CÁLCULO DE DISPONIBILIDADE EM SIMULADOR DE PROCESSOS

Alan Matias Avelar

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos, Escola de Química, Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre em Ciências em Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos.

Orientador: Frederico Wanderley Tavares

Rio de Janeiro

Agosto de 2013

CÁLCULO DE DISPONIBILIDADE EM SIMULADOR DE PROCESSOS

Alan Matias Avelar

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO APRESENTADA AO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM TECNOLOGIA DE PROCESSOS QUÍMICOS E BIOQUÍMICOS, ESCOLA DE QUÍMICA, UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO, COMO PARTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS À OBTENÇÃO DO TÍTULO DE MESTRE EM CIÊNCIAS EM TECNOLOGIA DE PROCESSOS QUÍMICOS E BIOQUÍMICOS.

Examinada por:

Prof. Frederico Wanderley Tavares, D.Sc., EQ/UFRJ

Prof. Eduardo Mach Queiroz, D.Sc., EQ/UFRJ

Prof. Jorge Eduardo da Silva Ourique, D.Sc., EE/UFF

Prof. Argimiro Resende Secchi, D.Sc., PEQ/COPPE/UFRJ

RIO DE JANEIRO, RJ - BRASIL

AGOSTO DE 2013

Avelar, Alan Matias.
Cálculo de disponibilidade em simulador de processos / Alan Matias Avelar. – 2013.
221 f.: il. ; 30 cm.

Dissertação (mestrado) – Universidade Federal do Rio de Janeiro, Escola de Química, Programa de Pós-Graduação em Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos, Rio de Janeiro, 2013.

Orientador: Frederico Wanderley Tavares

1. Exergia. 2. Simulação. 3. Otimização. 4. Sustentabilidade. I. Tavares, Frederico Wanderley. II. Universidade Federal do Rio de Janeiro. Escola de Química. III. Título.

“Temos de nos tornar na mudança que queremos ver.”

(Mahatma Gandhi)

AGRADECIMENTOS:

Muito além do resultado material, o mestrado foi um período de crescimento pessoal, que em grande parte eu devo as pessoas que estão em minha volta. Obrigado Senhor pelo convívio, ainda que restrito, com as pessoas que mencionarei aqui:

Agradeço aos meus pais, Alexandre Matias Avelar e Sheila Hamilton Avelar, e ao meu irmão Brian Hamilton Avelar, pela compreensão da minha ausência em casa, que desde muito cedo, deixei em busca de grandes desafios. Obrigado pelo apoio incondicional. Obrigado por terem me ensinado a colocar as pessoas acima das coisas materiais. Dedico a vocês este trabalho.

Agradeço a minha noiva Aline Yae Kina pelo carinho e paciência, que durante 3 anos, soube respeitar e me apoiar nesse mestrado. Amorzinho, com você, eu sou muito mais forte. Agradeço também a família da minha noiva pelo suporte.

Agradeço ao meu orientador Frederico Wanderley Tavares, primeiro, pelo desafio de orientação de um mestrado em tempo parcial, segundo, pela forma de tratamento interpessoal, e por último, pela confiança em mim depositada.

Agradeço aos meus amigos da UFF, que estiveram comigo nesta empreitada. Que programaram no MATLAB com sono, com muito sono, que treinaram n redes neurais, que compraram o Bird e que aprenderam “com quantos paus” se faz um mestrado, trabalhando. Aliás, foram mais de 150 noites, para que, avançando em pequenos passos, eu chegasse a este texto.

Agradeço a Chemtech – a Siemens Company, pela oportunidade que me foi dada. Obrigado aos meus amigos engenheiros da equipe de Processo, muitos da minha turma do mestrado e que conviveram comigo muito mais que minha própria família. Saudades de todos!

Resumo da Dissertação apresentada à EQ/UFRJ como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Mestre em Ciências (M.Sc.)

CÁLCULO DE DISPONIBILIDADE EM SIMULADOR DE PROCESSOS

Alan Matias Avelar

Agosto/2013

Orientador: Frederico Wanderley Tavares

Programa: Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos

A análise exergética de processos consiste em uma metodologia baseada na segunda lei da termodinâmica. A implementação desta metodologia em simuladores de processo permite ampliar a importância da exergia como critério de avaliação de projetos de unidades de processamento.

O cálculo da exergia em correntes materiais e de energia foi implementado no simulador de processos Aspen HYSYS®. Para cada tipo de operação ou processo unitário foram programados os cálculos de irreversibilidade e de eficiência. As rotinas de programação foram validadas a partir de comparações com resultados encontrados na literatura.

Foram escolhidos três exemplos para testar a implementação: (a) tubulação de escoamento gasoso; (b) coluna despropanizadora; e (c) planta térmica simplificada. Nos exemplos, critérios termoeconômicos e ambientais foram analisados. Os resultados demonstraram que a eficiência racional, diretamente relacionada ao índice de sustentabilidade do processo, consegue lidar com a ordem de grandeza da escala completa de disponibilidade. A atribuição de custos exergéticos na formulação do custo real dos produtos pode ser utilizada para mensurar, de maneira extensiva, o impacto ambiental e avaliar a viabilidade econômica de tecnologias sustentáveis.

Abstract of Dissertation presented to EQ/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Master of Science (M.Sc.)

EXERGY CALCULATION IN PROCESS SIMULATOR

Alan Matias Avelar

August/2013

Advisor: Frederico Wandeley Tavares

Program: Chemical and Biochemical Process Technology

The exergy analysis consists in a methodology based on the second law of thermodynamics. The implementation of this technique in process simulators allowed enhancing the importance of this type of assessment criterion for process design.

Exergy calculations for mass and energy streams were programmed in Aspen HYSYS® process simulator. For each type of unit operation or unit chemical process were programmed calculations of its irreversibility and efficiency. Comparing results with those from literature validated the exergy calculation routines.

Three examples were simulated in order to test the implementation: (a) gaseous flow pipe; (b) depropanization column; and (c) simplified thermal unit. Thermoeconomic and environmental criteria, were also considered. Results shown here suggest that the rational efficiency, directly related to the process sustainability index, can deal with the concern about the order of magnitude of the complete exergy scale. The assignment of exergetic costs in the formulation of products actual cost may be used to measure, extensively, the environmental impact, and also to assess economic viability of sustainable technologies.

ÍNDICE

I - INTRODUÇÃO **2**

II - REVISÃO BIBLIOGÁFICA **5**

II.1 - ANÁLISE TERMODINÂMICA DE PROCESSOS 5
II.1.1 - IRREVERSIBILIDADE: PRODUÇÃO DE DESORDEM *6*
II.1.2 - EXERGIA: ESCALA DE DISPONIBILIDADE DE ENERGIA *10*
II.2 - ANÁLISE DE DISPONIBILIDADE EM OPERAÇÕES E PROCESSOS UNITÁRIOS 17
II.3 - EXERGIA, MEIO AMBIENTE, SUSTENTABILIDADE E ECONOMIA 22
II.3.1 - EXERGIA, MEIO AMBIENTE E SUSTENTABILIDADE *22*
II.3.2 - EXERGIA E ECONOMIA *24*
II.3.2.1 - ATRIBUIÇÃO DE CUSTOS EXERGÉTICOS PARA ANÁLISE TERMOECONÔMICA DE PROCESSOS 24
II.4 - EMERGIA: HISTÓRICO DA ENERGIA 28

III - METODOLOGIA **31**

III.1 - CÁLCULO DA EXERGIA EM SIMULADOR DE PROCESSOS 32
III.1.1 - CÁLCULO DA EXERGIA EM CORRENTES DE PROCESSO *33*
III.1.2 - CÁLCULO DA EXERGIA EM CORRENTES DE ENERGIA *50*
III.2 - CÁLCULO DA EFICIÊNCIA DE OPERAÇÕES E PROCESSOS UNITÁRIOS 54
III.2.1 - PROCESSOS FÍSICOS *54*
III.2.1.1 - TUBULAÇÕES 54
III.2.1.2 - VÁLVULAS DE CONTROLE 59
III.2.1.3 - MÁQUINAS DE FLUXO 63
III.2.1.4 - TROCADORES DE CALOR 75
III.2.1.5 - COLUNAS DE DESTILAÇÃO 90
III.2.2 - PROCESSOS QUÍMICOS *103*
III.2.2.1 - REAÇÕES DE COMBUSTÃO 105

IV - RESULTADOS E DISCUSSÕES **109**

IV.1 - VALIDAÇÃO DAS ROTINAS DE CÁLCULO DA EXERGIA 109
IV.2 - ESTUDOS DE CASOS DE PROJETO DE PROCESSOS E OPERAÇÕES UNITÁRIAS 112
IV.2.1 - TUBULAÇÃO *112*
IV.2.2 - COLUNA DE DESTILAÇÃO DEPROPANIZADORA *113*
IV.2.3 - COMPARAÇÃO ENTRE COMBUSTÍVEIS DE UMA PLANTA TÉRMICA *126*

V - CONCLUSÕES **146**

VI - SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS **149**

VII - REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS **151**

ANEXO A 155

ANEXO B 206

ANEXO C 220

ÍNDICE DE TABELAS

Tabela II.1 – Comparação entre o balanço de energia e equação da disponibilidade de energia. 12
Tabela II.2 – Comparação dos cálculos de exergia existentes em simuladores de processo. Adaptado de Ghannadzadeh, et al., (2012) 16
Tabela II.3 – Mariz de incidência para sistema energético genérico. 26
Tabela III.1 – Estado morto de referência proposto por Szargut, et al., (1988) 33
Tabela III.2 – Propriedades do usuário com os coeficientes estequiométricos. Referente ao exemplo proposto por Abdollahi-Demneh, et al., (2011). 44
Tabela III.3 – Variáveis do usuário programadas para o cálculo da exergia em correntes materiais. 45
Tabela III.4 – Variáveis do usuário programadas para o cálculo de exergia em correntes de energia. 51
Tabela III.5 – Velocidade recomendada para alguns fluidos comuns. (Branan, 2005) 55
Tabela III.6 – Análise exergética de tubulações. 56
Tabela III.7 – Variáveis do usuário programadas para a operação unitária tubulação. 57
Tabela III.8 – Análise exergética de válvulas de controle 60
Tabela III.9 – Variáveis do usuário programadas para a operação unitária válvula. 61
Tabela III.10 – Análise exergética de bombas. 64
Tabela III.11 – Variáveis do usuário programadas para a operação unitária bomba. 65
Tabela III.12 – Fator de configuração para cálculo de investimento em compressores. (Douglas, 1988) 67
Tabela III.13 – Análise exergética de compressores. 68
Tabela III.14 – Análise exergética de expansores. 69
Tabela III.15 – Variáveis do usuário programadas para a operação unitária compressor. 70
Tabela III.16 – Variáveis do usuário programadas para a operação unitária expansor. 70
Tabela III.17 – Fatores de configuração para cálculo de investimento em trocadores de calor. Adaptado de Douglas (1988). 78
Tabela III.18 – Análise exergética de trocadores de calor. 79
Tabela III.19 – Variáveis do usuário programadas para a operação unitária trocador de calor... 80
Tabela III.20 – Cenários de avaliação de trocadores de calor. 85
Tabela III.21 – Análise exergética de colunas de destilação. 91
Tabela III.22 – Variáveis do usuário programadas para a operação unitária coluna de destilação. 98
Tabela III.23 – Análise exergética de reações de combustão. 106
Tabela III.24 – Variáveis do usuário programadas para o processo unitário de combustão. 107
Tabela IV.1 – Composição da Corrente exemplo 1. 109
Tabela IV.2 – Temperatura, pressão e vazão da Corrente exemplo 1. 109
Tabela IV.3 – Comparação entre os resultados obtidos para Exergia da Corrente exemplo 1.. 109
Tabela IV.4 – Composição da Corrente exemplo 2. 110
Tabela IV.5 – Temperatura, pressão e vazão da Corrente exemplo 2. 110
Tabela IV.6 – Comparação entre os resultados obtidos para Exergia da Corrente exemplo 2.. 110
Tabela IV.7 – Exergia Química Molar de alguns componentes a 298 K e 1 bar. Ambiente de referência: (Szargut, et al., 1988); Modelo termodinâmico utilizado no Aspen HYSYS®: SRK – Soave-Redlich-Kwong. 111
Tabela IV.8 – Resultados obtidos para o projeto da tubulação. 112

Tabela IV.8 – Resumo do estudo de caso para coluna depropanizadora. 114
Tabela IV.9 – Resultados obtidos para a coluna depropanizadora..... 116
Tabela IV.10 – Exergias das correntes da coluna depropanizadora para os diferentes cenários 118
Tabela IV.11 – Custo exergéticos das correntes da coluna depropanizadora para os diferentes cenários 124
Tabela IV.12 – Resumo do estudo de caso para planta térmica. 126
Tabela IV.13 – Resultados do estudo de caso planta térmica..... 129

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura II.1– Processo genérico com escoamento 6
Figura II.2– Processo genérico com escoamento, o meio ambiente e o estado morto de referência. 10
Figura II.3– Análise exergética em um processo genérico com escoamento. 17
Figura II.4– Ilustração qualitativa da relação entre a eficiência exergética de um processo e o impacto ambiental em termos de produção de desordem, degradação de recursos ou emissão de rejeitos. Adaptado de Rosen, et al., (2008). 22
Figura II.5– Ilustração qualitativa da relação entre a eficiência exergética de um processo, o impacto ambiental e a sustentabilidade. Adaptado de Rosen, et al., (2008). 24
Figura II.6– Sistema energético genérico. 25
Figura II.7 – Diagrama com os princípios da contabilização da emergia. 29
Figura III.1 - Estrutura simplificada de um programa simulador de processo e adicional cálculo da exergia. 32
Figura III.2 – Transformação referente ao cálculo da exergia física de uma corrente material. . 34
Figura III.3 – Transformação referente a Etapa 2 do cálculo da exergia de uma corrente material – separação dos componentes. 35
Figura III.4 – Transformação referente a Etapa 3 do cálculo da exergia de uma corrente material – reação química. 38
Figura III.5 – Transformação referente a Etapa 4 do cálculo da exergia de uma corrente material – estado morto de referência. 39
Figura III.6 – Transformação referente a Etapa 5 do cálculo da exergia de uma corrente material – estado morto real. 40
Figura III.7 – Conjunto de transformações com todas etapas do procedimento proposto para o cálculo da exergia de corrente de processo. 42
Figura III.8 – Fluxograma da rotina de cálculo da variável do usuário Exergia Física Mássica. 46
Figura III.9 – Fluxograma da rotina de cálculo da variável do usuário Exergia Química Mássica, dividida em três partes (a), (b) e (c). 49
Figura III.10 – Fluxograma de um trocador de calor, identificando as correntes de utilidade, para o cálculo da temperatura média termodinâmica. 50
Figura III.11 – Fluxograma da rotina de cálculo da variável do usuário Temperatura Média Termodinâmica e Exergia de correntes de energia. 53
Figura III.12– (a) e (b) Operação unitária tubulação representada em Fluxograma de Processo (a), em Diagrama de Grassmann (b). 56
Figura III.13 – Fluxograma da rotina de cálculo da variável do usuário Irreversibilidade em tubulações. 57
Figura III.14 – Fluxograma da rotina de cálculo da variável do usuário Eficiência Exergética em tubulações. 58
Figura III.15– (a) e (b) Operação unitária válvula de controle representada em Fluxograma de Processo (a) e em Diagrama de Grassmann (b). 60
Figura III.16 – Fluxograma da rotina de cálculo da variável do usuário Irreversibilidade em válvulas. 61
Figura III.17 – Fluxograma da rotina de cálculo da variável do usuário Eficiência Exergética em válvulas. 62

Figura III.18– (a) e (b) Operação unitária bomba centrífuga representada em Fluxograma de Processo (a) e em Diagrama de Grassmann (b). 64
Figura III.19 – Fluxograma da rotina de cálculo da variável do usuário Irreversibilidade em bombas. 65
Figura III.20 – Fluxograma da rotina de cálculo da variável do usuário Eficiência Racional em bombas. 66
Figura III.21– (a) e (b) Operação unitária compressor centrífugo representada em Fluxograma de Processo (a) e em Diagrama de Grassmann (b). 68
Figura III.22– (a) e (b) Operação unitária expansor representada em Fluxograma de Processo (a) e em Diagrama de Grassmann (b). 69
Figura III.23 – Fluxograma da rotina de cálculo da variável do usuário Irreversibilidade em compressores. 71
Figura III.24 – Fluxograma da rotina de cálculo da variável do usuário Eficiência Racional em compressores. 72
Figura III.25 – Fluxograma da rotina de cálculo da variável do usuário Irreversibilidade em expansores. 73
Figura III.26 – Fluxograma da rotina de cálculo da variável do usuário Eficiência Racional em expansores. 74
Figura III.27– Operação unitária resfriador de uma corrente de processo (P) através de uma corrente de utilidade (U) 76
Figura III.28– (a) e (b) Operação unitária trocador de calor (aquecedor) representada em Fluxograma de Processo (a) e em Diagrama de Grassmann (b). 79
Figura III.29 – Fluxograma da rotina de cálculo da variável do usuário Diferença de exergia em trocadores de calor para o lado dos tubos. 81
Figura III.30(a) e (b) – Fluxograma da rotina de cálculo da variável do usuário Eficiência Racional em trocadores de calor. 83
Figura III.31 – Diferenças de temperaturas mínima e máxima permitida em aquecedores. Adaptado de Wei, et al., (2012). 86
Figura III.32 – Algoritmo para trocadores de calor com utilidade quente. 87
Figura III.33 – Diferença de temperatura mínima e máxima permitida em trocadores de calor resfriadores. Adaptado de Wei, et al., (2012). 88
Figura III.34 – Algoritmo para trocadores de calor com utilidade fria. 89
Figura III.35– (a) e (b) Operação unitária coluna de destilação representada em Fluxograma de Processo (a) e em Diagrama de Grassmann (b). 92
Figura III.37 – Análise exergética do condensador. Adaptado de Santana (2004). 94
Figura III.38 – Análise exergética do estágio. 95
Figura III.39 – Análise exergética do refervedor. 95
Figura III.40 – Exemplo de perfil de irreversibilidade em uma coluna. Notar o efeito de irreversibilidade no estágio (4) de alimentação. Adaptado de Santana (2004). 96
Figura III.41 – Obtenção do perfil da curva entalpia-temperatura para colunas de destilação (binário) nas condições praticamente termodinâmicas (MTC). De (a) para (b) modificação quantitativa nas utilidades. De (b) para (c) modificações qualitativas (condições) nas utilidades e no arranjo do sistema. Adaptado de Santana (2004). 97
Figura III.42 – Relação entre o número de estágios e a razão de refluxo em uma coluna de destilação. Adaptado de Wei, et al., (2012). 99
Figura III.43 – Relação entre a razão de refluxo e o custo de investimento (a), custo energético (b) e custo total (c) em uma coluna de destilação. Adaptado de Wei, et al., (2012). 100
Figura III.44 – Algoritmo para colunas de destilação. 102

Figura III.45 – Energia livre do sistema conforme a coordenada de reação e cálculo da afinidade química da reação. 104
Figura III.46– (a) e (b) Processo unitário de combustão representada em Fluxograma de Processo (a) e em Diagrama de Grassmann (b). 106
Figura IV.1 – Fluxograma de processo – coluna depropanizadora (C2: R = 2,5; N = 86 ; N_F = 51). 115
Figura IV.2 – Percentual atacado da irreversibilidade evitável e irreversibilidade para os diferentes cenários de razão de refluxo do estudo de caso da coluna depropanizadora. 117
Figura IV.3 – Custo de investimento e eficiência racional para os diferentes cenários de razão de refluxo do estudo de caso da coluna depropanizadora. 117
Figura IV.4 – Fluxograma de exergia – coluna depropanizadora (C1: R = 2,1; N = 93 ; N_F = 54). 119
Figura IV.5 – Fluxograma de exergia – coluna depropanizadora (C4: R = 4; N = 59 ; N_F = 35). 120
Figura IV.6 –Índice de sustentabilidade da coluna depropanizadora para os diferentes cenários. 122
Figura IV.7 – Relação entre o índice de sustentabilidade com a eficiência racional da coluna depropanizadora para os diferentes cenários. 122
Figura IV.10 – Índice de sustentabilidade e impacto ambiental, mensurado por meio do aumento do custo exergético da corrente de topo em relação ao cenário C1 da coluna depropanizadora, contra a eficiência racional do processo. 125
Figura IV.11 – Índice de sustentabilidade e impacto ambiental, mensurado por meio do custo exergético da corrente de fundo em relação ao cenário C1 da coluna depropanizadora, contra a eficiência racional do processo. 125
Figura IV.12 – Fluxograma de processo – planta térmica (C1: Metano). 127
Figura IV.13 – Fluxograma de processo – planta térmica (C6: Hexano). 128
Figura IV.14 – Exergia da corrente de combustível constante para todos os cenários e vazão molar de combustível nos diferentes cenários. 130
Figura IV.15 – Perda externa de exergia pela corrente de gás de combustão exausto, potência da turbina a vapor e vazão molar de combustível nos diferentes cenários. 130
Figura IV.16 – Irreversibilidade do processo de combustão nos diferentes cenários e percentual de acréscimo da emissão de gás carbônico em relação a emissão do cenário um. 131
Figura IV.17 – Irreversibilidade do processo de combustão nos diferentes cenários cenários e percentual molar de consumo de combustível em relação ao consumo do cenário um. 131
Figura IV.18 – Fluxograma de exergia – planta térmica (C1: Metano). 132
Figura IV.19 – Fluxograma de exergia – planta térmica (C6: Hexano). 133
Figura IV.20 – Irreversibilidade da planta térmica para os diversos cenários. 134
Figura IV.21 – Irreversibilidades por operação ou processo unitário – planta térmica (C1: Metano). 137
Figura IV.22 – Irreversibilidades por operação ou processo unitário – planta térmica (C6: Hexano). 137
Figura IV.23 – Índice de sustentabilidade e percentual de acréscimo de emissão de gás carbônico (impacto ambiental), contra a eficiência racional. 138
Figura IV.24 – Fluxograma de processo – planta térmica com modificações (C1-B: Metano). 139
Figura IV.25 – Fluxograma de exergia – planta térmica (C1-B: Metano). 141
Figura IV.26 – Irreversibilidades por operação ou processo unitário – planta térmica (C1 e C1-B). 142

Figura IV.27 – Índice de sustentabilidade da planta térmica para os cenários C1, C1-B e C-6. 144
Figura A.1 – Código referente à variável do usuário temperatura ambiente. 156
Figura A.2 – Código referente à variável do usuário pressão ambiente. 157
Figura A.3 – Código referente à variável do usuário pressão parcial de XENÔNIO / OXIGÊNIO / NEÔNIO / NITROGÊNIO / KRIPTÔNIO / HÉLIO / ÁGUA / ÓXIDO DE DEUTÉRIO / DIÓXIDO DE CARBONO / ARGÔNIO no estado morto de referência. 158
Figura A.4 – Código referente à variável do usuário exergia física em unidade de potência. .. 159
Figura A.5 – de (a) até (g) Código referente à variável do usuário exergia química em unidade de potência. 166
Figura A.6 – Código referente à variável do usuário exergia em unidade de potência. 167
Figura A.7 – De (a) até (c) Janelas contendo temperatura, pressão, vazão e composição e variáveis do usuário de uma corrente material. 169
Figura A.8 – (a) e (b) Código referente à variável do usuário Temperatura Média Termodinâmica. Esta variável também identifica o tipo de corrente de energia em questão, calcula e atribui o valor da Exergia contida na corrente de energia. (utilizada em trocadores de calor)..... 171
Figura A.9 – (a) e (b) Código referente à variável do usuário Cálculo da Exergia em Correntes de Energia. Esta variável também identifica o tipo de corrente de energia em questão, calcula e atribui o valor da Exergia contida na corrente de energia. (utilizada em máquinas de fluxo) .. 173
Figura A.10 De (a) até (c) – Janelas com os dados de entrada e as variáveis do usuário programadas em um trocador e em uma corrente de energia. 175
Figura A.11 – Janela com as propriedades do usuário necessárias ao funcionamento das rotinas. 176
Figura A.12 – Código referente à variável do usuário irreversibilidade de tubulações. 177
Figura A.13 – Código referente à variável do usuário eficiência exergética de tubulações..... 178
Figura A.14 – Código referente à variável do usuário irreversibilidade de válvulas. 179
Figura A.15 – Código referente à variável do usuário eficiência exergética de válvulas. 180
Figura A.16 – Código referente à variável do usuário irreversibilidade de bombas. 181
Figura A.17 de (a) até (c) – Código referente à variável do usuário eficiência racional de bombas. 184
Figura A.18 – Código referente à variável do usuário irreversibilidade de compressores. 185
Figura A.19 (a) e (b) – Código referente à variável do usuário eficiência racional de compressores. 187
Figura A.20 – Código referente à variável do usuário estimativa do custo de investimento em compressores. 188
Figura A.21 – Código referente à variável do usuário irreversibilidade de expansores. 189
Figura A.22 – Código referente à variável do usuário eficiência racional de expansores (caso específico de turbinas a vapor) 190
Figura A.23 (a) e (b) – Código referente à variável do usuário Diferença de exergia nos tubos (a) e no casco (b). 192
Figura A.24 – Código referente à variável do usuário irreversibilidade em trocadores de calor. 193
Figura A.25 de (a) até (e) – Código referente à variável do usuário eficiência racional de trocadores de calor. 198
Figura A.26 – Código referente à variável do usuário estimativa do custo de investimento em trocadores de calor. 199

Figura A.27 – Código referente à variável do usuário irreversibilidade em colunas de destilação. 200
Figura A.28 – Código referente à variável do usuário eficiência racional em colunas de destilação. 201
Figura A.29 – Código referente à variável estimativa de custo de investimento em colunas de destilação. 202
Figura A.30 – Código referente à variável do usuário irreversibilidade em combustores. 203
Figura A.31 – Código referente à variável do usuário eficiência exergética combustores. 204
Figura A.32 – Resultado obtido para o projeto da tubulação. 205

