacote Energia Clima 2030 e o Pacote Energia Limpa para todos os Europeus tem como objetivo promover a transição energética até 2030, tendo em vista o cumprimento do Acordo de Paris <sup>[4]</sup>.

No caso do Pacote Energia Clima 2030 foi designada para a União Europeia uma meta de redução de emissões mínima de 40% em relação a 1990, uma meta de 27% de energias renováveis e uma meta indicativa para a Eficiência Energética (EE) de 27% <sup>[4]</sup>.

Segundo a Estratégia Nacional para o Hidrogénio <sup>[4]</sup> “O Pacote Energia Limpa para todos os Europeus compreende um conjunto de medidas destinadas a preservar a competitividade da União Europeia. A Comissão pretende que a UE não só se adapte a esta transição como a lidere. Por este motivo, a UE comprometeu-se a reduzir as emissões de CO<sub>2</sub> em pelo menos 40% até 2030, estando em discussão uma meta de 50%-55%, enquanto moderniza a economia e garante crescimento e emprego para todos os cidadãos europeus”.

Os autores <sup>[4]</sup> acrescentam ainda que “Neste sentido, a União Europeia aprovou um conjunto de metas mais ambiciosas e que visam alcançar em 2030: (i) 32% de quota de energia proveniente de fontes renováveis no consumo final bruto; (ii) 32,5% de redução do consumo de energia; (iii) 40% de redução das emissões de gases com efeito de estufa relativamente aos níveis de 1990”.

Por fim, na publicação <sup>[4]</sup> descrevem “O Regulamento da Governação da União da Energia e da Ação Climática aprovado no âmbito do Pacote Energia Limpa para todos os Europeus prevê que todos os Estados-Membros elaborem e apresentem à Comissão Europeia um Plano Nacional integrado de Energia e Clima (PNEC) para o horizonte 2021-2030. Este plano visa o estabelecimento, pelos Estados-Membros, de metas, objetivos e respetivas políticas e medidas em matéria de descarbonização, emissões de gases com efeito de estufa e as energias renováveis, eficiência energética, segurança energética, mercado interno e investigação, inovação e competitividade, bem como uma abordagem clara para o alcance dos referidos objetivos e metas. O PNEC será o principal instrumento de política energética e climática para a década 2021-2030”.

Assim a União Europeia promove uma transição energética com o objetivo de atingir a neutralidade em carbono, introduzindo metas em diversas áreas onde é possível reduzir ou

neutralizar as emissões de gases poluentes e incentivando a utilização de tecnologias mais limpas.

### 2.3. Enquadramento nacional

Nos últimos anos Portugal tem apostado na promoção das energias renováveis, o que lhe permitiu alcançar um dos lugares cimeiros do *ranking* da produção de energia proveniente de fontes renováveis ao nível da União Europeia. Este processo de transição exigiu uma mudança na forma de produção de energia, tornando-se fundamental o desenvolvimento de políticas e medidas de apoio à geração de energia descentralizada (maior distribuição das centrais de produção e geração de energia), através da criação de estratégias de investigação, inovação e competitividade, de modo a facilitar o investimento em tecnologias de baixa emissão de carbono [7].

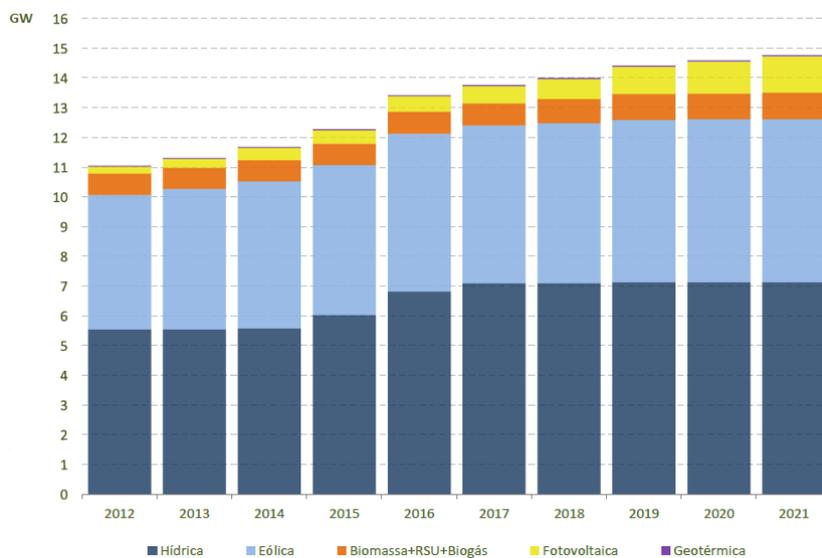


Figura 1 - Evolução da potência instalada de energias renováveis ao longo dos últimos anos.

Para completar estes objetivos é necessário reduzir o consumo de energia, promover melhorias tecnológicas, utilizar tecnologias energeticamente eficientes e progredir com a utilização de energia proveniente de fontes renováveis [7].

É nesta situação que, numa opção de médio e longo prazo, os novos combustíveis, como o hidrogénio, se poderão assumir como vetores energéticos e contribuir para um sistema energético mais limpo e sustentável, para o cumprimento dos objetivos nacionais em termos de energia e clima e para o aumento da independência energética a nível nacional [7].

O hidrogénio constitui-se como um combustível alternativo aos hidrocarbonetos fósseis na transição para um novo cenário energético nacional, permitindo desenvolver novas oportunidades e reforçar a competitividade de Portugal [7].

Para além dos problemas de sensibilização quanto a esta mudança, encontra-se o desenvolvimento estratégico de longo prazo, que para além de colocar desafios de natureza económica, tecnológica e regulamentar, terá necessariamente de ultrapassar obstáculos relacionados com os elevados custos das tecnologias e com a criação de uma rede que vai da produção, ao transporte, à distribuição e ao consumo, para além da adaptação legislativa e regulamentar com intenção de promover a sua integração no sistema energético nacional <sup>[7]</sup>.

### 2.4. Moléculas de transporte

O transporte de hidrogénio é um passo importante da rede, sendo crucial a escolha dos modos de distribuição. Deste modo, além dos mais conhecidos (gasoduto e camião-cisterna), existem transportes de moléculas compostas por hidrogénio que requerem condições mais favoráveis e com um custo mais baixo.

Num caso mais clássico, considerou-se o amoníaco como uma das moléculas mais promissoras na tarefa de transportar hidrogénio, visto que já existem diversos estudos e que o processo de conversão de hidrogénio em amoníaco se encontra bem estabelecido <sup>[8]</sup>. Por outro lado, considerou-se o transporte de hidrogénio através de líquidos orgânicos, destacando-se o dibenziltolueno como uma molécula com uma elevada capacidade de hidrogenação e com poucos requisitos de pressão e temperatura durante o transporte <sup>[9]</sup>.

### 2.5. Modelação e otimização de redes de hidrogénio

Li et al. <sup>[10]</sup> exploram um modelo de otimização de uma rede integrada de consumo com o planeamento de estações de abastecimento de hidrogénio. Além disso, resumem trabalhos anteriormente feitos como o de Almansoori et al. <sup>[11]</sup> que descreveram um cenário estático com vários componentes da rede, sendo estudado um caso para a Grã-Bretanha e o de Johnson et al. <sup>[12]</sup> que concederam um modelo matemático que otimiza o custo de produção centralizada com transmissão através da rede de gasodutos em localizações geográficas reais. Pan et al. <sup>[13]</sup> desenvolveram um modelo de dupla camada multiobjectivo, baseado na minimização do custo anual total e do custo nivelado de hidrogénio apenas para a produção. Hwangbo et al. <sup>[14]</sup> abordam um modelo baseado em dados e algoritmos adaptativos que prevê a produção e consumo de eletricidade no futuro, permitindo criar uma rede de produção de hidrogénio autossustentável integrada com energia renovável. O trabalho de Almansoori et al. <sup>[11]</sup> foi o principal impulsionador de outros trabalhos que tentaram otimizar o trabalho já feito e introduzir modificações para novos cenários.

O modelo desenvolvido neste trabalho, como os demais explorados em bibliografia, foca-se no planeamento e otimização de uma rede de distribuição de hidrogénio para consumo a nível nacional em Portugal, tendo como objetivo minimizar o custo final médio do produto nas várias regiões consumidoras do país, sendo calculado através da soma de vários custos nas diferentes etapas da rede. Esta otimização será desenvolvida na plataforma GAMS <sup>[15]</sup>.

As diferenças deste modelo do tipo MILP, focam-se na abordagem de métodos de produção diferenciados (eletrólise PEM e eletrólise alcalina) comparativamente ao método de *Steam Methane Reforming* (SMR); introdução de um custo de carbono gerado nos métodos de produção; o foco nas técnicas de conversão comuns (compressão e liquefação), bem como alternativas de armazenamento e transporte promissoras (amoníaco e dibenziltolueno); avaliação da reconversão de amoníaco e dibenziltolueno (DBT) em pontos estratégicos de forma a minimizar o custo final; avaliação do fornecimento de energia baseado na rede de eletricidade ou no alternativa fora da rede (parque eólico ou solar); avaliação dos custos de investimento e custos de operação com base em economia de escala; determinação dos custos nivelados finais num horizonte temporal com avaliação da evolução dos custos de tecnologias e do carbono ao longo do tempo; incorporação do hidrogénio nos setores nacionais de acordo com os objetivos traçados na Estratégia Nacional para o Hidrogénio.

Neste sentido, o modelo destaca-se pela utilização de tecnologias de produção e modos de transporte que permitam a coexistência dos dois vetores energéticos abordados (gás natural e hidrogénio), pela utilização de moléculas de transporte e pela otimização dos locais de produção e reconversão.



### 3. Componentes do modelo

#### 3.1. Procura

O modelo desenvolvido nesta dissertação tem por base uma procura de hidrogénio “verde” baseada na utilização deste como combustível e para utilização como matéria-prima. Estas procuras foram filtradas para consumos industriais, sendo apenas selecionadas algumas das localidades com maior consumo industrial em Portugal <sup>[43]</sup>. As localidades e os respetivos consumos são ilustrados na Tabela 1 e na Figura 2, demonstrando-se quais são as zonas do país mais ativas industrialmente e a procura energética de gás natural para combustível que se considera ser substituída por hidrogénio, como se demonstra nas conversões da Tabela 1.

Tabela 1 - Procura de combustível e de matéria-prima em Portugal.

Consumidores	Consumo			Matéria-prima <sup>[44]</sup> <sup>[45]</sup>
	Gás Natural (Nm <sup>3</sup> ) <sup>[43]</sup>	Energia (kWh)	Hidrogénio (ton)	Hidrogénio (ton)
Abrantes	397307400	4727958060	140713	0
Alenquer	433944300	5163937170	153689	0
Covilhã	4899500	58304050	1735	0
Estarreja	100981000	1201673900	35764	12885
Figueira da Foz	730663800	8694899220	258777	0
Gondomar	600973900	7151589410	212845	0
Guimarães	99331400	1182043660	35180	0
Marinha Grande	118030000	1404557000	41802	0
Matosinhos	252257100	3001859490	89341	0
Portalegre	7855300	93478070	2782	0
Setúbal	126901000	1510121900	44944	0
Sines	0	0	0	86304
Viana do Castelo	132222000	1573441800	46829	0
Vila Velha de Rodão	33166400	394680160	11746	0
Total	3038533100	36158543890	1076147	99189



Figura 2 - Localização geográfica da procura para combustível (esquerda) e da procura para matéria-prima (direita).

### 3.2. Superestrutura de possibilidades

Sabendo que existe uma tendência de substituição de fontes de energia fósseis (p.e. gás natural) por outras mais “verdes” e que as matérias-primas produzidas de forma poluente têm uma tendência para deixarem de ser utilizadas (p.e. hidrogénio cinzento), pensou-se em modos e tecnologias que permitissem a produção de hidrogénio verde e garantissem uma transição energética adequada. Nas secções 3.3. a 3.8., apresentam-se as opções do modelo, começando na produção e terminando no transporte.

A rede completa de produção e distribuição é representada na Figura 3 na forma de uma rede de nodos e arcos, onde os nodos iniciais (à esquerda na figura) representam matérias-primas para produção de hidrogénio, os nodos intermédios processos de transformação ou transporte, os nodos finais os consumidores finais de hidrogénio (à direita na figura), e os arcos as quantidades transportadas entre nodos. A rede da Figura 3 é de facto uma superestrutura uma vez que contempla todas as possibilidades de produção, conversão e transporte, ou seja, todas as possíveis redes reais de produção e distribuição de hidrogénio. Deve ainda acrescentar-se que a rede da Figura 3 é de facto um caso particular para uma origem e dois destinos, sendo que a sua generalização será explicada mais adiante na secção 3.9.

Por agora, recomenda-se que a leitura das secções 3.3 a 3.8 seja acompanhada da leitura da Figura 3, que é a peça de informação central desta dissertação.

### 3.3. Tecnologias de produção

O hidrogénio, dependendo da origem das matérias-primas e da emissão de gases poluentes pela sua produção, pode ser classificado como cinzento, azul ou verde: cinzento para a utilização de matérias-primas fósseis e com emissão de gases poluentes na sua produção; azul para a utilização de matérias-primas fósseis e captura dos gases poluentes derivados da sua produção; e verde para a utilização de matérias-primas não-fósseis que não provoquem a

emissão de gases poluentes durante a produção. Assim, existem diversas formas de produzir hidrogénio, sendo necessário apurar as que melhor se enquadram em cada caso. Para este trabalho avaliou-se as tecnologias emergentes de produção de hidrogénio verde (eletrólise alcalina e Polymer Electrolyte Membrane Electrolysis ou eletrólise PEM), bem como a tecnologia de produção mais comum atualmente (Steam Methane Reforming ou SMR).

Com estas escolhas de tecnologias de produção pretende-se equacionar um plano de transição energética, apresentando os requisitos de cada tecnologia (p.e. matérias-primas), a sua maturidade económica e o enquadramento de cada uma a nível ambiental.

#### 3.4. Tecnologias de conversão

Para as tecnologias de conversão de hidrogénio escolheu-se a compressão, liquefação, conversão em amoníaco e hidrogenação de dibenziltolueno (DBT). A compressão, bem como a liquefação, são tecnologias bem estabelecidas, modificando as propriedades físicas do hidrogénio de forma a permitir um transporte facilitado; a conversão em amoníaco ocorre através da reação de formação de amoníaco, como se representa na Equação 1, facilitando o seu transporte e permitindo tirar vantagem das propriedades físico-químicas da nova molécula transportadora de hidrogénio; a hidrogenação do DBT, representada na Equação 2, difere da tecnologia anterior na medida em que o DBT funciona como molécula transportadora de hidrogénio reutilizável, podendo ser submetida a vários ciclos de conversão.



As tecnologias de conversão apresentam condições de operação diferenciadas, sendo para a compressão de 15 para 200 bar à temperatura ambiente (20-25°C); na liquefação arrefece-se o hidrogénio até -253°C à pressão atmosférica; na conversão em amoníaco, a reação ocorre às condições habituais do Processo Haber-Bosch (250-350 bar e 450-550°C); por fim, a hidrogenação do DBT é promovida a 250°C com uma pressão entre 25 e 50 bar.

#### 3.5. Tecnologias de armazenamento

Como acima referido, o armazenamento das moléculas transportadoras de hidrogénio é incorporado no modelo da sua conversão. Já no caso do hidrogénio comprimido ou liquefeito, considera-se explicitamente o seu armazenamento nestes estados físicos. Estes armazenamentos, tal como as tecnologias de conversão que precedem este passo, estão bem estabelecidos, apresentando assim um grau de maturidade tecnológica elevado.

Assim, o armazenamento gasoso é mantido a 200 bar e à temperatura ambiente num tanque metálico; o armazenamento liquefeito a  $-253^{\circ}\text{C}$  e à pressão atmosférica num tanque de compósito isolado; quanto ao amoníaco, este é armazenado a  $-33^{\circ}\text{C}$  e à pressão atmosférica num tanque metálico isolado; por fim, o DBT hidrogenado é armazenado à temperatura e pressão ambiente.

#### 3.6. Tecnologia de vaporização

A tecnologia de vaporização garante a passagem do hidrogénio liquefeito para o estado gasoso, permitindo conservar parte da energia sobre a forma de pressão do gás. Esta transição é possível com a utilização de um evaporador.

#### 3.7. Tecnologias de reconversão

As tecnologias de reconversão de hidrogénio são o processo inverso da conversão, sendo assim o cracking do amoníaco e a desidrogenação do perhidrodibenziltolueno (P-DBT). Estas tecnologias permitem a libertação do hidrogénio das moléculas transportadoras, permitindo transportá-lo desde o local de reconversão até ao destino de consumo.

#### 3.8. Modos de transporte

Na rede de distribuição de hidrogénio podemos diferenciar o transporte de hidrogénio e o transporte de moléculas transportadoras de hidrogénio. Para o transporte de hidrogénio há quatro alternativas: transporte através de *pipeline* mistura (conduta com mistura de  $\text{H}_2$  com gás natural), *pipeline* exclusivo de hidrogénio, camiã-cisterna com hidrogénio gasoso e camiã com hidrogénio liquefeito. No transporte de moléculas transportadoras de hidrogénio, há apenas duas alternativas, ambas em fase líquida: amoníaco em camiã e transporte de DBT também em camiã.

Há ainda um terceiro conjunto de nodos de transporte, relativos ao transporte de hidrogénio gasoso após reconversão, que é feito em camiã-cisterna e percorrendo distâncias muito menores do que as percorridas nos modos de transporte primário acima referidos.

#### 3.9. Generalização da superestrutura e exemplificação

Descritos todos os modos e tecnologias, faz-se novamente referência à superestrutura da Figura 3 que integra todas as possibilidades atrás descritas, mas de facto para o caso particular de uma só origem onde se produz hidrogénio – Origem (o1) - e dois destinos onde há procura de hidrogénio – Destino (d1) e Destino (d2). O Destino (d1) tem de facto a mesma

localização da Origem ( $o1$ ), permitindo assim o autoconsumo (produção e consumo de hidrogénio na mesma localização). Já o Destino ( $d2$ ) difere a sua localização da Origem ( $o1$ ), possibilitando apenas o abastecimento de hidrogénio desde a origem ao destino com passagem obrigatória pelas etapas de transformação e transporte descritas na superestrutura.

Quanto ao Local ( $dd1$ ), este representa uma possível localização de uma fábrica de reconversão, tal como o Local ( $dd2$ ). Estas localizações diferem dos destinos na medida em que não há a necessidade de existir uma fábrica de reconversão (quando se opta por esta opção de transporte) por cada destino, mantendo a possibilidade de centralizar a reconversão do hidrogénio e posterior distribuição pelos vários destinos consumidores.

Relativamente à rede de gás natural já existente, esta é integrada no planeamento da rede de hidrogénio, existindo uma solução de mistura do gás natural da rede com o hidrogénio produzido através do gasoduto de mistura.

Na Figura 3 ilustra-se algumas das variáveis deste modelo, começando pelas variáveis binárias  $y_m$  e  $y_p$  que indicam se a matéria-prima é utilizada e se a tecnologia de produção é selecionada, respetivamente; as variáveis  $y_c$ ,  $y_a$  e  $y_v$  selecionam as tecnologias de conversão, armazenamento e vaporização, respetivamente; a variável de quantidade de gás natural introduzido na rede é representada por  $x_e^{GN}$ ;  $y_e$  e  $y_{ea}$  escolhem o modo de transporte, seja ele primário ou por moléculas de transporte, respetivamente;  $y_r$  seleciona a tecnologia de reconversão e  $y_{ee}$  o modo de reenvio de hidrogénio; por fim,  $x_e^{autoconsumo}$  demonstra a quantidade transportada para os casos de autoconsumo, quando se aplica.

A superestrutura descrita é aplicada para as 14 localizações selecionadas, sendo estes consumidores e possíveis locais de produção e/ou reconversão. Assim, as possibilidades de tecnologias de produção, transformação e transporte são analisadas em todas as localizações, aumentando o modelo para além do demonstrado na Figura 3.

De salientar que, dependendo do fim a que se destina, o hidrogénio pode ser restrito a determinadas tecnologias de produção e modos de distribuição que serão posteriormente descritos.

Na Figura 4 exemplifica-se uma possível rede representada pela Figura 3, com nodos e arcos ativos representados a verde. Começa-se pela produção através da eletrólise PEM que requisita água como matéria-prima; de seguida, parte deste hidrogénio é comprimido e armazenado e outra parte é enviada para autoconsumo através de gasoduto diretamente para o

destino que apresenta a mesma localização que a origem; na fase de distribuição, mistura-se o restante hidrogénio com gás natural, enviando-se esta mistura para os consumidores finais.