NOMENCLATURA

Notação	Significado / Grandeza	Unidade
Af_{ρ}	Afinidade química da ρ-ésima reação química	J/kgmol
A	Área	m²
h_C	Altura da coluna de destilação	M
bhp	*Brake Horse Power*	W
Cp_i	Capacidade calorífica molar a pressão constante do i-ésimo componente	J/(kgmol.K)
$\upsilon_{\gamma,\rho}$	Coeficiente estequiométrico do γ-ésimo componente na reação ρ	-
a, b, c, d, e, f, g	Coeficientes da expressão da entalpia de gás ideal	-
Tr_i	Coeficiente de transformação	sej/J
C_V	Coeficiente de vazão	-
F	Constante de Faraday	96485 x 10³ (A.s)/kgmol
R	Constante dos gases	8314 J/(kgmol.K)
i	Corrente elétrica	A
$B^{\$}$	Custo exergético	W
d_C	Diâmetro da coluna de destilação	m
ddp°	Diferença de potencial da célula (tensão) no estado padrão (1 atm e 25 °C)	V
LMTD	Diferença de temperatura média logarítmica	K
φ	Eficiência energética	-
σ	Eficiência emergética	-
η	Eficiência exergética	-
ψ	Eficiência racional	-
NHE	Eletrodo padrão de hidrogênio	-
M_i	Emergia com referência a energia solar	sej
E	Energia	J
U	Energia interna mássica	J/kg
G^t	Energia de Gibbs total (extensiva)	W
G	Energia de Gibbs mássica	J/kg
$G_{f,i}$	Energia de Gibbs molar de formação ideal do i-	J/kgmol

	ésimo componente	
H	Entalpia mássica	J/kg
$\Delta H_{f,i}{}^{T}{}_{0n}$	Entalpia de formação do i-ésimo componente na temperatura de referência do simulador	J/kgmol
S	Entropia mássica	J/(kg.K)
EoS	Equação de estado (e*quation of state*)	-
B	Exergia mássica	J/kg
Fc	Fator de configuração para cálculo do custo de investimento de equipamentos	-
Fm	Fator de material de construção para cálculo do custo de investimento de equipamentos	-
Fd	Fator de tipo para cálculo do custo de investimento de equipamentos	-
Fp	Fator de pressão admissível para cálculo do custo de investimento de equipamentos	-
z_i	Fração molar do i-ésimo componente	-
γ	Fóton	-
GEE	Gases do efeito estufa	-
lhp	*Liquid Horse Power*	W
MS	Índice *Marshall-Swift*	-
IS	Índice de sustentabilidade	-
$ISBL_i$	Investimento do i-ésimo equipamento dentro do limite de bateria da unidade	US$
m	Massa	kg
MM	Massa molar da corrente	kg/kgmol
MM_i	Massa molar do i-ésimo componente	kg/kgmol
MTC	*Minimum thermodynamic conditions*	-
$\underline{\underline{A}}$	Matriz de incidência	-
G^E	Modelo de energia de Gibbs em excesso	-
NPSH	*Net Positive Suction Head*	M
N_F	Número do estágio de alimentação em uma coluna de destilação	-
N	Número de estágios em uma coluna de destilação	-
n	Número total de componentes na corrente	-
q	Parâmetro térmico da alimentação	-

PCI	Poder calorífico inferior	J/kg
PCS	Poder calorífico superior	J/kg
$\dot{W}_S$	Potência obtida por trabalho de eixo	W
$\dot{W}_{EL}$	Potência obtida por célula eletroquímica	W
P	Pressão absoluta	Pa
P_0	Pressão ambiente	Pa
P_{0n}	Pressão de referência do simulador	Pa
$P_{ref,i}$	Pressão parcial do i-ésimo componente no estado morto de referência	Pa
P_{00}	Pressão no estado morto de referência	Pa
PEMFC	*Próton Exchange Membrane Fuel Cell*	
r	Razão de refluxo	-
SI	Sistema Internacional de Unidades	-
SRK	Equação de estado de Soave-Redlich-Kwong	-
$\dot{E}$	Potência	W
μ_γ	Potencial químico do componente γ	J/kgmol
$\dot{M}$	Taxa de emergia	sej/s
$\dot{B}$	Taxa de exergia	W
$\dot{I}$	Irreversibilidade	W
$\dot{S}_G$	Taxa de geração de entropia	W/K
r_ρ	Taxa de reação	kgmole/s
$\dot{Q}$	Taxa de transferência de calor	W
T	Temperatura absoluta	K
T_0	Temperatura ambiente	K
T_{0n}	Temperatura de referência do simulador	K
$\overline{T}$	Temperatura média de operação	K
T_{00}	Temperatura no estado morto de referência	K
t	Tempo	S
$	Valor econômico	R$
$\dot{m}$	Vazão mássica	kg/s
$\dot{n}$	Vazão molar	kgmol/s
c	Velocidade da luz no vácuo	2,9979 x 10^8 m/s
$\underline{\dot{m}}$	Vetor de vazões mássicas	kg/s
$\underline{z}_i$	Vetor de frações molares dos componentes da i-	-

	ésima corrente	
$\underline{z_0}$	Vetor de frações molares no estado morto	-
$\underline{z_{00}}$	Vetor de frações molares no estado morto de referência	-
VB	*Visual Basic* (linguagem de programação)	-
V	Volume	m^3

CAPÍTULO I

INTRODUÇÃO

I -INTRODUÇÃO

O custo da energia é uma preocupação em qualquer processo produtivo. Os desafios iminentes que dizem respeito a sustentabilidade energética, demandam não apenas o desenvolvimento de novos processos mas, também, o aperfeiçoamento das rotas tecnológicas existentes.

Nesse sentido, concerne a área de engenharia de projeto a busca por soluções que consigam melhor aproveitar os recursos energéticos disponíveis, através de medidas respaldadas por critérios técnicos, que além de proporcionarem ganhos econômicos, também configurem aspectos sustentáveis a operações e processos que foram concebidos sem esta preocupação.

A disponibilidade de energia, ou simplesmente exergia, é destruída devido as irreversibilidades dos processos. A despeito das equações da conservação da massa, energia e momento, amplamente exploradas nos currículos de engenharia química; sobre a função exergia, pouco se fala. Além disso, a maioria dos simuladores de processos existentes no mercado: Aspen HYSYS®, Aspen Plus®, ProII®, EMSO/VRTHERM, não realizam o cálculo de disponibilidade em seus pacotes termodinâmicos.

A análise de disponibilidade, ou exergética, permite a avaliação de processos, sob o ponto de vista da energia útil. As correntes materiais e de energia são agrupadas através de uma ótica única, e interpretadas como correntes de exergia. Alguns processos, que até então não eram analisados sob o ponto de vista energético, podem ter suas eficiências calculadas e, dessa forma, podem ser comparados a processos completamente diferentes, baseados em uma escala cuja referência é o meio ambiente.

O presente trabalho visa implementar o cálculo de exergia no simulador Aspen HYSYS® e investigar quais os critérios de projeto que minimizam as irreversibilidades de operações e processos unitários, procurando estabelecer aspectos ambientais e econômicos. O texto encontra-se estruturado, além deste capítulo de Introdução, da seguinte forma:

No Capítulo II, encontra-se uma concisa revisão da literatura, cujo ponto de partida é a análise termodinâmica de processos e seus conceitos fundamentais. É apresentada uma comparação, entre os desenvolvimentos de alguns autores, que realizaram o cálculo de disponibilidade em simuladores de processos, posicionando o presente trabalho frente aos demais da literatura. Os cálculos do índice de sustentabilidade e dos custos exergéticos são também apresentados.

No Capítulo III, a metodologia proposta, que concatena diversos trabalhos da literatura, é apresentada por etapas. Primeiro, é descrita a implementação do cálculo de disponibilidade no Aspen HYSYS®. Segundo, são apresentados os algoritmos e rotinas dos cálculos de irreversibilidade e de eficiência, além dos diagramas de Grassmann, para diferentes tipos de operações e processos unitários.

No Capítulo IV, são discutidos os resultados obtidos para três estudos de casos. Sendo que, no segundo, é efetuada a atribuição de custos exergéticos para diferentes cenários de projeto de uma coluna de destilação despropanizadora. No terceiro, é feita uma comparação entre diferentes combustíveis hipotéticos para uma planta térmica simplificada. Ambos os resultados são discutidos, no que diz respeito ao índice de sustentabilidade.

Nos Capítulos V e VI, são apresentadas as conclusões e sugestões para trabalhos futuros, respectivamente. Nos Anexos, encontram-se todas as rotinas programadas em VB.

CAPÍTULO II

REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

II -REVISÃO BIBLIOGÁFICA

II.1 - ANÁLISE TERMODINÂMICA DE PROCESSOS

Entende-se por estado termodinâmico uma condição plenamente especificada por propriedades termodinâmicas como temperatura e pressão, e pela composição da matéria em questão, que independe da forma com que foi atingido. As funções matemáticas que dependem somente da condição presente, ou seja, do estado termodinâmico são denominadas funções de estado (Smith, et al., 1987).

Há diferentes formas de realizar uma determinada transformação. Sendo que, há uma maneira menos dispendiosa, sob o ponto de vista energético. O aumento desse dispêndio está relacionado à irreversibilidade do processo.

Entende-se por processo mecanicamente reversível uma transformação quase-estática, cujo sistema se afasta infinitesimalmente do equilíbrio com a vizinhança. Desse modo, um processo reversível representa um limite de desempenho para os processos reais. As operações unitárias reais são irreversíveis e, portanto, passíveis de análise termodinâmica. Para quantificar essa irreversibilidade deve ser utilizado o conceito da função de estado entropia.

Com o enfoque da conservação de energia, a eficiência termodinâmica de um processo deveria ser a mais alta possível, e a geração de entropia ou o trabalho perdido o menor possível. O projeto final depende fortemente de considerações econômicas, e o custo da energia é um fator importante. A análise termodinâmica de um processo específico mostra os locais de maiores ineficiências, equipamentos ou etapas do processo que devem ser alteradas ou substituídas para torná-lo melhor (Smith, et al., 1987).

Um escopo adicional para análise termodinâmica de processos surge na iminente discussão sobre os problemas relacionados ao meio ambiente. De maneira que, o projeto final passa a depender também das considerações ambientais, o que configura novos desafios de sustentabilidade energética.

II.1.1 - IRREVERSIBILIDADE: PRODUÇÃO DE DESORDEM

Do ponto de vista industrial, os processos que envolvem o escoamento de fluidos através de tubulações e equipamentos são os mais comuns. (Smith, et al., 1987). A Figura II.1 apresenta um processo genérico com escoamento, no qual um fluido, líquido ou gás, escoa através de um equipamento de uma única entrada para uma única saída:

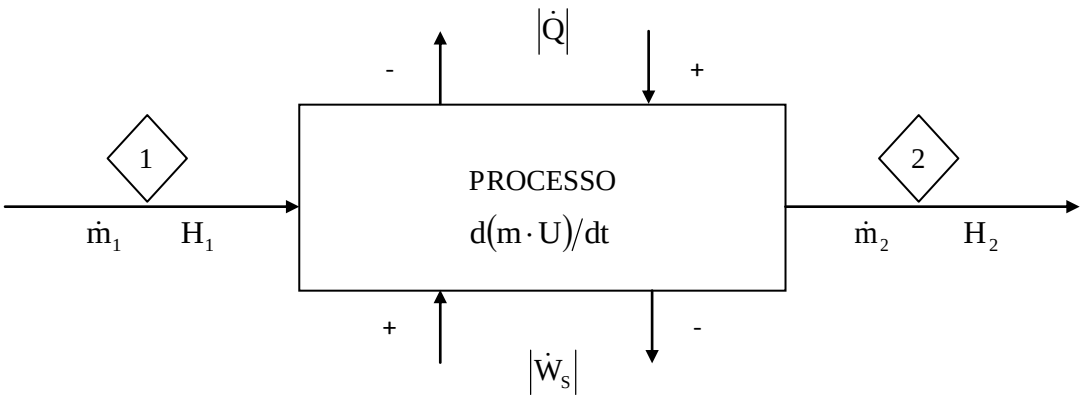


Figura II.1– Processo genérico com escoamento

O balanço de energia é então dado pela Equação II.1:

$$\frac{d(m \cdot U)}{dt} + \dot{m}_2 \cdot H_2 - \dot{m}_1 \cdot H_1 = \dot{Q} + \dot{W}_S \qquad \text{(II.1)}$$

Sendo:

U - Energia interna mássica em J/kg;

H - Entalpia mássica em J/kg;

m - Massa em kg;

$\dot{W}_S$ - Potência obtida por trabalho de eixo em W;

$\dot{Q}$ - Taxa de transferência de calor em W;

t - Tempo em s; e

$\dot{m}$ - Vazão mássica em kg/s.

Em regime estacionário, a vazão mássica é constante ao longo de toda trajetória do escoamento, e a equação do balanço de energia pode ser simplificada:

$$\dot{m} \cdot \Delta H = \dot{Q} + \dot{W}_S \qquad \text{(II.2)}$$

Para aplicação da Equação II.2, os valores de entalpia devem ser conhecidos. Como a entalpia é uma função de estado e uma propriedade da matéria, seus valores dependem somente das condições de temperatura, pressão e da composição da corrente em um determinado estado (Smith, et al., 1987).

O termo de trabalho de eixo significa o trabalho realizado pelo ou sobre o fluido escoando em uma parte do equipamento e é transmitido por um eixo. Essas operações são normalmente executadas por máquinas de fluxo.

O termo referente ao calor diz respeito a toda energia térmica adicionada ao fluido que escoa em determinado equipamento. Existem diversas operações onde a transferência de calor é importante. Todavia, as operações onde esse fenômeno é o objetivo principal são normalmente executadas por equipamentos denominados trocadores de calor. Operações de separação, como por exemplo, colunas de destilação, também necessitam da transferência de calor nos refervedores e condensadores.

Processos químicos são normalmente executados em reatores. Esses equipamentos podem ser contínuos ou em batelada. No que diz respeito ao balanço de energia, podem ou não ser adiabáticos.

A segunda lei da termodinâmica pode ser enunciada de diferentes formas. O enunciado matemático da segunda lei afirma que todo processo se desenvolve no sentido em que a variação total da entropia associada a ele é positiva, sendo o valor limite igual a zero, atingido somente em um processo reversível (Smith, et al., 1987).

No nível microscópico, a entropia pode ser entendida como o número de formas diferentes de ser arrumar um sistema. A interpretação qualitativa deste conceito é interessante, pois traz consigo o conceito de grau de desordem de um sistema. A geração de desordem em um processo é dada pela Equação II.3:

$$\dot{S}_G = \dot{m} \cdot \Delta S - \frac{\dot{Q}}{T_0} \qquad \text{(II.3)}$$

Define-se irreversibilidade através da Equação II.4:

$$\dot{I} = T_0 \cdot \dot{S}_G \qquad \text{(II.4)}$$

Substituindo a Equação II.3 em II.4, tem-se que:

$$\dot{I} = \dot{m} \cdot T_0 \cdot \Delta S - \dot{Q} \qquad \text{(II.5)}$$

Sendo:

$\dot{S}_G$ - Taxa de geração de entropia em W/K;

S - Entropia mássica em J/(kg.K);

T_0 - Temperatura ambiente em K;

$\dot{I}$ - Irreversibilidade em W;

$\dot{Q}$ - Taxa de transferência de calor em W; e

$\dot{m}$ - Vazão mássica em kg/s.

Como a segunda lei da termodinâmica exige que, em um sistema isolado, a variação de entropia total do sistema é maior ou igual a zero, sabe-se que, sua irreversibilidade é, no mínimo, nula.

Em sistemas abertos, tem-se que:

$$\dot{m} \cdot T_0 \cdot \Delta S \geq \dot{Q} \qquad \text{(II.6)}$$

Esta equação, que, aliás, representa matematicamente a segunda lei da termodinâmica, permite verificar que, de fato, a irreversibilidade de qualquer processo é, no mínimo, nula.

II.1.2 - EXERGIA: ESCALA DE DISPONIBILIDADE

Qualquer desequilíbrio com relação ao meio ambiente, seja de pressão, temperatura, composição química, velocidade ou elevação, consiste de uma oportunidade para realização de trabalho. Na medida em que, o estado se aproxima do estado que representa o meio ambiente, as oportunidades de desenvolver trabalho diminuem. O estado onde não há disponibilidade alguma para se desenvolver trabalho é denominado de estado morto, onde são satisfeitas condições de equilíbrio químico, térmico e mecânico.

Entende-se por exergia o trabalho máximo que se pode obter levando-se uma dada corrente ao estado de equilíbrio com o ambiente, por um processo reversível (Figura II.2). Diferentemente da energia, a exergia não se conserva, sendo destruída pelas irreversibilidades do processo. Diversos trabalhos introduziram o conceito de exergia como capacidade de realizar trabalho útil (Keenan, 1951) (Rant, 1957) (Kotas, 1985).

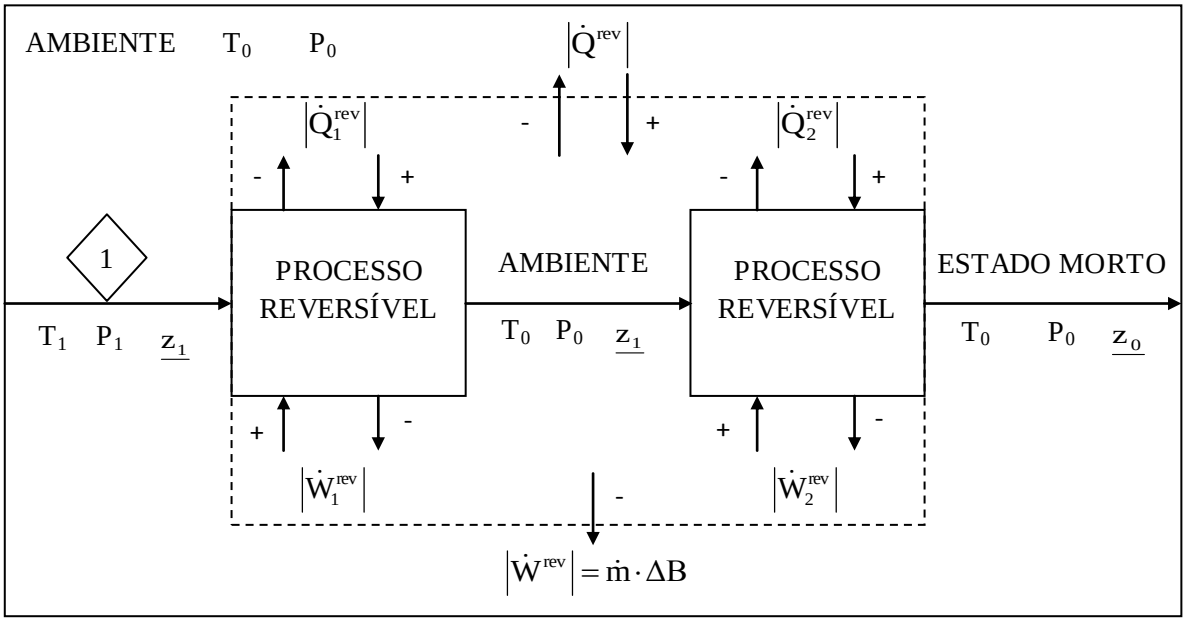


Figura II.2– Processo genérico com escoamento, o meio ambiente e o estado morto de referência.

A variação da exergia da corrente material referente ao processo genérico da Figura II.1, é dada pela Equação II.7:

$$\dot{m} \cdot \Delta B = \dot{Q} \cdot \left(1 - \frac{T_0}{\overline{T}}\right) + \dot{W}_S - \dot{I} \qquad \text{(II.7)}$$

Sendo:

B - Exergia mássica em J/kg;

$\dot{W}_S$ - Potência obtida por trabalho de eixo em W;

T_0 - Temperatura ambiente em K;

$\overline{T}$ - Temperatura média termodinâmica em K;

$\dot{I}$ - Irreversibilidade em W;

$\dot{Q}$ - Taxa de transferência de calor em W; e

$\dot{m}$ - Vazão mássica em kg/s.

Deste equacionamento, alguns aspectos devem ser ressaltados. A modificação da exergia de uma corrente está relacionado à troca de calor reversível com a vizinhança, à entrada ou retirada de trabalho e as irreversibilidades do processo.

O termo referente ao calor compreende a energia útil que é obtida através da sua aplicação em uma máquina de Carnot cujo reservatório frio opera a temperatura ambiente, e cujo reservatório quente é a própria temperatura de operação do processo. Sendo que, para operações em que há mudança de temperatura, utiliza-se o conceito de temperatura média termodinâmica.

De acordo com Ghannadzadeh (2012), a temperatura média termodinâmica ($\overline{T}$) é igual a:

$$\overline{T} = \frac{\int dQ}{\int \frac{dQ}{T}} = \frac{\Delta H}{\Delta S} \qquad \text{(II.8)}$$

Sendo:

$\overline{T}$ - Temperatura média termodinâmica em K;

H - Entalpia mássica em J/kg; e

S - Entropia mássica em J/(kg.K).

Uma comparação entre o balanço de energia e a equação da disponibilidade é feita na Tabela II.1:

Tabela II.1 – Comparação entre o balanço de energia e equação da disponibilidade de energia.

Equação	$\dot{m} \cdot \Delta H = \dot{Q} + \dot{W}_S$ (Balanço de energia - 1ª lei)	$\dot{m} \cdot \Delta B = \dot{Q} \cdot \left(1 - \frac{T_0}{\overline{T}}\right) + \dot{W}_S - \dot{I}$ (Disponibilidade e destruição)
Formas possíveis	$\dot{m} \cdot \Delta H$, $\dot{Q}$, $\dot{W}_S$	$\dot{m} \cdot \Delta B$, $\dot{Q} \cdot \left(1 - \frac{T_0}{\overline{T}}\right)$, $\dot{W}_S$
Funções de estado	H Entalpia	B Exergia
Grandezas dependentes do processo	$\dot{Q}$, $\dot{W}_S$	$\dot{Q}$, $\dot{W}_S$
Destruição / Degradação	-	$\dot{I}$

O termo da irreversibilidade da Equação II.7 compreende toda exergia destruída, ou seja, toda energia útil degradada no processo, em virtude da suas irreversibilidades inerentes e atacáveis. É o sumidouro da energia útil. Aplicando a definição de irreversibilidade (Equação II.5), na equação da exergia (Equação II.7), tem-se:

$$\dot{m} \cdot \Delta B = \dot{Q} \cdot \left(1 - \frac{T_0}{\overline{T}}\right) - \dot{m} \cdot T_0 \cdot \Delta S + \dot{Q} + \dot{W}_S \qquad \text{(II.9)}$$

Sendo:

B - Exergia mássica em J/kg;

$\dot{W}_S$ - Potência obtida por trabalho de eixo em W;

T_0 - Temperatura ambiente em K;

$\overline{T}$ - Temperatura média termodinâmica em K;

$\dot{Q}$ - Taxa de transferência de calor em W; e

$\dot{m}$ - Vazão mássica em kg/s.

Há algumas implicações interessantes na equação anterior, no que diz respeito ao aumento da irreversibilidade dos processos. Além da geração de entropia propriamente dita, a retirada de calor é uma fonte de irreversibilidade. Isto porque, fica evidente que o calor é uma forma menos nobre de energia, quando comparado a energia química, por exemplo, haja vista que está submetido a uma eficiência menor ou igual à de uma máquina de Carnot. Aplicando a 1ª lei, tem-se:

$$\dot{m} \cdot \Delta B = \dot{Q} \cdot \left(1 - \frac{T_0}{\overline{T}}\right) - \dot{m} \cdot T_0 \cdot \Delta S + \dot{m} \cdot \Delta H \qquad \text{(II.10)}$$

Sendo:

B - Exergia mássica em J/kg;

H - Entalpia mássica em J/kg;

S - Entropia mássica em J/(kg.K);

T_0 - Temperatura ambiente em K;

$\overline{T}$ - Temperatura média termodinâmica em K;

$\dot{Q}$ - Taxa de transferência de calor em W; e

$\dot{m}$ - Vazão mássica em kg/s.

A definição de disponibilidade é enunciada de diferentes formas na literatura. O conceito de exergia começou a ser amplamente explorado, de fato, somente a partir da década de 50 (Keenan, 1951), (Rant, 1957) e (Kotas, 1985). Principalmente porque a interpretação da escala foi ampliada no que concerne a compreensão dos fenômenos químicos. O trabalho de Szargut, et al., (1988) apresenta-se como um ponto de inflexão, pois, a partir dele, os processos químicos e metalúrgicos; e não somente os conceitos da área térmica, que eram foco dos trabalhos anteriores; começaram a ser abordados com exergia. Recentes trabalhos abordam a exergia química, tanto com metodologias empíricas, como analíticas (Gharagheizi, et al., 2007) (Zanchini, et al., 2009). O trabalho de Rivero (2002) enfatiza que o conceito de exergia é apto para concatenar em um único modelo, as considerações energéticas, econômicas e ecológicas.

De acordo com Rivero (2002) a implicação econômica da exergia reside no fato de que esta grandeza é capaz de mensurar a qualidade da energia útil, ou seja, a sua capacidade de realizar trabalho, sendo assim uma forma de atribuir valor econômico.

Já a implicação ambiental da exergia, de acordo com Rivero (2002), resulta no fato de que, esta grandeza não constitui uma escala absoluta, mas, tem como estado de referência o meio ambiente e a água; em termos de temperatura, pressão e composição. Sendo assim, uma forma de se mensurar o efeito do processo no ambiente.

A análise de disponibilidade de energia foi introduzida por Kotas (1985) como uma técnica útil que explora o conceito de qualidade para quantificar a porção da energia que pode ser aproveitada. A análise de disponibilidade, também conhecida como análise exergética, examina, em um volume de controle, o problema de sua máxima capacidade de realizar trabalho, em relação ao ambiente em questão (estado morto de referência).

Desse modo, esta análise procura saber, quais as perdas (irreversibilidades) que podem ser atacadas; quais as variáveis de decisão possuem influência no projeto de determinada operação ou processo unitário e que alternativa de processo proporciona a melhor eficiência exergética, ou seja, que ocorre com degradação mínima de energia útil.