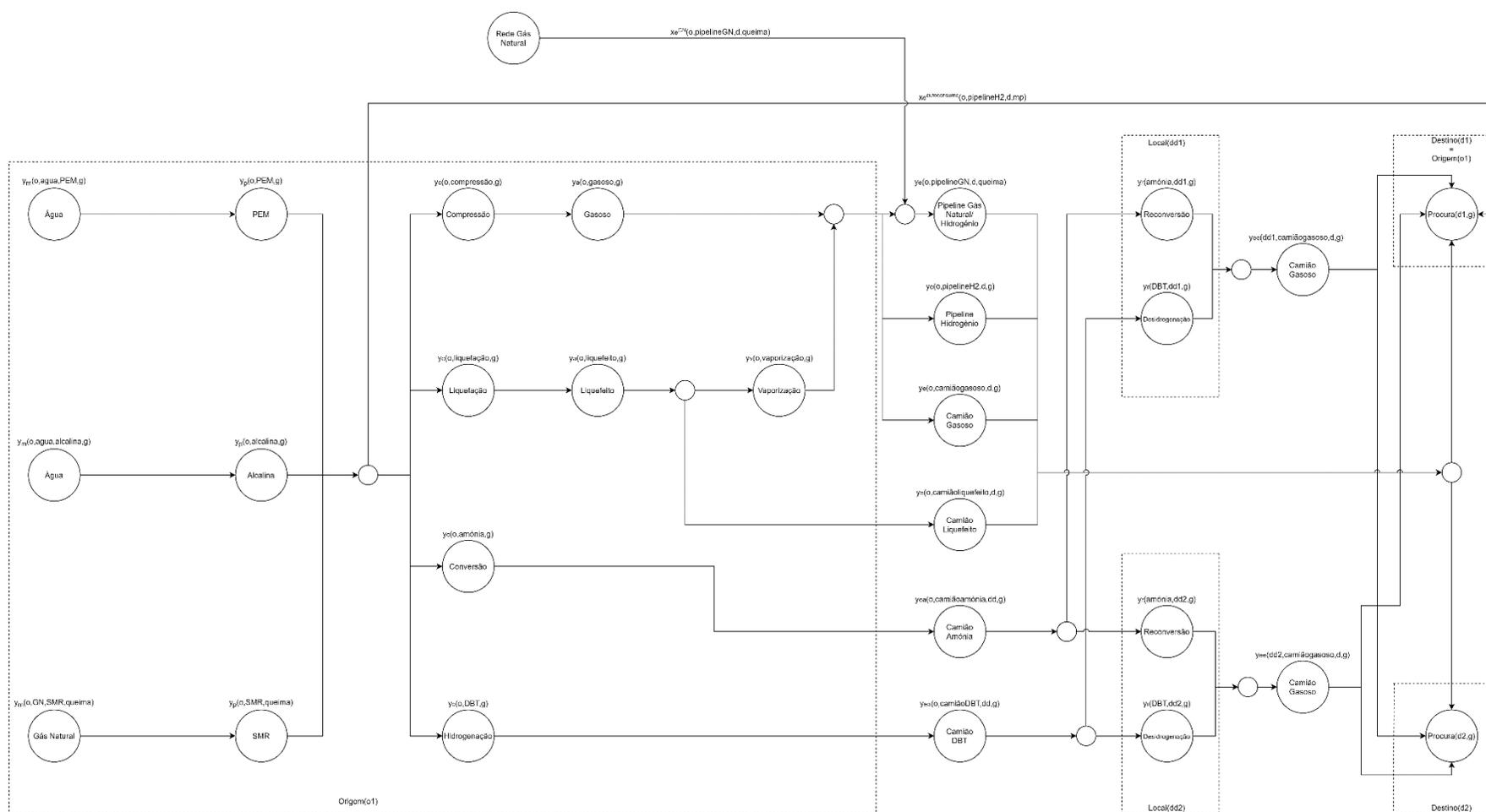


Figura 3 - Superestrutura de produção e distribuição de hidrogénio.



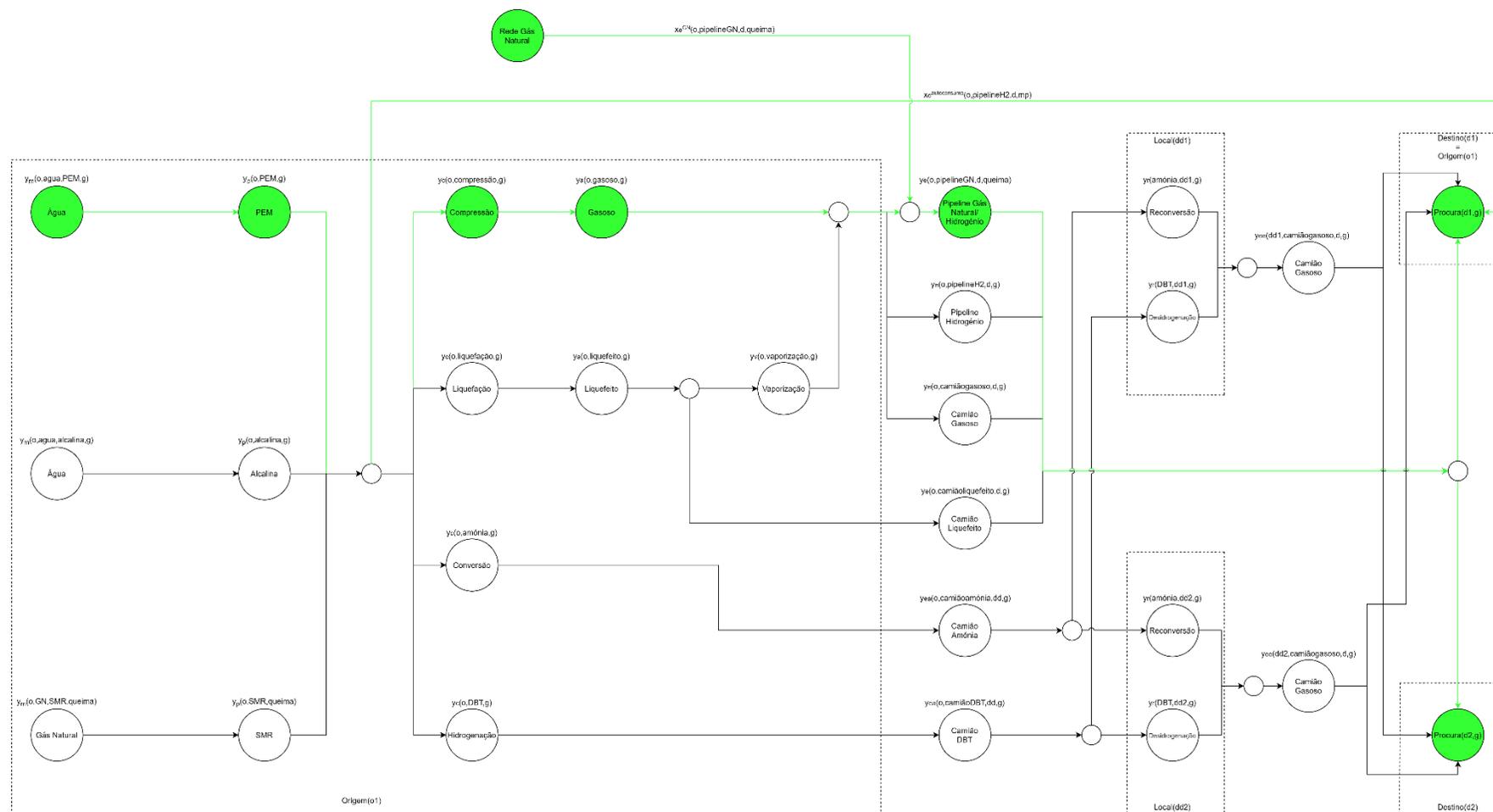


Figura 4 - Exemplo de caso possível de rede de produção e distribuição de hidrogénio.



## 4. Recolha de dados

Os dados recolhidos necessários para suportar o modelo de otimização são organizados como se segue.

Na Tabela 2 apresentam-se algumas propriedades de interesse das substâncias utilizadas ao longo da rede de distribuição.

Tabela 2 – Propriedades dos compostos utilizados.

		Fonte
Massa volúmica H <sub>2</sub> (kg/m <sup>3</sup> )	0,72	[3]
Densidade energética H <sub>2</sub> (kWh/kg <sub>H2</sub> )	33,6	[2]
Densidade energética NH <sub>3</sub> (kWh/kg <sub>NH3</sub> )	5,90	[16]
Densidade energética CH <sub>4</sub> (kWh/kg <sub>CH4</sub> )	14,9	[17]

### 4.1. Matérias-primas e eletricidade

As matérias-primas necessárias aos métodos de produção são água e gás natural. A água é utilizada nos métodos de eletrólise, apresentando assim uma composição adequada ao efeito. O gás natural apenas é utilizado no SMR. A energia elétrica utilizada é fornecida por diversas fontes, sendo assim o seu preço dependente dessas fontes. Os preços base considerados são apresentados na Tabela 3.

Tabela 3 - Preços das matérias-primas e eletricidade.

		Fonte
Preço da energia da rede em vazio (€/MWh)	28,2	[18]
Preço da energia solar (€/MWh)	Espanha, 2019 – 47 EUA, 2023 – 21	[19][20]
Preço da energia eólica (€/MWh)	Espanha, 2019 – 43 EUA, 2025 – 34	[20][21]

Preço do gás natural (€/MWh)	14	[22]
Preço da água (€/m <sup>3</sup> H <sub>2</sub> O)	0,603	[23]

## 4.2. Produção

Os métodos de produção considerados foram o SMR, a eletrólise alcalina e a eletrólise PEM. Estas escolhas remetem para a comparação do método atual de produção de hidrogénio (SMR) com os métodos de produção emergentes (eletrólise alcalina e eletrólise PEM).

O modelo contempla custos de investimento de fábricas de produção e respetivas economias de escala, custos de operação e penalizações de produções de gases poluentes. Estes dados são resumidos na Tabela 4. Algumas parcelas dos custos de operação são representadas em unidades de energia por massa (kWh/kg) que são posteriormente multiplicadas pelo preço da eletricidade utilizada.

Tabela 4 - Custos associados à produção.

			Fonte
Consumo específico de energia na produção (kWh/kg <sub>H2</sub> )	Alcalina	2017 – 52 2025 – 50	[24]
	PEM	2017 – 61 2025 - 53	
	SMR	5,43*	[25]
Consumo específico de água na produção (m <sup>3</sup> H <sub>2</sub> O/kg <sub>H2</sub> )	Alcalina	15	[24]
	PEM		
Consumo específico de gás natural na produção (m <sup>3</sup> CH <sub>4</sub> /kg <sub>H2</sub> )	SMR	3,75*	[25]
Produção de CO <sub>2</sub> no SMR (kgCO <sub>2</sub> /kg <sub>H2</sub> )		11,0592	[26]
Custo de CO <sub>2</sub> emitido (€/tonCO <sub>2</sub> )		2020 – 23 2025 – 30 2030 – 39	[27]

Custo de investimento na produção (€/kW)	Alcalina	10kW – 618 50kW – 448 100kW – 406	[28]
	PEM	10kW – 508 50kW – 347 100kW – 330	[28]
	SMR	1000 m <sup>3</sup> /h – 3600 100 000 m <sup>3</sup> /h - 450	[29]
Custo de manutenção na produção (€/kW/ano)	Alcalina	2017 – 380 2025 – 270	[24]
	PEM	2017 – 470 2025 – 250	

### 4.3. Conversão

Os métodos de condicionamento/conversão abordados baseiam-se em comprimir, liquefazer, converter em amoníaco ou incorporar o hidrogénio numa substância orgânica líquida através de hidrogenação. Para cada caso é necessário avaliar custos de investimento, custos de operação, preços de compostos orgânicos e eficiências para os métodos utilizados. Estes valores são resumidos na Tabela 5. Algumas parcelas dos custos de operação são representadas em unidades de energia por massa (kWh/kg) que são posteriormente multiplicadas pelo preço da eletricidade utilizada.

Tabela 5 - Custos associados à conversão.

		Fonte
Conversão H <sub>2</sub> em NH <sub>3</sub> a 95%	5,9323	Cálculos próprios
(kg <sub>NH3</sub> /kg <sub>H2</sub> )		
Quantidade DBT	14,9835	Cálculos próprios
(kg <sub>DBT</sub> /kg <sub>H2</sub> )		
Preço do DBT	1,61	[30]
(€/kg)		
Perda de DBT	0,013	[27]
(%/ciclo)		

Consumo específico na conversão de H <sub>2</sub>	Gasoso (kWh/kg <sub>H2</sub> )	2,4	[24]	
	Liquefeito (kWh/kg <sub>H2</sub> )	21,2	[32]	
	Amoníaco (kWh/kg <sub>H2</sub> )	32,17	[33]	
	P-DBT (kWh/kg <sub>H2</sub> )	0,1	[34]	
Custo de investimento na conversão de H <sub>2</sub>	Compressão (€/kg <sub>H2</sub> /h)	20 kg/h	24,9	[24]
		100 kg/h	14,41	
		400 kg/h	8,9925	
	Liquefação (€/kg <sub>H2</sub> /h)	1250 kg/h	56000	[35]
		12500 kg/h	44800	
	Amoníaco (€/kg <sub>NH3</sub> /h)	0,125 kg/h	7200	[36]
	Hidrogenação (€/kg <sub>H2</sub> /h)	30 kg/h	8533,33	[31] [34] [37]

#### 4.4. Armazenamento

Os custos de investimento e os custos de operação de cada forma de armazenamento são representados na Tabela 6. As parcelas dos custos de operação são representadas em unidades de energia por massa (kWh/kg) que são posteriormente multiplicadas pelo preço da eletricidade utilizada.

Tabela 6 - Custos associados ao armazenamento.

			Fonte
Consumo específico no armazenamento (kWh/kg <sub>H2</sub> )	Gasoso	1,2	[9]
	Liquefeito	6	
Custo de investimento no armazenamento (€/kg <sub>H2</sub> )	Gasoso	490	[38]
	Liquefeito	26,6	[35]

#### 4.5. Vaporização

A vaporização é uma etapa extra após o armazenamento liquefeito, sendo um nodo de união entre o condicionamento liquefeito e os transportes na forma gasosa. Este processo envolve perdas de calor para permitir a transição de estado físico do hidrogénio, não tendo custos de operação relevantes. A pressão máxima obtida no hidrogénio vaporizado é de 430 bar. O custo de investimento deste processo é descrito na Tabela 7. Os custos de operação são desprezáveis visto que é um processo de libertação de energia.

Tabela 7 - Custo associado à vaporização.

			Fonte
Custo de investimento na vaporização (€/kg <sub>H2</sub> /h)	100 kg/h	750	[35]

#### 4.6. Distribuição

Após a conversão e armazenamento do hidrogénio este é distribuído pelos locais de reconversão e de consumo. O hidrogénio é distribuído através de gasoduto adaptado para mistura de hidrogénio/gás natural, pipeline dedicado para transporte de hidrogénio puro, camião com hidrogénio gasoso, camião com hidrogénio liquefeito, camião com amoníaco e camião com molécula de transporte orgânica líquida. As formas acima descritas apresentam custos de investimento e custos de operação que são apresentados na Tabela 8. Os custos de investimento em transportes rodoviários são considerados nulos. Os custos de investimento para o caso de mistura de hidrogénio com gás natural são assumidos para diversos graus de incorporação, sendo apenas dependentes da quantidade de hidrogénio e/ou hidrogénio equivalente que se transporte, como se exemplifica no Anexo I.

Tabela 8 - Custos associados à distribuição.

			Fonte	
Custo de operação na distribuição	Pipeline H <sub>2</sub> /CH <sub>4</sub> (€/kg km))		0,00011	[39]
	Pipeline H <sub>2</sub> (€/kg km))	100 km	0,0022	[40]
		300 km	0,0019	
		500 km	0,00176	
	Camião H <sub>2</sub> gasoso (€/kg km))	100 km	0,0063	
		300 km	0,0042	
		500 km	0,00364	
	Camião H <sub>2</sub> liquefeito (€/kg km))	100 km	0,002	
		300 km	0,001	
		500 km	0,0008	
	Camião NH <sub>3</sub> (€/kg km))	100 km	0,0017	
		300 km	0,0010	
		500 km	0,00086	
	Camião P-DBT (€/kg km))	100 km	0,0025	
		300 km	0,0018	
500 km		0,00156		
Custo de investimento na distribuição	Pipeline H <sub>2</sub> /CH <sub>4</sub> (€/km kg <sub>H2</sub> )/h)	35714 kg/h	10,92	[39]
		107143 kg/h	5,04	
		386905 kg/h	2,895	
	Pipeline H <sub>2</sub> (€/km kg <sub>H2</sub> )/h)	35714 kg/h	44,52	
		139881 kg/h	18,015	
		386905 kg/h	8,84	

#### 4.7.Reconversão

Na reconversão recuperam-se as moléculas de hidrogénio utilizadas anteriormente, convertendo-se o amoníaco novamente em hidrogénio e desidrogenando a molécula orgânica transportadora. Na Tabela 9 apresentam-se estimativas dos custos de investimento nestas

unidades de reconversão, bem como os respetivos custos de operação. As parcelas dos custos de operação são representadas em unidades de energia por massa (kWh/kg) que são posteriormente multiplicadas pelo preço da eletricidade utilizada.

Tabela 9 - Custos associados à reconversão.

				Fonte
Custo de investimento na reconversão de H <sub>2</sub>	Amoníaco (€/kg <sub>NH3</sub> /h)	0,125 kg/h	7200	[36]
	Desidrogenação (€/kg <sub>H2</sub> /h)	30 kg/h	9400	[31] [34] [37]
Consumo específico na reconversão (kWh/kg <sub>H2</sub> )	Amoníaco (kWh/kg <sub>H2</sub> )		1,1424	[29]
	DBT (kWh/kg <sub>H2</sub> )		0,1	[34]



### 5. Formulação do modelo

Tendo em conta a superestrutura de produção e distribuição de hidrogénio contemplando as diversas possibilidades, o problema de determinação da rede ótima é formulado como um problema MILP (Mixed-Integer Linear Programming), onde as diferentes alternativas são equacionadas através de variáveis binárias que codificam a existência de determinados nodos da rede, e as quantidades transportadas entre nodos são variáveis contínuas positivas.

A função objetivo a minimizar é o custo nivelado da rede, em EUR por kg de hidrogénio, calculado como a média dos custos do hidrogénio à porta de todos os consumidores, levando em linha de conta todos os custos desde a produção até ao destino. O preço previsto do hidrogénio na rede otimizada será este custo nivelado mais uma margem a distribuir por todos os agentes económicos.

As restrições do problema incluem necessariamente os balanços de massa nos vários nodos da rede, feitos em estado estacionário, e de acordo com alguns pressupostos de armazenamento. Para os nodos de destino, estes balanços garantem a satisfação dos valores de procura admitidos.

De seguida, apresenta-se o modelo matemático completo, incluindo: pressupostos (secção 5.1.), conjuntos, parâmetros e variáveis (secção 5.2.), restrições do problema (apresentadas por blocos, secções 5.3. a 5.12.), e finalmente a função objetivo (secção 5.13.).