Em simulação de processos, a implementação da análise exergética é uma técnica útil na avaliação, aliada ao tradicional balanço de massa e energia. Entretanto, torna-se necessário o

cálculo da grandeza exergia de uma corrente. Para uma dada operação ou processo unitário, as entradas e saídas de exergia têm diferentes formas, que correspondem a calor, trabalho e correntes materiais.

Diversos trabalhos iniciaram as implementações do cálculo da exergia em simuladores de processo (Montelongo-Luna, 2007), (Abdollahi-Demneh, et al., 2011) e (Ghannadzadeh, et al., 2012).

A Tabela II.2, foi adaptada do trabalho de Ghannadzadeh, et al., (2012) e faz uma revisão da literatura, comparando as implementações de exergia em simuladores de processos, já publicadas até então. Nela, aspectos como o estado de referência e a possibilidade de modificação; o cálculo da exergia de trabalho e calor; e a maneira como fora realizada a implementação são colocados para comparação.

A motivação para implementação do cálculo da exergia em simuladores de processos reside na aplicação desta metodologia para identificar irreversibilidades, avaliar tanto as correntes de processo e as utilidades, alinhando rentabilidade e sustentabilidade no projeto de processos.

O presente trabalho objetiva estender a implementação de Abdollahi-Demneh, et al., (2011) , que contempla a possibilidade de alteração do estado de referência, aplicando também o cálculo da exergia de correntes de energia; bem como, avaliação de aspectos termoeconômicos e ambientais.

Tabela II.2 – Comparação dos cálculos de exergia existentes em simuladores de processo. Adaptado de Ghannadzadeh, et al., (2012)

Referência	Componentes da exergia	Estado de referência	Modificar T_0 e P_0	Trabalho e calor	Termoeconomia
(Hinderink, et al., 1996)	Física, química e mistura	(Szargut, et al., 1988)	Não	Não	Não
(Montelongo-Luna, 2007)	Física, química e mistura	(Van Gool, 1998)	Não	Não	Não
(Zargarzadeh, et al., 2007)	Física	(Szargut, et al., 1988)	Não	Sim	Não
(Querol, et al., 2011)	Física e química	(Szargut, et al., 1988)	Não	Sim	Sim
(Abdollahi-Demneh, et al., 2011)	Física e química	(Szargut, et al., 1988)	Sim	Não	Não
PRESENTE TRABALHO	**Física e química**	(Szargut, et al., 1988)	**Sim**	**Sim**	**Sim**

Referência	Simulador	Implementação	Dependente do modelo termodinâmico	Comentários
(Hinderink, et al., 1996)	Aspen Plus®	Subrotina externa	Sim	Extremamente dependente do modelo
(Montelongo-Luna, 2007)	Sim42	Incluído no simulador	Sim	Sem rotinas externas
(Zargarzadeh, et al., 2007)	Online	Subrotina externa	Não	Interface com as informações
(Querol, et al., 2011)	Aspen Plus®	Excel	Sim	Aplicável a análises termoeconômicas
(Abdollahi-Demneh, et al., 2011)	Aspen HYSYS®	VB	Sim	Número limitado de componentes
PRESENTE TRABALHO	**Aspen HYSYS®**	**VB**	**Sim**	**Número limitado de componentes**

II.2 - ANÁLISE DE DISPONIBILIDADE EM OPERAÇÕES E PROCESSOS UNITÁRIOS

A abordagem da análise de disponibilidade, ou exergética, consiste em equacionar a porção de energia útil contida nas correntes materiais, de calor e de trabalho. Desse modo, não há distinção entre corrente material e de energia, sendo ambas contabilizadas apenas quanto ao conteúdo de energia útil (exergia) que transportam, conforme Figura II.3.

Dado uma corrente material, por exemplo, uma vez calculada sua exergia, sabe-se, o quanto de energia útil pode-se extrair desta corrente. Comparando-se com o rendimento real obtido no processo, pode-se verificar que parte desta energia fora destruída em virtude das irreversibilidades. Cabe, portanto, a análise exergética de processos: (1) identificar as operações ou processos unitários onde há degradação da energia útil; (2) quantificar as irreversibilidades; (3) identificar parâmetros de projeto que constituem variáveis de decisão para a eficiência exergética; (4) otimização e (5) verificação dos resultados sob aspectos econômicos e ambientais.

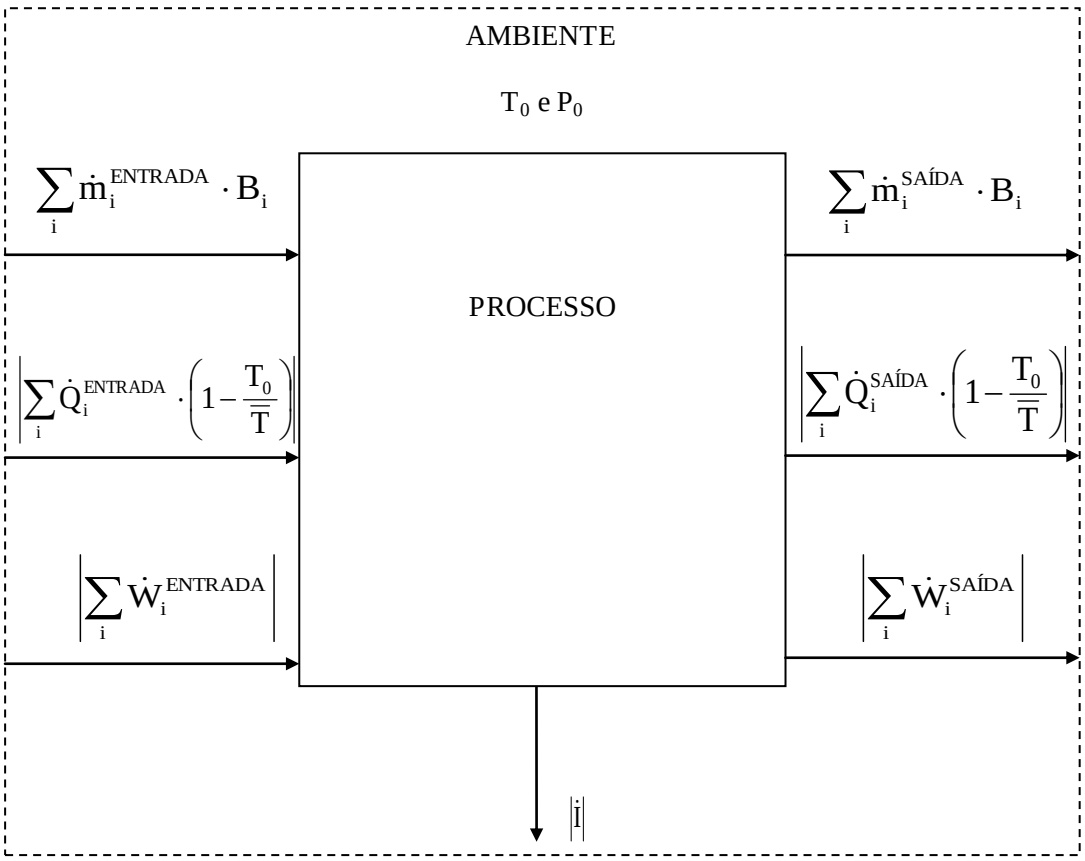


Figura II.3– Análise exergética em um processo genérico com escoamento.

A partir das exergias das correntes, a irreversibilidade ($\dot{I}$) pode ser calculada como:

$$\sum_i \dot{m}_i^{ENTRADA} \cdot B_i - \sum_i \dot{m}_i^{SAÍDA} \cdot B_i + \left| \sum_i \dot{Q}_i^{ENTRADA} \cdot \left(1 - \frac{T_0}{\overline{T}_i}\right) \right| - \left| \sum_i \dot{Q}_i^{SAÍDA} \cdot \left(1 - \frac{T_0}{\overline{T}_i}\right) \right|$$
$$+ \left| \sum_i \dot{W}_i^{ENTRADA} \right| - \left| \sum_i \dot{W}_i^{SAÍDA} \right| = \dot{I} \qquad \text{(II.11)}$$

Para realizar uma análise exergética é essencial definir indicadores capazes de mensurar a eficiência exergética, ou seja, o desempenho da operação ou processo unitário sob o ponto de vista da exergia.

Sejam:

$$\dot{B}_M^{ENTRADA} = \sum_i \dot{m}_i^{ENTRADA} \cdot B_i$$
$$\dot{B}_M^{SAÍDA} = \sum_i \dot{m}_i^{SAÍDA} \cdot B_i \qquad \text{(II.12)}$$

$$\dot{B}_Q^{ENTRADA} = \left| \sum_i \dot{Q}_i^{ENTRADA} \cdot \left(1 - \frac{T_0}{\overline{T}_i}\right) \right|$$
$$\dot{B}_Q^{SAÍDA} = \left| \sum_i \dot{Q}_i^{SAÍDA} \cdot \left(1 - \frac{T_0}{\overline{T}_i}\right) \right| \qquad \text{(II.13)}$$

$$\dot{B}_W^{ENTRADA} = \left| \sum_i \dot{W}_i^{ENTRADA} \right|$$
$$\dot{B}_W^{SAÍDA} = \left| \sum_i \dot{W}_i^{SAÍDA} \right| \qquad \text{(II.14)}$$

E também,

$$\dot{B}^{ENTRADA} = \dot{B}_M^{ENTRADA} + \dot{B}_Q^{ENTRADA} + \dot{B}_W^{ENTRADA}$$
$$\dot{B}^{SAÍDA} = \dot{B}_M^{SAÍDA} + \dot{B}_Q^{SAÍDA} + \dot{B}_W^{SAÍDA} \qquad \text{(II.15)}$$

Desse modo, a Equação II.11 pode ser reescrita:

$$\dot{B}_M^{ENTRADA} - \dot{B}_M^{SAÍDA} + \dot{B}_Q^{ENTRADA} - \dot{B}_Q^{SAÍDA} + \dot{B}_W^{ENTRADA} - \dot{B}_W^{SAÍDA} = \dot{I} \quad \text{(II.16)}$$

Logo,

$$\dot{B}^{ENTRADA} - \dot{B}^{SAÍDA} = \dot{I} \quad \text{(II.17)}$$

Então:

$$\Delta\dot{B} + \dot{I} = 0 \quad \text{(II.18)}$$

Sabe-se que a irreversibilidade é proporcional a geração de entropia ($\dot{S}_G$):

$$\dot{I} = T_0 \cdot \dot{S}_G \quad \text{(II.19)}$$

Desse modo,

$$\Delta\dot{B} = -T_0 \cdot \dot{S}_G \quad \text{(II.20)}$$

Apesar de ser facilmente calculada a partir da geração entropia, a irreversibilidade por si só, não expressa a eficiência do processo, em termos de aproveitamento de energia livre. Ghannadzadeh, et al., (2012) definem eficiência exergética como sendo a razão entre as saídas de exergia sobre as entradas de exergia de um determinado sistema.

$$\eta = \frac{\dot{B}^{SAÍDA}}{\dot{B}^{ENTRADA}} = 1 - \frac{\dot{I}}{\dot{B}^{ENTRADA}} \quad \text{(II.21)}$$

Expandindo a expressão, tem-se:

$$\eta = \frac{\sum_i \dot{m}_i^{SAÍDA} \cdot B_i + \left|\sum_i \dot{Q}_i^{SAÍDA} \cdot \left(1 - \frac{T_0}{\overline{T}}\right)\right| + \left|\sum_i \dot{W}_i^{SAÍDA}\right|}{\sum_i \dot{m}_i^{ENTRADA} \cdot B_i + \left|\sum_i \dot{Q}_i^{ENTRADA} \cdot \left(1 - \frac{T_0}{\overline{T}}\right)\right| + \left|\sum_i \dot{W}_i^{ENTRADA}\right|} = 1 - \frac{\dot{I}}{\sum_i \dot{m}_i^{ENTRADA} \cdot B_i + \left|\sum_i \dot{Q}_i^{ENTRADA} \cdot \left(1 - \frac{T_0}{\overline{T}}\right)\right| + \left|\sum_i \dot{W}_i^{ENTRADA}\right|} \quad \text{(II.22)}$$

Apesar de ser facilmente calculada, a eficiência exergética, definida pela equação (II.22), não proporciona uma visão clara para alguns casos. Por exemplo, Ghannadzadeh, et al., (2012) cita um trocador de calor, que aquece uma corrente de hidrocarboneto. Nesta operação unitária, apenas a exergia física se altera, em virtude do aumento de temperatura. Por outro lado, não há alteração na sua composição química, desse modo, a exergia química não se altera. Se calculada para esta operação a eficiência exergética do trocador de calor seria próximo a unidade, o que, entretanto, não significa que o trocador esteja operando com ótimo desempenho exergético. Desse modo, surge o conceito de exergia invariante, ou seja, a porção da exergia não alterada pelo processo ou operação unitária.

Além do conceito de eficiência exergética, há o conceito de eficiência racional, que Ghannadzadeh, et al., (2012) descrevem como sendo a razão entre variação de exergia desejável dividido pela exergia utilizada. De acordo com Ghannadzadeh, et al., (2012) este conceito é útil para avaliação de desempenho das operações unitárias mais comuns.

Diferentemente da eficiência exergética, a eficiência racional depende do objetivo da operação unitária. De acordo com Ghannadzadeh, et al., (2012) é possível definir diferentes objetivos para um mesmo tipo de operação unitária. De uma forma geral, a eficiência racional (ψ) pode ser definida como:

$$\psi = \frac{\left(\Delta\dot{B}\right)_{DESEJÁVEL}}{\left(\Delta\dot{B}\right)_{UTILIZADO}} = \frac{\left(\dot{B}^{SAÍDA} - \dot{B}^{ENTRADA}\right)_{DESEJÁVEL}}{\left(\dot{B}^{SAÍDA} - \dot{B}^{ENTRADA}\right)_{UTILIZADO}} \quad \text{(II.23)}$$

Expandindo a expressão, tem-se:

$$\psi = \frac{\left(\begin{array}{l} \sum_i \dot{m}_i^{SAÍDA} \cdot B_i - \sum_i \dot{m}_i^{ENTRADA} \cdot B_i + \\ \left| \sum_i \dot{Q}_i^{SAÍDA} \cdot \left(1 - \frac{T_0}{\overline{T}}\right) \right| - \left| \sum_i \dot{Q}_i^{ENTRADA} \cdot \left(1 - \frac{T_0}{\overline{T}}\right) \right| + \\ \left| \sum_i \dot{W}_i^{SAÍDA} \right| - \left| \sum_i \dot{W}_i^{ENTRADA} \right| \end{array} \right)_{DESEJÁVEL}}{\left(\begin{array}{l} \sum_i \dot{m}_i^{SAÍDA} \cdot B_i - \sum_i \dot{m}_i^{ENTRADA} \cdot B_i + \\ \left| \sum_i \dot{Q}_i^{SAÍDA} \cdot \left(1 - \frac{T_0}{\overline{T}}\right) \right| - \left| \sum_i \dot{Q}_i^{ENTRADA} \cdot \left(1 - \frac{T_0}{\overline{T}}\right) \right| + \\ \left| \sum_i \dot{W}_i^{SAÍDA} \right| - \left| \sum_i \dot{W}_i^{ENTRADA} \right| \end{array} \right)_{UTILIZADO}} \qquad \text{(II.24)}$$

Com o intuito de facilitar o entendimento, Ghannadzadeh, et al., (2012) introduzem o termo de rejeito, admitindo que as correntes de processo podem ser ou não úteis. Desse modo, o termo de variação de exergia utilizado é descrito como:

$$\left(\Delta \dot{B}\right)_{UTILIZADO} = \left(\Delta \dot{B}\right)_{DESEJÁVEL} + \dot{I} + \left(\sum_i \dot{m}_i^{SAÍDA} \cdot B_i \right)_{REJEITOS} \qquad \text{(II.25)}$$

Logo, a expressão da eficiência racional pode ser escrita da seguinte forma:

$$\psi = 1 - \frac{\dot{I} + \left(\sum_i \dot{m}_i^{SAÍDA} \cdot B_i \right)_{REJEITOS}}{\left(\Delta \dot{B}\right)_{UTILIZADO}} \qquad \text{(II.26)}$$

A equação (II.26) mostra que, se a irreversibilidade, a perda externa de exergia e a exergia utilizada são conhecidas, é possível calcular a eficiência racional. Resta ainda, definir a função objetivo específica de cada operação unitária. No próximo capítulo deste trabalho, o projeto de algumas operações unitárias é discutido sob o ponto de vista da análise de disponibilidade.

II.3 - EXERGIA, MEIO AMBIENTE, SUSTENTABILIDADE E ECONOMIA

II.3.1 - EXERGIA, MEIO AMBIENTE E SUSTENTABILIDADE

A energia pode ser utilizada para satisfazer as necessidades humanas e melhorar a qualidade de vida, mas, geralmente, conduz a impactos ambientais. Alguns autores afirmam que a redução da emissão de gás carbônico na atmosfera pode ser conseguida através do aumento da eficiência exergética, redução do uso de combustíveis fósseis e introdução de fontes alternativas de energia (Rosen, et al., 2008).

Segundo Rosen, et al., (2008), a conexão entre a segunda lei da termodinâmica e o impacto ambiental, é demonstrada através da escala de disponibilidade energética. Em parte, porque esta escala utiliza o meio ambiente como estado de referência, logo, a magnitude da exergia depende de ambos os estados, do sistema e do meio ambiente.

Ainda segundo Rosen, et al., (2008), para grande parte dos processos, a minimização do impacto ambiental está relacionada a um aumento da eficiência exergética. Há algumas exceções, por exemplo, a instalação de sistemas de controle de poluição, pode diminuir a eficiência exergética de um processo.

Os autores afirmam que o impacto ambiental de um processo, está relacionado a três contribuições: produção de desordem, degradação dos recursos e emissão de rejeitos. E essas contribuições, são inversamente proporcionais a eficiência exergética do processo, de acordo com a Figura II.4:

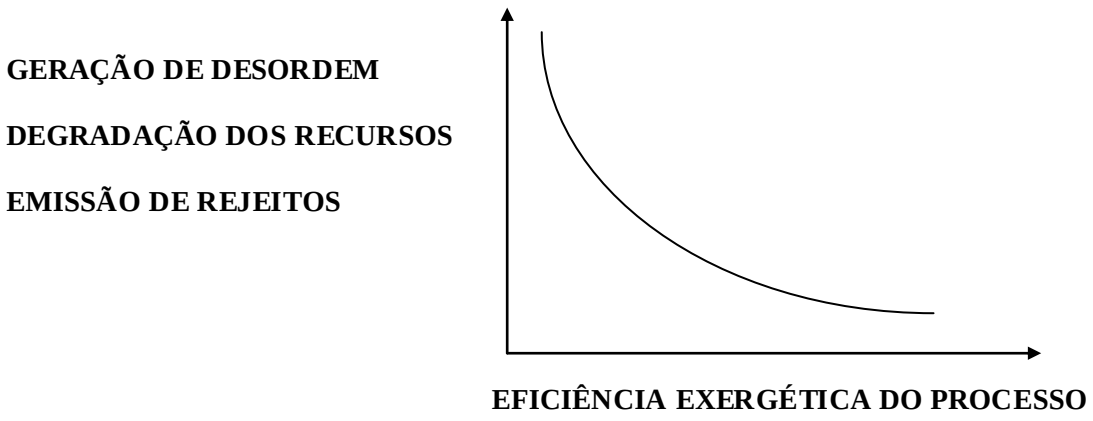


Figura II.4– Ilustração qualitativa da relação entre a eficiência exergética de um processo e o impacto ambiental em termos de produção de desordem, degradação de recursos ou emissão de rejeitos. Adaptado de Rosen, et al., (2008).

De forma geral, para reduzir os impactos relacionados a degradação dos recursos, os autores sugerem a utilização de fontes externas de exergia, por exemplo, a luz solar. A Terra é um sistema aberto que recebe um fluxo de exergia através da luz solar e, praticamente, toda exergia é radiada para o universo. O impacto ambiental dos processos seria menor, caso parte desta exergia fosse utilizada, substituindo recursos encontrados na natureza.

Quando emitido para o ambiente, qualquer rejeito contém exergia, haja vista que, não está em equilíbrio com o meio ambiente. Essa exergia contida no rejeito, consiste em um potencial de causar danos no meio ambiente.

Rosen, et al., (2008) propuseram um Índice de Sustentabilidade do processo, calculado através do número de depleção:

$$D_p = \frac{\dot{I}}{\dot{B}^{ENTRADA}} = 1 - \eta \qquad \text{(II.27)}$$

O Índice de Sustentabilidade do processo é definido como o inverso do número de depleção:

$$IS = \frac{1}{D_p} = \frac{1}{(1 - \eta)} \qquad \text{(II.28)}$$

Portanto, a relação entre sustentabilidade, impacto ambiental com a eficiência exergética, é ilustrada na Figura II.5:

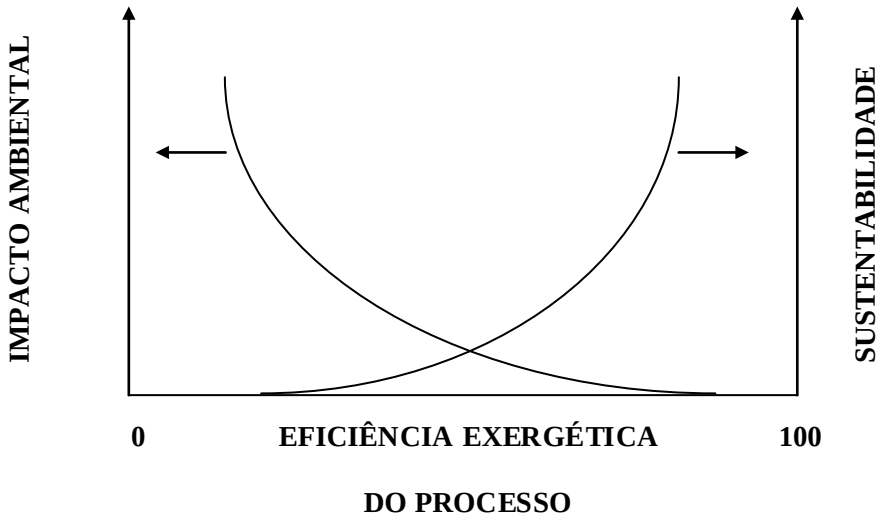


Figura II.5– Ilustração qualitativa da relação entre a eficiência exergética de um processo, o impacto ambiental e a sustentabilidade. Adaptado de Rosen, et al., (2008).

II.3.2 - EXERGIA E ECONOMIA

Segundo Rosen, et al., (2008), a escala de disponibilidade é, para grande parte dos casos, uma forma consistente de se medir o valor econômico, ao passo que a energia é aplicável apenas a algumas situações. A área de conhecimento que relaciona exergia com economia é chamada de termoeconomia. Este assunto foi desenvolvido por Valero e Lozano (1993).

II.3.2.1 - *ATRIBUIÇÃO DE CUSTOS EXERGÉTICOS PARA ANÁLISE TERMOECONÔMICA DE PROCESSOS*

A análise termoeconômica de processos visa estabelecer custos, baseados unicamente em parâmetros termodinâmicos. Valero e Lozano (1993) formularam um procedimento para atribuição desses custos, baseado no conceito de exergia e na matriz de incidência. Uma simples

análise do processo permite a distinção dos diferentes tipos de correntes: Recurso (F) ou Produto (P); Perda (L) ou Destruição (D). Desse modo, tem-se:

$$\text{PRODUTO (P)} = \text{RECURSOS (F)} - \text{PERDAS (L)} - \text{DESTRUIÇÃO (D)} \qquad \text{(II.29)}$$

De acordo com Valero e Lozano (1993), o custo exergético de uma corrente ($B^{\$}$), seja Recurso (F) ou Produto (P) é a quantidade real de exergia que tenha sido necessária para produzi-la. Esta quantidade é no mínimo igual à exergia da corrente:

$$B_i^{\$} \geq \dot{m}_i \cdot B_i \qquad \text{(II.30)}$$

Entende-se por sistema energético o total de subsistemas ou equipamentos, acrescido o total de correntes materiais e de energia. A relação entre as correntes e os subsistemas, estabelece a matriz de incidência ($\underline{\underline{A}}(n,m)$). Na matriz, n representa o número de subsistemas e m o número de correntes. A Figura II.6 representa um exemplo genérico de um sistema energético.

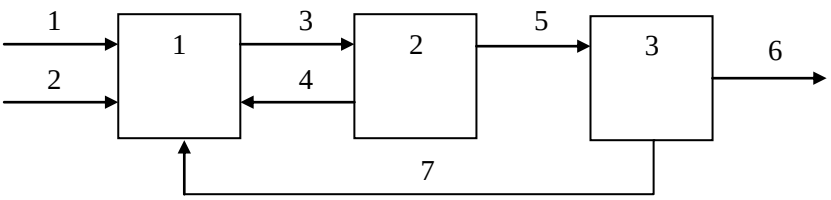


Figura II.6– Sistema energético genérico.

A matriz de incidência para o sistema energético genérico da Figura II.6 encontra-se representada na Tabela II.3:

Tabela II.3 – Mariz de incidência para sistema energético genérico.

1	1	-1	1	0	0	1
0	0	1	-1	-1	0	0
0	0	0	0	1	-1	-1

Seja $\underline{\dot{m}}(m,1)$ o vetor com as vazões mássicas das correntes, o balanço de massa do sistema é então dado por:

$$\underline{\underline{A}} \cdot \underline{\dot{m}} = \underline{0} \qquad \text{(II.31)}$$

Da mesma forma, seja $\underline{\dot{B}}(m,1)$ o vetor com as exergias em unidade de potência de todo o sistema e $\underline{\dot{D}}(n,1)$ o vetor com as irreversibilidades de cada operação ou processo unitário. Desse modo, tem-se que:

$$\underline{\underline{A}} \cdot \underline{\dot{B}} = \underline{\dot{D}} \qquad \text{(II.32)}$$

Através da definição da matriz de incidência, é possível, portanto, resolver o problema de atribuição de custos**.** Para isto, Valero e Lozano (1993) definiram algumas preposições básicas para o problema de atribuição de custos, dentre as quais é válido citar:

- O custo exergético de uma corrente ($B^{\$}$), seja Recurso (F) ou Produto (P) é a quantidade real de exergia que tenha sido necessário para produzi-la.
- Na ausência de uma atribuição externa, pode-se atribuir um custo exergético nulo as perdas do sistema, uma vez que, não possuem utilidade posterior.
- Na ausência (pelo desconhecimento) de um valor externo, o custo exergético dos fluxos de entrada ao sistema é igual a sua exergia. $B_i^{\$} = \dot{m}_i \cdot B_i = \dot{B}_i$
- Os custos exergéticos das correntes de entrada em um equipamento devem ser repercutidos nas correntes úteis que deixam o mesmo.

- Se um produto de uma unidade é, de fato, parte de uma corrente de entrada, entende-se que o custo exergético unitário deverá ser o mesmo da corrente de entrada.
- Se o produto de uma unidade for composto de várias correntes, será atribuído um mesmo custo exergético unitário a todas elas.
- O custo exergético é uma propriedade conservativa, portanto: $\sum_i B_i^{\$} = 0$.

Considerando um sistema constituído de vários subsistemas, o balanço de custos exergéticos, baseado nas preposições de Valero e Lozano (1993), constitui o seguinte sistema de equações:

$$\underline{\underline{A}} \cdot \underline{B^{\$}} = \underline{0} \qquad \text{(II.33)}$$

Sendo o vetor de custos exergéticos $\underline{B^{\$}}$ a quantidade de exergia gasta para produzir determinada corrente.

II.4 - EMERGIA: HISTÓRICO DA ENERGIA

Assim como a análise de disponibilidade, o conceito de emergia, também pode ser utilizado para cálculo de índices de sustentabilidade de processos. Definido por Zhang, et al., (2010), como sendo o conteúdo de energia disponível que fora utilizado, direta ou indiretamente, para construção do produto ou serviço, expresso em unidades de um tipo de energia, sendo a energia solar normalmente utilizada como referência (sej). A emergia não é, entretanto, uma função de estado, haja vista que, está diretamente relacionada ao caminho percorrido para se chegar a determinada fonte de energia.

Para o cálculo da emergia, utiliza-se um parâmetro inverso à eficiência de obtenção do conteúdo de energia, denominado coeficiente de transformação. O coeficiente de transformação (Tr_i) é uma grandeza intensiva, normalmente medida em emergia por unidade de energia (sej/J).

Desse modo, tem-se:

$$M_i = Tr_i \cdot E \tag{II.34}$$

Sendo:

M_i - Emergia com referência a energia solar em sej;

Tr_i - Coeficiente de transformação em sej/J; e

E - Energia em J.

Recentemente, Mu, et al., (2012) aplicaram o conceito de emergia em processos químicos. Os autores abordaram a álgebra da emergia em quatro estruturas básicas da engenharia de processos: série, paralelo, *by-pass* e reciclo.

Zhang, et al., (2010) revisaram os indicadores de processos denominados eco-tecnológicos. Os indicadores de emergia são funções do tipo de energia, sendo estas classificadas de acordo com os tipos de fontes (S): renováveis (R), não renováveis (N) ou compradas (F). Os autores fazem também, uso de diagramas de emergia (Figura II.7):

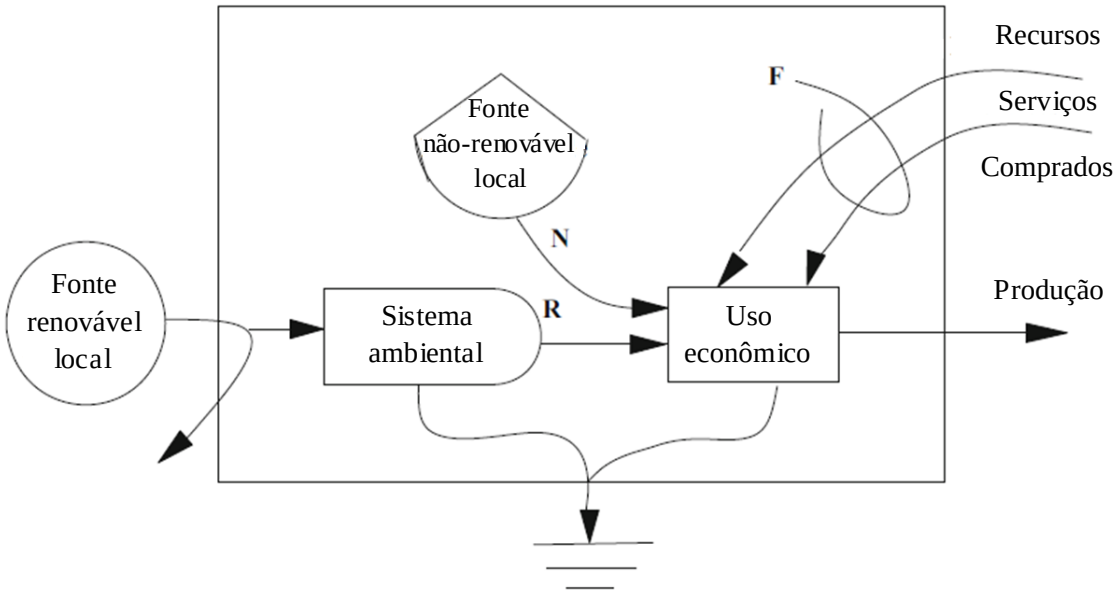


Figura II.7 – Diagrama ilustrando os princípios da contabilização da emergia por meio da distinção entre recursos renováveis e não-renováveis, sistema ambiental e indústria de processamento.

Adaptado de Zhang, et al., (2010).

Siubba (2010) compara e distingue os propósitos e fundamentos da análise exergética e emergética. Neste trabalho, o autor ressalta que análise exergética, que é baseada na segunda lei da termodinâmica, deve ser utilizada para avaliação de processos industriais. Por outro lado, a análise emergética é um método energético especial para comparação entre diferentes alternativas, que pode ser útil quando existem variáveis que não podem ser definidas em termos de disponibilidade, como por exemplo, fontes agroeconômicas, políticas sociais e serviços de uma forma geral.

Baseado na análise de Siubba (2010), o presente trabalho não utilizará o cálculo da emergia em sua metodologia, uma vez que, aspectos políticos, sociais, fontes renováveis de energia abrem espaço para outro tipo de discussão, que não escopo deste trabalho. O conceito de emergia é mencionado com intuito de distinguí-lo de custo exergético e ressaltar que trata-se de um outro tipo de metodologia, cuja análise aborda outras variáveis, de características mais abrangentes.

CAPÍTULO III

METODOLOGIA

III - METODOLOGIA

A metodologia aplicada no presente trabalho é composta pelas seguintes etapas, a saber:

1. Implementação do cálculo da exergia no simulador de processos Aspen HYSYS® de acordo com a metodologia proposta por Abdollahi-Demneh, et al., (2011);
2. Implementação do cálculo de funções objetivo no simulador de processos Aspen HYSYS® para otimização de operações e processos unitários, de acordo com: Ghannadzadeh, et al., (2012), Som, et al., (2008), Midilli, et al., (2009), Baniasadi, et al., (2012);
3. Cálculo das perdas exergéticas atacáveis e inevitáveis em trocadores de calor e colunas de destilação, de acordo com a metodologia proposta por Wei, et al., (2012); e
4. Avaliação econômica e ambiental de acordo com: Valero, et al., (1993) e Rosen, et al., (2008).

III.1 - CÁLCULO DA EXERGIA EM SIMULADOR DE PROCESSOS

O cálculo da exergia em simuladores de processo, a priori, segue a mesma concepção das demais funções de estado. Dados: temperatura, pressão, composição e vazão de uma corrente de processo, o sistema está completamente especificado e a exergia, assim como as demais funções de estado podem ser avaliadas.

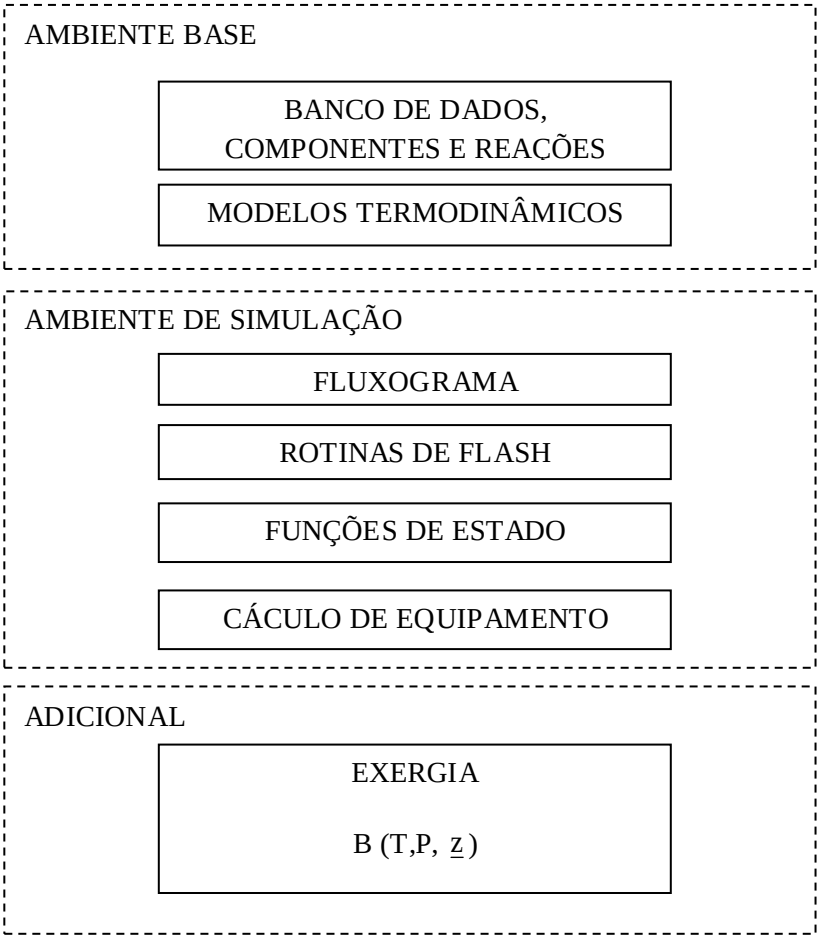


Figura III.1 - Estrutura simplificada de um programa simulador de processo e adicional cálculo da exergia.

III.1.1 - CÁLCULO DA EXERGIA EM CORRENTES DE PROCESSO

Diferentemente das demais funções de estado, onde o estado de referência é, por conveniência, gás ideal a temperatura e pressão ambiente; a escala de disponibilidade utiliza como referência um estado denominado de "morto" (conforme Tabela III.1), haja vista que, a partir dele, não é possível produzir trabalho (Szargut, et al., 1988).

Há duas formas de se calcular exergia disponíveis da literatura. A primeira, decompõem a exergia em duas componentes: química e física, proposta por Kotas (1985). A segunda, em três componentes: química, física e de mistura, proposta por Van Gool (1998). Há, na literatura, um maior número de trabalhos que utilizam a metodologia de Kotas (1985): (Abdollahi-Demneh, et al., 2011) (Ghannadzadeh, et al., 2012).

A metodologia implementada neste trabalho foi proposta por Abdollahi-Demneh, et al., (2011) . A referência de estado morto adotada, foi sugerida por Szargut, et al., (1988), que também foi utilizada em diversos trabalhos recentes (Ghannadzadeh, et al., 2012).

Tabela III.1 – Estado morto de referência proposto por Szargut, et al., (1988)

Temperatura (T_{00})	298,15 K
Pressão (P_{00})	99312 Pa
Componente	Pressão parcial (Pa)
N_2	75780
O_2	20390
CO_2	33,5
H_2O	2200
D_2O	0,342
Ar	906
Xe	0,0087
Ne	1,77
Kr	0,097
He	0,485

O procedimento proposto por Abdollahi-Demneh, et al., (2011) consiste em um método direto, sem *loops* de programação, para o cálculo da exergia de uma corrente de processo, implementada através de código em VB no programa simulador de processos Aspen HYSYS®.

Na ausência de efeitos nucleares, campos magnéticos, elétricos, e de tensão superficial, a exergia de uma corrente de processo, é computada pela soma das contribuições: física, química, cinética e potencial.

$$B = B_F + B_Q + B_C + B_P \quad \text{(III.1)}$$

Nas aplicações em que as contribuições cinética e potencial possuírem ordem de grandeza inferior as demais componentes, podem ser desconsideradas. (Abdollahi-Demneh, et al., 2011)

Antes de iniciar o detalhamento, é válido distinguir algumas referências utilizadas. Entende-se por estado de referência, um estado arbitrário, utilizado para o calculo das funções de estado tradicionais do simulador de processos, como entalpia e entropia, convenientemente definido como sendo gás ideal puro a temperatura (T_{0n}) e pressão (P_{0n}).

Entende-se por estado morto de referência, um estado onde não é possível produzir trabalho, cuja referência aqui adotada, é a sugerida por Szargut, et al., (1988) e utiliza a notação de (T_{00}) e (P_{00}), para as variáveis de temperatura e pressão do estado morto de referência, respectivamente.

Entende-se por ambiente, um estado de temperatura (T_0) e pressão (P_0), sendo ambos definidos pelo usuário, para que, efetue o cálculo de disponibilidade de energia da corrente material ou de energia, em relação às condições de meio ambiente que lhe for conveniente.

A exergia física de uma corrente material corresponde ao trabalho obtido, por unidade de massa da corrente, do seu estado inicial de temperatura e pressão até as condições de temperatura e pressão do ambiente, por meio de um processo reversível. Em outras palavras, consiste em conduzir a corrente material ao estado de equilíbrio termo-mecânico com o ambiente, por meio de um processo reversível. (Hinderink, et al., 1996)

- Etapa 1: Cálculo da exergia física da corrente.

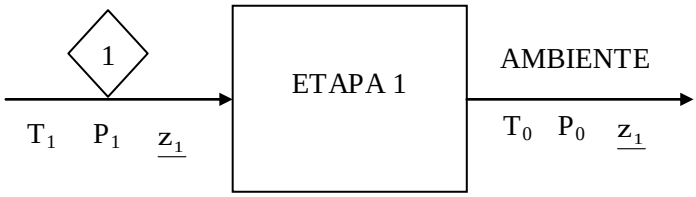


Figura III.2 – Transformação referente ao cálculo da exergia física de uma corrente material.

$$B_F = \left(H(T_1, P_1, \underline{z_1}) - H(T_0, P_0, \underline{z_1})\right) - T_0 \cdot \left(S(T_1, P_1, \underline{z_1}) - S(T_0, P_0, \underline{z_1})\right) \quad \text{(III.2)}$$

A exergia química de uma corrente material corresponde ao trabalho obtido pela transformação química da composição de uma unidade de massa da corrente, nas condições de temperatura e pressão do ambiente, até o equilíbrio completo com o meio ambiente, em termos de composição inclusive. Em outras palavras, consiste em conduzir a corrente ao estado de equilíbrio com o estado de referência, denominado de estado morto (Hinderink, et al., 1996).

As espécies químicas que compõem o estado de referência estão nomeadas em Szargut, et al., (1988). Em função das condições de pressão e temperatura do estado morto, é comum presumir um comportamento ideal, e desse modo, as espécies descritas são tratadas como estado gasoso puro na sua pressão parcial. A propriedade termodinâmica molar é então dada pelo somatório das propriedades individuais de cada componente na sua pressão parcial. (Abdollahi-Demneh, et al., 2011)

Considerar os componentes de Szargut, et al., (1988) acarreta a limitação no número de espécies químicas que podem ser tratadas com esta referência, haja vista que, apenas dez elementos químicos estão presentes.

O procedimento proposto por Abdollahi-Demneh, et al., (2011) utiliza o método proposto por Szargut, et al., (1988) para o cálculo da exergia química, que é divido em quatro etapas, aqui nomeadas de Etapa 2 (cálculo da B_{Q1}), Etapa 3 (B_{Q2}), Etapa 4 (B_{Q3}) e Etapa 5 (B_{Q4}), a saber:

- Etapa 2: Todas as substâncias contidas na mistura nas condições ambiente de temperatura e pressão (T_0 e P_0) são conduzidas ao seu estado de gás ideal e substância pura, na mesma condição de temperatura (T_0) e na condição de pressão de referência do simulador (P_{0n}=101325 Pa)

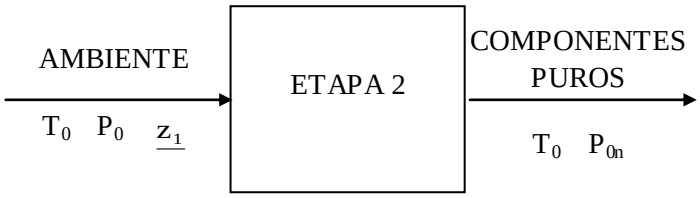


Figura III.3 – Transformação referente a Etapa 2 do cálculo da exergia de uma corrente material – separação dos componentes.

$$B_{Q1} = \left(H\left(T_0, P_0, \underline{z_1}\right) - H^{id}\left(T_0, \underline{z_1}\right)\right) - T_0 \cdot \left(S(T_0, P_0, \underline{z_1}) - S^{id}\left(T_0, P_{0n}, \underline{z_1}\right) + \frac{R}{MM(\underline{z_1})} \cdot \sum_{i=1}^{n} z_i \cdot \ln(z_i) \right) \quad \text{(III.3)}$$

$$H^{id}\left(T_0, \underline{z_1}\right) = \frac{1}{MM(\underline{z_1})} \cdot \sum_{i=1}^{n} z_i \cdot \left(\Delta H_{f,i}^{T_{0n}} + \int_{T_{0n}}^{T_0} Cp_i(T) \cdot dT \right) \quad \text{(III.4)}$$

$$S^{id}\left(T_0, P_{0n}, \underline{z_1}\right) = \frac{1}{MM(\underline{z_1})} \cdot \sum_{i=1}^{n} z_i \cdot \left(S_i^{id}\left(T_{0n}, P_{0n}\right) + \int_{T_{0n}}^{T_0} \frac{Cp_i(T)}{T} \cdot dT - R \cdot \ln(z_i) \right) \quad \text{(III.5)}$$

Sendo:

$$\underline{z_1} = \left[z_1, z_2, ..., z_n\right] \quad \text{(III.6)}$$

$$MM(\underline{z_1}) = \sum_{i=1}^{n} z_i \cdot MM_i \quad \text{(III.7)}$$

O autores Abdollahi-Demneh, et al., (2011) , usando a documentação do programa Aspen HYSYS®, simplificam as equações da Etapa 2, utilizando a notação para o calor específico dos componentes ideais puros, implementada no próprio Aspen HYSYS®, que se apresenta da seguinte forma:

$$Cp_i(T) = MM_i \cdot \left(b_i + 2 \cdot c_i \cdot T + 3 \cdot d_i \cdot T^2 + 4 \cdot e_i \cdot T^3 + 5 \cdot f_i \cdot T^4\right) \quad \text{(III.8)}$$

$$\psi_i^{id}(T) = \int Cp_i(T) \cdot dT = MM_i \cdot \left(a_i + b_i \cdot T + c_i \cdot T^2 + d_i \cdot T^3 + e_i \cdot T^4 + f_i \cdot T^5\right) \quad \text{(III.9)}$$

Desse modo, tem-se:

$$\Delta H_{f,i}^{T_{0n}} + \int_{T_{0n}}^{T_0} Cp_i(T) \cdot dT = \Delta H_{f,i}^{T_{0n}} + \left(\psi_i^{id}(T_0) - \psi_i^{id}(T_{0n})\right) \quad \text{(III.10)}$$

$$\Delta H_{f,i}^{T_{0n}} + \int_{T_{0n}}^{T_0} Cp_i(T) \cdot dT = \psi_i^{id}(T_0) + \left(\Delta H_{f,i}^{T_{0n}} - \psi_i^{id}(T_{0n})\right) \quad \text{(III.11)}$$

$$\Delta H_{f,i}^{T_{0n}} + \int_{T_{0n}}^{T_0} Cp_i(T) \cdot dT = \psi_i^{id}(T_0) + \text{Desvio de entalpia}_i \quad \text{(III.12)}$$

Sendo o desvio de entalpia uma propriedade de cada substância no banco de dados do Aspen HYSYS®, e T_{0n} a temperatura de referência do simulador.

Da mesma forma, para entropia, tem-se:

$$\begin{aligned} \xi_i^{id}(T) &= \int \frac{Cp_i(T)}{T} \cdot dT = -R \cdot \ln(P_{0n}) + \\ & MM_i \cdot \left(b_i \cdot \ln(T) + 2 \cdot c_i \cdot T + \frac{3}{2} \cdot d_i \cdot T^2 + \frac{4}{3} \cdot e_i \cdot T^3 + \frac{5}{4} \cdot f_i \cdot T^4 + g_i \right) \end{aligned} \quad \text{(III.13)}$$

$$S_i^{id}(T_{0n}, P_{0n}) + \int_{T_{0n}}^{T_0} \frac{Cp_i(T)}{T} \cdot dT = S_i^{id}(T_{0n}, P_{0n}) + \left(\xi_i^{id}(T_0) - \xi_i^{id}(T_{0n})\right) \quad \text{(III.14)}$$

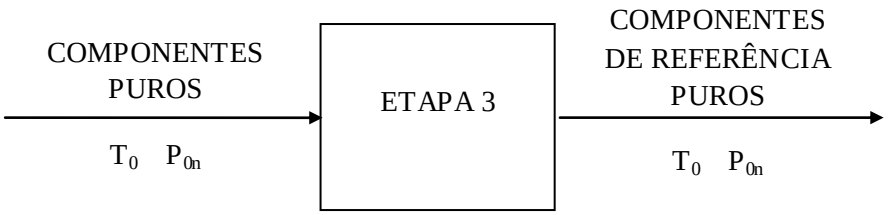
$$S_i^{id}(T_{0n}, P_{0n}) + \int_{T_{0n}}^{T_0} \frac{Cp_i(T)}{T} \cdot dT = \xi_i^{id}(T_0) + \left(S_i^{id}(T_{0n}, P_{0n}) - \xi_i^{id}(T_{0n})\right) \quad \text{(III.15)}$$

$$S_i^{id}(T_{0n}, P_{0n}) + \int_{T_{0n}}^{T_0} \frac{Cp_i(T)}{T} \cdot dT = \xi_i^{id}(T_0) + \text{Desvio de entropia}_i \qquad \text{(III.16)}$$

Sendo o desvio de entropia uma propriedade nula de cada substância no banco de dados do simulador Aspen HYSYS®.

$$S_i^{id}(T_{0n}, P_{0n}) + \int_{T_{0n}}^{T_0} \frac{Cp_i(T)}{T} \cdot dT = \xi_i^{id}(T_0) \qquad \text{(III.17)}$$

- Etapa 3: Todas as substância puras; exceto aquelas que não possuem espécie química de referência, por exemplo, hidrocarbonetos halogenados; são convertidas por reações reversíveis na temperatura ambiente e na pressão de referência do simulador (P_{0n}=101325 Pa), dando origem as espécies de referência do estado morto.



$$\begin{aligned} &X_i + \upsilon_{i1}O_2 \leftrightarrow \upsilon_{i2}CO_2 + \upsilon_{i3}H_2O + \\ &\upsilon_{i4}N_2 + \upsilon_{i5}Ar + \upsilon_{i6}Xe + \upsilon_{i7}Ne + \upsilon_{i8}Kr + \upsilon_{i9}He + \upsilon_{i10}D_2O + \upsilon_{i11}S_{(\text{sólido})} \end{aligned} \qquad \text{(III.18)}$$

Figura III.4 – Transformação referente a Etapa 3 do cálculo da exergia de uma corrente material – reação química.

A exergia química referente a esta etapa é calculada da seguinte forma:

$$B_{Q2} = \frac{1}{MM(\underline{z_1})} \cdot \sum_{i=1}^{n} z_i \sum_{j=1}^{10} \upsilon_{ij} \cdot G_{f,j} \qquad \text{(III.19)}$$

- Etapa 4: Nesse estágio as pressões parciais das substâncias de referência são alteradas da condição de substância pura na pressão de referência do simulador (P_{0n} = 101325 Pa), para as pressões parciais do estado morto de referência da Tabela III.1, de maneira reversivel e isotérmica, uma vez que a temperatura do estado morto de referência (T_{00} = 298,15 K) definido por Szargut, et al., (1988) é a mesma temperatura ambiente (T_0 = 298,15 K). É válido ressaltar que a pressão total do estado morto de referência é P_{00} =99312 Pa, sendo necessário uma etapa posterior para corrigir a exergia ao estado morto real.

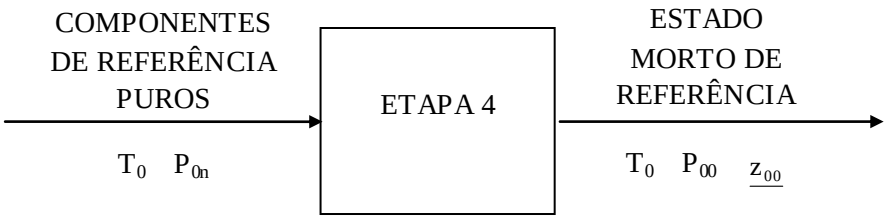


Figura III.5 – Transformação referente a Etapa 4 do cálculo da exergia de uma corrente material – estado morto de referência.

A exergia química referente a esta etapa é calculada da seguinte forma:

$$B_{Q3} = \frac{1}{MM(\underline{z_1})} \cdot \sum_{i=1}^{n} z_i \sum_{j=1}^{10} \upsilon_{ij} \cdot R \cdot T_0 \cdot \ln\left(\frac{P_{0n}}{P_{ref,\,j}}\right) \qquad \text{(III.20)}$$

É válido ressaltar que os coeficientes estequiométricos possuem sinais opostos para as espécies reagentes e produtos.