#### 5.1.Pressupostos

Neste modelo teve-se as seguintes premissas:

- Procura anual de hidrogénio fixa em cada localização, não englobando possíveis variações ao longo do ano;
- Procura de hidrogénio categorizada por objetivo, podendo ser para matéria-prima ou para combustível;
- Métodos de produção e transporte especializados para cada tipo de procura, nomeadamente apenas produção por eletrólise alcalina e PEM para procura de combustível e transporte por gasoduto de mistura de gás natural e hidrogénio exclusivo desse tipo de procura;
- Preços de matéria-prima constantes ao longo do ano;

- Preço de energia combinado, incorporando contribuições fora da rede (35% eólica e 35% solar) e dentro da rede elétrica (30%);
- Distâncias entre nodos produtores e nodos consumidores calculadas como o caminho mais curto por estrada;
- Potência instalada de produção acima do estimado, prevenindo variações na produção nos períodos de maior utilização de energia da rede;
- Custos de operação nas tecnologias de vaporização de hidrogénio desprezáveis;
- Custos de transporte para o transporte com DBT sobrestimados no dobro de forma a garantir a sua reutilização (viagem de volta).
- Perdas desprezáveis na regeneração de moléculas orgânicas, sendo substituída anualmente (compra anual de novas moléculas orgânicas).
- Armazenamento de 30 dias para o hidrogénio no estado gasoso e liquefeito;
- Armazenamento desprezável para os casos de autoconsumo de hidrogénio com o objetivo de utilização como matéria-prima;

### 5.2. Conjuntos, parâmetros e variáveis

---

#### Conjuntos

---

$m \in M$	tipos de matérias-primas
$p \in P$	tecnologias de produção de hidrogénio
$c \in C$	tecnologias de conversão de hidrogénio
$a \in A$	modos de armazenamento de hidrogénio
$v \in V$	tecnologias de vaporização de hidrogénio
$e, ee \in E$	modos de transporte de hidrogénio
$ea \in EA$	modos de transporte de moléculas transportadoras de hidrogénio
$r \in R$	tecnologias de reconversão de hidrogénio
$o, dd, d \in D$	origens, locais de reconversão, destinos
$s \in S$	escala

---

---

$g \in G$  objetivo (combustível ou matéria-prima)

$l \in L$  longitude

---

### Parâmetros

---

$CIp_{p,s}^{unit}$  custo de investimento da tecnologia de produção de hidrogénio  $p$  à escala  $s$ , €  $kW_{instalado}^{-1}$

$CIc_{c,s}^{unit}$  custo de investimento da tecnologia de conversão de hidrogénio  $c$  à escala  $s$ , €  $h \text{ kg}_{H_2}^{-1}$

$CIa_a^{unit}$  custo de investimento do modo de armazenamento de hidrogénio  $a$ , €  $h \text{ kg}_{H_2}^{-1}$

$CIv_v^{unit}$  custo de investimento da tecnologia de vaporização de hidrogénio  $v$ , €  $h \text{ kg}_{H_2}^{-1}$

$CIe_e^{unit}$  custo de investimento do modo de transporte de hidrogénio  $e$ , €  $h \text{ km}^{-1} \text{ kg}_{H_2}^{-1}$

$CIr_r^{unit}$  custo de investimento da tecnologia de reconversão de hidrogénio  $r$ , €  $h \text{ kg}_{H_2}^{-1}$

$CM_p$  custo de manutenção da tecnologia de produção de hidrogénio  $p$ , €  $\text{ano } kW_{instalado}^{-1}$

$CEMP_{m,p}$  consumo específico de matéria-prima  $m$  da tecnologia de produção de hidrogénio  $p$ ,  $\text{kg}_{mp} \text{ kg}_{H_2}^{-1}$

$CEEP_p$  consumo específico de energia da tecnologia de produção de hidrogénio  $p$ ,  $\text{kWh } \text{kg}_{H_2}^{-1}$

$CEEC_c$  consumo específico de energia da tecnologia de conversão de hidrogénio  $c$ ,  $\text{kWh } \text{kg}_{H_2}^{-1}$

$CEEA_a$  consumo específico de energia do modo de armazenamento de hidrogénio  $a$ ,  $\text{kWh } \text{kg}_{H_2}^{-1}$

$CEER_r$  consumo específico de energia na tecnologia de reconversão de hidrogénio  $r$ ,  $\text{kWh } \text{kg}_{H_2}^{-1}$

---

---

$COE_{e,l}$	custo de operação do modo de transporte de hidrogénio $e$ à longitude $l$ , € km <sup>-1</sup> kg <sub>H2</sub> <sup>-1</sup>
$COEA_{ea,l}$	custo de operação do modo de transporte de moléculas transportadoras de hidrogénio $ea$ à longitude $l$ , € km <sup>-1</sup> kg <sub>H2</sub> <sup>-1</sup>
$COEE_{ee,l}$	custo de operação do modo de transporte de hidrogénio $ee$ à longitude $l$ , € km <sup>-1</sup> kg <sub>H2</sub> <sup>-1</sup>
$Dist_{o,d,l}$	distância da origem $o$ ao destino $d$ com uma longitude $l$ , km
$Dist_{o,dd,l}$	distância da origem $o$ ao local de reconversão $dd$ com uma longitude $l$ , km
$Dist_{dd,d,l}$	distância do local de reconversão $dd$ ao destino $d$ com uma longitude $l$ , km
$Proc_{d,g}$	procura de hidrogénio no destino $d$ com o objetivo $g$ , kg <sub>H2</sub>
$Capm^{max}_m$	capacidade máxima de fornecimento de matéria-prima $m$ , kg <sub>mp</sub>
$Capp^{max}_p$	capacidade máxima da tecnologia de produção de hidrogénio $p$ , kg <sub>H2</sub>
$Capc^{max}_c$	capacidade máxima da tecnologia de conversão de hidrogénio $c$ , kg <sub>H2</sub>
$Capa^{max}_a$	capacidade máxima do modo de armazenamento de hidrogénio $a$ , kg <sub>H2</sub>
$Capv^{max}_v$	capacidade máxima da tecnologia de vaporização de hidrogénio $c$ , kg <sub>H2</sub>
$Cap_e^{max}$	capacidade máxima do modo de transporte de hidrogénio $e$ , kg <sub>H2</sub>
$Cap_{ea}^{max}$	capacidade máxima do modo de transporte de moléculas transportadoras de hidrogénio $ea$ , kg <sub>H2</sub>
$Capr^{max}_r$	capacidade máxima da tecnologia de reconversão de hidrogénio $r$ , kg <sub>H2</sub>
$Cap_{ee}^{max}$	capacidade máxima do modo de transporte de hidrogénio $ee$ , kg <sub>H2</sub>
$Capm^{min}_m$	capacidade mínima de fornecimento de matéria-prima $m$ , kg <sub>mp</sub>
$Capp^{min}_p$	capacidade mínima da tecnologia de produção de hidrogénio $p$ , kg <sub>H2</sub>
$Capc^{min}_c$	capacidade mínima da tecnologia de conversão de hidrogénio $c$ , kg <sub>H2</sub>

---

---

$Capa^{\min}_a$	capacidade mínima do modo de armazenamento de hidrogénio $a$ , $kg_{H2}$
$Capv^{\min}_v$	capacidade mínima da tecnologia de vaporização de hidrogénio $c$ , $kg_{H2}$
$Cap_e^{\min}_e$	capacidade mínima do modo de transporte de hidrogénio $e$ , $kg_{H2}$
$Cap_{ea}^{\min}_{ea}$	capacidade mínima do modo de transporte de moléculas transportadoras de hidrogénio $ea$ , $kg_{H2}$
$Capr^{\min}_r$	capacidade mínima da tecnologia de reconversão de hidrogénio $r$ , $kg_{H2}$
$Cap_{ee}^{\min}_{ee}$	capacidade mínima do modo de transporte de hidrogénio $ee$ , $kg_{H2}$
$Capps^{\max}_p$	limite máximo de capacidade da tecnologia de produção de hidrogénio $p$ para a escala considerada, $kg_{H2}$
$Capcs^{\max}_c$	limite máximo de capacidade da tecnologia de conversão de hidrogénio $c$ para a escala considerada, $kg_{H2}$
$Cap_e^{\max}_e$	limite máximo de capacidade do modo de transporte de hidrogénio $e$ para a escala considerada, $kg_{H2}$
$Capps^{\min}_p$	limite mínimo de capacidade da tecnologia de produção de hidrogénio $p$ para a escala considerada, $kg_{H2}$
$Capcs^{\min}_c$	limite mínimo de capacidade da tecnologia de conversão de hidrogénio $c$ para a escala considerada, $kg_{H2}$
$Cap_e^{\min}_e$	limite mínimo de capacidade do modo de transporte de hidrogénio $e$ para a escala considerada, $kg_{H2}$
$\rho_{CH4}$	massa volúmica do metano, $kg_{CH4} m^{-3}_{CH4}$
PE	preço da energia, $\text{€ kWh}^{-1}$
$PMP_p$	preço da matéria-prima $m$ , $\text{€ kg}_{mp}^{-1}$
$QPGP_p$	quantidade produzida de gases poluentes com a tecnologia de produção $p$ , $kg_{CO2} kg_{H2}^{-1}$

---

---

TEGP	taxa penalizadora de emissão de gases poluentes, € kgCO <sub>2</sub> <sup>-1</sup>
Dens <sub>H2</sub>	densidade energética do hidrogénio, kWh kg <sub>H2</sub> <sup>-1</sup>
Dens <sub>CH4</sub>	densidade energética do metano, kWh kg <sub>CH4</sub> <sup>-1</sup>
Dens <sub>NH3</sub>	densidade energética do amoníaco, kWh kg <sub>NH3</sub> <sup>-1</sup>
$\alpha$	tempo de recuperação do capital investido, anos
$\beta$	tempo de trabalho na rede, h
$\gamma$	tempo de armazenamento, h
$\theta$	fator de excesso na potência instalada

---

**Variáveis contínuas**


---

$x_{o,m,p,g}^{mp}$	quantidade de matéria-prima $m$ necessária na tecnologia de produção $p$ instalada na origem $o$ com o objetivo $g$ , kg <sub>H2</sub>
$x_{o,p,g}^{prod}$	quantidade de hidrogénio produzido através da tecnologia de produção $p$ instalada na origem $o$ com o objetivo $g$ , kg <sub>H2</sub>
$x_{o,c,g}^{conv}$	quantidade de hidrogénio convertido através da tecnologia de conversão $c$ instalada na origem $o$ com o objetivo $g$ , kg <sub>H2</sub>
$x_{o,a,g}^{arm}$	quantidade de hidrogénio armazenado através do modo de armazenamento $a$ instalada na origem $o$ com o objetivo $g$ , kg <sub>H2</sub>
$x_{o,v,g}^{vap}$	quantidade de hidrogénio vaporizado através da tecnologia de vaporização $v$ instalada na origem $o$ com o objetivo $g$ , kg <sub>H2</sub>
$x_{o,e,d,g}^{env}$	quantidade de hidrogénio/gás natural transportado da origem $o$ para o destino $d$ através do modo de transporte de hidrogénio $e$ com o objetivo $g$ , kg <sub>H2</sub>
$x_{o,ea,dd,g}^{env\ alt}$	quantidade de hidrogénio equivalente transportado da origem $o$ para o local de reconversão $dd$ através do modo de transporte de moléculas transportadoras de hidrogénio $ea$ com o objetivo $g$ , kg <sub>H2</sub>

---

---

$x_{r,dd,g}^{rec}$	quantidade de hidrogénio reconvertido no local de reconversão $dd$ através da tecnologia de reconversão $r$ com o objetivo $g$ , $kg_{H2}$
$x_{dd,ee,d,g}^{reenv}$	quantidade de hidrogénio transportado do local de reconversão $dd$ para o destino $d$ através do modo de transporte de hidrogénio $ee$ com o objetivo $g$ , $kg_{H2}$
$x_{o,e,d,g}^{GN}$	quantidade de gás natural transportado da origem $o$ para o destino $d$ através do modo de transporte $e$ com o objetivo $g$ , $kg_{CH4}$
$x_{o,e,d,g}^{H2}$	quantidade de hidrogénio transportado da origem $o$ para o destino $d$ através do modo de transporte $e$ com o objetivo $g$ , $kg_{H2}$
$Custo^{nivel}_{H2}$	custo nivelado de hidrogénio, $\text{€ } kg_{H2}^{-1}$

---

**Variáveis binárias**

---

$y_{o,m,p,g}^{mp}$	1 se a matéria-prima $m$ é necessária na tecnologia de produção $p$ instalada na origem $o$ com o objetivo $g$ , 0 se o contrário
$y_{o,p,g}^{prod}$	1 se o hidrogénio é produzido através da tecnologia de produção $p$ instalada na origem $o$ com o objetivo $g$ , 0 se o contrário
$y_{o,c,g}^{conv}$	1 se o hidrogénio é convertido através da tecnologia de conversão $c$ instalada na origem $o$ com o objetivo $g$ , 0 se o contrário
$y_{o,a,g}^{arm}$	1 se o hidrogénio é armazenado através do modo de armazenamento $a$ instalada na origem $o$ com o objetivo $g$ , 0 se o contrário
$y_{o,v,g}^{vap}$	1 se o hidrogénio é vaporizado através da tecnologia de vaporização $v$ instalada na origem $o$ com o objetivo $g$ , 0 se o contrário
$y_{o,e,d,g}^{env}$	1 se o hidrogénio/gás natural é transportado da origem $o$ para o destino $d$ através do modo de transporte de hidrogénio $e$ com o objetivo $g$ , 0 se o contrário
$y_{o,ea,dd,g}^{env\ alt}$	1 se o hidrogénio equivalente é transportado da origem $o$ para o local de reconversão $dd$ através do modo de transporte de moléculas transportadoras de hidrogénio $ea$ com o objetivo $g$ , 0 se o contrário

---

---

$y_{r,dd,g}^{rec}$	1 se o hidrogénio é reconvertido no local de reconversão $dd$ através da tecnologia de reconversão $r$ com o objetivo $g$ , 0 se o contrário
$y_{dd,ee,d,g}^{reenv}$	1 se o hidrogénio é transportado do local de reconversão $dd$ para o destino $d$ através do modo de transporte de hidrogénio $ee$ com o objetivo $g$ , 0 se o contrário

---

### 5.3. Transporte de hidrogénio

A procura em cada destino  $d$  com o objetivo  $g$  ( $Proc_{d,g}$ ) é um parâmetro definido à partida, sendo necessário suprir esta procura através de locais de produção de hidrogénio em origens  $o$  complementados com gás natural proveniente da rede de distribuição.

A procura em cada destino  $d$  com o objetivo  $g$  ( $Proc_{d,g}$ ) é suprida por hidrogénio/gás natural que chega ao destino vindo das várias origens e usando vários modos de transporte ( $x_{o,e,d,g}^{env}$ ), e também pelo hidrogénio proveniente dos locais de reconversão ( $x_{dd,ee,d,g}^{reenv}$ ):

$$\sum_{o,e} x_{o,e,d,g}^{env} + \sum_{dd,ee} x_{dd,ee,d,g}^{reenv} = Proc_{d,g} \quad (3)$$

No caso do transporte por pipeline-mistura (com mistura de hidrogénio com gás natural) e para  $g = combustível$ , a quantidade  $x^{env}$  inclui hidrogénio e gás natural:

$$x_{o,d}^{env} = x_{o,d}^{H2} + x_{o,d}^{GN} \times \frac{Dens_{CH4}}{Dens_{H2}} \quad (4)$$

Nos restantes modos de transporte, a quantidade transportada ( $x_{o,e,d,g}^{env}$ ) é igual à quantidade transportada de hidrogénio ( $x_{o,e,d,g}^{H2}$ ):

$$x_{o,e,d,g}^{env} = x_{o,e,d,g}^{H2} \quad (5)$$

De forma a transportar o hidrogénio é necessário garantir uma infraestrutura, sendo assim necessário contabilizar os custos de investimento. Esta infraestrutura é partilhada, sendo utilizada para o transporte de qualquer objetivo  $g$  nos modos de transporte de pipeline-mistura e pipeline de hidrogénio. Os custos de investimento são dependentes do custo unitário de investimento ( $CI_e^{unit}$ ), da distância da origem ao destino ( $Dist_{o,d,l}$ ), da quantidade transportada no envio ( $x_{o,e,d,g}^{env}$ ), do tempo de trabalho na rede ( $\beta$ ) e do tempo de recuperação do capital investido ( $\alpha$ ):

$$CI_{o,e,d}^{env} = \frac{CI_e^{unit} \times \sum_l Dist_{o,d,l} \times \frac{\sum_g x_{o,e,d,g}^{env}}{\beta}}{\alpha} \quad (6)$$

Contabilizados os custos de investimento na infraestrutura, é necessário definir os custos de operação no transporte. Estes custos são dependentes das distâncias da origem ao destino e do local de reconversão ao destino ( $Dist_{o,d,l}$  e  $Dist_{dd,d,l}$ ) e dos custos de operação unitários do envio e do reenvio ( $COe_{e,l}^{unit}$  e  $COee_{ee,l}^{unit}$ ):

$$CO_{o,e,d,l}^{env} = COe_{e,l}^{unit} \times Dist_{o,d,l} \quad (7)$$

$$CO_{dd,ee,d,l}^{reenv} = COee_{ee,l}^{unit} \times Dist_{dd,d,l} \quad (8)$$

#### 5.4.Reconversão de hidrogénio

No caso da reconversão, o hidrogénio reconvertido através das tecnologias de reconversão  $r$  será enviado desde os locais de reconversão até aos destinos através dos métodos de envio de hidrogénio  $ee$  disponíveis, sendo assim a quantidade reconvertida ( $x_{r,dd,g}^{rec}$ ) igual à quantidade transportada ( $x_{dd,ee,d,g}^{reenv}$ ):

$$\sum_r x_{r,dd,g}^{rec} = \sum_{ee,d} x_{dd,ee,d,g}^{reenv} \quad (9)$$

A infraestrutura de reconversão de hidrogénio será partilhada nos objetivos  $g$ , sendo os custos de investimento associados às tecnologias de reconversão  $r$  e aos locais de reconversão  $dd$ . Estes custos de investimento são dependentes do custo unitário de investimento ( $CIr_r^{unit}$ ), da quantidade de hidrogénio reconvertida ( $x_{r,dd,g}^{rec}$ ), do tempo de trabalho na rede ( $\beta$ ) e do tempo de recuperação do capital investido ( $\alpha$ ):

$$CI_{dd,r}^{rec} = \frac{CIr_r^{unit} \times \sum_g x_{r,dd,g}^{rec}}{\alpha \beta} \quad (10)$$

Os custos de operação na reconversão são dependentes do preço da energia (PE) e do consumo específico de energia nas tecnologias de reconversão ( $CEER_r$ ):

$$CO_r^{rec} = CEER_r \times PE \quad (11)$$

#### 5.5.Transporte de moléculas portadoras de hidrogénio

O transporte de moléculas transportadoras de hidrogénio é o modo de transporte que conecta as moléculas produzidas na origem  $o$  com os locais de reconversão  $dd$ , sendo a quantidade de hidrogénio equivalente transportada pelo modo de transporte  $ea$  ( $x_{o,ea,dd,g}^{env\ alt}$ ) igual à quantidade de hidrogénio reconvertido através da tecnologia de reconversão  $r$  ( $x_{r,dd,g}^{rec}$ ). A molécula transportada deve coincidir com o tipo de tecnologia de reconversão, inviabilizando certas combinações entre  $ea$  e  $r$ :

$$\sum_{o,ea} x_{o,ea,dd,g}^{env\ alt} = \sum_r x_{r,dd,g}^{rec} \quad (12)$$

O transporte de moléculas transportadoras de hidrogénio inclui custos de operação, estando estes dependentes da distância da origem  $o$  até ao local de reconversão  $dd$  ( $Dist_{o,dd,l}$ ) e do custo de operação unitário no envio alternativo ( $COea^{unit}_{ea,l}$ ):

$$CO_{o,ea,dd,l}^{env\ alt} = COea_{ea,l}^{unit} \times Dist_{o,dd,l} \quad (13)$$

### 5.6. Vaporização de hidrogénio

As tecnologias de vaporização de hidrogénio  $v$  entram como nodos de ligação entre o armazenamento de hidrogénio liquefeito e o seu transporte no estado gasoso. Assim, a quantidade de hidrogénio vaporizado ( $x_{o,v,g}^{vap}$ ) será dependente da quantidade de hidrogénio armazenado no estado liquefeito ( $x_{o,g}^{arm}$  com  $a = liquefeito$ ) e da quantidade de hidrogénio transportado através de camião no estado liquefeito ( $x_{o,d,g}^{env}$  com  $e = camião\ liquefeito$ ):

$$\sum_v x_{o,v,g}^{vap} = x_{o,g}^{arm} - \sum_d x_{o,d,g}^{env} \quad (14)$$

Este passo do modelo apenas necessita de uma infraestrutura onde possa ocorrer a mudança de estado do hidrogénio, sendo apenas associado a custos de investimento. Esta infraestrutura é partilhada, sendo utilizada para a vaporização de hidrogénio com qualquer objetivo  $g$ . Estes custos de investimento são dependentes do custo unitário de investimento ( $CIv^{unit}_v$ ), da quantidade de hidrogénio vaporizada ( $x_{o,v,g}^{vap}$ ), do tempo de trabalho na rede ( $\beta$ ) e do tempo de recuperação do capital investido ( $\alpha$ ):

$$CI_{o,v}^{vap} = \frac{CIv_v^{unit} \times \sum_g x_{o,v,g}^{vap}}{\alpha} \quad (15)$$

### 5.7. Armazenamento de hidrogénio

Os modos de armazenamento  $a$  são os nodos responsáveis por acumular hidrogénio, prevenindo possíveis falhas de fornecimento da rede de distribuição provocadas por variações na procura. A quantidade de hidrogénio armazenado é igual à quantidade de hidrogénio transportado pelos modos de transporte  $e$ , podendo passar pelas tecnologias de vaporização  $v$ . O armazenamento gasoso ( $x_{o,g}^{arm}$  com  $a = gasoso$ ) é equivalente à quantidade de hidrogénio enviado para  $e = pipeline\ mistura$ ,  $e = pipeline\ de\ hidrogénio$  e  $e = camião\ gasoso$  subtraída à quantidade de hidrogénio vaporizado ( $x_{o,v,g}^{vap}$ ):

$$x_{o,g}^{arm} = \sum_d x_{o,d,g}^{env} - \sum_v x_{o,v,g}^{vap} \quad (16)$$

O armazenamento liquefeito já foi anteriormente definido na Equação 14.