Para o caso específico do enxofre sólido rômbico, recomenda-se o cálculo deste componente com base no íon sulfato dissolvido na água do mar. (Abdollahi-Demneh, et al., 2011) Desse modo tem-se:

$$B_{Q3} = \frac{1}{MM(\underline{z}_1)} \cdot z_i \cdot \upsilon_{i11} \cdot \Delta B_S \qquad \text{(III.21)}$$

Em que:

$$\Delta B_S = 609{,}6 \text{ J/kgmol} \qquad \text{(III.22)}$$

- Etapa 5: Na quinta etapa as pressões parciais das espécies de referência são alteradas dos valores do estado morto de referência da Tabela III.1 que somados resultam na P_{00} = 99312 Pa, para a pressão do ambiente P_0 = 101325 Pa, de maneira reversivel e isotérmica. Assume-se que a concentração das espécies é a mesma em ambos os estados.

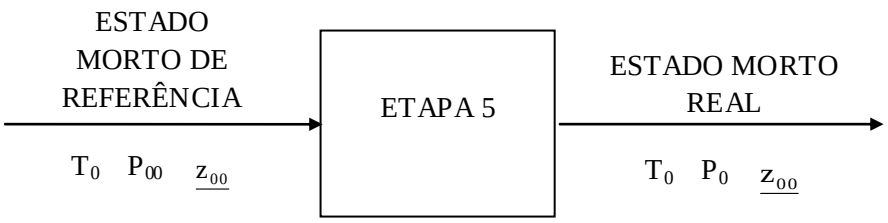


Figura III.6 – Transformação referente a Etapa 5 do cálculo da exergia de uma corrente material – estado morto real.

A exergia química referente a esta etapa é calculada da seguinte forma:

$$B_{Q4} = \frac{1}{MM(\underline{z}_1)} \cdot \sum_{i=1}^{n} z_i \sum_{j=1}^{10} \upsilon_{ij} \cdot R \cdot T_0 \cdot \ln\left(\frac{\sum_{j=1}^{10} P_{ref,\,j}}{P_0} \right) \qquad \text{(III.23)}$$

É possível combinar os termos referentes às Etapas 4 e 5, somadas em um único termo:

$$B_{Q3} + B_{Q4} = \frac{1}{MM(\underline{z_1})} \cdot \sum_{i=1}^{n} z_i \sum_{j=1}^{10} \upsilon_{ij} \cdot R \cdot T_0 \cdot \ln\left(\frac{\sum_{j=1}^{10} P_{ref,\,j}}{P_0} \cdot \frac{P_{0n}}{P_{ref,\,j}} \right) \qquad \text{(III.24)}$$

Agrupando-se as etapas em um único diagrama (Figura III.7), é possível visualizar todo o processo de cálculo da disponibilidade de energia de uma corrente material de processo em uma única equação (Equação III.25).

A programação deste método de cálculo no simulador Aspen HYSYS® foi implementada neste trabalho, por meio da criação de propriedades e variáveis do usuário, programadas no simulador em linguagem VB, utilizando grande parte dos recursos já prontamente oferecidos pelo *software*.

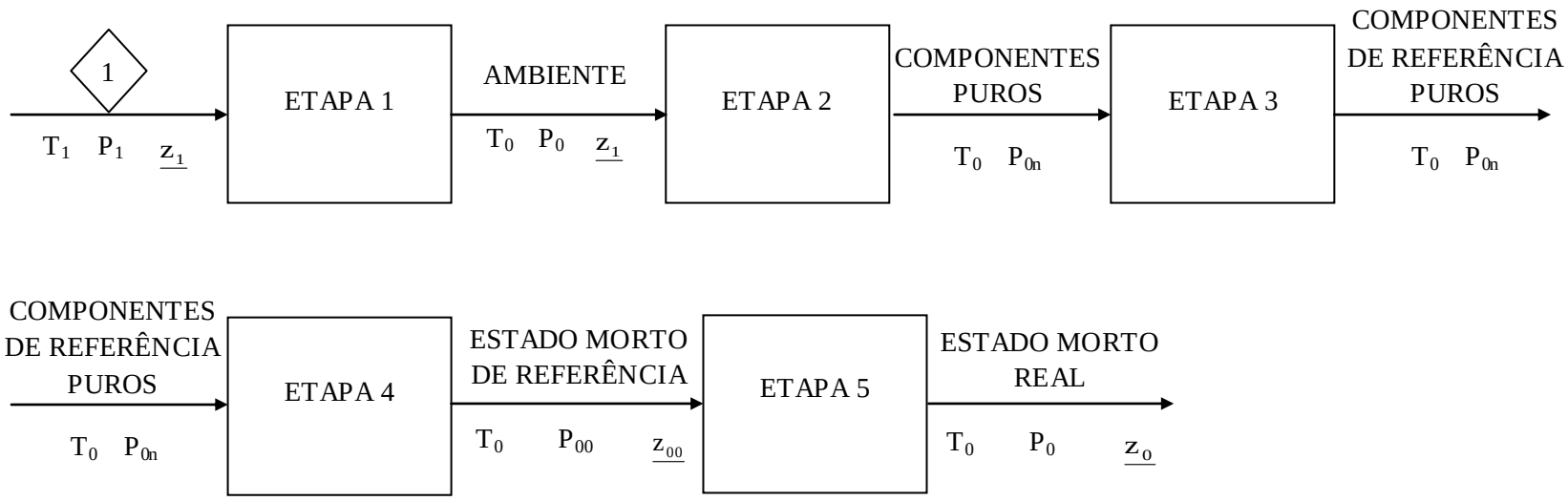


Figura III.7 – Conjunto de transformações com todas etapas do procedimento proposto para o cálculo da exergia de corrente de processo.

$$
\begin{aligned}
B = {} & \left(H(T_1, P_1, \underline{z_1}) - H(T_0, P_0, \underline{z_1})\right) - T_0 \cdot \left(S(T_1, P_1, \underline{z_1}) - S(T_0, P_0, \underline{z_1})\right) + \\
& \left(H\left(T_0, P_0, \underline{z_1}\right) - H^{id}\left(T_0, \underline{z_1}\right)\right) - T_0 \cdot \left(S(T_0, P_0, \underline{z_1}) - S^{id}\left(T_0, P_{0n}, \underline{z_1}\right) + \frac{R}{MM(\underline{z_1})} \cdot \sum_{i=1}^{n} z_i \cdot \ln(z_i) \right) + \\
& \frac{1}{MM(\underline{z_1})} \cdot \sum_{i=1}^{n} z_i \sum_{j=1}^{10} \upsilon_{ij} \cdot \left(R \cdot T_0 \cdot \ln\left(\frac{\sum_{j=1}^{10} P_{ref,j}}{P_0} \cdot \frac{P_{0n}}{P_{ref,j}} \right) + G_{f,j} + \upsilon_{i11} \cdot \Delta B_S \right)
\end{aligned}
\tag{III.25}
$$

As propriedades do usuário utilizadas são os coeficientes estequiométricos da reação química da Etapa 3. Distingui-se, para fins de implementação, propriedade do usuário como valor constante e variável do usuário como valor calculado por alguma rotina de programação. As propriedades portanto, ficam a disposição dos códigos para o cálculo da variável exergia.

Os coeficientes estequiométricos da reação química da Etapa 3 são dependentes da substância que é convertida. Desse modo, um banco de dados de coeficientes é adicionado na forma de propriedades do usuário. É válido ressaltar que estas propriedades devem ser alteradas, sempre que se inserir uma nova substância na simulação.

Um exemplo, conforme proposto por Abdollahi-Demneh, et al., (2011) para uma corrente que contém uma mistura de hidrocarbonetos. Essas espécies químicas estão sujeitas aos seguintes coeficientes estequiométricos, definidos pela reação:

$$1\,C_nH_m + \frac{(2n + m/2)}{2}\,O_2 \leftrightarrow n\,CO_2 + m/2\,H_2O \qquad \text{(III.26)}$$

Desta forma, o banco de dados consiste da matriz com as propriedades do usuário que são vetores que contém os coeficientes estequiométricos, das reações mencionadas.

As propriedades do usuário criadas neste exemplo encontram-se na Tabela III.2:

Tabela III.2 – Propriedades do usuário com os coeficientes estequiométricos da Equação III.18. Referente ao exemplo proposto por Abdollahi-Demneh, et al., (2011).

Substância	**Propriedades e seus respectivos coeficientes**			
	O2Demand	GenCO2	GenH2O	Demais
	υ_1	υ_2	υ_3	$\upsilon_4 \ldots \upsilon_{11}$
Nitrogênio	0,0	0,0	0,0	0,0
Dióxido de carbono	0,0	0,0	0,0	0,0
Metano	2,0	1,0	2,0	0,0
Etano	3,5	2,0	3,0	0,0
Propano	5,0	3,0	4,0	0,0
i-Butano	6,5	4,0	5,0	0,0
n-Butano	6,5	4,0	5,0	0,0
i-Pentano	8,0	5,0	6,0	0,0
n-Pentano	8,0	5,0	6,0	0,0
n-Hexano	9,5	6,0	7,0	0,0
Benzeno	7,5	6,0	3,0	0,0
metil-ciclo-Pentano	9,0	6,0	6,0	0,0
ciclo-hexano	9,0	6,0	6,0	0,0
n-Heptano	11,0	7,0	8,0	0,0

As variáveis do usuário foram programadas na linguagem VB, e são executadas pelo *software*, uma vez inseridos os dados de entrada, fornecem o cálculo de determinadas grandezas. As variáveis do usuário adicionadas encontram-se na Tabela III.3:

Tabela III.3 – Variáveis do usuário programadas para o cálculo da exergia em correntes materiais.

Nome	Variável	Significado	Valor	Unid.
Amb. Ar Partial Pres.	pAr	Pressão parcial de Argônio no estado morto de referência	906	Pa
Amb. CO2 Partial Pres.	pCO2	Pressão parcial de Gás carbônico no estado morto de referência	33,5	Pa
Amb. D2O Partial Pres.	pD2O	Pressão parcial de Óxido de deutério no estado morto de referência	0,342	Pa
Amb. H2O Partial Pres.	pH2O	Pressão parcial de Água no estado morto de referência	2200	Pa
Amb. He Partial Pres.	pHe	Pressão parcial de Hélio no estado morto de referência	0,485	Pa
Amb. Kr Partial Pres.	pKr	Pressão parcial de Kripitônio no estado morto de referência	0,097	Pa
Amb. N2 Partial Pres.	pN2	Pressão parcial de Nitrogênio no estado morto de referência	75780	Pa
Amb. Ne Partial Pres.	pNe	Pressão parcial de Neônio no estado morto de referência	1,77	Pa
Amb. O2 Partial Pres.	pO2	Pressão parcial de Oxigênio no estado morto de referência	20390	Pa
Amb. Xe Partial Pres.	pXe	Pressão parcial de Xenônio no estado morto de referência	0,0087	Pa
Ambient Pressure	P0	Pressão ambiente	101325	Pa
Ambient Temperature	T0	Temperatura ambiente	298,15	K
Mass Chemical Exergy	B_Q	Exergia química mássica	*	J/kg
Mass Physical Exergy	B_F	Exergia física mássica	*	J/kg
Molar Chemical Exergy	$MM \cdot B_Q$	Exergia química molar	*	J/kgmol
Molar Physical Exergy	$MM \cdot B_F$	Exergia física molar	*	J/kgmol
Chemical Exergy	$\dot{n} \cdot MM \cdot B_Q / 10^3$	Exergia química	*	kW
Physical Exergy	$\dot{n} \cdot MM \cdot B_F / 10^3$	Exergia física	*	kW
Total Exergy	$\dot{n} \cdot MM \cdot (B_Q + B_F) / 10^3$	Exergia	*	kW

* VARIÁVEIS CALCULADAS

Todos os códigos das variáveis do usuário listadas na Tabela III.3 encontram-se em ANEXO A - CÓDIGOS DAS VARIÁVEIS DO USUÁRIO E RESULTADOS NO HYSYS®.

A variável denominada de Exergia Física Mássica (*Mass Physical Exergy*) expressa em unidades do SI (J/kg), é calculada de acordo com o algoritmo representado na Figura III.8:

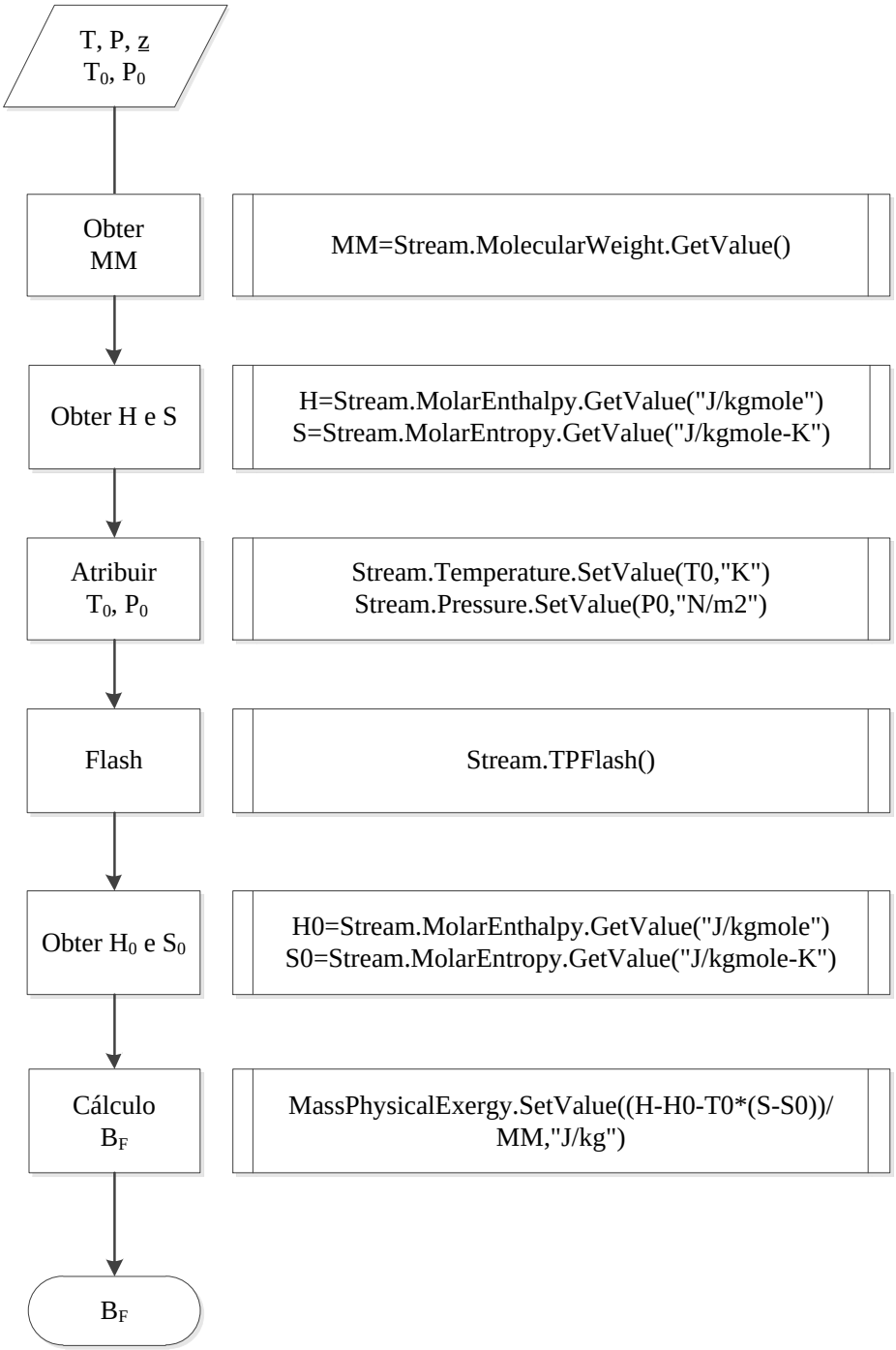
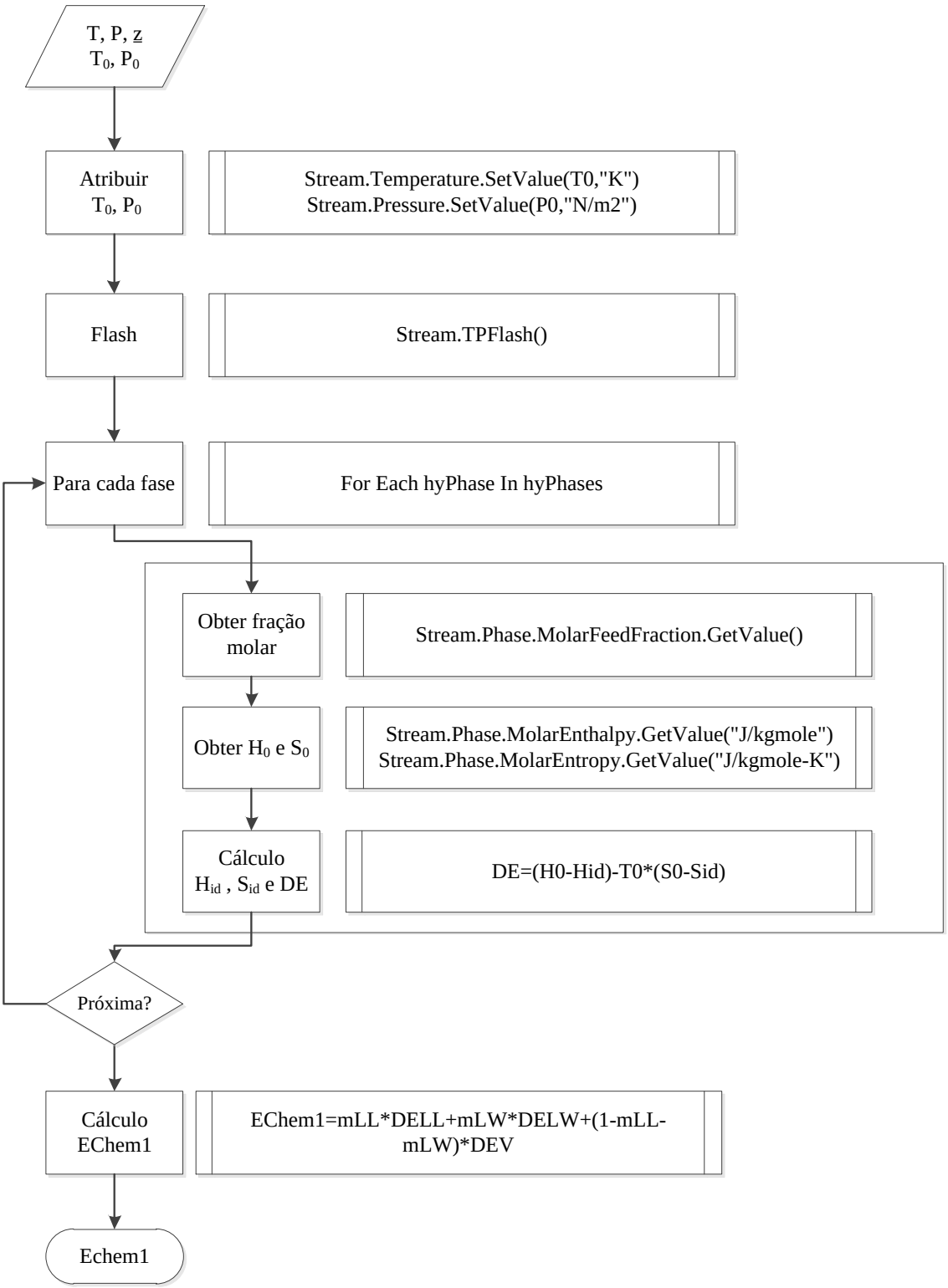
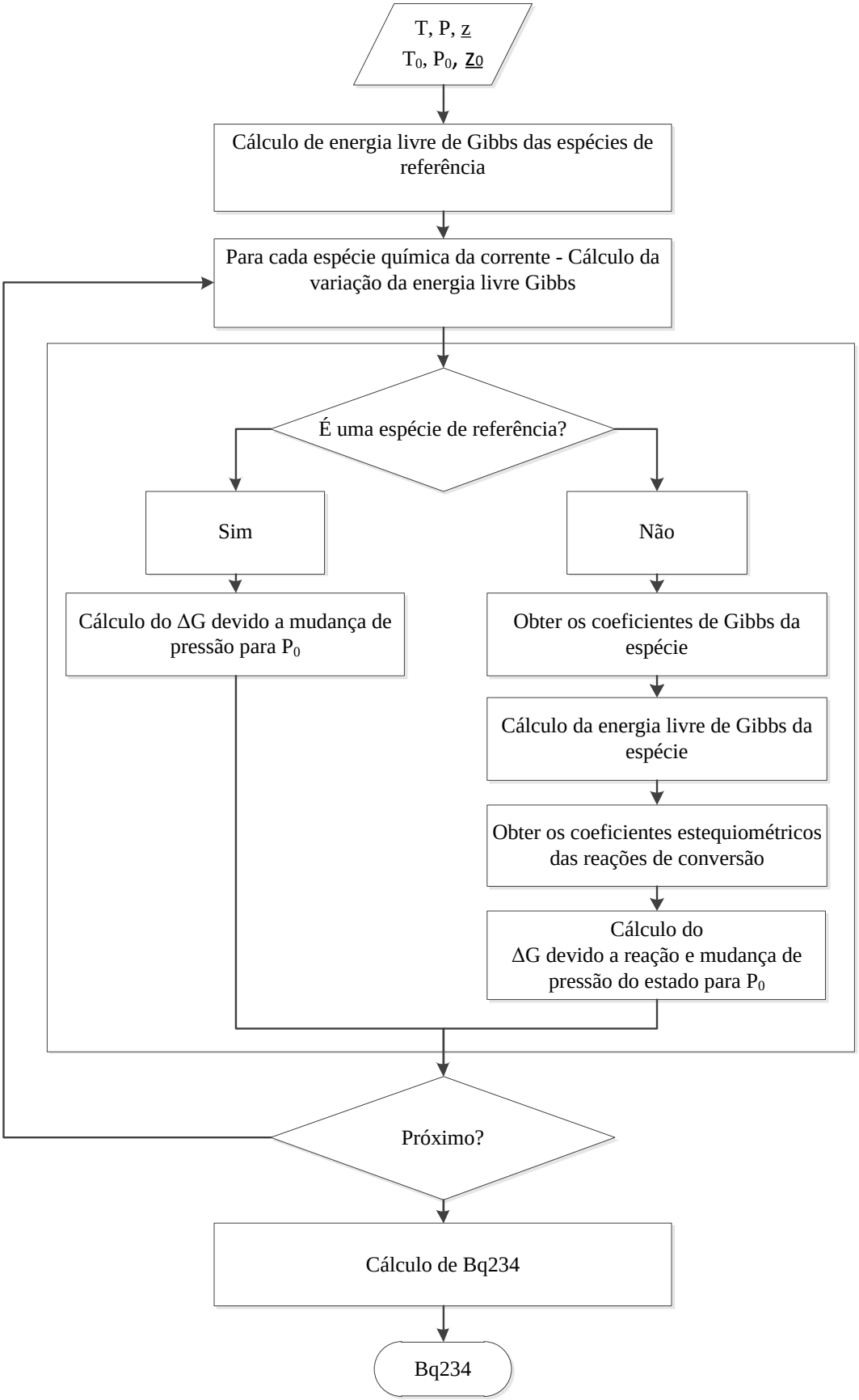


Figura III.8 – Fluxograma da rotina de cálculo da variável do usuário Exergia Física Mássica.

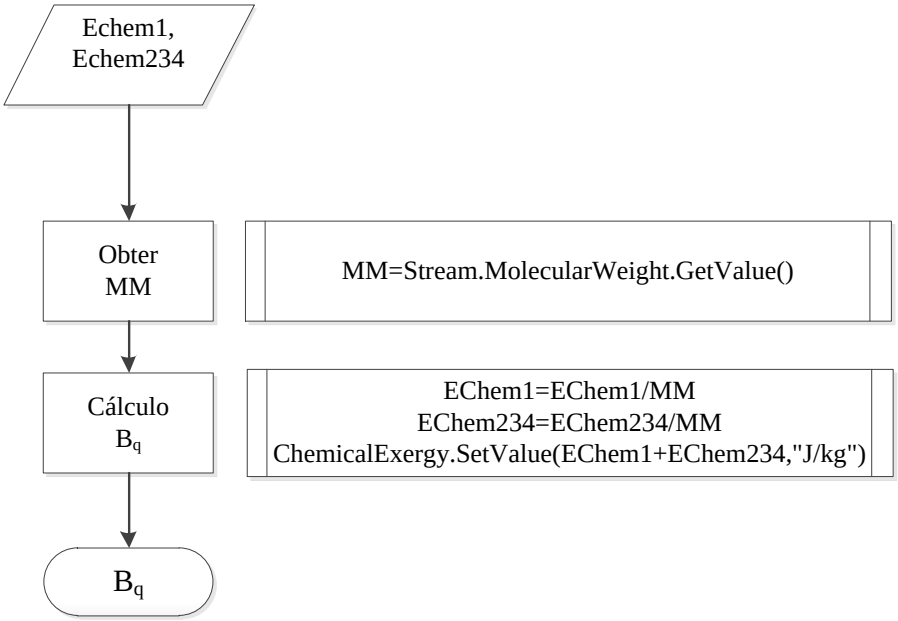
A variável denominada de Exergia Química Mássica (*Mass Chemical Exergy*) expressa em unidade do SI (J/kg), é calculada de acordo com o algoritmo representado na Figura III.9 :



(a)


T, P, z
T0, P0, z0
Cálculo de energia livre de Gibbs das espécies de referência
Para cada espécie química da corrente - Cálculo da variação da energia livre Gibbs
É uma espécie de referência?
Sim
Não
Cálculo do ΔG devido a mudança de pressão para P0
Obter os coeficientes de Gibbs da espécie
Cálculo da energia livre de Gibbs da espécie
Obter os coeficientes estequiométricos das reações de conversão
Cálculo do ΔG devido a reação e mudança de pressão do estado para P0
Próximo?
Cálculo de Bq234
Bq234

(b)



(c)

Figura III.9 – Fluxograma da rotina de cálculo da variável do usuário Exergia Química Mássica, dividida em três partes (a), (b) e (c).