Os custos de investimento nos modos de armazenamento de hidrogénio são influenciados pelo tempo que o hidrogénio é armazenado, bem como pela quantidade de hidrogénio armazenado. Estes custos de investimento são dependentes do custo unitário de investimento ( $CI_a^{unit}$ ), da quantidade de hidrogénio armazenada ( $x_{o,a,g}^{arm}$ ), do tempo de armazenamento ( $\gamma$ ) e do tempo de recuperação do capital investido ( $\alpha$ ):

$$CI_{o,a}^{arm} = \frac{CI_a^{unit} \times \sum_g x_{o,a,g}^{arm}}{\gamma} \quad (17)$$

Relativamente aos custos de operação, estes são essencialmente consumos específicos de energia ( $CEEA_a$ ), visando a manutenção das condições de armazenagem:

$$CO_a^{arm} = CEEA_a \times PE \quad (18)$$

### 5.8. Conversão de hidrogénio

Nas tecnologias de conversão de hidrogénio  $c$  realizam-se alterações físicas e/ou químicas no hidrogénio produzido a montante. A quantidade de hidrogénio convertido ( $x_{o,c,g}^{conv}$ ) é igual à quantidade que prossegue para etapas a jusante, nomeadamente o armazenamento ( $x_{o,a,g}^{arm}$ ) e o envio alternativo ( $x_{o,ea,dd,g}^{env alt}$ ):

$$\sum_c x_{o,c,g}^{conv} = \sum_a x_{o,a,g}^{arm} + \sum_{ea,dd} x_{o,ea,dd,g}^{env alt} \quad (19)$$

Esta etapa apresenta custos de investimento nas instalações de conversão, sendo estas partilhadas para cada objetivo  $g$ . Estes custos de investimento são dependentes do custo unitário de investimento ( $CI_c^{unit}$ ), da quantidade de hidrogénio convertida ( $x_{o,c,g}^{conv}$ ), do tempo de trabalho na rede ( $\beta$ ) e do tempo de recuperação do capital investido ( $\alpha$ ):

$$CI_{o,c}^{conv} = \frac{CI_c^{unit} \times \sum_g x_{o,c,g}^{conv}}{\beta} \quad (20)$$

O processo de conversão de hidrogénio apresenta custos de operação, sendo estes essencialmente consumos específicos de energia ( $CEEC_c$ ). Para as tecnologias de conversão, excetuando a hidrogenação do DBT, traduz-se na seguinte equação:

$$CO_c^{conv} = CEEC_c \times PE \quad (21)$$

No caso da hidrogenação do DBT ( $c = DBT$ ), acrescenta-se uma parcela de compra do composto orgânico:

$$CO^{conv} = CEEC \times PE + PDBT \times Conv^{DBT} \quad (22)$$

### 5.9. Produção de hidrogénio

As tecnologias de produção de hidrogénio  $p$  são responsáveis pelo hidrogénio existente na rede. A quantidade de hidrogénio produzida ( $x_{o,p,g}^{prod}$ ) é igual à quantidade de hidrogénio convertida ( $x_{o,c,g}^{conv}$ ). Para o objetivo de matéria-prima ( $g = matéria-prima$ ), utilizam-se todas as tecnologias de produção; para o objetivo de combustível ( $g = combustível$ ) descarta-se a produção por  $SMR$  ( $p \neq SMR$ ):

$$\sum_p x_{o,p,g}^{prod} = \sum_c x_{o,c,g}^{conv} \quad (23)$$

De forma a garantir a quantidade de hidrogénio necessária, define-se a potência instalada da tecnologia de produção  $p$  na origem  $o$  ( $Pot_{o,p}^{inst}$ ) pela seguinte equação, sendo dependente do fator de excesso ( $\theta$ ), da quantidade de hidrogénio produzida ( $x_{o,p,g}^{prod}$ ), da densidade energética do hidrogénio ( $Dens_{H2}$ ) e do tempo de trabalho da rede ( $\beta$ ):

$$Pot_{o,p}^{inst} = \sum_g \frac{\theta \times x_{o,p,g}^{prod} \times Dens_{H2}}{\beta} \quad (24)$$

As unidades de produção de hidrogénio são influenciadas pela quantidade de hidrogénio produzido. Estas infraestruturas são partilhadas, independentemente do objetivo  $g$ . Estes custos de investimento são dependentes do custo unitário de investimento ( $CIp_p^{unit}$ ), do fator de excesso ( $\theta$ ), da quantidade de hidrogénio produzida ( $x_{o,p,g}^{prod}$ ), da densidade energética do hidrogénio ( $Dens_{H2}$ ), do tempo de trabalho na rede ( $\beta$ ), da potência instalada ( $Pot_{o,p}^{inst}$ ), do custo de manutenção ( $CM_p$ ) e do tempo de recuperação do capital investido ( $\alpha$ ):

$$CI_{o,p}^{prod} = \sum_g \frac{CIp_p^{unit} \times \frac{\theta \times x_{o,p,g}^{prod} \times Dens_{H2}}{\beta}}{\alpha} + Pot_{o,p}^{inst} \times CM_p \quad (25)$$

De salientar que o custo de investimento foi sobrestimado com o dobro da potência, visto que se considerou uma produção a 50% quando o fornecimento de eletricidade era garantido pela rede (8 horas por dia), sendo refletido no fator de excesso.

A produção de hidrogénio associa-se a custos de operação, sendo estes consumos específicos de energia ( $CEEP_p$ ) e penalizações pela emissão de gases poluentes, nomeadamente

a quantidade produzida de gases poluentes (QPGP<sub>p</sub>) e a taxa de emissão de gases poluentes (TEPG):

$$CO_p^{prod} = CEEP_p \times PE + QPGP_p \times TEGP \quad (26)$$

### 5.10. Compra de matérias-primas

As matérias-primas surgem como fonte de alimentação das tecnologias de produção, sendo assim a quantidade de matéria-prima  $m$  ( $x_{o,m,p,g}^{mp}$ ) relacionada com a quantidade de hidrogénio produzida ( $x_{o,p,g}^{prod}$ ) através do consumo específico de matéria-prima (CEMP<sub>m,p</sub>):

$$x_{o,m,p,g}^{mp} = \frac{x_{o,p,g}^{prod}}{CEMP_{m,p}} \quad (27)$$

Esta etapa apenas apresenta custos de operação, derivados do preço da matéria-prima (PMP<sub>m</sub>):

$$CO_{m,p}^{mp} = PMP_m \times CEMP_{m,p} \quad (28)$$

### 5.11. Restrições Big-M e Low-L

As restrições do tipo Big-M fazem a ligação entre as variáveis contínuas e as variáveis binárias. Por exemplo, na Equação 29 a quantidade enviada ( $x_{o,e,d,g}^{env}$ ) deve respeitar a capacidade máxima do modo de transporte ( $Cap_e^{max}$ ), podendo ser um valor igual ou inferior a essa capacidade quando  $y_{o,e,d,g}^{env}$  se ativa ou igual a zero quando esta variável binária não se ativa.

$$x_{o,e,d,g}^{env} \leq y_{o,e,d,g}^{env} \times Cap_e^{max} \quad (29)$$

As outras restrições do mesmo tipo são:

$$x_{dd,ee,d,g}^{reenv} \leq y_{dd,ee,d,g}^{reenv} \times Cap_{ee}^{max} \quad (30)$$

$$x_{r,dd,g}^{rec} \leq y_{r,dd,g}^{rec} \times Cap_r^{max} \quad (31)$$

$$x_{o,ea,dd,g}^{env\ alt} \leq y_{o,ea,dd,g}^{env\ alt} \times Cap_{ea}^{max} \quad (32)$$

$$x_{o,v,g}^{vap} \leq y_{o,v,g}^{vap} \times Cap_v^{max} \quad (33)$$

$$x_{o,a,g}^{arm} \leq y_{o,a,g}^{arm} \times Cap_a^{max} \quad (34)$$

$$x_{o,c,g}^{conv} \leq y_{o,c,g}^{conv} \times Cap_c^{max} \quad (35)$$

$$x_{o,p,g}^{prod} \leq y_{o,p,g}^{prod} \times Cap_p^{max} \quad (36)$$

$$x_{o,m,p,g}^{mp} \leq y_{o,m,p,g}^{mp} \times Cap_m^{max} \quad (37)$$

Relativamente às restrições Low-L, estas permitem igualmente uma ligação entre variáveis contínuas e variáveis binárias. Neste caso, como se demonstra na Equação 38, a quantidade enviada ( $x_{o,e,d,g}^{env}$ ) deve ser igual ou superior a uma capacidade mínima do modo de transporte ( $Cap_e^{min}$ ), podendo ser um valor superior ou igual a essa capacidade quando  $y_{o,e,d,g}^{env}$  se ativa ou superior ou igual a zero quando esta variável binária não se ativa.

$$x_{o,e,d,g}^{env} \geq y_{o,e,d,g}^{env} \times Cap_e^{min} \quad (38)$$

As outras restrições do mesmo tipo são:

$$x_{dd,ee,d,g}^{reenv} \geq y_{dd,ee,d,g}^{reenv} \times Cap_{ee}^{min} \quad (39)$$

$$x_{r,dd,g}^{rec} \geq y_{r,dd,g}^{rec} \times Cap_r^{min} \quad (40)$$

$$x_{o,ea,dd,g}^{env\ alt} \geq y_{o,ea,dd,g}^{env\ alt} \times Cap_{ea}^{min} \quad (41)$$

$$x_{o,v,g}^{vap} \geq y_{o,v,g}^{vap} \times Cap_v^{min} \quad (42)$$

$$x_{o,a,g}^{arm} \geq y_{o,a,g}^{arm} \times Cap_a^{min} \quad (43)$$

$$x_{o,c,g}^{conv} \geq y_{o,c,g}^{conv} \times Cap_c^{min} \quad (44)$$

$$x_{o,p,g}^{prod} \geq y_{o,p,g}^{prod} \times Cap_p^{min} \quad (45)$$

$$x_{o,m,p,g}^{mp} \geq y_{o,m,p,g}^{mp} \times Cap_m^{min} \quad (46)$$

## 5.12. Modelo linear de economias de escala

A economia de escala traduz-se numa evolução não-linear dos custos de investimento das unidades instaladas por unidade de capacidade. Esta função não-linear pode ser aproximada por uma função por ramos, com um valor constante diferente para cada ramo (função por escalões). Por exemplo, o custo de investimento unitário de produção ( $CI_p^{unit}$ ) é variável com a dimensão da unidade instalada, tornando-se economicamente mais interessante com o aumento da capacidade de produção. A evolução destes custos de investimento é tipicamente não-linear como se representa na Figura 5.

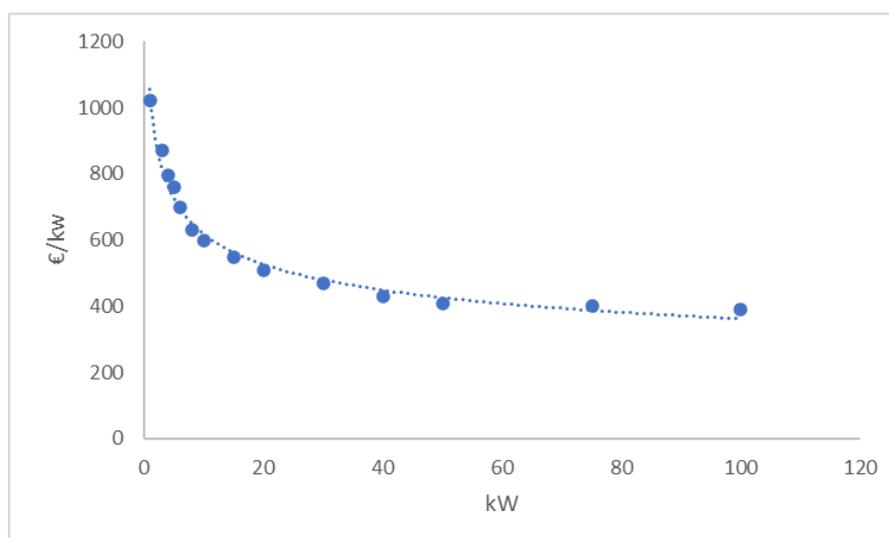


Figura 5 - Evolução do custo de investimento unitário de produção com a potência instalada.

Esta função não-linear pode ser aproximada a várias funções lineares, como se representa na Figura 6, formando uma função por ramos com valor fixo de custo de investimento para cada escalão.

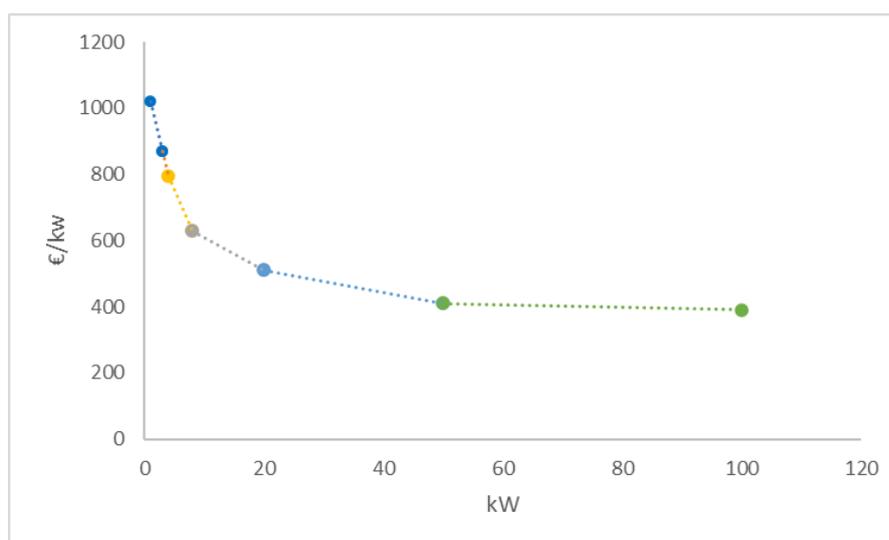


Figura 6 - Aproximação da economia de escala através de uma função por escalões lineares.

Esta técnica baseia-se na soma das quantidades produzidas em cada escala que determina a quantidade total produzida:

$$x_{o,p,g}^{prod} = x_{o,p,g}^{prod,e1} + x_{o,p,g}^{prod,e2} + x_{o,p,g}^{prod,e3} \quad (47)$$

Sendo que existem variáveis binárias associadas a cada escala e que para uma determinada instalação apenas se pode basear numa das economias de escala:

$$y_{o,p,g}^{prod,e1} + y_{o,p,g}^{prod,e2} + y_{o,p,g}^{prod,e3} = 1 \quad (48)$$

Estas quantidades produzidas são restringidas pelas capacidades de produção ( $Capps_p^{max,e}$ ) em cada escala, fazendo-se uso das variáveis binárias para ativar ou desativar cada escalão:

$$0 \leq x_{o,p,g}^{prod,e1} \leq y_{o,p,g}^{prod,e1} \times Capps_p^{max,e1} \quad (49)$$

$$y_{o,p,g}^{prod,e2} \times Capps_p^{max,e1} \leq x_{o,p,g}^{prod,e2} \leq y_{o,p,g}^{prod,e2} \times Capps_p^{max,e2} \quad (50)$$

$$y_{o,p,g}^{prod,e3} \times Capps_p^{max,e2} \leq x_{o,p,g}^{prod,e3} \leq y_{o,p,g}^{prod,e3} \times Capps_p^{max,e3} \quad (51)$$

Por fim, estas quantidades produzidas em cada escala são multiplicadas pelo custo de investimento unitário de cada escalão ( $CIp_p^{unit,e}$ ), formando o custo de investimento de produção ( $CIp_p^{prod}$ ) sem a parcela do custo de manutenção:

$$CIp_p^{prod} = \sum_g \frac{\theta \times Dens_{H2}}{\beta} \times \frac{(CIp_p^{unit,e1} \times x_{o,p,g}^{prod,e1} + CIp_p^{unit,e2} \times x_{o,p,g}^{prod,e2} + CIp_p^{unit,e3} \times x_{o,p,g}^{prod,e3})}{\alpha} \quad (52)$$

Esta metodologia é abordada nas tecnologias de produção, nas tecnologias de compressão, nomeadamente a compressão e liquefação, e no modo de transporte por gasoduto com mistura e gasoduto de hidrogénio [41].

### 5.13. Função objetivo

O objetivo do modelo é minimizar o custo nivelado de hidrogénio, sendo somados os custos de investimento, custos de operação da rede, bem como os preços de matérias-primas e de gás natural. A anualização dos custos de investimento é descrita nas respetivas equações acima demonstradas, existindo diferenciação entre tecnologias com os tempos médios de vida característicos de cada uma. Estes custos são divididos pela procura de forma a obter um custo unitário de hidrogénio/hidrogénio equivalente (€/kg). De seguida demonstra-se parte da função-objetivo, bem como a sequência de construção da mesma:

$$Custo_{H2}^{nivel} = \frac{\sum_{o,m,p,g} x_{o,m,p,g}^{mp} \times CO_{m,p}^{mp} + \sum_{o,p,g} CIp_p^{prod} + x_{o,p,g}^{prod} \times CO_p^{prod} + \dots}{\sum_{d,g} Proc_{d,g}} \quad (53)$$

## 6. Exemplo de solução

O modelo apresentado no capítulo anterior foi aplicado a 14 localizações (14 origens e 14 destinos), com base na procura ilustrada na Tabela 1 e Figura 2, segundo o Cenário A representado na Tabela 11, do qual apenas se tiram conclusões no capítulo seguinte. Neste exemplo considerou-se todas as opções em todas as etapas da rede de consumo, com restrições desde a Equação (3) à (52), resultando nas dimensões descritas na Tabela 10.

Tabela 10 – Dimensões, tempo de computação e tolerância relativa do exemplo analisado.

Nº de restrições	11916
Nº de variáveis contínuas	6106
Nº de variáveis binárias	5838
Tempo de computação (s)	0,266
Tolerância relativa (%) <sup>1</sup>	0,1

<sup>1</sup> Na convergência do algoritmo do tipo Branch & Bound

Na Figura 7 demonstra-se as variáveis  $x^{prod}$  e  $x^{arm}$  já otimizadas e com os valores de cada quantidade produzida e armazenada, respetivamente.

---- VAR xp				----- VAR xa					
	LOWER	LEVEL	UPPER	MARGINAL		LOWER	LEVEL	UPPER	MARGINAL
Sines .alcalina.queima	.	.	+INF	0.0004	Sines .gasoso .queima	.	.	.	+INF
Sines .alcalina.mp	.	86304.0000	+INF	.	Sines .gasoso .mp	.	.	.	+INF
Sines .PEM .queima	.	.	+INF	7.5014472E-5	Sines .liquefeito.queima	.	.	.	+INF
Sines .PEM .mp	.	.	+INF	.	Estarreja .gasoso .queima	.	35764.1042	.	+INF
Sines .SNR .queima	.	.	+INF	.	Estarreja .gasoso .mp	.	.	.	+INF
Sines .SNR .mp	.	.	+INF	.	Estarreja .liquefeito.queima	.	.	.	+INF
Estarreja .alcalina.queima	.	35764.1042	+INF	.	Estarreja .liquefeito.mp	.	.	.	+INF
Estarreja .alcalina.mp	.	12885.2142	+INF	.	FigueiraDaFoz .gasoso .queima	.	259776.7625	.	+INF
Estarreja .PEM .queima	.	.	+INF	.	FigueiraDaFoz .gasoso .mp	.	.	.	+INF
Estarreja .PEM .mp	.	.	+INF	.	FigueiraDaFoz .liquefeito.queima	.	.	.	+INF
Estarreja .SNR .queima	.	.	+INF	.	FigueiraDaFoz .liquefeito.mp	.	.	.	+INF
Estarreja .SNR .mp	.	.	+INF	.	Matosinhos .gasoso .queima	.	89341.0562	.	+INF
FigueiraDaFoz .alcalina.queima	.	259776.7625	+INF	.	Matosinhos .gasoso .mp	.	.	.	+INF
FigueiraDaFoz .alcalina.mp	.	.	+INF	0.0004	Matosinhos .liquefeito.queima	.	.	.	+INF
FigueiraDaFoz .PEM .queima	.	.	+INF	.	Matosinhos .liquefeito.mp	.	.	.	+INF
FigueiraDaFoz .PEM .mp	.	.	+INF	7.5014472E-5	MarinhaGrande .gasoso .queima	.	41802.2517	.	+INF
FigueiraDaFoz .SNR .queima	.	.	+INF	.	MarinhaGrande .gasoso .mp	.	.	.	+INF
FigueiraDaFoz .SNR .mp	.	.	+INF	0.0004	MarinhaGrande .liquefeito.queima	.	.	.	+INF
Matosinhos .alcalina.queima	.	89341.0562	+INF	.	MarinhaGrande .liquefeito.mp	.	.	.	+INF
Matosinhos .alcalina.mp	.	.	+INF	0.0004	Setubal .gasoso .queima	.	44944.1042	.	+INF
Matosinhos .PEM .queima	.	.	+INF	.	Setubal .gasoso .mp	.	.	.	+INF
Matosinhos .PEM .mp	.	.	+INF	7.5014472E-5	Setubal .liquefeito.queima	.	.	.	+INF
Matosinhos .SNR .queima	.	.	+INF	.	Setubal .liquefeito.mp	.	.	.	+INF
Matosinhos .SNR .mp	.	.	+INF	0.0004	VianaDoCastelo .gasoso .queima	.	46828.6250	.	+INF
MarinhaGrande .alcalina.queima	.	41802.2517	+INF	.	VianaDoCastelo .gasoso .mp	.	.	.	+INF
MarinhaGrande .alcalina.mp	.	.	+INF	0.0004	VianaDoCastelo .liquefeito.queima	.	.	.	+INF
MarinhaGrande .PEM .queima	.	.	+INF	.	VianaDoCastelo .liquefeito.mp	.	.	.	+INF
MarinhaGrande .PEM .mp	.	.	+INF	7.5014472E-5	Abrantes .gasoso .queima	.	140713.0370	.	+INF
MarinhaGrande .SNR .queima	.	.	+INF	.	Abrantes .gasoso .mp	.	.	.	+INF
MarinhaGrande .SNR .mp	.	.	+INF	0.0004	Abrantes .liquefeito.queima	.	.	.	+INF
					Abrantes .liquefeito.mp	.	.	.	+INF
					Alenquer .gasoso .queima	.	183698.6060	.	+INF
					Alenquer .gasoso .mp	.	.	.	+INF
					Alenquer .liquefeito.queima	.	.	.	+INF
					Alenquer .liquefeito.mp	.	.	.	+INF
					Gondomar .gasoso .queima	.	212844.9220	.	+INF
					Gondomar .gasoso .mp	.	.	.	+INF
					Gondomar .liquefeito.queima	.	.	.	+INF
					Gondomar .liquefeito.mp	.	.	.	+INF

Figura 7 - Resultados das variáveis otimizadas  $x^{prod}$  (esquerda) e  $x^{arm}$  (direita.)