Além das contribuições mássicas, foram programados os cálculos das variáveis Exergia Física/Química Molar (*Molar Physical/Chemical Exergy*) expressa em J/kgmol, e da variável extensiva Exergia Física/Química (*Physical/Chemical Exergy*) expressa em kW.

A variável Exergia Mássica consiste na soma das contribuições física e química da exergia. De maneira análoga, foram programadas as variáveis Exergia Molar (*Molar Exergy*) expressa em J/kgmol, e a variável extensiva Exergia (*Exergy*) expressa em kW.

Uma vez implementados os algoritmos, é possível efetuar os cálculos das exergias em correntes materiais de processo. Todas as variáveis do usuário listadas na Tabela III.3 foram então programadas no HYSYS®. Um exemplo prático encontra-se no ANEXO A.7 - EXEMPLO VARIÁVEIS DO USUÁRIO EM CORRENTES DE PROCESSO.

Para aplicação das rotinas programadas, devem ser fornecidos, pelo usuário, os coeficientes estequiométricos referentes à Reação (III.18) para cada espécie química selecionada na lista de componentes. Os dados de entrada são inseridos nas propriedades do usuário, conforme Tabela III.2 e ANEXO A.25 - PROPRIEDADES DO USUÁRIO.

III.1.2 - CÁLCULO DA EXERGIA EM CORRENTES DE ENERGIA

No cálculo da exergia de correntes de energia é realizada de forma diferente para calor e trabalho. Para uma corrente de energia de trabalho, o valor da exergia em unidade de potência, é igual à taxa de energia da corrente. Por outro lado, para a corrente de calor, a exergia é calculada aplicando uma máquina de Carnot (Ghannadzadeh, et al., 2012).

Considerando o calor como fornecido por uma determinada utilidade, por exemplo, vapor de média pressão, em uma dada operação unitária, a temperatura da fonte fria (T_F) é considerada como a temperatura ambiente (T_0), por outro lado, a temperatura da fonte quente (T_Q) é considerada como a temperatura da corrente, na qual ocorre a transferência de calor. Quando a transferência de calor ocorre com variação desta temperatura, como no caso de um trocador de calor, a temperatura média termodinâmica ($\overline{T}$) pode ser usada.

A temperatura média termodinâmica ($\overline{T}$) é determinada combinando a primeira e a segunda leis da termodinâmica no processo:

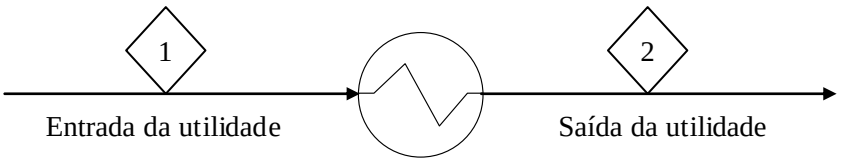


Figura III.10 – Fluxograma de um trocador de calor, identificando as correntes de utilidade, para o cálculo da temperatura média termodinâmica.

Assumindo a transferência de calor como reversível, tem-se que:

$$S_2 - S_1 = \int \frac{dQ}{T} \qquad \text{(III.27)}$$

De acordo com a primeira lei, para sistema aberto e sem trabalho:

$$H_2 - H_1 = \int dQ \qquad \text{(III.28)}$$

Por definição, a temperatura média termodinâmica ($\overline{T}$) é igual a:

$$\overline{T} = \frac{\int dQ}{\int \frac{dQ}{T}} = \frac{\Delta H}{\Delta S} \qquad \text{(III.29)}$$

Desse modo, a eficiência da máquina de Carnot é dada por:

$$\eta = 1 - \frac{T_0}{\overline{T}} = 1 - \frac{T_0 \cdot \Delta S_{UTILIDADE}}{\Delta H_{UTILIDADE}} \qquad \text{(III.30)}$$

As variáveis do usuário para o cálculo da exergia em correntes de energia encontram-se listadas na Tabela III.4. É válido ressaltar que o cálculo é efetuado por uma variável do usuário contida na operação unitária em questão.

Tabela III.4 – Variáveis do usuário programadas para o cálculo de exergia em correntes de energia.

Nome	Variável	Significado	Valor	Unid.
Mean Thermo Temp	Tmean / TmeanStream	Variável do trocador de calor que calcula e apresenta a temperatura média termodinâmica e realiza o cálculo da exergia da corrente de energia	*	K
Exergy in Energy Stream Calculator	Exergy in Energy Stream Calculator	Variável de máquinas de fluxo que realiza o cálculo da exergia em correntes de energia	-	-
Heat or Work	HW	Identificação do tipo de corrente de energia	Heat /Work	-
Exergy in Energy Stream	ExergyEnergy	Exergia em correntes de energia	*	kW

Para correntes de energia em forma de trabalho, que alimentam as máquinas de fluxo, por exemplo, há apenas uma rotina (*Exergy in Energy Stream Calculation*) que atribui o valor da potência calculada pelo simulador à variável exergia da corrente de energia em questão.

Um exemplo prático encontra-se no ANEXO A.9 EXEMPLO VARIÁVEIS DO USUÁRIO EM CORRENTES DE ENERGIA.

A variável Exergia em correntes de energia (*Exergy in Energy Stream*) expressa em unidades de potência (kW), é calculada através da rotina de cálculo da temperatura média termodinâmica (*Mean Thermo Temp*), programada nos trocadores de calor (*Heater e Cooler*). Essa rotina identifica o tipo de corrente de energia em questão, de acordo com o algoritmo representado na Figura III.11 :

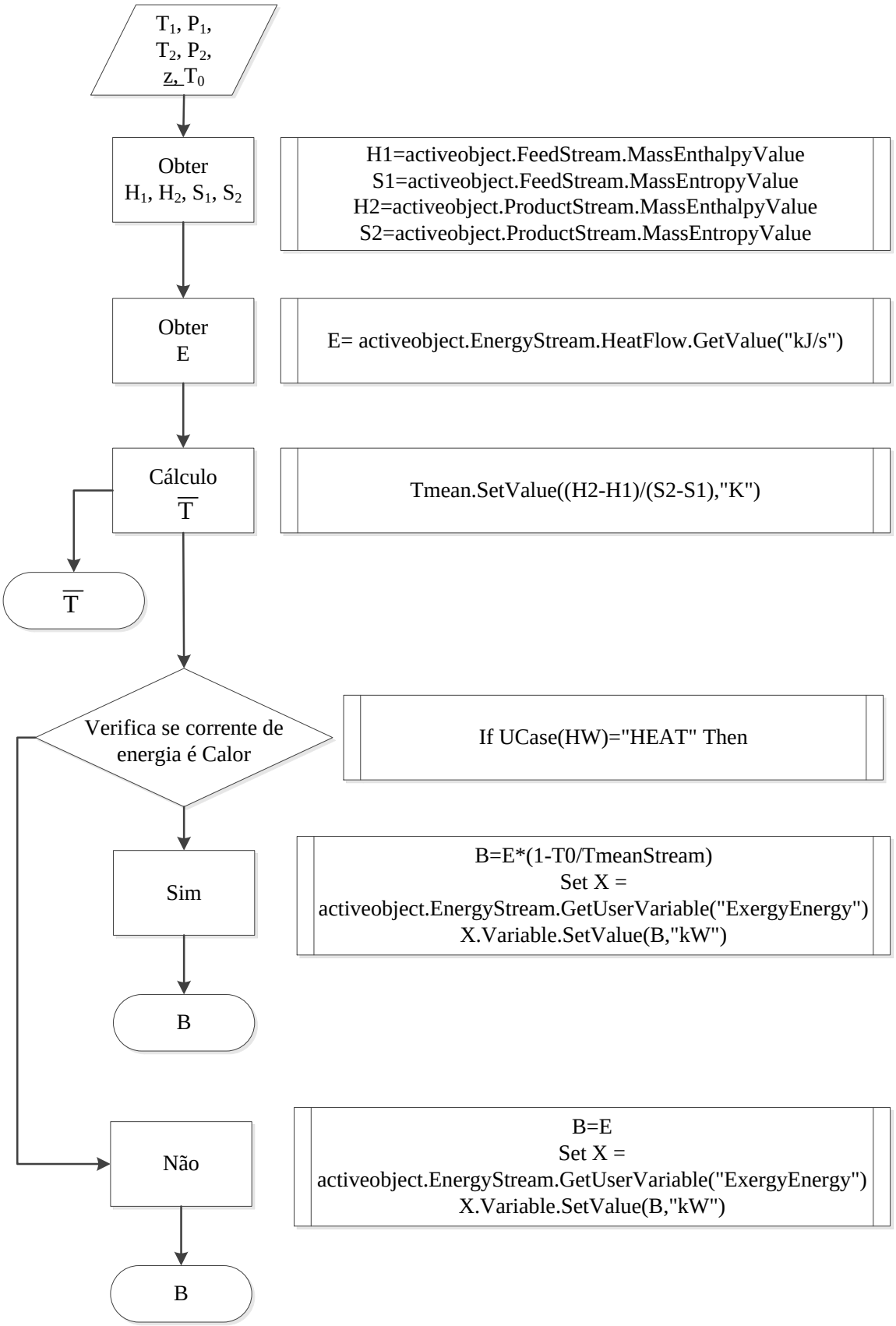


Figura III.11 – Fluxograma da rotina de cálculo da variável do usuário Temperatura Média Termodinâmica e Exergia de correntes de energia.

III.2 - CÁLCULO DA EFICIÊNCIA DE OPERAÇÕES E PROCESSOS UNITÁRIOS

Neste tópico, o projeto de algumas operações e processos unitários é discutido com enfoque na análise de disponibilidade. Uma vez implementado o cálculo da exergia em correntes materiais e de energia, resta a implementação de funções objetivo nos processos, capazes de representar sua eficiência, em termos exergéticos.

III.2.1 - PROCESSOS FÍSICOS

Os processos físicos são aqueles em que não há fenômeno químico envolvido. Em termos de processos industriais, são as operações unitárias propriamente ditas. Nelas há transporte de quantidade de movimento, calor e massa. Entretanto, não há reação química entre as substâncias envolvidas. Sabe-se que, um processo físico reversível é intangível, adiabático e com variação nula de entropia. Além disso, sabe-se que, as irreversibilidades desses processos, estão relacionadas a magnitude das forças motrizes e fluxo do transporte de quantidade de movimento, calor e massa.

III.2.1.1 - *TUBULAÇÕES*

O projeto de tubulações encontra-se amplamente discutido na literatura. (CRANE Co, 1988) (Ludwig, 1999). As metodologias que aplicam as equações de Darcy-Weisbach para cálculo da perda de carga em escoamentos incompressíveis; a equação do escoamento isotérmico para escoamentos compressíveis e a carta de Baker para escoamentos bifásicos; combinados com critérios apropriados de velocidade fornecem bons resultados para o projeto deste tipo de operação unitária. Entretanto, pouco é comentado sobre a perda de exergia em escoamentos em tubulações.

Sugere-se que a otimização do projeto de tubulações sob critério exergético, obedeça à função eficiência exergética, uma vez que, a eficiência racional para este tipo de operação unitária é nula. Conforme Equação III.31:

$$\psi = \frac{\left(\Delta \dot{B}\right)_{\text{DESEJÁVEL}}}{\left(\Delta \dot{B}\right)_{\text{UTILIZADO}}} = \frac{0}{\left(\dot{B}^{\text{SAÍDA}} - \dot{B}^{\text{ENTRADA}}\right)_{\text{UTILIZADO}}} = 0 \qquad \text{(III.31)}$$

A variação de entropia do processo e o conteúdo de exergia física na entrada são calculados através do simulador. Utiliza-se somente a exergia física neste caso, porque a exergia química, para este tipo de processo é considerada invariante. Desse modo, tem-se:

$$\eta = \frac{\dot{B}_F^{SAÍDA}}{\dot{B}_F^{ENTRADA}} = 1 - \frac{\left(\dot{m} \cdot T_0 \cdot \Delta S - \dot{Q}\right)}{\dot{B}_F^{ENTRADA}} \qquad \text{(III.32)}$$

A principal fonte de irreversibilidade em tubulações é a perda de carga inerente ao escoamento, em virtude da rugosidade do material da tubulação e da viscosidade do fluido em questão. Em projetos hidráulicos, adotar diâmetros maiores é uma medida que proporciona menores perdas de carga. Entretanto, deve-se atentar a que uma velocidade mínima deve ser superada em todas as situações operacionais, visando evitar problemas como depósitos e incrustações. Otimizar a hidráulica do sistema, melhorando o encaminhamento e minimizando o número de acidentes, consiste em melhoria para o projeto de tubulações, com redução do dispêndio energético com bombas e compressores, necessários ao transporte do fluido.

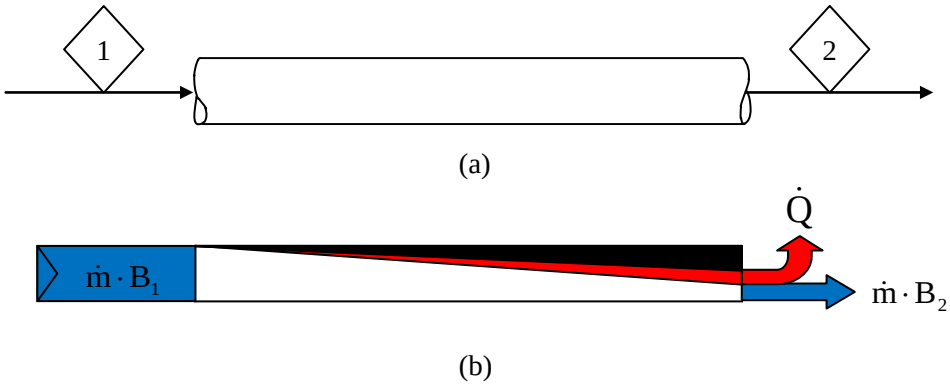
Faixas de velocidade recomendada estão amplamente divulgadas na literatura para diversos fluidos. (Ludwig, 1999) (Branan, 2005) O critério de velocidade (Tabela III.5) é então aplicado para uma estimativa inicial de diâmetro. O dimensionamento da tubulação é, então, verificado com um critério de perda de carga aplicável.

Tabela III.5 – Velocidade recomendada para alguns fluidos comuns. (Branan, 2005)

Fluido	**Velocidade (m/s)**
Gás úmido	18,3
Gás seco	30,5
Vapor de alta pressão	45,0
Vapor de baixa pressão	30,5
Ar	30,5

Gasodutos e tubulações de escoamento compressível de longa extensão são normalmente projetadas por equações empíricas (Weymouth e Panhandle), ao invés da equação do escoamento isotérmico, normalmente adotada para tubulações de até 100 ft de comprimento. Para este tipo de situação o monitoramento de vazamentos na rede deve ser utilizado, pois, consiste em uma grave perda externa de exergia (CRANE Co, 1988). A Tabela III.6 apresenta um resumo para análise de disponibilidade em tubulações para escoamento de fluidos gasosos:

Tabela III.6 – Análise exergética de tubulações (fluidos gasosos).

Tubulações	
 **Figura III.12– (a) e (b)** Operação unitária tubulação representada em Fluxograma de Processo (a), em Diagrama de Grassmann (b).	
Balanço de energia	$\dot{m} \cdot (H_2 - H_1) = -\lvert\dot{Q}\rvert$ (III.33)
Parâmetros de projeto	Diâmetro
Critérios	Velocidade e Perda de carga
Equação da exergia	$\dot{m} \cdot (B_2 - B_1) = -\dot{m} \cdot T_0 \cdot (S_2 - S_1) - \lvert\dot{Q}\rvert$ (III.34)
Fonte de irreversibilidade	Perda de carga
Formas de melhoria	Adotar maiores diâmetros; Otimizar o encaminhamento do sistema; Reduzir o número de acessórios e acidentes.
Função objetivo	$\eta = 1 - \frac{(T_0 \cdot (S_2 - S_1) - (H_2 - H_1))}{(T_0 \cdot (S_1 - S_0) - (H_1 - H_0))}$ (III.35)

Desse modo, duas variáveis do usuário foram programadas para a operação unitária de tubulações. Elas encontram-se descritas na Tabela III.7:

Tabela III.7 – Variáveis do usuário programadas para a operação unitária tubulação.

Nome	Variável	Significado	Valor	Unid.
Pipe Irreversibility	PipeIrreversibility	Irreversibilidade da tubulação	*	kW
Exergetic Efficiency	ExergeticEfficiency	Eficiência exergética	*	-

Os códigos referentes às variáveis mencionadas na Tabela III.7 encontram-se no ANEXO A.11 - IRREVERSIBILIDADE DE TUBULAÇÕES e no ANEXO A.12 - EFICIÊNCIA EXERGÉTICA DE TUBULAÇÕES.

A variável irreversibilidade é calculada de acordo com o seguinte algoritmo ilustrado na Figura III.13:

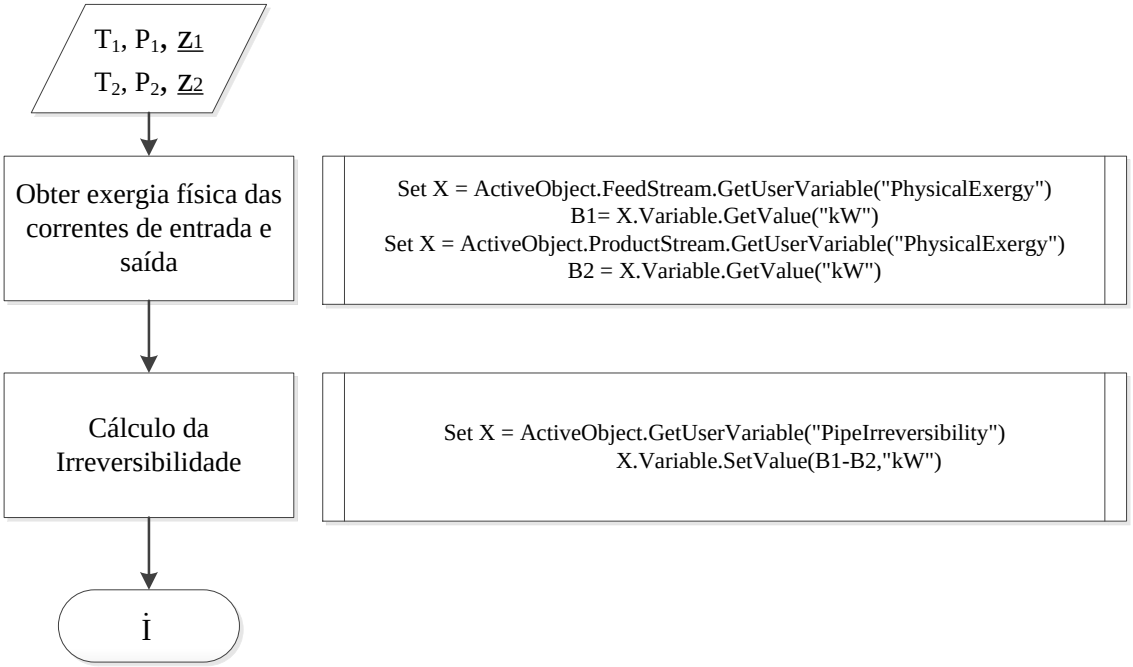


Figura III.13 – Fluxograma da rotina de cálculo da variável do usuário Irreversibilidade em tubulações.

A variável eficiência exergética é calculada de acordo com o seguinte algoritmo ilustrado na Figura III.14:

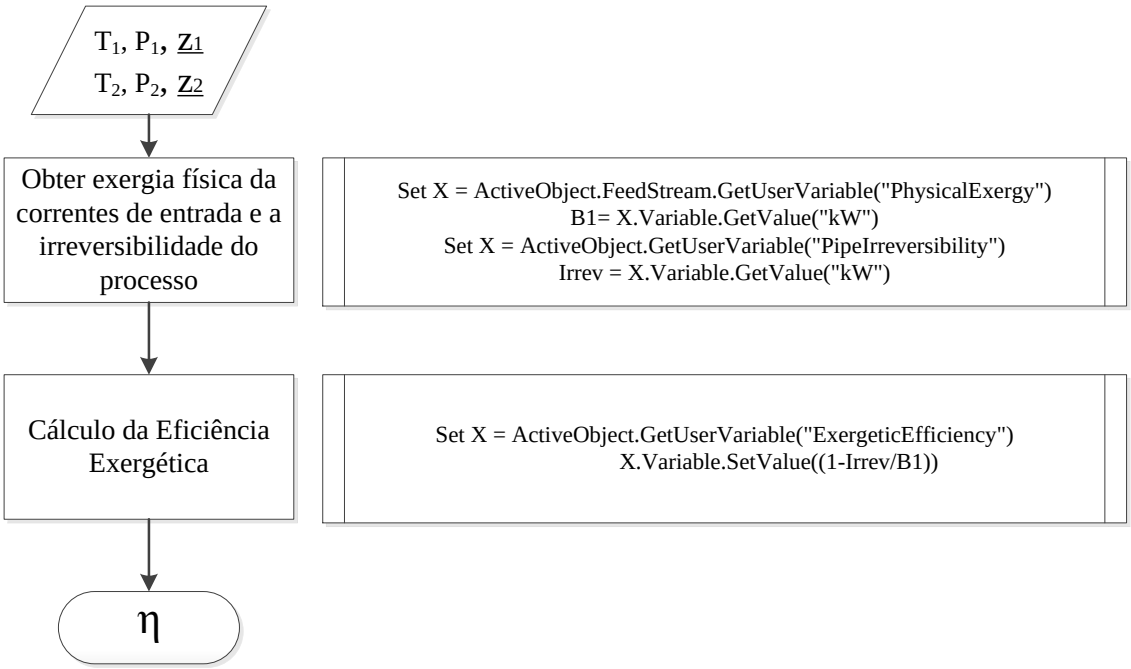


Figura III.14 – Fluxograma da rotina de cálculo da variável do usuário Eficiência Exergética em tubulações.

III.2.1.2 - *VÁLVULAS DE CONTROLE*

O coeficiente de vazão (C_V) foi proposto pela empresa Masoneilan e tornou-se o parâmetro fundamental no dimensionamento de válvulas de controle. Por definição, o coeficiente de vazão de uma válvula é o número de galões de água por minuto que atravessam a válvula totalmente aberta dada uma perda de carga de 1 psi a 60 ºF (MASONEILAN, 2000).

Da mesma forma que as tubulações, sugere-se que a otimização do projeto de válvulas de controle obedeça a função de eficiência exergética. A eficiência racional para este tipo de operação unitária também é nula; haja vista que, não há variação de exergia desejada para esta operação, apenas dispêndio exergético. Acordo Equação III.36:

$$\psi = \frac{\left(\Delta\dot{B}\right)_{\text{DESEJÁVEL}}}{\left(\Delta\dot{B}\right)_{\text{UTILIZADO}}} = \frac{0}{\left(\dot{B}^{\text{SAÍDA}} - \dot{B}^{\text{ENTRADA}}\right)_{\text{UTILIZADO}}} = 0 \qquad \text{(III.36)}$$

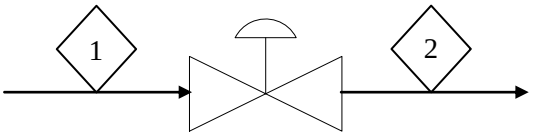
A variação de entropia do processo e o conteúdo de exergia na entrada são calculados através do simulador. O processo de expansão isentálpica em válvulas de controle é adiabático e irreversível. A despeito da conservação da energia, pois o conteúdo de entalpia que entra é o mesmo que sai; é uma operação de grande degradação da disponibilidade de energia, devido ao termo de geração de entropia. Conforme Equação III.37:

$$\eta = \frac{\dot{B}_F^{\text{SAÍDA}}}{\dot{B}_F^{\text{ENTRADA}}} = 1 - \frac{\left(\dot{m} \cdot T_0 \cdot \Delta S\right)}{\dot{B}_F^{\text{ENTRADA}}} \qquad \text{(III.37)}$$

Durante o projeto de válvulas de controle, o coeficiente de vazão é avaliado nas situações de vazão máxima, de operação e vazão mínima; visando obter informações sobre a faixa de abertura da válvula em questão, e verificar o desempenho do sistema de controle.

É necessário ressaltar que, para um bom desempenho do sistema de controle, é necessário alocar uma perda de carga mínima apropriada, para minimizar problemas operacionais. Algumas referências estimam como sendo 10%, 25%, 33% ou até 40% das perdas de carga por atrito nos demais itens do sistema (tubulação e acessórios) (Ludwig, 1999). A Tabela III.8 apresenta um resumo para análise de disponibilidade em válvulas de controle:

Tabela III.8 – Análise exergética de válvulas de controle

Válvulas de controle	
 (a) (b) **Figura III.15– (a) e (b)** Operação unitária válvula de controle representada em Fluxograma de Processo (a) e em Diagrama de Grassmann (b).	
Balanço de energia	$H_2 - H_1 = 0$ (III.38)
Parâmetros de projeto	Coeficiente de vazão
Critérios	Perda de carga
Equação da exergia	$\dot{m} \cdot (B_2 - B_1) = -\dot{m} \cdot T_0 \cdot (S_2 - S_1)$ (III.39)
Fonte de irreversibilidade	Perda de carga
Formas de melhoria	Substituição por turbinas a vapor ou moinhos; Utilizar a menor perda de carga que ainda apresente bom desempenho de controle.
Função objetivo	$\eta = 1 - \frac{(T_0 \cdot (S_2 - S_1))}{(T_0 \cdot (S_1 - S_0) - (H_1 - H_0))}$ (III.40)

Desse modo, duas variáveis do usuário foram programadas para a operação unitária válvula. Elas encontram-se descritas na Tabela III.9:

Tabela III.9 – Variáveis do usuário programadas para a operação unitária válvula.