O problema MILP foi resolvido por um computador com Intel® Core™ i7-3517U, 1.9 GHz, com o solver CPLEX 20.1 através da plataforma de modelação GAMS com a versão 35.1.0. O problema aqui resolvido assemelha-se aos que serão discutidos no capítulo seguinte em termos de dimensões e tempo de computação, garantindo na sua solução a otimalidade global.



## 7. Discussão de resultados

### 7.1. Incorporação de hidrogénio na rede de consumo

O objetivo deste estudo consiste na modelação e otimização da futura rede de hidrogénio em Portugal, desde o local de produção de hidrogénio até ao consumidor final. Assim, e tendo em conta que esta rede se foca no consumo industrial, teremos de descrever cenários que contemplem a transição energética necessária para implementar uma economia de hidrogénio em Portugal.

Estes cenários apresentam-se na Tabela 11, estando os objetivos para cada ano alinhados com a atual Estratégia Nacional para o Hidrogénio. Os casos apresentam uma incorporação gradual de hidrogénio na rede, permitindo a coexistência do gás natural e do hidrogénio.

Tabela 11 - Objetivos de incorporação de hidrogénio na rede de consumo.

Cenários	Ano	Mistura (%(V/V) de H <sub>2</sub> )	Preços/custos atualizados
A	2025	1-5	Não
B			Sim
C	2030	10-15	Não
D			Sim
E	2040	40-50	Não
F			Sim
G	2050	75-80	Não
H			Sim

Nos Cenários A e B, o consumo industrial continua a ser predominantemente fornecido por gás natural, sendo este o principal influenciador dos custos da rede e do preço à porta do consumidor. Quanto ao hidrogénio incorporado, este é produzido em pequena quantidade, não permitindo a instalação de unidades que permitam o efeito da economia de escala. Este fator influencia a quantidade e localização das unidades de produção, promovendo, nestes cenários, a instalação de mais unidades de produção e em localizações distintas.

Na Figura 8 encontra-se o diagrama de fluxo da rede de consumo do Cenário A onde se demonstra, além do já referido anteriormente, unidades de produção em Sines e Estarreja de maiores dimensões, sendo estas destinada ao consumo de matéria-prima no próprio local. Comparativamente ao Cenário B, os diagramas de fluxo apenas mudam o método de produção

escolhido: no Cenário A a produção de hidrogénio verde é feita através de eletrólise alcalina enquanto que no Cenário B essa mesma produção é concretizada por eletrólise PEM. Esta variação deve-se à atualização dos custos de investimento de produção (diminuição de 38% na alcalina e 36% na PEM), dos consumos de energia na produção (diminuição de 4% na alcalina e 15% na PEM) e dos custos de substituição de membranas (diminuição de 40% na alcalina e de 88% na PEM) que, com a maturação tecnológica ao longo dos anos, favorecem a eletrólise PEM.

Relativamente à localização das unidades de produção, a otimização sugere a instalação de 10 unidades de produção no país de forma a suprir a procura com as restrições impostas. A Figura 9 demonstra as trocas de hidrogénio entre nodos produtores e nodos consumidores adjacentes e a Tabela 12 resume todas as trocas de hidrogénio e o fim a que se destina cada troca.

Tabela 12 - Fluxos de troca entre origens e destinos nos Cenários A e B.

Destino \ Origem	Sines	Estarreja	Figueira da Foz	Matosinhos	Marinha Grande	Setúbal	Viana do Castelo	Abrantes	Alenquer	Gondomar	Covilhã	Vila Velha de Rodão	Portalegre	Guimarães
Sines	86304 <sup>2</sup>													
Estarreja		12885 <sup>2</sup>												
Figueira da Foz			258776 <sup>1</sup>											
Matosinhos				89341 <sup>1</sup>										
Marinha Grande		33041 <sup>1</sup>			41802 <sup>1</sup>									
Setúbal						44944 <sup>1</sup>			29899 <sup>1</sup>					
Viana do Castelo							46828 <sup>1</sup>							28014 <sup>1</sup>
Abrantes								140713 <sup>1</sup>			1735 <sup>1</sup>	11746 <sup>1</sup>	2782 <sup>1</sup>	
Alenquer									123789 <sup>1</sup>					
Gondomar										212844 <sup>1</sup>				7165 <sup>1</sup>
Covilhã														
Vila Velha de Rodão														
Portalegre														
Guimarães														

<sup>1</sup> - Fluxo de consumo para combustível

<sup>2</sup> - Fluxo de consumo para matéria-prima

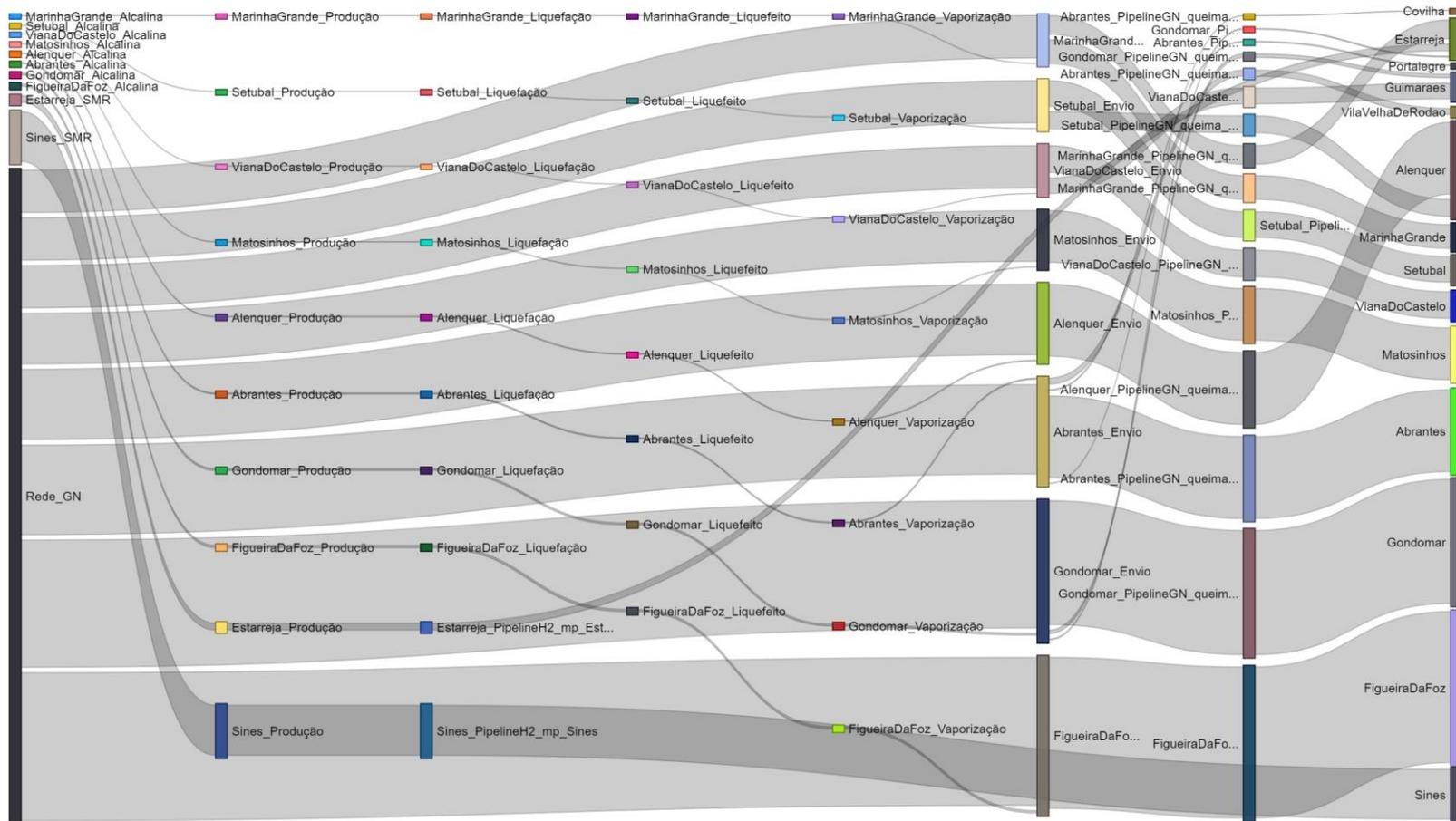


Figura 8 - Diagrama de fluxo do Cenário A



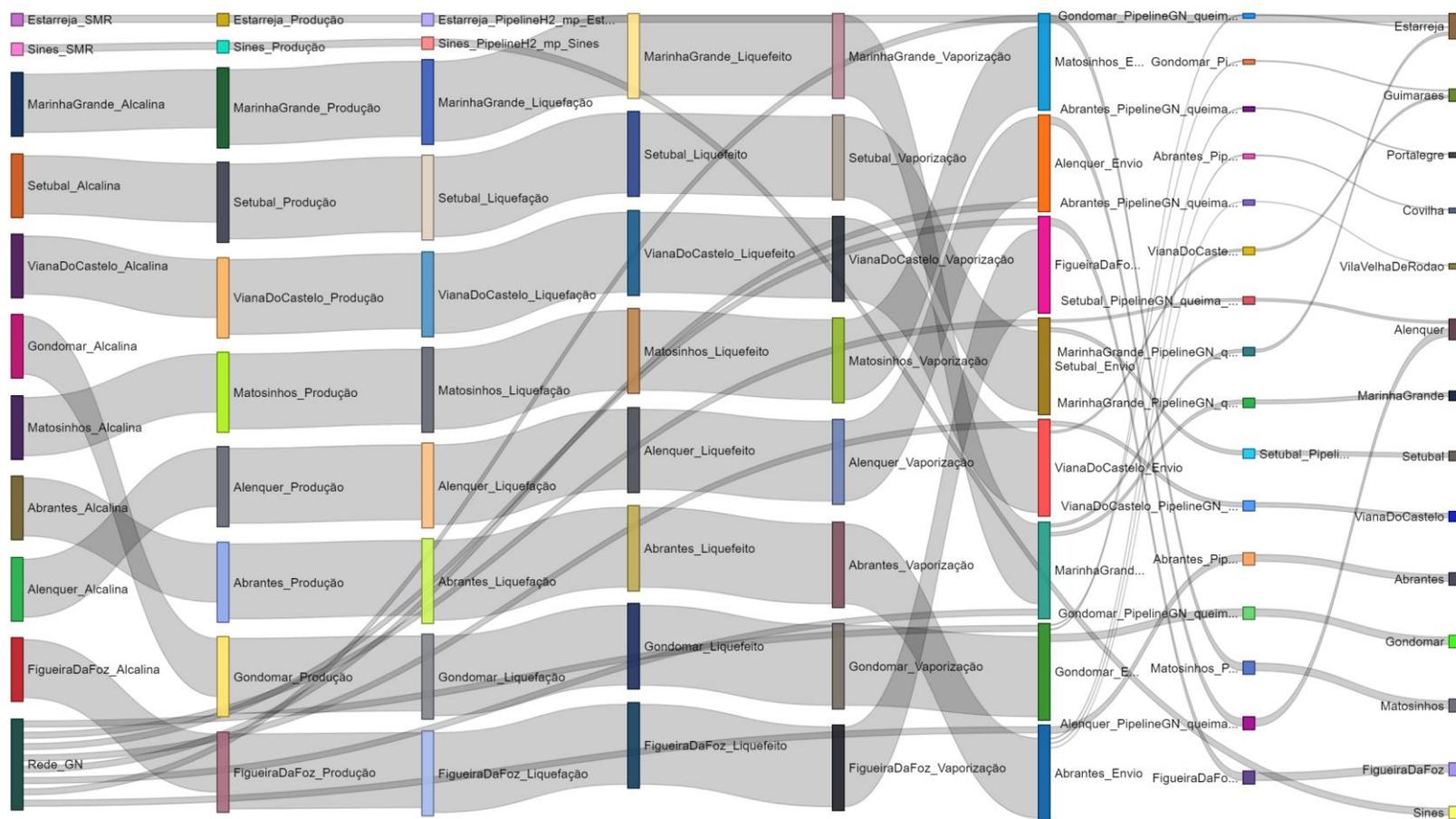


Figura 10 - Custo final do produto à porta do consumidor no Cenário A.

No Cenário C e D existe uma mudança na restrição da quantidade de hidrogénio presente na mistura gás natural/hidrogénio transportada através de gasoduto. Avaliando estas alterações de intervalos, verificou-se uma modificação, permitindo uma maior incorporação de hidrogénio, como se pode verificar na Figura 11 onde se demonstra o diagrama de fluxo do Cenário C. Analogamente, o Cenário D apresenta os mesmos fluxos de hidrogénio que o Cenário C, alterando apenas as tecnologias de produção escolhidas para a produção de hidrogénio como combustível, tal como nos cenários anteriormente analisados.

O aumento da quantidade de hidrogénio permitido na mistura provoca um aumento na sua produção. Consequentemente, este aumento de produção é promovido pelo aumento da capacidade das unidades de produção e/ou um aumento do número de unidades de produção. Nos Cenários C e D a otimização indicou um aumento da capacidade das unidades de produção, distribuindo igualmente a produção de hidrogénio por 10 unidades dispersas pelo país. As localizações selecionadas são equivalentes para o Cenário C e D, sendo ilustradas na Figura 12 as permutas de hidrogénio entre localizações adjacentes e resumidas na Tabela 13 todas as trocas de hidrogénio e o fim a que se destina cada troca.

Tabela 13 - Fluxos de troca entre origens e destinos nos Cenários C e D.

Destino \ Origem	Sines	Estarreja	Figueira da Foz	Matosinhos	Marinha Grande	Setúbal	Viana do Castelo	Abrantes	Alenquer	Gondomar	Covilhã	Vila Velha de Rodão	Portalegre	Guimarães
Sines	86304 <sup>2</sup>													
Estarreja		35764 <sup>1</sup> /12885 <sup>2</sup>								18686 <sup>1</sup>				
Figueira da Foz			258776 <sup>1</sup>											
Matosinhos				89341 <sup>1</sup>										
Marinha Grande					41802 <sup>1</sup>						1735 <sup>1</sup>	8130 <sup>1</sup>	2782 <sup>1</sup>	
Setúbal						44944 <sup>1</sup>			9506 <sup>1</sup>					
Viana do Castelo							46828 <sup>1</sup>							7621 <sup>1</sup>
Abrantes								140713 <sup>1</sup>				3615 <sup>1</sup>		
Alenquer									144182 <sup>1</sup>					
Gondomar										194158 <sup>1</sup>				27557 <sup>1</sup>
Covilhã														
Vila Velha de Rodão														
Portalegre														
Guimarães														

<sup>1</sup> - Fluxo de consumo para combustível

<sup>2</sup> - Fluxo de consumo para matéria-prima

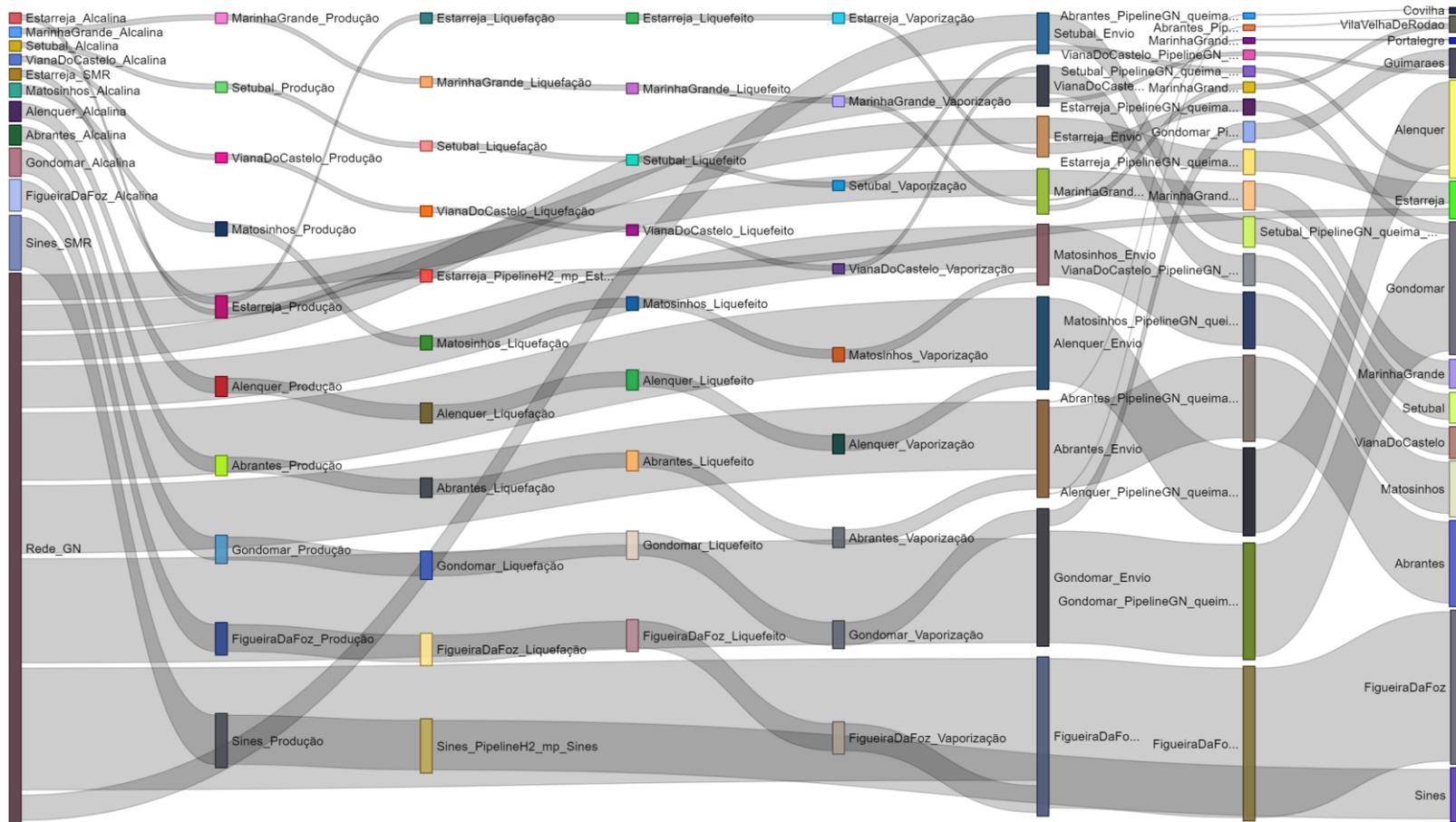


Figura 11 - Diagrama de fluxo do Cenário C.