Nome	Variável	Significado	Valor	Unid.
Valve Irreversibility	ValveIrreversibility	Irreversibilidade da válvula	*	kW
Exergetic Efficiency	ExergeticEfficiency	Eficiência exergética	*	-

Os códigos referentes às variáveis mencionadas na Tabela III.9 encontram-se no ANEXO A.13 -IRREVERSIBILIDADE DE VÁLVULAS e no ANEXO A.14 -EFICIÊNCIA EXERGÉTICA DE VÁLVULAS.

A variável irreversibilidade é calculada de acordo com o seguinte algoritmo ilustrado na Figura III.16:

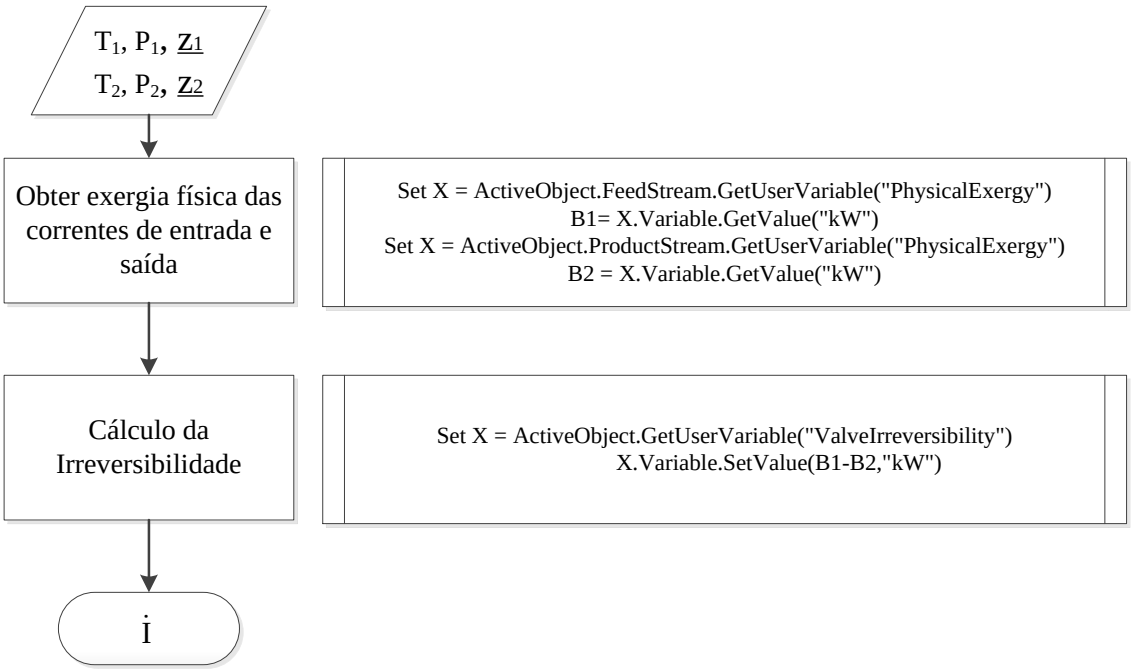


Figura III.16 – Fluxograma da rotina de cálculo da variável do usuário Irreversibilidade em válvulas.

A variável eficiência exergética é calculada de acordo com o seguinte algoritmo ilustrado na Figura III.17:

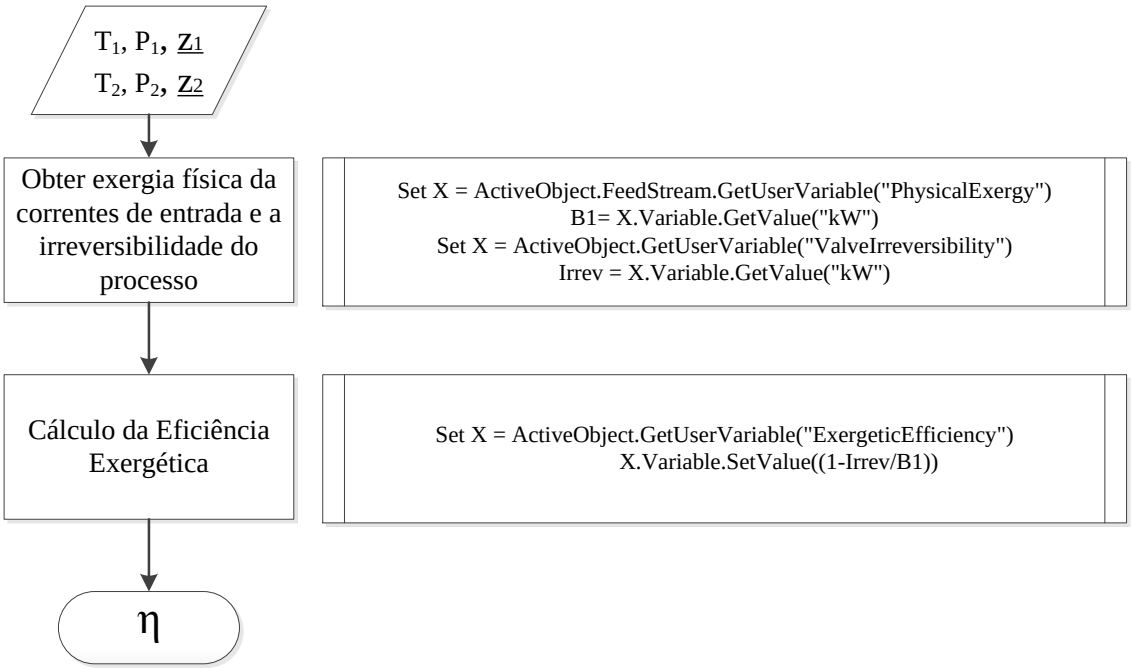


Figura III.17 – Fluxograma da rotina de cálculo da variável do usuário Eficiência Exergética em válvulas.

III.2.1.3 - *MÁQUINAS DE FLUXO*

a) Bombas centrífugas

O projeto de bombas centrífugas também encontra-se amplamente discutido na literatura (CRANE Co, 1988) (Ludwig, 1999) (Mattos, et al., 1998). A metodologia para cálculo de comprimento equivalente permite uma estimativa acurada para cálculo de altura manométrica total, validada por vários projetos de plantas industriais em operação.

Diferentemente das tubulações e válvulas de controle que reduzem a pressão do fluido, uma bomba centrífuga, por exemplo, confere pressão ao líquido. Para tanto, recebe exergia sob a forma de trabalho de eixo. Parte desta exergia é direcionada ao fluido, e outra parte é dissipada pelas ineficiências internas da máquina.

A potência cedida ao fluido (denominada de lhp – *Liquid Horse Power*) não contabiliza a eficiência da bomba. Sabe-se que, de fato, a potência fornecida ao eixo será superior (denominada de bhp – *Brake Horse Power*) (Ludwig, 1999).

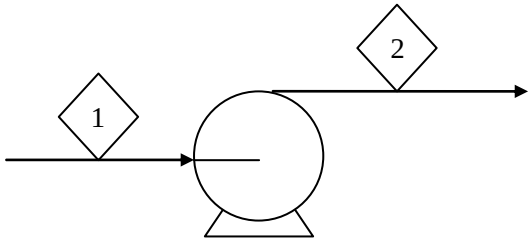
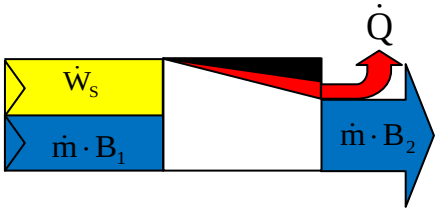
Define-se eficiência da bomba como:

$$\varphi = \frac{\text{lhp}}{\text{bhp}} = \frac{\dot{m} \cdot \left(H_2 - H_1\right)}{\left|\dot{W}_S\right|} \qquad \text{(III.41)}$$

A análise de disponibilidade pode ser conduzida considerando a potência fornecida ao eixo, que constitui um importante parâmetro de projeto. Há um dispêndio de calor no mancal do eixo (perda externa em função da transmissão) referente à potência não absorvida pelo fluido. A eficiência da máquina é função do ponto de operação, que é obtido pela interseção entre a curva da bomba e a curva do sistema. Desse modo, a seleção da bomba apropriada, ou seja, aquela cujo ponto de operação esteja próximo do mais eficiente, configura uma medida que pode ser utilizada para minimizar o dispêndio exergético.

A eficiência racional para bombas centrífugas, de acordo com Ghannadzadeh, et al., (2012) é dada pela variação de exergia mecânica do fluido, ou seja, obtida exclusivamente pelo aumento da pressão (efeito desejado), a temperatura constante; dividida pelo trabalho de eixo. A Tabela III.10 apresenta um resumo para análise de disponibilidade em bombas centrífugas.

Tabela III.10 – Análise exergética de bombas.

Bombas	
 (a)  (b) **Figura III.18– (a) e (b)** Operação unitária bomba centrífuga representada em Fluxograma de Processo (a) e em Diagrama de Grassmann (b).	
Balanço de energia	$\dot{m} \cdot (H_2 - H_1) = -\lvert\dot{Q}\rvert + \lvert\dot{W}_S\rvert$ (III.42)
Parâmetros de projeto	*Head*, vazão, potência e NPSH
Critérios	Perda de carga
Equação da exergia	$\dot{m} \cdot (B_2 - B_1) - \lvert\dot{W}_S\rvert = -\dot{m} \cdot T_0 \cdot (S_2 - S_1) - \lvert\dot{Q}\rvert$ (III.43)
Fonte de irreversibilidade	Perda de carga
Formas de melhoria	Otimizar a hidráulica do sistema
Função objetivo	$\psi = \dfrac{\dot{m} \cdot (B(T_1, P_2, \underline{z}_1) - B(T_1, P_1, \underline{z}_1))}{bhp}$ (III.44)

Desse modo, três variáveis do usuário foram programadas para a operação unitária bomba. Elas encontram-se descritas na Tabela III.11:

Tabela III.11 – Variáveis do usuário programadas para a operação unitária bomba.

Nome	Variável	Significado	Valor	Unid.
Exergy in Energy Stream Calculator	-	Realiza o cálculo da exergia da corrente de energia e atribui o valor na variável da corrente de energia	-	-
Pump Irreversibility	PumpIrreversibility	Irreversibilidade da bomba	*	kW
Rational Efficiency	RationalEfficiency	Eficiência racional	*	-

Os códigos referentes às variáveis mencionadas na Tabela III.11 encontram-se no ANEXO A.15 -IRREVERSIBILIDADE DE BOMBAS e no ANEXO A.16 -EFICIÊNCIA RACIONAL DE BOMBAS.

A variável irreversibilidade é calculada de acordo com o seguinte algoritmo ilustrado na Figura III.19:

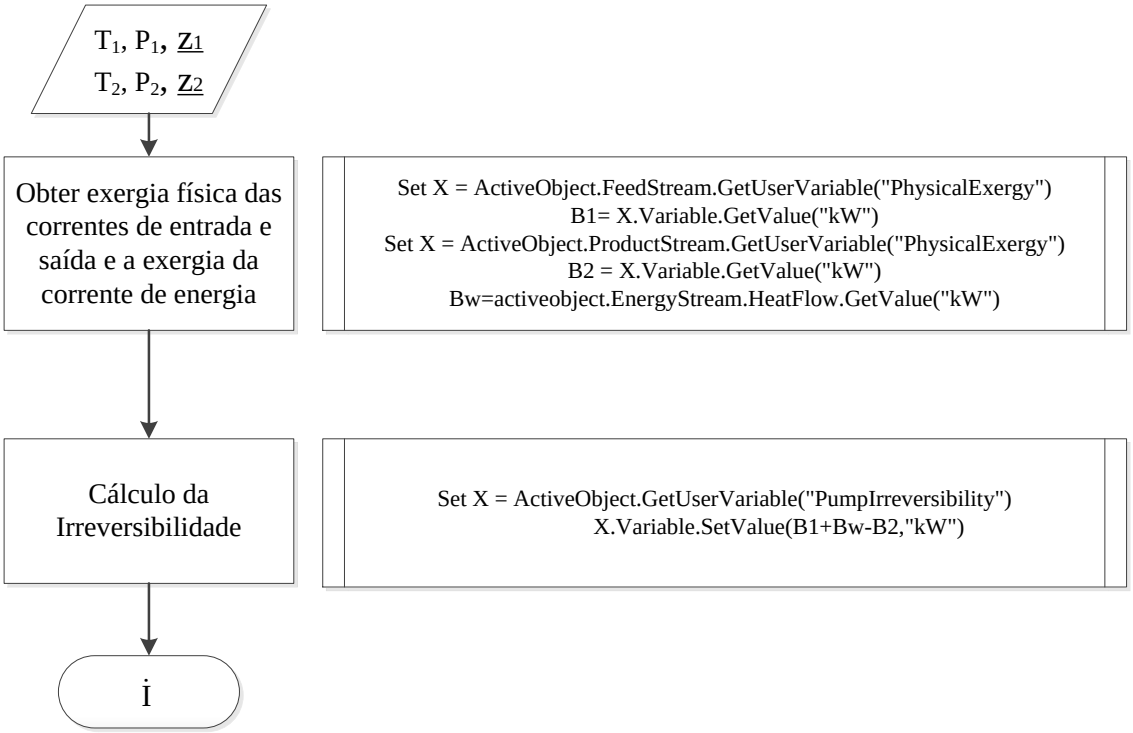


Figura III.19 – Fluxograma da rotina de cálculo da variável do usuário Irreversibilidade em bombas.

A variável eficiência racional é calculada de acordo com o seguinte algoritmo ilustrado na Figura III.20:

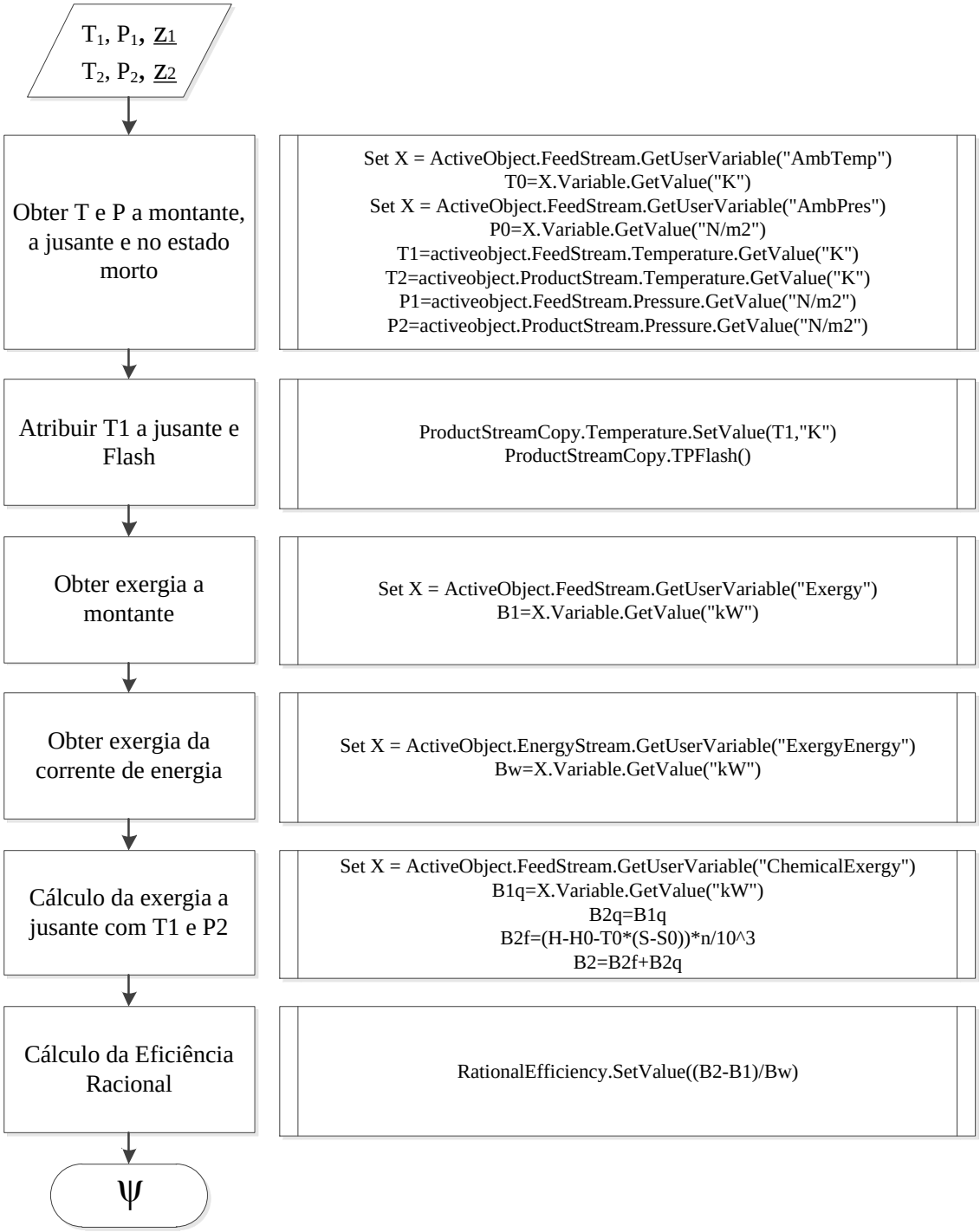


Figura III.20 – Fluxograma da rotina de cálculo da variável do usuário Eficiência Racional em bombas.

b) Compressores e Turbinas

O projeto de compressores é fundamental para definir o investimento da planta de processamento. Normalmente, constitui uma parte importante do investimento (Douglas, 1988) (Silla, 2003). O projeto deste tipo de operação unitária é abordado de forma sucinta por Branan (2005), e é amplamente discutido por Ludwig (1999). Se considerado como ideal a compressão seria um processo adiabático e reversível, portanto, isentrópico. Contudo, processos reais de compressão são irreversíveis. Da mesma forma, devem ser contabilizadas as perdas externas da máquina, a potência fornecida ao eixo é o bhp – *Brake Horse Power*.

O custo de investimento em compressores, de acordo com Douglas (1988) é função direta da potência fornecida ao eixo. Uma correlação simples, que utiliza o índice MS (Marshall -Swift) publicado na *Chemical Engineering* para correção de valores é proposta:

$$\mathrm{ISBL}_{\mathrm{COMPRESSOR}} = \left(\frac{\mathrm{MS}}{280}\right) \cdot 517{,}5 \cdot \left(\mathrm{bhp} \cdot 0{,}00135962\right)^{0{,}82} \cdot \left(2{,}11 + \mathrm{Fc}\right) \tag{III.45}$$

Sendo o coeficiente de configuração (Fc) dado de acordo com a Tabela III.12.

Tabela III.12 – Fator de configuração para cálculo de investimento em compressores. (Douglas, 1988)

Configuração	Centrífugo + motor	Centrífugo + turbina	Alternativo + vapor	Alternativo + motor
Fator	1,0	1,15	1,07	1,29

As turbinas a vapor são expansores responsáveis pela geração de energia elétrica tanto para máquinas de pequeno porte, quanto em plantas térmicas de grande capacidade de geração de energia. Seu projeto está relacionado com o projeto das caldeiras e com o das tubulações dos sistemas de vapor. Ghannadzadeh, et al., (2012) descrevem a eficiência racional para compressores em duas situações distintas: para processos adiabáticos e não-adiabáticos. Para expansores, descrevem a eficiência racional de turbinas a vapor e expansores de sistemas criogênicos. As Tabelas III.13 e III.14 apresentam um resumo para análise de disponibilidade em compressores e turbinas.

Tabela III.13 – Análise exergética de compressores.

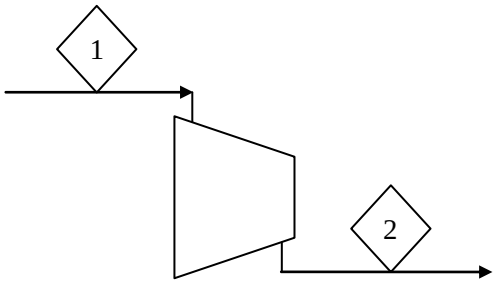
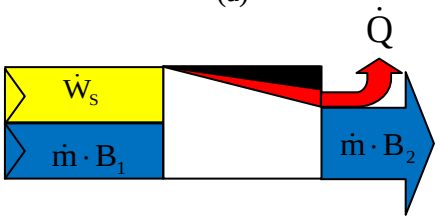
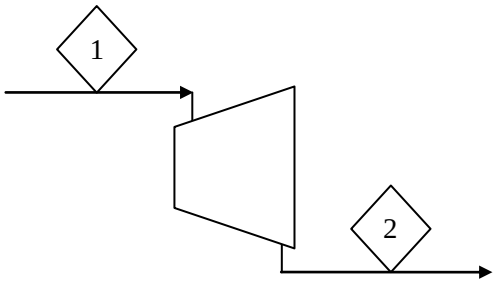
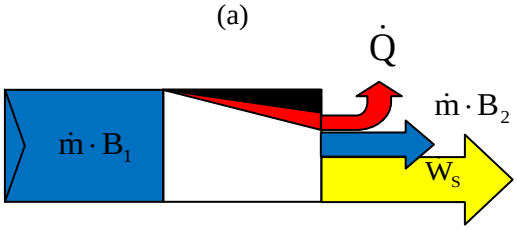
Compressores	
 (a)  (b) **Figura III.21– (a) e (b)** Operação unitária compressor centrífugo representada em Fluxograma de Processo (a) e em Diagrama de Grassmann (b).	
Balanço de energia	$\dot{m} \cdot (H_2 - H_1) = -\lvert\dot{Q}\rvert + \lvert\dot{W}_S\rvert$ (III.46)
Parâmetros de projeto	ΔP, vazão, potência e curvas de *Surge*
Critérios	Perda de carga
Equação da exergia	$\dot{m} \cdot (B_2 - B_1) - \lvert\dot{W}_S\rvert = -\dot{m} \cdot T_0 \cdot (S_2 - S_1) - \lvert\dot{Q}\rvert$ (III.47)
Fonte de irreversibilidade	Correntes de entrada com altas temperaturas
Formas de melhoria	Redução da temperatura da corrente de entrada ou instalação de *intercooler* para compressores multi-estágios
Função objetivo	Adiabático: $\psi = \frac{\dot{m} \cdot (B_2 - B_1)}{bhp}$ (III.48) Não adiabático: $\psi = \frac{\dot{m} \cdot (B(T_1, P_2, \underline{z}_1) - B(T_1, P_1, \underline{z}_1))}{bhp}$ (III.49)

Tabela III.14 – Análise exergética de expansores.

Expansores	
 (a)  (b) **Figura III.22– (a) e (b)** Operação unitária expansor representada em Fluxograma de Processo (a) e em Diagrama de Grassmann (b).	
Balanço de energia	$\dot{m} \cdot (H_2 - H_1) = -\lvert\dot{Q}\rvert - \lvert\dot{W}_S\rvert$ (III.50)
Parâmetros de projeto	ΔP, vazão, potência, título do vapor
Critérios	Perda de carga
Equação da exergia	$\dot{m} \cdot (B_2 - B_1) + \lvert\dot{W}_S\rvert = -\dot{m} \cdot T_0 \cdot (S_2 - S_1) - \lvert\dot{Q}\rvert$ (III.51)
Fonte de irreversibilidade	Baixa temperatura do vapor
Formas de melhoria	Uso do superaquecedores
Função objetivo	Turbina a vapor: $\psi = \frac{\lvert\dot{W}_S\rvert}{\dot{m} \cdot (B_1 - B_2)}$ (III.52) Sistemas criogênicos: $\psi = \frac{\dot{m} \cdot (B(T_1, P_1, \underline{z}_1) - B(T_2, P_1, \underline{z}_1)) + \lvert\dot{Q}\rvert \cdot \left(1 - \frac{T_0}{\overline{T}}\right) + \lvert\dot{W}_S\rvert}{\dot{m} \cdot (B(T_1, P_1, \underline{z}_1) - B(T_1, P_2, \underline{z}_1))}$ (III.53)

Para a operação unitária compressor foi programado o cálculo da eficiência racional para o caso não adiabático. Já para o expansor foi programado o cálculo da variável eficiência racional para o caso de turbinas a vapor. As variáveis programadas encontram-se nas Tabela III.15 e Tabela III.16 :

Tabela III.15 – Variáveis do usuário programadas para a operação unitária compressor.

Nome	Variável	Significado	Valor	Unid.
Exergy in Energy Stream Calculator	-	Realiza o cálculo da exergia da corrente de energia e atribui o valor na variável da corrente de energia	-	-
Compressor Irreversibility	CompressorIrreversibility	Irreversibilidade do compressor	*	kW
Rational Efficiency	RationalEfficiency	Eficiência racional	*	-
Marshall-Swift Index	MS	Índice M&S para correlação de custos de equipamentos de processo		-
Configuration factor	Fc	Fator de configuração para cálculo do custo de investimento		-
Compressor Cost Estimation	Cost	Estimativa de custo de investimento do compressor através do índice MS.	*	US$

Tabela III.16 – Variáveis do usuário programadas para a operação unitária expansor.

Nome	Variável	Significado	Valor	Unid.
Exergy in Energy Stream Calculator	-	Realiza o cálculo da exergia da corrente de energia e atribui o valor na variável da corrente de energia	-	-
Expansor Irreversibility	ExpansorIrreversibility	Irreversibilidade do expansor	*	kW
Rational Efficiency	RationalEfficiency	Eficiência racional	*	-

Os códigos referentes às variáveis mencionadas na Tabela III.15 encontram-se no ANEXO A.17 -IRREVERSIBILIDADE DE COMPRESSORES, ANEXO A.18 -EFICIÊNCIA RACIONAL DE COMPRESSORES e no ANEXO A.19 -ESTIMATIVA DE CUSTO DE COMPRESSORES.

Os códigos referentes às variáveis mencionadas na Tabela III.16 encontram-se no ANEXO A.20 - IRREVERSIBILIDADE DE EXPANSORES e no ANEXO A.21 - EFICIÊNCIA RACIONAL DE EXPANSORES.

A variável irreversibilidade em compressores é calculada de acordo com o seguinte algoritmo ilustrado na Figura III.23.