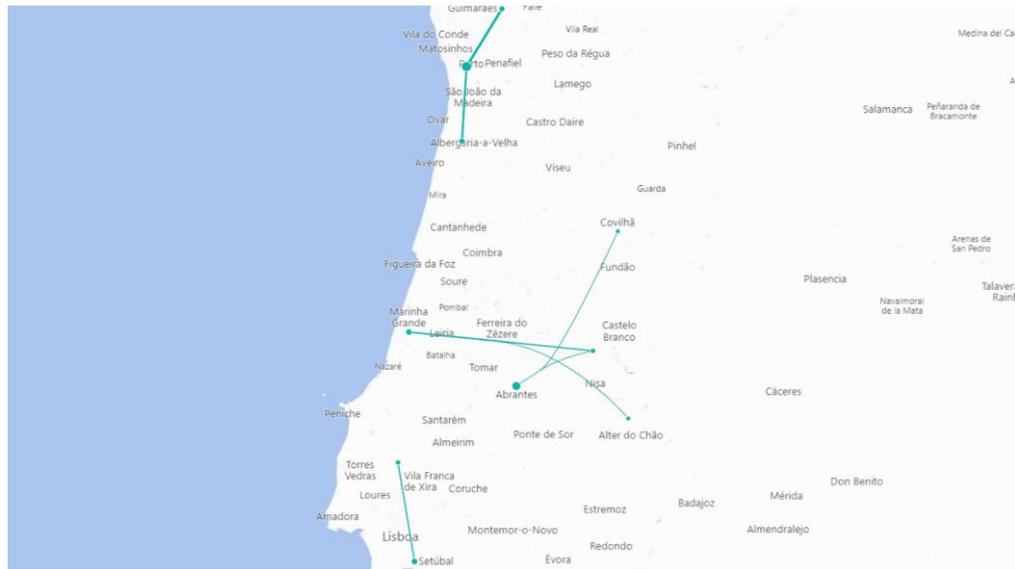


Figura 12 - Interações entre nodos adjacentes nos Cenários C e D.

Nestes cenários, comparativamente aos anteriores, existe um aumento do custo final à porta do consumidor devido à maior incorporação de hidrogénio no consumo final. Este aumento de custo final reflete um maior investimento em infraestruturas que, apesar de mais elevado em valores totais, apresenta um menor custo específico por unidade de hidrogénio produzido devido ao efeito da economia de escala. O custo final à porta do consumidor difere em cada consumidor, sendo essa diferença provocada pelos custos de produção em cada unidade de produção, que diferem dependendo das capacidades de produção de cada unidade. Por outro lado, uma pequena parte dessa diferença deriva dos diferentes custos de transporte entre localidades, variando entre 2,333 e 35,765 €/kg para o transporte mais curto e mais longo, respetivamente. Na Figura 13 ilustra-se o custo final à porta do consumidor do Cenário C.

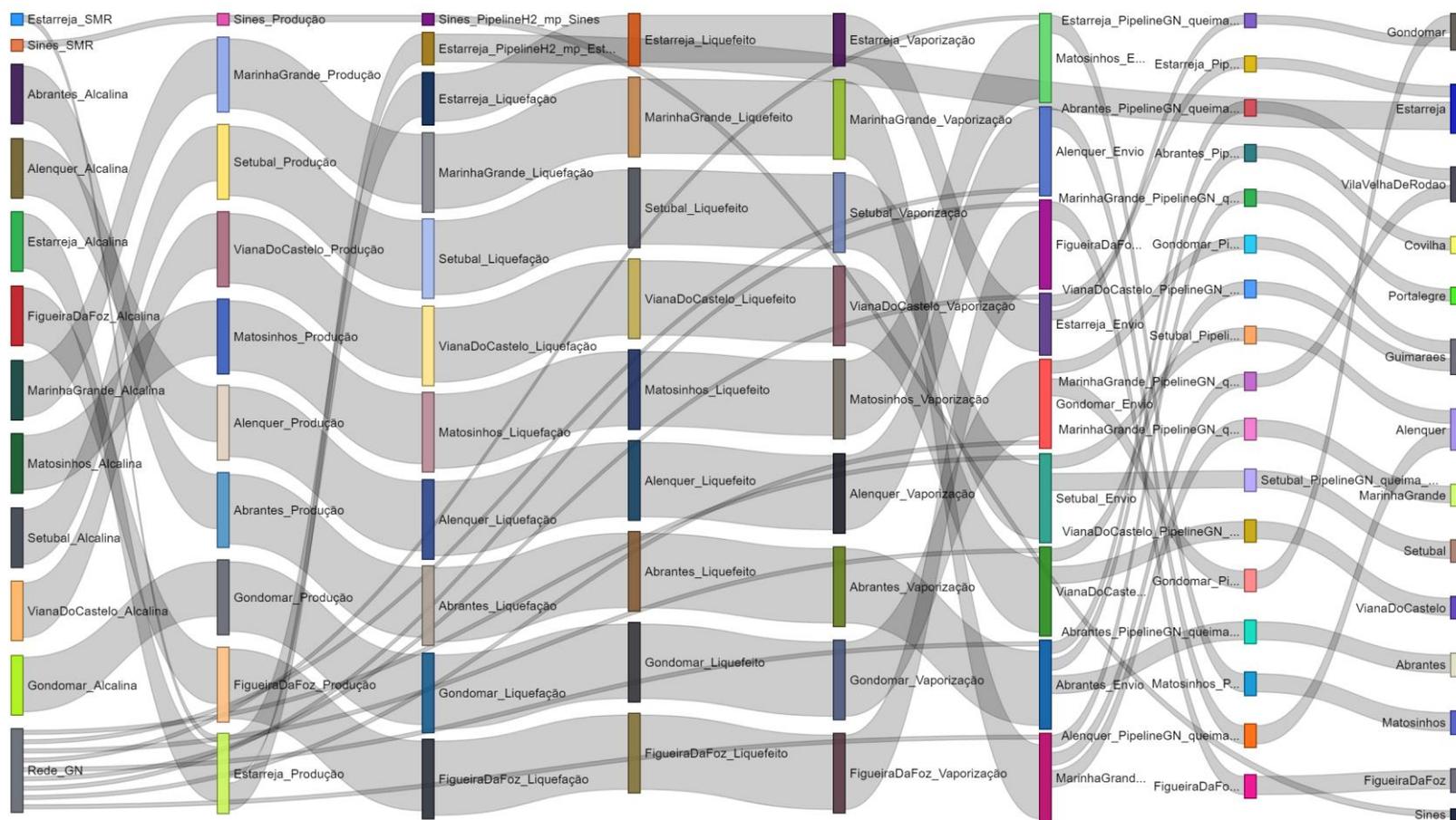


Figura 13 - Custo final do produto à porta do consumidor no Cenário C.

Nos Cenários E e F, à semelhança do Cenários C e D, existe uma alteração no intervalo de mistura, permitindo uma otimização da rede de consumo com maior incorporação de hidrogénio. Relativamente às tecnologias utilizadas, sugere-se a produção de hidrogénio por SMR para utilização como matéria-prima e a produção de hidrogénio verde por eletrólise alcalina nos cenários não atualizados e por eletrólise PEM para os cenários utilizados, tendo este hidrogénio como fim a utilização como combustível. A jusante optou-se pela liquefação, armazenamento e a sua vaporização. Por fim, o hidrogénio é transportado via *pipeline* com mistura de hidrogénio com gás natural. Todas estas opções são demonstradas na Figura 14 onde se encontra o diagrama de fluxos do Cenário E.

No que toca à distribuição e capacidade das unidades de produção, a otimização sugere um aumento do número de unidades de produção, promovendo a descentralização da produção. Este fenómeno explica-se pela quantidade elevada de hidrogénio produzido que encontra um custo mínimo de produção nas várias unidades devido à ausência de uma economia de escala mais abrangente. Com isto apenas se verifica o efeito da economia de escala nos estágios iniciais de aumento de capacidade de produção instalada, estabilizando o custo de produção após atingir o último limite desta economia. As localizações selecionadas são equivalentes para o Cenário E e F, sendo ilustradas na Figura 15 as permutas de hidrogénio entre localizações adjacentes e resumidas na Tabela 14 todas as trocas de hidrogénio e o fim a que se destina cada troca.

Tabela 14 - Fluxos de troca entre origens e destinos nos Cenários E e F.

Destino \ Origem	Sines	Estarreja	Figueira da Foz	Matosinhos	Marinha Grande	Setúbal	Viana do Castelo	Abrantes	Alenquer	Gondomar	Covilhã	Vila Velha de Rodão	Portalegre	Guimarães
Sines	86304 <sup>2</sup>													
Estarreja		35764 <sup>1</sup> /12885 <sup>2</sup>												
Figueira da Foz			258776 <sup>1</sup>											
Matosinhos				89341 <sup>1</sup>										
Marinha Grande					41802 <sup>1</sup>									
Setúbal						44944 <sup>1</sup>								
Viana do Castelo							46828 <sup>1</sup>							
Abrantes								139568 <sup>1</sup>						
Alenquer									153688 <sup>1</sup>					
Gondomar										212844 <sup>1</sup>				
Covilhã														
Vila Velha de Rodão								1144 <sup>1</sup>						
Portalegre											1735 <sup>1</sup>	11746 <sup>1</sup>	2782 <sup>1</sup>	
Guimarães														35179 <sup>1</sup>

<sup>1</sup> - Fluxo de consumo para combustível

<sup>2</sup> - Fluxo de consumo para matéria-prima

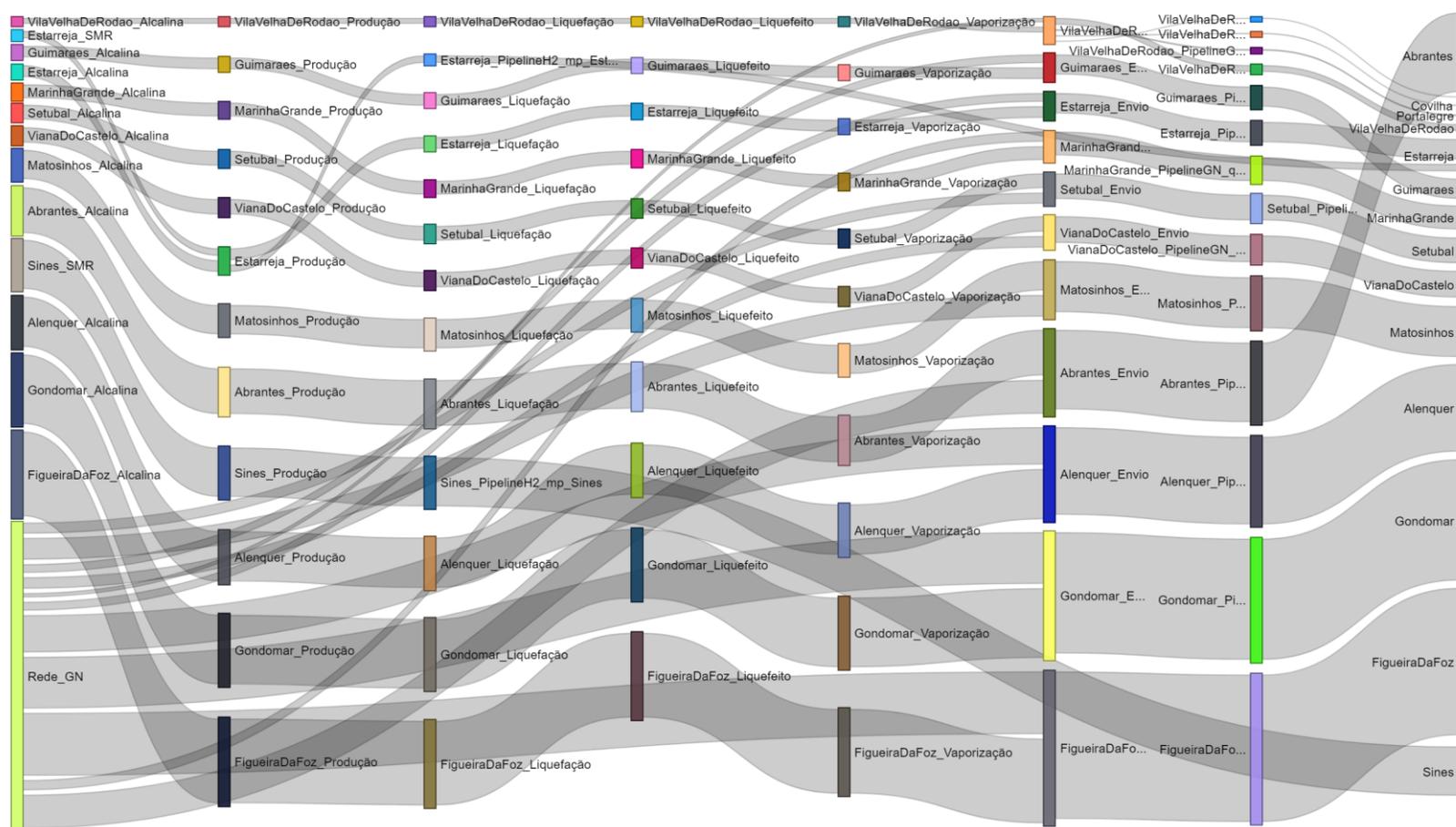


Figura 14 - Diagrama de fluxo do Cenário E.



*Figura 15 - Interações entre nodos adjacentes nos Cenários E e F.*

Nestes cenários ocorreu novamente um aumento do custo final à porta do consumidor, explicado pelo aumento da incorporação de hidrogénio, como já referido anteriormente. Além da maior incorporação, existe igualmente a diferença de capacidades instaladas nas diferentes unidades de produção que promove diferentes custos finais em cada consumidor. Este custo representa-se na Figura 16.

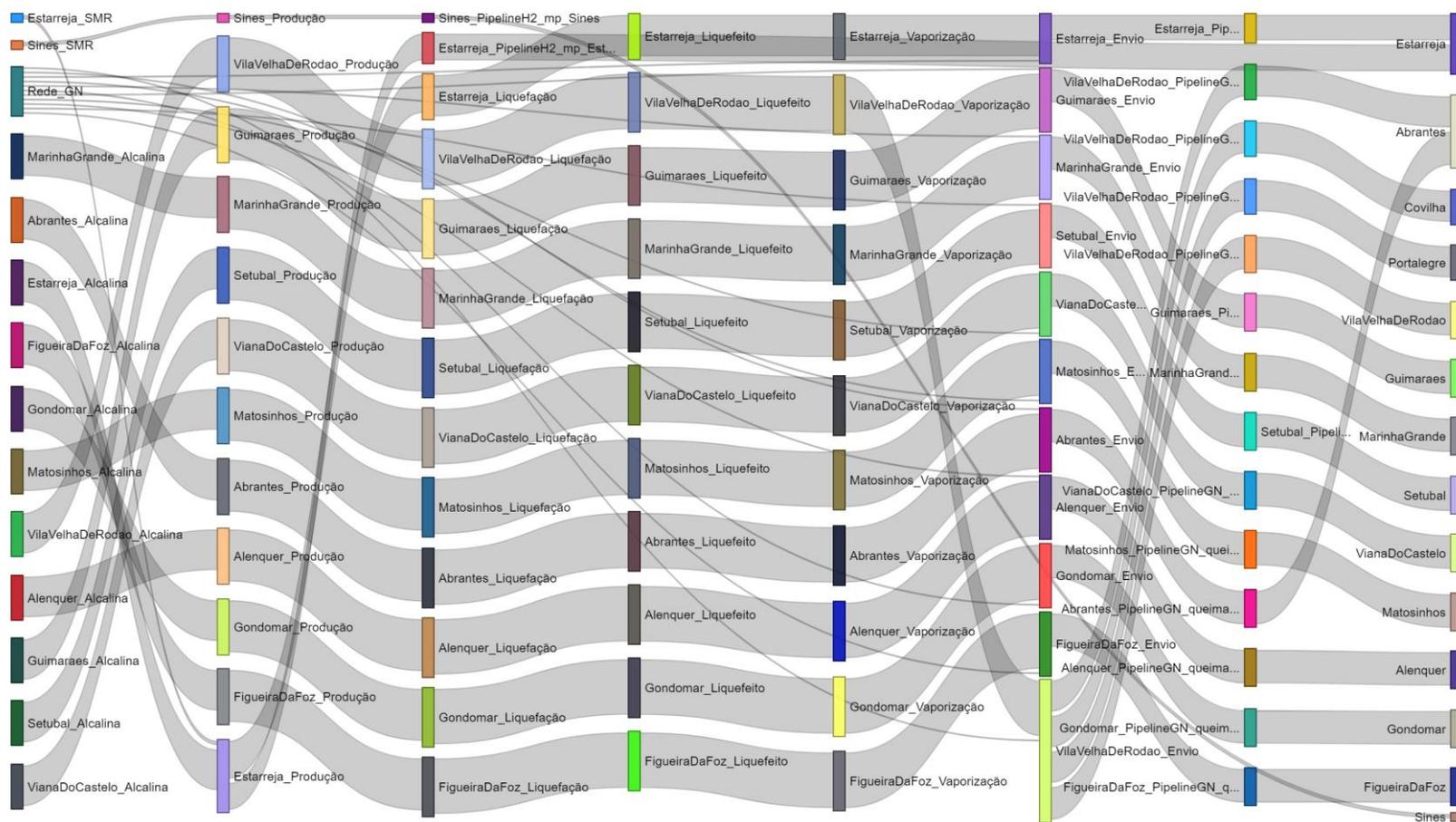


Figura 16 - Custo final do produto à porta do consumidor no Cenário E

Nos Cenários G e H, à semelhança dos anteriores, existe um aumento da incorporação de hidrogénio na rede de consumo. A otimização do modelo demonstrou que o método de envio preferencial é de mistura de gás natural/hidrogénio por *pipeline*. Esta escolha, aliada à pouca centralização dos nodos produtores, reflete a otimização dos custos de investimento de envio (considerados inexistentes no caso de autoconsumo) e dos custos de operação de envio (inferiores para *pipeline*). Quanto às tecnologias a montante, a liquefação foi sempre a escolhida, seguida do armazenamento e vaporização. Esta escolha reflete os elevados custos de armazenamento gasoso, promovendo a escolha de um caminho alternativo que, neste caso, foi liquefazer o hidrogénio, armazena-lo de forma mais económica e posteriormente vaporiza-lo. Os métodos alternativos de envio, bem como locais de reconversão não foram eleitos, visto que o custo de investimento num maior número de estruturas e acréscimo de custos de operação nestas unidades não contrabalança com a redução nos custos operacionais de envio. Estas opções encontram-se no diagrama de fluxo do Cenário G representado na Figura 17. Comparativamente ao Cenário H, apenas difere a tecnologia de produção de hidrogénio verde para combustível, à semelhança dos cenários anteriores.

Quanto às unidades de produção de hidrogénio, estas seguem a tendência descrita nos Cenários E e F, mantendo o mesmo número de unidades e aumentando a sua capacidade de produção. As localizações selecionadas são equivalentes para o Cenário G e H, ilustrando-se na Figura 18 as permutas de hidrogénio entre localizações adjacentes e resumidas na Tabela 15 todas as trocas de hidrogénio e o fim a que se destina cada troca.

Tabela 15 - Fluxos de troca entre origens e destinos no Cenários G e H.

Destino \ Origem	Sines	Estarreja	Figueira da Foz	Matosinhos	Marinha Grande	Setúbal	Viana do Castelo	Abrantes	Alenquer	Gondomar	Covilhã	Vila Velha de Rodão	Portalegre	Guimarães
Sines	86304 <sup>2</sup>													
Estarreja		35764 <sup>1</sup> /12885 <sup>2</sup>												
Figueira da Foz			258776 <sup>1</sup>											
Matosinhos				89341 <sup>1</sup>										
Marinha Grande					41802 <sup>1</sup>									
Setúbal						44944 <sup>1</sup>								
Viana do Castelo							46828 <sup>1</sup>							
Abrantes								140713 <sup>1</sup>						
Alenquer									153688 <sup>1</sup>					
Gondomar										212844 <sup>1</sup>				
Covilhã														
Vila Velha de Rodão											1735 <sup>1</sup>	11746 <sup>1</sup>	2782 <sup>1</sup>	
Portalegre														
Guimarães														35179 <sup>1</sup>

<sup>1</sup> - Fluxo de consumo para combustível

<sup>2</sup> - Fluxo de consumo para matéria-prima

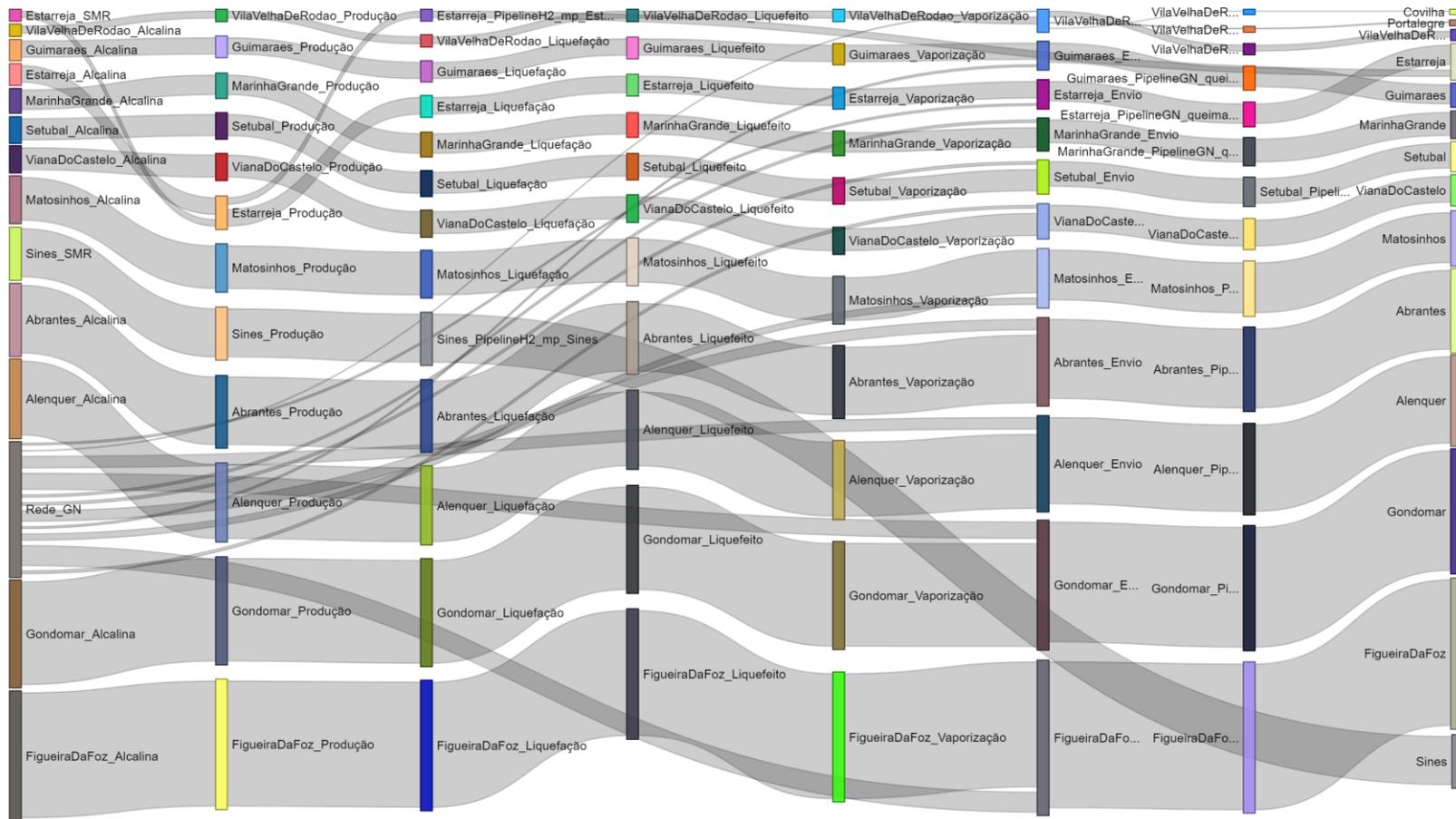


Figura 17 - Diagrama de fluxo do Cenário G.



Figura 18 - Interações entre nodos adjacentes nos Cenários G e H.

Por fim, nos Cenários G e H ocorre novamente um aumento do custo final à porta do consumidor, explicado pelo aumento da incorporação de hidrogénio e consequentemente do aumento das capacidades de produção nas unidades instaladas, à semelhança de cenários anteriores. De referir que a troca de hidrogénio entre nodos adjacentes apenas ocorre para dois consumidores de pequena escala, justificando-se nesse caso em particular a centralização da produção. O custo final à porta de cada consumidor é representado na Figura 19.

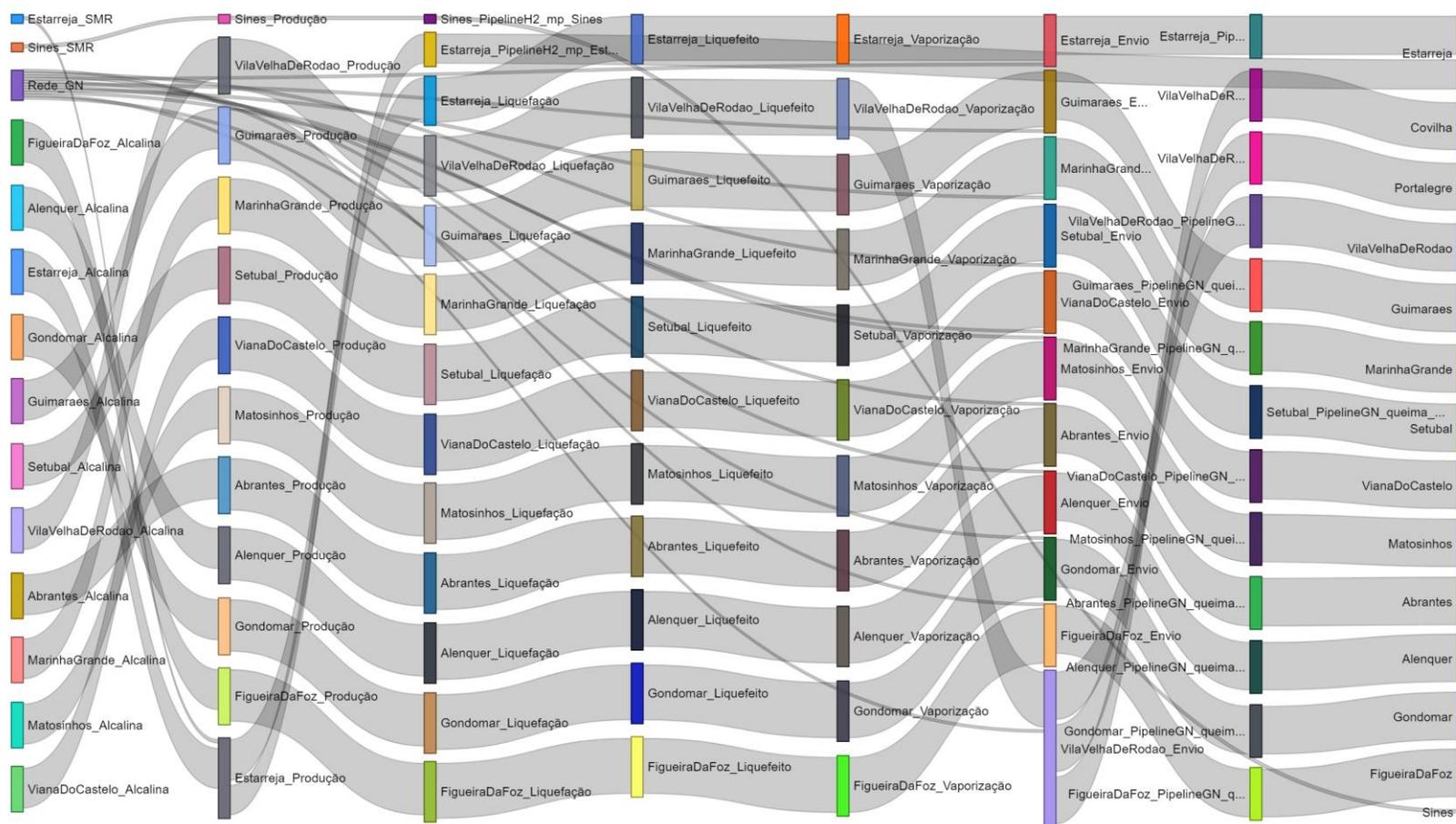


Figura 19 - Custo final do produto à porta do consumidor no Cenário G.

## 7.2. Evolução temporal do preço do gás natural e do custo final médio da mistura

A análise da evolução temporal expectável do preço médio da mistura de gás natural com hidrogénio que chega à porta de cada consumidor é fundamental para analisar a competitividade desta solução energética face à atualmente utilizada. Desta forma, na Figura 20 apresenta-se a comparação gráfica entre o preço do gás natural com a evolução da taxa de emissão de CO<sub>2</sub> e o custo final médio da mistura de gás natural com hidrogénio num horizonte de tempo até 2050. Esta mistura encontra-se dentro dos intervalos de mistura anteriormente descritos na Tabela 11.

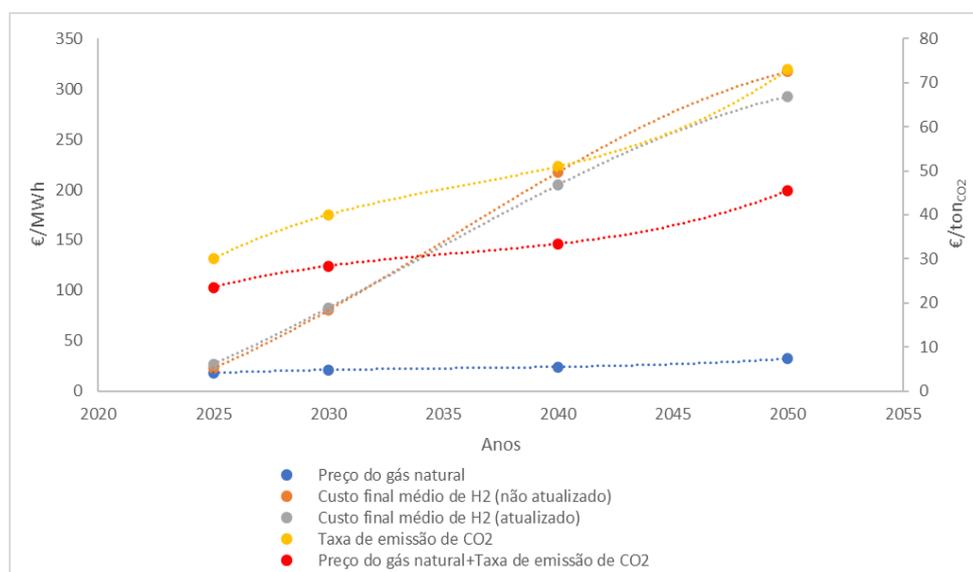


Figura 20 - Evolução temporal do preço do gás natural, do custo final médio da mistura e da taxa de emissão de CO<sub>2</sub>.

Por análise da Figura 20, pôde-se concluir que a diferença entre o custo final médio da mistura de gás natural com hidrogénio e o preço do gás natural é crescente ao longo dos anos, sendo muito pequena em 2025 e aumentando ao longo dos anos. Este aumento deve-se à maior incorporação de hidrogénio no horizonte temporal, como descrito na Tabela 11, que apresenta um maior custo de produção comparativamente ao preço de gás natural, provocando um aumento progressivo do custo com o aumento da incorporação de hidrogénio. Denota-se também uma mudança no perfil das funções de custo atualizado e não atualizado. Esta variação justifica-se com o aumento do preço do gás natural e a diminuição dos custos de investimento na produção ao longo do tempo, para o caso do preço médio atualizado. Inicialmente, como a diminuição dos custos de investimento é reduzida comparativamente ao aumento do preço do gás natural, e tendo em conta que existe uma elevada percentagem de gás natural na mistura, o custo final médio da mistura apresenta-se mais elevado no caso atualizado. Com a maturação tecnológica ao longo dos anos e a maior percentagem de incorporação de hidrogénio, o perfil

inverte-se, sendo a diminuição dos custos de investimento nas tecnologias de produção mais vantajoso que o aumento do preço do gás natural.

Quanto à taxa de emissão de CO<sub>2</sub>, esta tem uma tendência crescente ao longo do tempo, representando um custo acrescido na fatura dos grandes consumidores industriais. Associando esta taxa de emissão ao preço do gás natural, e tendo em conta que na combustão deste combustível existe uma emissão de 0,185 ton CO<sub>2</sub>/MWh gás natural<sup>[42]</sup>, podemos concluir que o preço final de compra e utilização do gás natural será superior ao preço de compra e com uma tendência crescente ao longo dos anos, acompanhando o crescimento do valor da taxa de emissão.

### 7.3. Evolução temporal do preço da energia e do custo final médio do hidrogénio

O estudo da variação do custo final médio de hidrogénio é um passo importante para encontrar as principais causas dessa variação. Neste caso, como a energia é utilizada na maioria das etapas da rede de consumo, avaliou-se o impacto da variação do preço da energia no custo final médio de hidrogénio. A energia utilizada é composta por energia da rede e energia de fontes renováveis, obtendo-se assim um preço final composto. Este preço varia ao longo do tempo, acompanhando a tendência de decréscimo do preço da energia de fontes renováveis, como se demonstra na Figura 21.

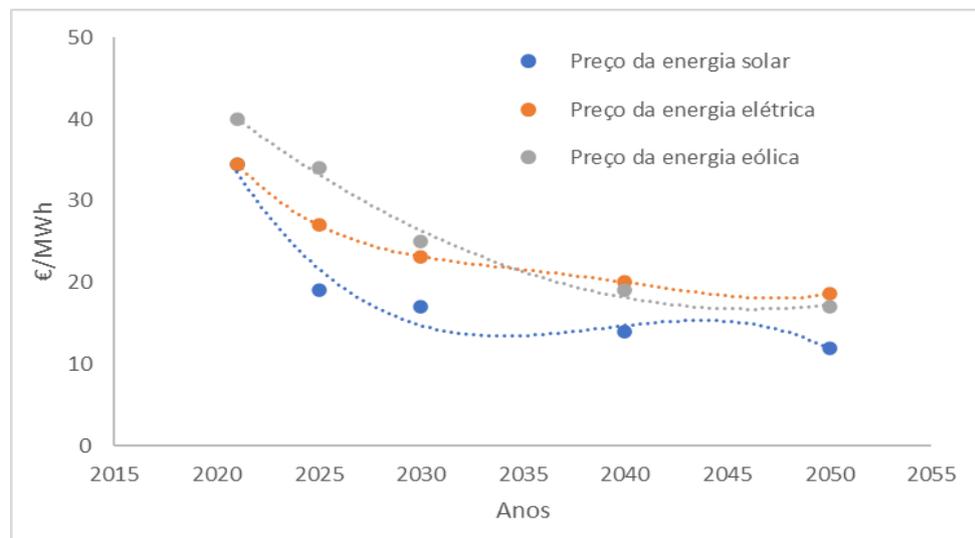


Figura 21 - Variação do preço da energia elétrica com a evolução do preço da energia solar e eólica.

O custo final médio de hidrogénio decresce com a diminuição do preço da eletricidade, demonstrando uma relação de proporcionalidade entre as duas variáveis. Estes comportamentos demonstram-se na Figura 22.

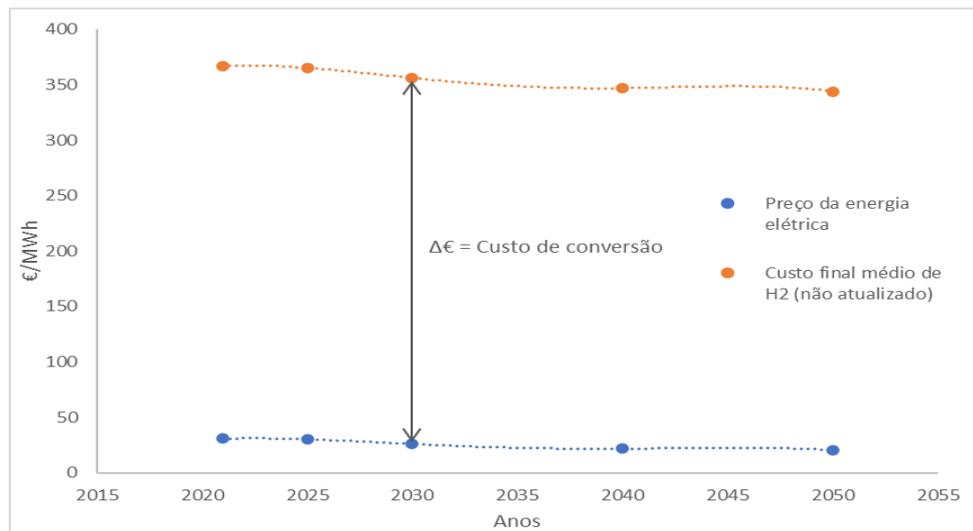


Figura 22 - Evolução temporal do preço da energia e do custo final médio de hidrogénio.

Para este estudo optou-se pela utilização do custo final médio de hidrogénio com os valores de custos de investimento e operação não atualizados para cada ano. Esta escolha deve-se à redução do número de variáveis que promovam a variação do resultado final da otimização, aproximando de forma mais precisa a relação entre o preço da energia e o custo final médio de hidrogénio.

A diferença entre o preço da eletricidade e o custo final médio de hidrogénio pode ser traduzido como o custo de conversão da energia elétrica em energia química, como demonstrado na Figura 22.

#### 7.4. Comparação entre o preço da água com o custo final médio do hidrogénio

As matérias-primas são um dos custos mais importantes, visto que refletem uma grande parcela do custo final do produto. Na produção de hidrogénio verde, a água entra como matéria-prima essencial, alimentando as unidades de eletrólise da rede de consumo. Esta água respeita determinados parâmetros, como o de sais dissolvidos, sofrendo pré-tratamentos até chegar às unidades de produção. Estes tratamentos elevam o preço desta água, influenciando o custo final do hidrogénio produzido e, conseqüentemente, o preço final médio de hidrogénio. Na Figura 23 demonstra-se o perfil do preço da água com o perfil do custo médio final de hidrogénio.

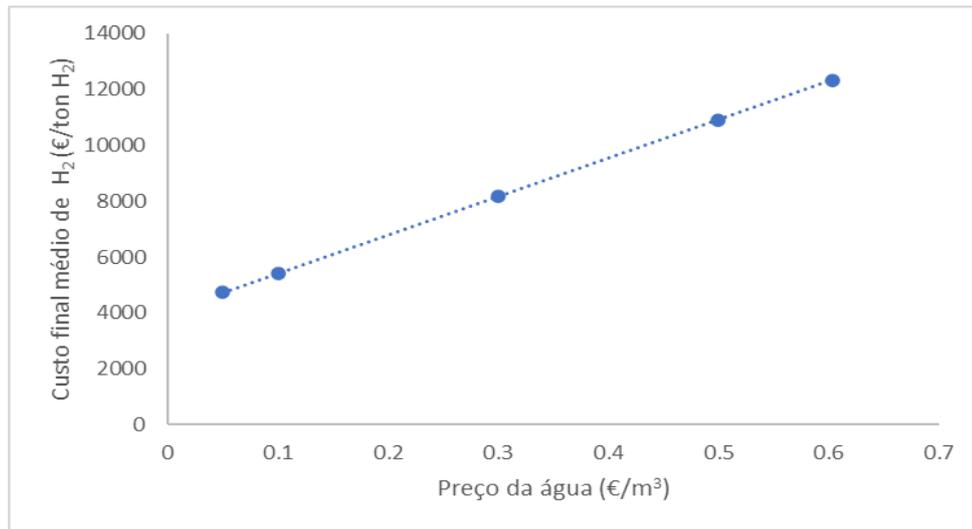


Figura 23 - Comparação entre o preço da água com o custo final médio do hidrogénio.

O comportamento das variáveis evidencia uma relação de proporcionalidade direta entre elas, indicando que o preço da água é um fator determinante para promover a competitividade do custo final médio de hidrogénio.

### 7.5. Avaliação do impacto dos custos de armazenamento no custo final médio de hidrogénio

O armazenamento é uma etapa intermédia entre a produção e o transporte de hidrogénio, servindo como *buffer* de variações que existam ao longo da rede, sendo de extrema importância avaliar a sua capacidade de forma ideal. Esta avaliação é feita através do balanço do volume necessário nos tanques para se diminuir a instabilidade do sistema com o impacto económico no custo do produto final. Na Figura 24 encontra-se a comparação do custo de armazenamento total com o custo de armazenamento diário num horizonte de dias de armazenamento.

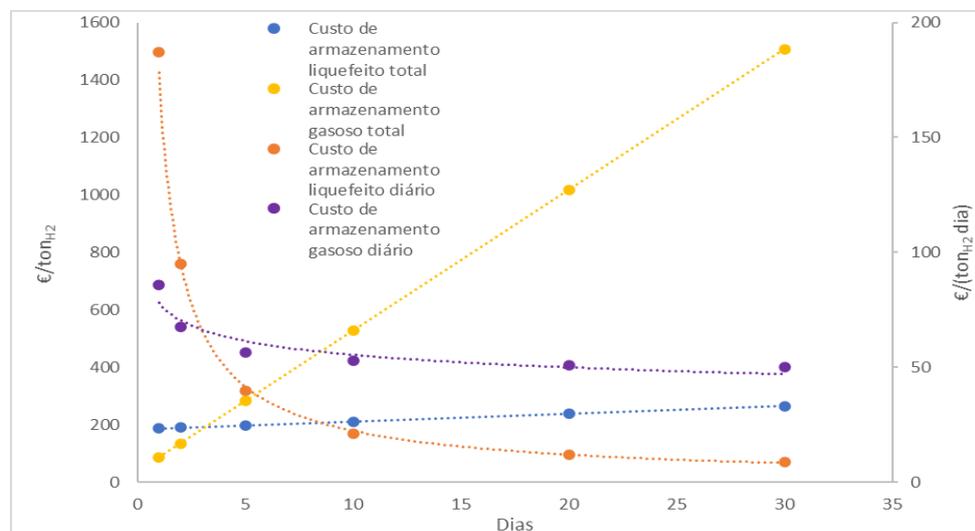


Figura 24 - Custo de armazenamento total e diário num horizonte temporal para armazenamento gasoso e liquefeito.

Por análise da Figura 24, pôde-se concluir que o custo de armazenamento diário decresce com o aumento do número de dias, demonstrando que o elevado custo de investimento em infraestruturas é mais significativo para o armazenamento liquefeito. Quanto ao armazenamento gasoso demonstra-se que custo de operação é o custo mais relevante devido ao aumento linear do custo total.

Quanto ao custo final do produto este sobe a ritmos diferentes nos dois casos com o aumento dos dias, demonstrando que o armazenamento gasoso é preferencial para períodos mais curtos (até 20 dias) e que o armazenamento liquefeito é o mais indicado para períodos mais longos (superiores a 20 dias). Estas conclusões são baseadas na Figura 25.

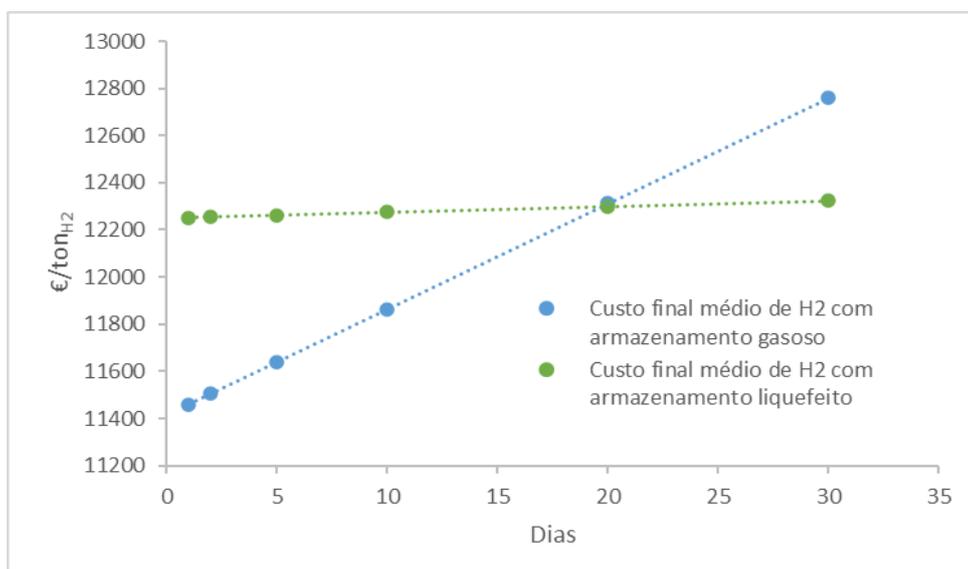


Figura 25 - Variação do custo final médio de H<sub>2</sub> para diferentes tipos de armazenamento num horizonte temporal.

## 8. Conclusões

A atual rede de abastecimento de gás natural, apesar de suficiente e bem estabelecida, não se encontra dentro das perspetivas futuras, sendo necessário submeter esta a alterações para cumprir os objetivos de neutralidade carbónica. Com isto, sugere-se a incorporação de hidrogénio de base renovável como molécula transportadora de energia, promovendo os objetivos ambientais e garantindo o fornecimento das necessidades energéticas, nomeadamente industriais. Neste âmbito, desenvolveu-se um modelo matemático de otimização da rede de abastecimento de hidrogénio em Portugal, alinhado com os objetivos delineados na Estratégia Nacional para o Hidrogénio.

Neste trabalho, abordaram-se diversas tecnologias ao longo da cadeia, desde a produção do hidrogénio, passando pelos estágios de conversão e armazenamento, até ao seu transporte. Além do método convencional de produção através de SMR, foram abordados os métodos de eletrólise alcalina e eletrólise PEM, promovendo a produção de hidrogénio verde. Admitiu-se que o hidrogénio utilizado como combustível seria produzido de forma “verde”. Equacionou-se a conversão do hidrogénio produzido em amoníaco e/ou dibenziltolueno.

De entre as tecnologias abordadas no modelo, o SMR é o método de produção com o custo mais baixo, demonstrando que o aumento do preço do gás natural e do preço das taxas de emissões de CO<sub>2</sub> não provocam uma mudança da tecnologia de produção a usar. Esta mudança deverá acontecer se a maturação tecnológica dos “métodos verdes” aumentar e/ou os preços do gás natural e/ou o preço das taxas de emissões de CO<sub>2</sub> subirem. Relativamente às tecnologias de conversão, o amoníaco e o DBT não se enquadram em nenhum cenário ótimo devido aos elevados custos de investimento em infraestruturas que são exigidos e à distância entre o local de produção e o local de consumo não ser suficientemente grande ao ponto de permitir uma economia no custo de transporte face aos outros métodos; a compressão foi uma das opções não utilizadas visto que apresenta elevados custos de investimento e operação no seu armazenamento, recaíndo assim a escolha na liquefação. De forma a equilibrar os custos na conversão com os custos de transporte e, visto que os custos de investimento e operação do transporte por *pipeline* são mais económicos face aos restantes, utilizou-se a vaporização como forma de interligar a tecnologia de conversão escolhida com o modo de transporte. O transporte por *pipeline* é efetuado na infraestrutura já existente, sendo esta adaptada à injeção de hidrogénio. Este modo de envio, apesar de apresentar custos de investimento elevados, é mais económico que os restantes, demonstrando que as distâncias entre local de produção e de

consumo são reduzidas ao ponto de justificar o custo de investimento. Por outro lado, este custo de investimento também se justifica pelas quantidades transportadas.

O custo médio final do hidrogénio face ao preço do gás natural é pouco competitivo, sendo justificável a sua incorporação na rede de gás natural em pequenas quantidades de forma a reduzir emissões de gases poluentes. A elevada incorporação de hidrogénio, além de não apresentar atualmente números competitivos com o gás natural, poderá provocar outros problemas nos consumidores, nomeadamente a níveis técnicos pela ausência de adaptação dos equipamentos de queima a este tipo de combustível.

Em suma, em termos económicos o SMR continua a ser o método de produção mais viável, mesmo com as evoluções dos preços de gás natural e de emissões de gases poluentes ao longo dos próximos anos; a compressão e armazenamento gasoso necessitam de maturação tecnológica de forma a tornar-se competitivo com a liquefação e armazenamento liquefeito; a amoníaco e DBT apenas serão opção para transportes de elevadas distâncias e com maior economia de escala nos custos de investimento; o transporte por *pipeline* com mistura é a opção mais favorável, apenas podendo o transporte por camião com hidrogénio liquefeito ser competitivo para distâncias maiores e quantidades transportadas mais reduzidas.

Por fim, o hidrogénio verde em Portugal apenas será viável com uma evolução da economia de escala dos módulos de eletrólise, sendo esta escala ainda reduzida para uma produção de dimensão nacional. Por outro lado, a subsidiação dos projetos de produção de hidrogénio verde é uma opção, sendo investidos capitais nomeadamente em infraestruturas de pré-tratamento de água que permitam que o preço desta matéria-prima seja reduzido ao ponto de tornar a produção de hidrogénio verde competitiva face às demais. Num cenário atual para abastecimento da procura total do país, seria necessária uma subsidiação de 83% em custos de investimento de infraestruturas e 95% em custos de operação para tornar o hidrogénio verde competitivo com o gás natural. Num cenário de futuro próximo, em 2030 a subsidiação dos custos de investimento desceria para os 70%, com uma os custos de operação a manter-se nos 95%.

## 9. Trabalhos futuros

A introdução de previsões de economias de escala para quantidades mais elevadas de hidrogénio em cada estágio da rede

A avaliação e previsão de consumos ao longo do tempo, bem como a introdução de incerteza neste parâmetro.

A alteração da otimização de locais fixos para uma otimização por geocoding.

A avaliação do custo final de hidrogénio com a instalação de unidades pré-tratamento de água, com a instalação de unidades de geração de energia verde (p.e. parques solares) e disponibilidade de matérias-primas e energia.

A otimização da rede de abastecimento num horizonte temporal, considerando assim a sua evolução ao longo do tempo.

O planeamento e otimização de redes locais de abastecimento de veículos pesados com base na procura local.



## 10. Bibliografia

[1] National Institute of Standards and Technology. Propriedades termofísicas de sistemas fluidos. <https://webbook.nist.gov/chemistry/fluid/>. Published 2018. Accessed March, 2021.

[2] Molloy, P. Run on Less with Hydrogen Fuel Cells. RockyMtnInst. <https://rmi.org/run-on-less-with-hydrogen-fuel-cells/>. Published October, 2019. Accessed March, 2021.

[3] Wijk A, Chatzimarkakis J. Green Hydrogen for a European Green Deal A 2x40 GW Initiative. <https://www.hydrogen4climateaction.eu/2x40gw-initiative>. Published 2020. Accessed March, 2021.

[4] Secretaria de Estado Adjunta e da Energia. EN-H2: Estratégia Nacional para o Hidrogénio. <https://participa.pt/pt/consulta/en-h2-estrategia-nacional-para-o-hidrogenio>. Published May, 2020. Accessed March, 2021.

[5] Cătuți M, Egenhofer C, Elkerbout M. The future of gas in Europe: Review of recent studies on the future of gas. [https://www.ceps.eu/wp-content/uploads/2019/08/RR2019-03\\_Future-of-gas-in-Europe.pdf](https://www.ceps.eu/wp-content/uploads/2019/08/RR2019-03_Future-of-gas-in-Europe.pdf). Published August, 2019. Accessed March, 2021.

[6] European Commission. A hydrogen strategy for a climate-neutral Europe. [https://ec.europa.eu/energy/sites/ener/files/hydrogen\\_strategy.pdf](https://ec.europa.eu/energy/sites/ener/files/hydrogen_strategy.pdf). Published July, 2020. Accessed April, 2021.

[7] Direção-Geral de Energia e Geologia. O Hidrogénio no Sistema Energético Português - Desafios de integração. <https://www.dgeg.gov.pt/media/3eshwqnl/p1-o-hidrogenio-no-sistema-energetico-portugues.pdf>. Published 2018. Accessed March, 2021.

[8] Ammonia to Green Hydrogen Project. UK's Department for Business Energy and Industrial Strategy. [https://assets.publishing.service.gov.uk/government/uploads/system/uploads/attachment\\_data/file/880826/HS420\\_-\\_Ecuity\\_-\\_Ammonia\\_to\\_Green\\_Hydrogen.pdf](https://assets.publishing.service.gov.uk/government/uploads/system/uploads/attachment_data/file/880826/HS420_-_Ecuity_-_Ammonia_to_Green_Hydrogen.pdf). Published April 2020. Accessed May, 2021.

[9] Andersson J, Grönkvist S. Large-scale storage of hydrogen. *International Journal of Hydrogen Energy*. 2019;44(23):11901-11919. doi.org/10.1016/j.ijhydene.2019.03.063.

- [10] Li L, Manier H, Manier MA. Integrated optimization model for hydrogen supply chain network design and hydrogen fueling station planning. *Computers & Chemical Engineering*. 2020;134:106683. doi:10.1016/j.compchemeng.2019.106683.
- [11] Almansoori A, Shah N. Design and Operation of a Future Hydrogen Supply Chain: Snapshot Model. *Chemical Engineering Research and Design*. 2006;84(6):423-438. doi:10.1205/cherd.05193
- [12] Johnson N, Ogden J. A spatially-explicit optimization model for long-term hydrogen pipeline planning. *International Journal of Hydrogen Energy*. 2012;37(6):5421-5433. doi:10.1016/j.ijhydene.2011.08.109
- [13] Pan G, Gu W, Qiu H, Lu Y, Zhou S, Wu Z. Bi-level mixed-integer planning for electricity-hydrogen integrated energy system considering levelized cost of hydrogen. *Applied Energy*. 2020;270:115176. doi: 10.1016/j.apenergy.2020.115176.
- [14] Hwangbo S, Nam K, Heo S, Yoo C. Hydrogen-based self-sustaining integrated renewable electricity network (HySIREN) using a supply-demand forecasting model and deep-learning algorithms. *Energy Conversion and Management*. 2019;185:353-367. doi/10.1016/j.enconman.2019.02.017.
- [15] GAMS User's Guide. General Algebraic Modeling System. [https://www.gams.com/35/docs/UG\\_MAIN.html#UG\\_Language\\_Environment](https://www.gams.com/35/docs/UG_MAIN.html#UG_Language_Environment). Accessed April, 2021.
- [16] Soloveichik, G. Ammonia as Virtual Hydrogen Carrier. U.S. Department of Energy. [https://www.energy.gov/sites/prod/files/2016/12/f34/fcto\\_h2atscale\\_workshop\\_soloveichik.pdf](https://www.energy.gov/sites/prod/files/2016/12/f34/fcto_h2atscale_workshop_soloveichik.pdf). Published November, 2016. Accessed April, 2021.
- [17] Envenstra. Common Properties of Commercial Fuels. <https://web.archive.org/web/20081010202138/http://www.natural-gas.com.au/about/references.html>. Published 2007. Accessed February, 2021.
- [18] Associação Portuguesa de Energias Renováveis. Renewable Energy Bulletin - May 2021. <https://www.apren.pt/contents/publicationsreportcarditens/pt-renewable-electricity-bulletin-may-2021.pdf>. Published May, 2021. Accessed June, 2021.
- [19] International Renewable Energy Agency. Solar Costs. <https://www.irena.org/Statistics/View-Data-by-Topic/Costs/Solar-Costs>. Published 2020. Accessed January, 2021.

- [20] U.S. Energy Information Administration. Levelised Costs of New Generation Resources in the *Annual Energy Outlook 2021*. [https://www.eia.gov/outlooks/aeo/pdf/electricity\\_generation.pdf](https://www.eia.gov/outlooks/aeo/pdf/electricity_generation.pdf). Published February, 2021. Accessed June, 2021.
- [21] International Renewable Energy Agency. Wind Costs. <https://www.irena.org/Statistics/View-Data-by-Topic/Costs/Wind-Costs>. Published 2020. Accessed March, 2021.
- [22] Pöyry. Portuguese Market Outlook up to 2040. Associação Portuguesa de Energias Renováveis. <https://www.apren.pt/contents/documents/2018-12-10-poyry-apren-outlook-2040.pdf>. Published December, 2018. Accessed March, 2021.
- [23] Lenntech. Reverse Osmosis Desalination Costs Analysis. <https://www.lenntech.com/processes/desalination/energy/general/desalination-costs.htm>. Accessed March, 2021.
- [24] Matute G, Yusta JM, Correas LC. Techno-economic modelling of water electrolyzers in the range of several MW to provide grid services while generating hydrogen for different applications: A case study in Spain applied to mobility with FCEVs. *International Journal of Hydrogen Energy*. 2019;44(33):17431-17442. doi:10.1016/j.ijhydene.2019.05.092.
- [25] Gim B, Yoon WL. Analysis of the economy of scale and estimation of the future hydrogen production costs at on-site hydrogen refueling stations in Korea. *International Journal of Hydrogen Energy*. 2012;37(24) 2012:19138-19145. doi:10.1016/j.ijhydene.2012.09.163.
- [26] Ayodele FO, Mustapa SI, Ayodele BV, Mohammad N. An Overview of Economic Analysis and Environmental Impacts of Natural Gas Conversion Technologies. *Sustainability*. 2020; 12(23):10148. doi:10.3390/su122310148.
- [27] Jorge, PM. Modelos de negócio de H2 verde. Presented at INEGI; February 10, 2021. Accessed February, 2021.
- [28] International Renewable Energy Agency. Green Hydrogen Cost Reduction: Scaling up Electrolyzers to Meet the 1.5°C Climate Goal. <https://www.irena.org/publications/2020/Dec/Green-hydrogen-cost-reduction>. Published December, 2020. Accessed February, 2021.

- [29] Keipi T, Tolvanen H, Kontinen J. Economic analysis of hydrogen production by methane thermal decomposition: Comparison to competing technologies, *Energy Conversion and Management*. 2018;159:264-273. doi:10.1016/j.enconman.2017.12.063.
- [30] HySTOC. LOHC production cost estimation study. European Commission. <https://www.hystoc.eu/Public-deliverables/>. Published June, 2019. Accessed March, 2021.
- [31] HySTOC. Business Development and Sustainability – Concept Studies, Economic Analysis, Life Cycle Assessment. European Commission. <https://www.hystoc.eu/Public-deliverables/>. Published August, 2019. Accessed March, 2021.
- [32] Allidieres, L. Cadeias Logísticas: Armazenamento, Transporte, Abastecimento. Published January, 2021. Accessed March, 2021.
- [33] Cihlar, J. Hydrogen generation in Europe: overview of costs and key benefits. Publications Office of the European Union. <http://op.europa.eu/en/publication-detail/-/publication/7e4afa7d-d077-11ea-adf7-01aa75ed71a1/language-en>. Published July, 2020. Accessed March, 2021.
- [34] Niermann M, Timmerberg S, Drünert S, Kaltschmitt M. Liquid Organic Hydrogen Carriers and alternatives for international transport of renewable hydrogen. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*. 2021;135:110171. doi:10.1016/j.rser.2020.110171.
- [35] DOE Technical Targets for Hydrogen Delivery. U.S. Department of Energy. <https://www.energy.gov/eere/fuelcells/doe-technical-targets-hydrogen-delivery>. Published 2011. Accessed March, 2021.
- [36] Brown, T. The capital intensity of small-scale ammonia plants. Ammonia Industry. <https://ammoniaindustry.com/the-capital-intensity-of-small-scale-ammonia-plants/>. Published January, 2018. Accessed March, 2021.
- [37] Hurskainen M, Ihonen J. Techno-economic feasibility of road transport of hydrogen using liquid organic hydrogen carriers, International. *Journal of Hydrogen Energy*. 2020;45(56):32098-32112. doi:10.1016/j.ijhydene.2020.08.186.
- [38] Gorre J, Ruoss F, Karjunen H, Schaffert J, Tynjälä T. Cost benefits of optimizing hydrogen storage and methanation capacities for Power-to-Gas plants in dynamic operation. *Applied Energy*. 2020;257:113967. doi:10.1016/j.apenergy.2019.113967.

[39] Jens, J, Wang, A, van der Leun, K, Peters, D, Buseman, M. Extending the European Hydrogen Backbone. [https://gasforclimate2050.eu/sdm\\_downloads/extending-the-european-hydrogen-backbone/](https://gasforclimate2050.eu/sdm_downloads/extending-the-european-hydrogen-backbone/). Published April, 2021. Accessed June, 2021.

[40] International Energy Agency. The Future of Hydrogen. <https://www.iea.org/reports/the-future-of-hydrogen>. Published June, 2019. Accessed March, 2021.

[41] Bradley SP, Hax AC, Magnanti TL. *Applied Mathematical Programming*. Boston: Addison-Wesley; 1977:282-284. <http://web.mit.edu/15.053/www/AMP-Chapter-03.pdf>. Accessed May, 2021.

[42] Método utilizado para efeitos de cálculo das emissões de CO<sub>2</sub>. GALP. <https://www.galp.com/pt/pt/empresas/eletricidade-e-gas/Apoio-ao-Cliente/Centro-de-Informacao/Eletricidade-e-Gas-Natural-da-Galp>. Accessed June, 2021.

[43] Consumos por município e por setor de atividade. Direção-Geral de Energia e Geologia. <https://www.dgeg.gov.pt/media/31jg4kqi/dgeg-gma-2019.xlsx>. Accessed March, 2021.

[44] Relatório Integrado 2020. Bondalti. [https://www.bondalti.com/contents/ficheiros/bondalti-ri-2020-pt-final\\_5539.pdf](https://www.bondalti.com/contents/ficheiros/bondalti-ri-2020-pt-final_5539.pdf). Accessed March, 2021.

[45] Alexandre AFF. *Projecto de recuperação CO<sub>2</sub> a partir das unidades de Steam Methane Reforming da refinaria de Sines*. [Master's thesis]. Lisboa: Instituto Superior Técnico. 2011:27-32.



## Anexos

### Anexo I – Exemplificação da determinação do custo de investimento de pipeline de mistura de gás natural com hidrogénio

Admitindo o caso em que existe uma incorporação de hidrogénio de 5% e que são produzidos 1000 kg<sub>H2</sub>/h para utilização como combustível numa determinada localidade, sendo totalmente suprida por pipeline.

Assim:

$$Quantidade_{transportada} = \frac{1000}{0,05} = 20\,000 \text{ kg}_{H2 \text{ equivalente}}/h$$

$$Quantidade_{gás \text{ natural}} = 20\,000 \times 0,95 \times \frac{Dens_{H2}}{Dens_{CH4}} = 42\,845,6 \text{ kg}_{CH4}/h$$

$$20\,000 < 35\,714 \text{ kg}_{H2 \text{ equivalente}}/h \text{ logo } C I e_e^{unit} = 10,92 \text{€}/(\text{km kg}_{H2 \text{ equivalente}}/h)$$