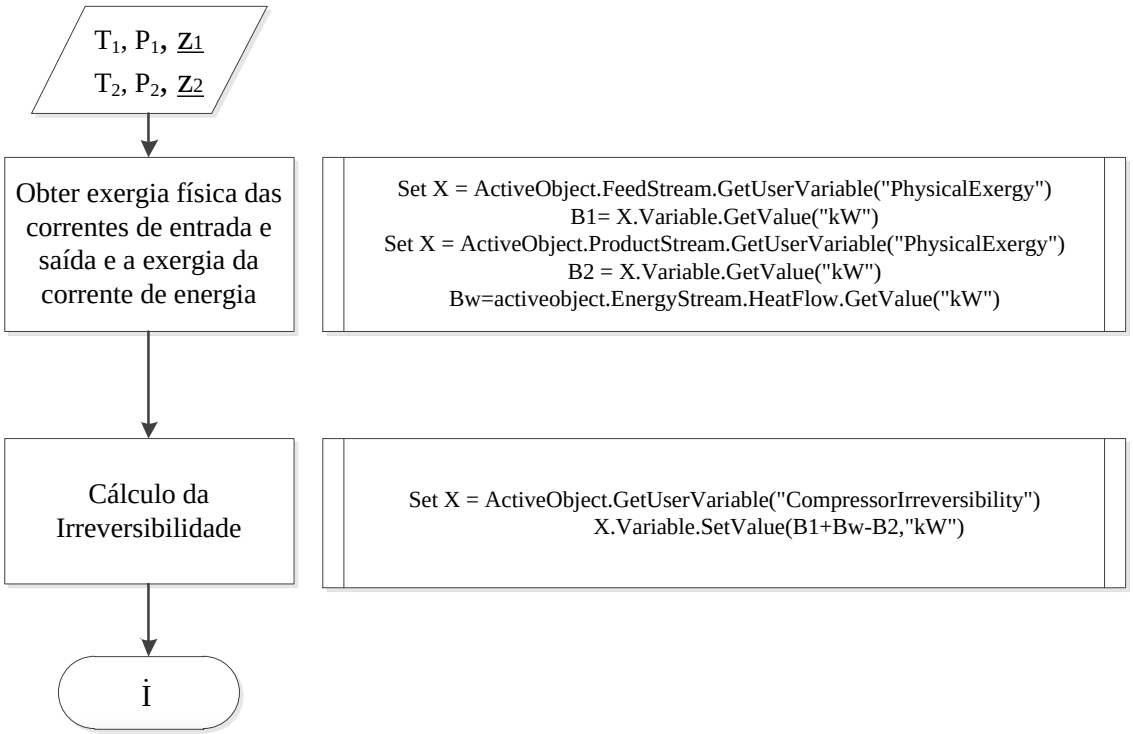


Figura III.23 – Fluxograma da rotina de cálculo da variável do usuário Irreversibilidade em compressores.

A variável eficiência racional de compressores é calculada de acordo com o seguinte algoritmo ilustrado na Figura III.24.

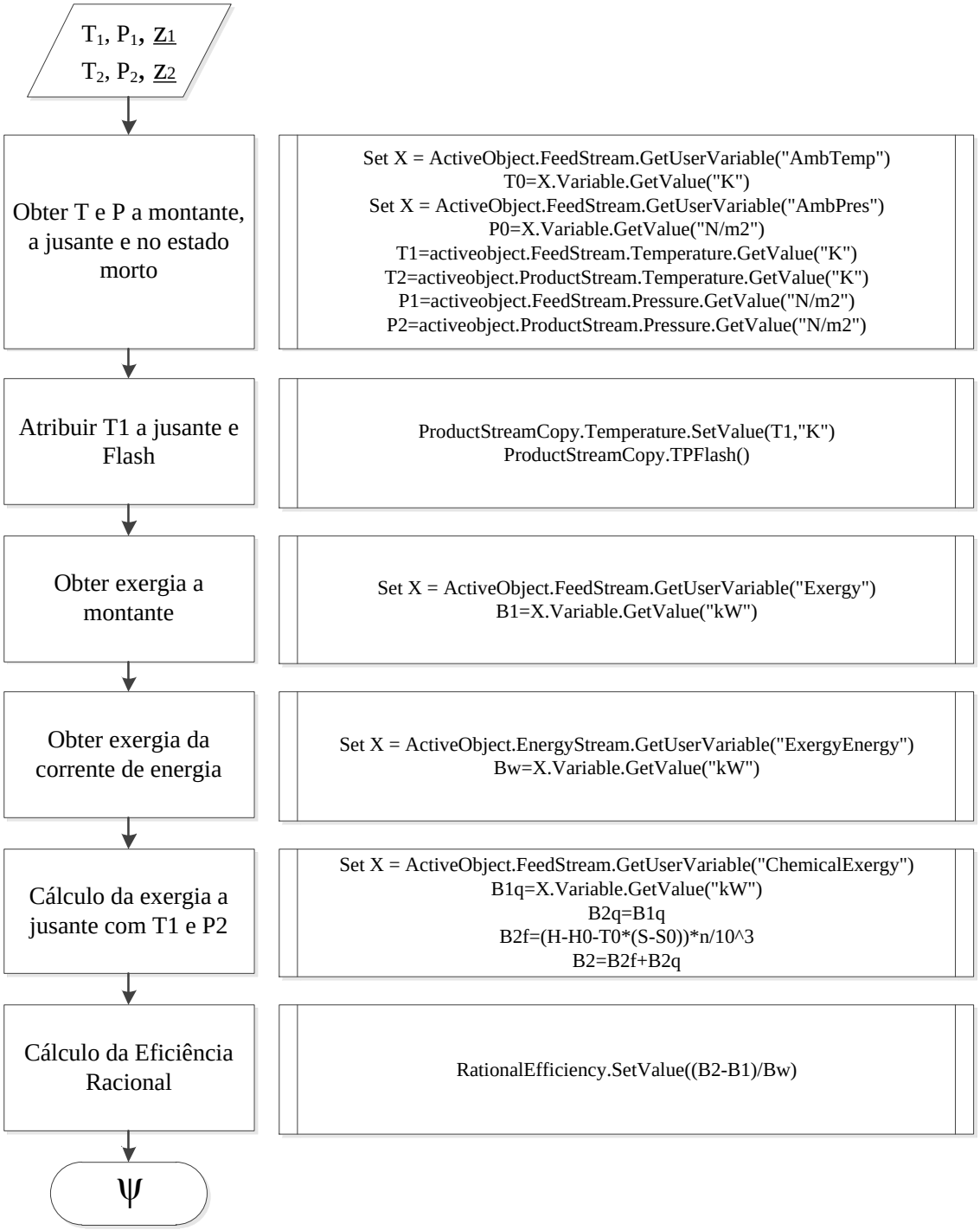


Figura III.24 – Fluxograma da rotina de cálculo da variável do usuário Eficiência Racional em compressores.

A variável irreversibilidade em expansores é calculada de acordo com o seguinte algoritmo ilustrado na Figura III.25.

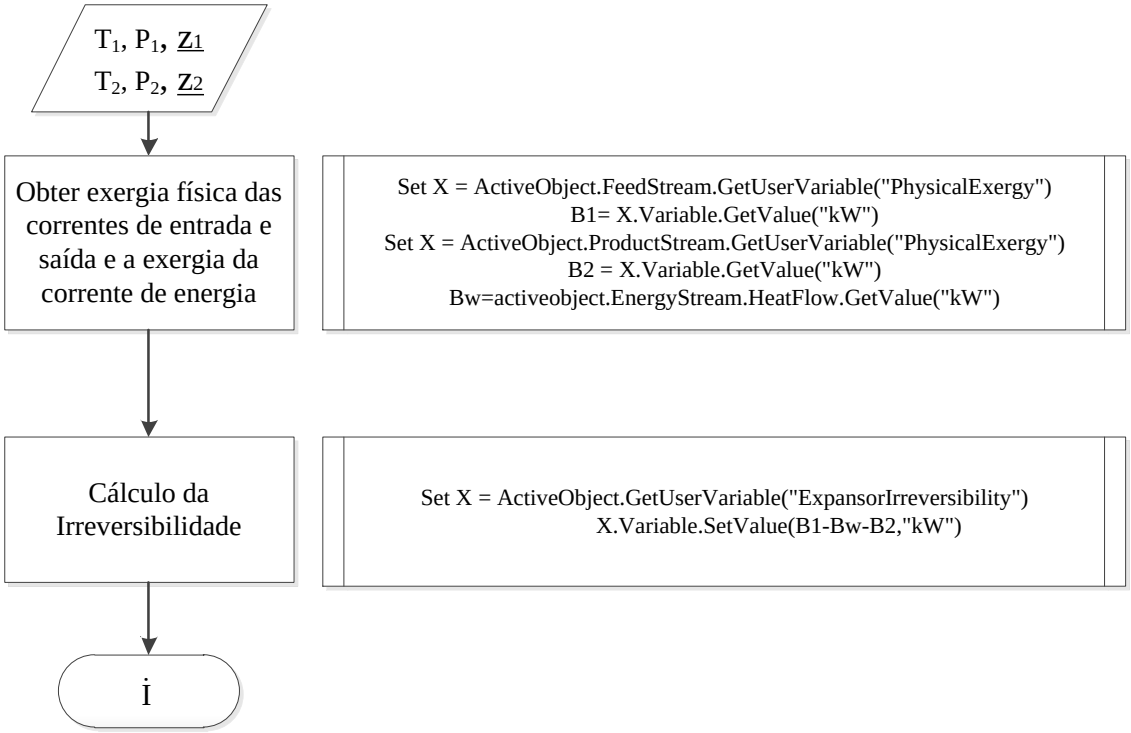


Figura III.25 – Fluxograma da rotina de cálculo da variável do usuário Irreversibilidade em expansores.

A variável eficiência racional de expansores é calculada de acordo com o seguinte algoritmo ilustrado na Figura III.26.

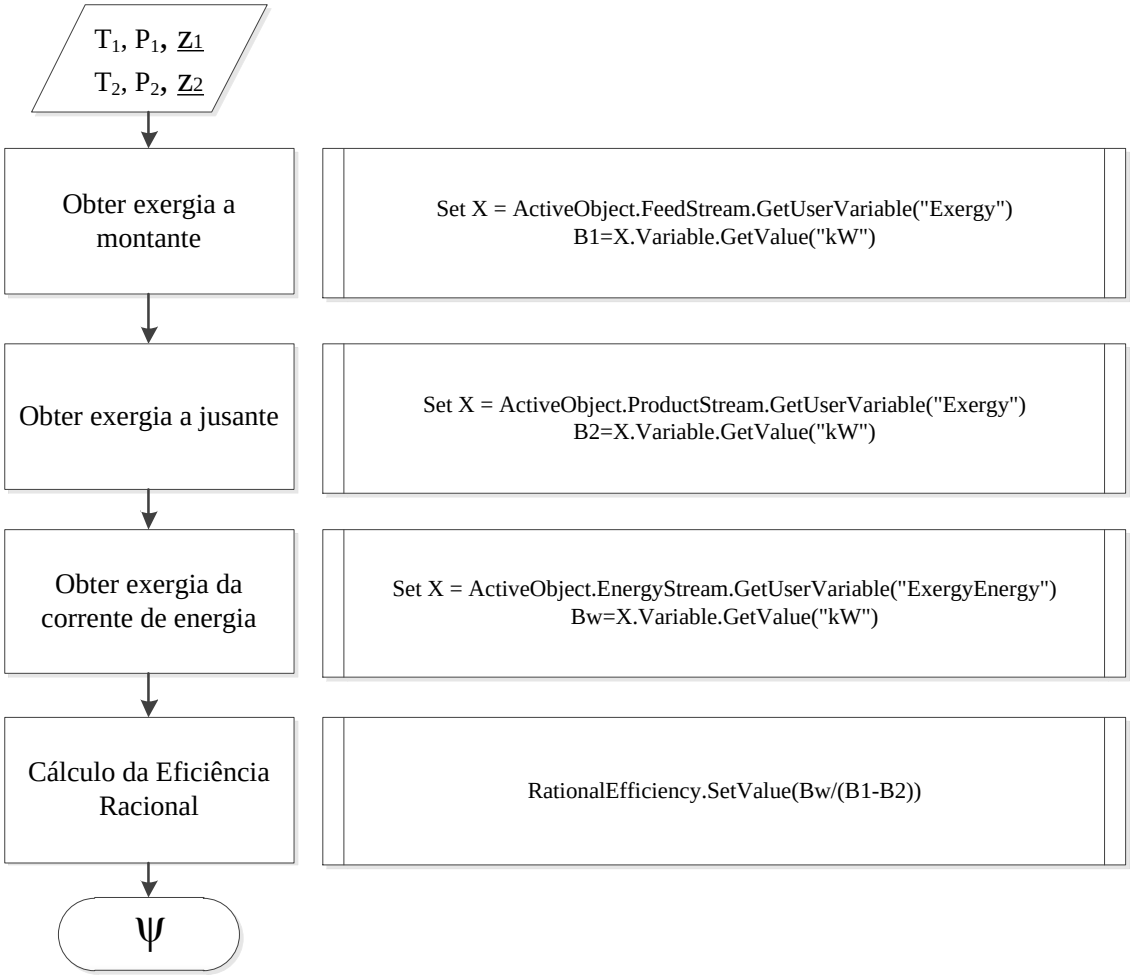


Figura III.26 – Fluxograma da rotina de cálculo da variável do usuário Eficiência Racional em expansores.

III.2.1.4 - *TROCADORES DE CALOR*

Para os equipamentos de troca térmica é necessário evidenciar a distinção entre: calor útil e calor rejeitado. De uma maneira geral, todo calor não aproveitado pelo processo, dissipado ao ambiente, é considerado no termo da irreversibilidade e não nos termos de entrada e saída de calor, da equação da exergia. Repare que, na primeira lei não há distinção entre calor útil e calor rejeitado. Desse modo, o termo referente ao calor no balanço de energia considera todos as transferências de calor envolvidas no processo, incluindo as perdas para o ambiente. Todavia, na equação da exergia, torna-se necessário distinguir as duas formas de calor, como se segue:

$$\sum_i \dot{m}_i^{ENTRADA} \cdot B_i - \sum_i \dot{m}_i^{SAÍDA} \cdot B_i + \left|\sum_i \dot{Q}_i^{ENTRADA} \cdot \left(1 - \frac{T_0}{\overline{T}}\right)\right| - \left|\sum_i \dot{Q}_i^{SAÍDA} \cdot \left(1 - \frac{T_0}{\overline{T}}\right)\right|$$
$$+ \left|\sum_i \dot{W}_i^{ENTRADA}\right| - \left|\sum_i \dot{W}_i^{SAÍDA}\right| + \sum_i \dot{m}_i^{ENTRADA} \cdot T_0 \cdot S_i - \sum_i \dot{m}_i^{SAÍDA} \cdot T_0 \cdot S_i - \left|\dot{Q}_{REJEITADO}\right| = 0 \qquad \text{(III.54)}$$

De fato, nas operações unitárias de deslocamento de fluidos mencionadas anteriormente o termo referente ao calor, somente aparece como dissipação para o ambiente, em virtude das ineficiências intrínsecas das máquinas e dos isolamentos de tubulações. Por outro lado, nas operações unitárias de transferência de calor, mais especificamente, em trocadores de calor, as perdas externas para o ambiente não são contabilizadas e os termos referentes ao calor referem-se a grandezas úteis, que de fato, configuram o objetivo deste tipo de operação unitária.

O projeto de trocadores de calor é amplamente discutido por Kern (1965). Algumas regras práticas são apresentadas por Branan (2005). Metodologia para a síntese de redes de trocadores de calor é descrita por Perlingeiro (2005). O projeto deste tipo de operação unitária é normalmente assistido por computador através de programas específicos.

Basicamente, a função de um trocador de calor é o ganho de exergia térmica de uma corrente através do dispêndio exergético de outra.

Como exemplo, Ghannadzadeh, et al., (2012) cita um resfriador, conforme a Figura III.27.

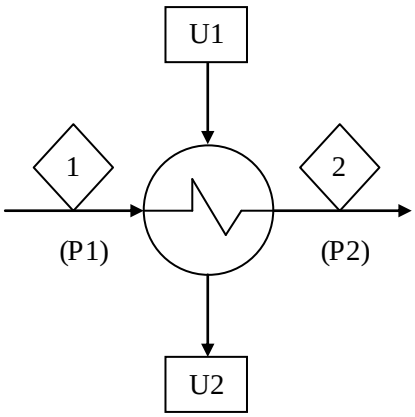


Figura III.27– Operação unitária resfriador de uma corrente de processo (P) através de uma corrente de utilidade (U)

Para um resfriador, por exemplo, a variação de exergia desejada é a perda de temperatura da corrente quente, dada por:

$$\left(\Delta\dot{B}\right)_{DESEJÁVEL} = \dot{m}_{P1} \cdot \left(B\left(T_{P1}, P_{P1}, \underline{z}_{P1}\right) - B\left(T_{P2}, P_{P1}, \underline{z}_{P1}\right)\right) \qquad \text{(III.55)}$$

Já o dispêndio exergético é composto pela perda de carga das correntes quente e fria, somada a perda exergia térmica da corrente fria, dado por:

$$\begin{aligned}\left(\Delta\dot{B}\right)_{UTILIZADO} &= \dot{m}_{U1} \cdot \left(B\left(T_{U2}, P_{U2}, \underline{z}_{U1}\right) - B\left(T_{U1}, P_{U1}, \underline{z}_{U1}\right)\right) + \\ &\dot{m}_{P1} \cdot \left(B\left(T_{P1}, P_{P1}, \underline{z}_{P1}\right) - B\left(T_{P1}, P_{P2}, \underline{z}_{P1}\right)\right)\end{aligned} \qquad \text{(III.56)}$$

Logo, tem-se que:

$$\psi = \frac{\dot{m}_{P1} \cdot \left(B\left(T_{P1}, P_{P1}, \underline{z}_{P1}\right) - B\left(T_{P2}, P_{P1}, \underline{z}_{P1}\right)\right)}{\left(\begin{aligned}&\dot{m}_{U1} \cdot \left(B\left(T_{U2}, P_{U2}, \underline{z}_{U1}\right) - B\left(T_{U1}, P_{U1}, \underline{z}_{U1}\right)\right) + \\ &\dot{m}_{P1} \cdot \left(B\left(T_{P1}, P_{P1}, \underline{z}_{P1}\right) - B\left(T_{P1}, P_{P2}, \underline{z}_{P1}\right)\right)\end{aligned}\right)} \qquad \text{(III.57)}$$

Se as perdas de carga forem desprezíveis, a expressão da eficiência racional para um resfriador é dado por:

$$\psi = \frac{\dot{m}_{P1} \cdot \left(B\left(T_{P1}, P_{P1}, \underline{z}_{P1}\right) - B\left(T_{P2}, P_{P1}, \underline{z}_{P1}\right)\right)}{\left(\dot{m}_{U1} \cdot \left(B\left(T_{U2}, P_{U1}, \underline{z}_{U1}\right) - B\left(T_{U1}, P_{U1}, \underline{z}_{U1}\right)\right)\right)} \qquad \text{(III.58)}$$

O custo de investimento em trocadores de calor, de acordo com Douglas (1988) é função direta da área de transferência de calor (A). Uma correlação que utiliza o índice MS (Marshall -Swift), publicado na *Chemical Engineering* para correção de valores é dada por:

$$ISBL_{\text{TROCADOR DE CALOR}} = \left(\frac{MS}{280}\right) \cdot 101{,}3 \cdot \left(10{,}7639 \cdot A\right)^{0{,}65} \cdot \left(2{,}29 + Fc\right) \qquad \text{(III.59)}$$

Sendo:

$$Fc = Fm \cdot \left(Fd + Fp\right) \qquad \text{(III.60)}$$

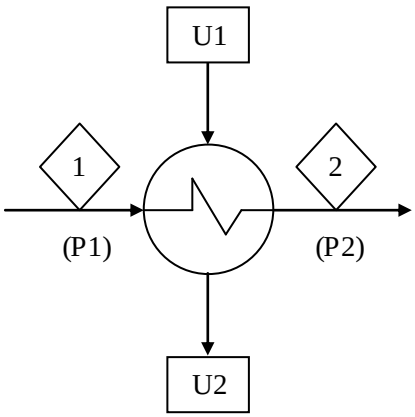
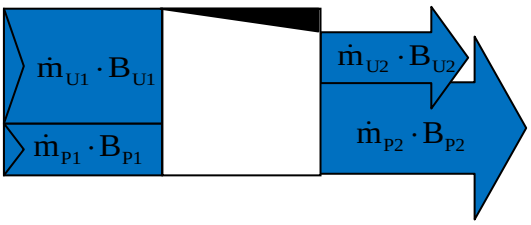
O coeficiente de configuração (Fc) é dado de acordo com o coeficiente de material (Fm), coeficiente de pressão (Fp) e de acordo com o tipo de equipamento, expresso através do coeficiente (Fd). Alguns valores típicos, encontram-se na Tabela III.17. A Tabela III.18 apresenta um resumo para análise de disponibilidade em trocadores de calor.

Tabela III.17 – Fatores de configuração para cálculo de investimento em trocadores de calor. Adaptado de Douglas (1988).

Material casco / tubo	Aço carbono / aço carbono	Aço carbono / latão	Aço carbono / aço inox	Aço inox / aço inox
Fm	1	1,3	2,81	3,75
Tipo	*Kettle*	Cabeçote flutuante	Tubos em U	Espelho fixo
Fd	1,35	1	0,85	0,80

Fp	**Pressão (psia)**
0	< 150
0,1	150 – 300
0,25	300 – 400
0,52	400 – 800
0,75	800 – 1200
1,12	1200 – 1600
1,5	1600 – 2000
2,0	2000 – 2500
2,5	2500 – 3000
3,0	3000 – 4000
3,5	4000 – 5000

Tabela III.18 – Análise exergética de trocadores de calor.

Trocadores de calor	
 (a)  (b) **Figura III.28– (a) e (b)** Operação unitária trocador de calor (aquecedor) representada em Fluxograma de Processo (a) e em Diagrama de Grassmann (b).	
Balanço de energia	$\dot{m}_{P1} \cdot (H_{P2} - H_{P1}) + \dot{m}_{U1} \cdot (H_{U2} - H_{U1}) = 0$ (III.61)
Parâmetros de projeto	Perda de carga (casco e tubos), carga térmica, área de transferência de calor
Critérios	Carga térmica e *over design*
Equação da exergia	$\dot{m}_{P1} \cdot (B_{P2} - B_{P1}) + \dot{m}_{U1} \cdot (B_{U2} - B_{U1}) = -\dot{m}_{P1} \cdot T_0 \cdot (S_{P2} - S_{P1}) - \dot{m}_{U1} \cdot T_0 \cdot (S_{U2} - S_{U1})$ (III.62)
Fonte de irreversibilidade	Diferença de temperatura entre as correntes Gradiente de pressão não uniforme
Formas de melhoria	Usar a menor força motriz possível Reduzir o número de chicanas no casco

Função objetivo	Aquecedor: $$\psi = \frac{\dot{m}_{P1} \cdot \left(B\left(T_{P2}, P_{P1}, \underline{z}_{P1}\right) - B\left(T_{P1}, P_{P1}, \underline{z}_{P1}\right)\right)}{\begin{pmatrix} \dot{m}_{U1} \cdot \left(B\left(T_{U1}, P_{U1}, \underline{z}_{U1}\right) - B\left(T_{U2}, P_{U2}, \underline{z}_{U1}\right)\right) + \\ \dot{m}_{P1} \cdot \left(B\left(T_{P1}, P_{P1}, \underline{z}_{P1}\right) - B\left(T_{P1}, P_{P2}, \underline{z}_{P1}\right)\right) \end{pmatrix}}$$ (III.63) Resfriador: $$\psi = \frac{\dot{m}_{P1} \cdot \left(B\left(T_{P1}, P_{P1}, \underline{z}_{P1}\right) - B\left(T_{P2}, P_{P1}, \underline{z}_{P1}\right)\right)}{\begin{pmatrix} \dot{m}_{U1} \cdot \left(B\left(T_{U2}, P_{U2}, \underline{z}_{U1}\right) - B\left(T_{U1}, P_{U1}, \underline{z}_{U1}\right)\right) + \\ \dot{m}_{P1} \cdot \left(B\left(T_{P1}, P_{P1}, \underline{z}_{P1}\right) - B\left(T_{P1}, P_{P2}, \underline{z}_{P1}\right)\right) \end{pmatrix}}$$ (III.64)

Para a operação unitária trocador de calor foram programadas as seguintes variáveis descritas na Tabela III.19:

Tabela III.19 – Variáveis do usuário programadas para a operação unitária trocador de calor.

Nome	Variável	Significado	Valor	Unid.
Tube Side Exergy Difference	TubeSideDB	Diferença de exergia no lado dos tubos	*	kW
Shell Side Exergy Difference	ShellSideDB	Diferença de exergia no lado do casco	*	kW
Irreversibility	Irrev	Irreversibilidade	*	kW
Rational Efficiency	RationalEfficiency	Eficiência racional	*	-
Marshall-Swift Index	MS	Índice M&S para correlação de custos de equipamentos de processo		-
Configuration factor	Fc	Fator de configuração para cálculo do custo de investimento		-
Heat Exchanger Cost Estimation	Cost	Estimativa de custo de investimento do trocador de calor através do índice MS.	*	US$

Os códigos referentes às variáveis mencionadas na Tabela III.19 encontram-se no ANEXO A.22 - DIFERENÇA DE EXERGIA EM TROCADORES DE CALOR, ANEXO A.23

- IRREVERSIBILIDADE EM TROCADORES DE CALOR, no ANEXO A.24 - EFICIÊNCIA RACIONAL DE TROCADORES DE CALOR e no ANEXO A.25 - ESTIMATIVA DE CUSTO DE TROCADORES DE CALOR.

A variável Diferença de exergia no lado dos tubos (ou no casco, de forma análoga) é calculada de acordo com o seguinte algoritmo ilustrado na Figura III.29 :

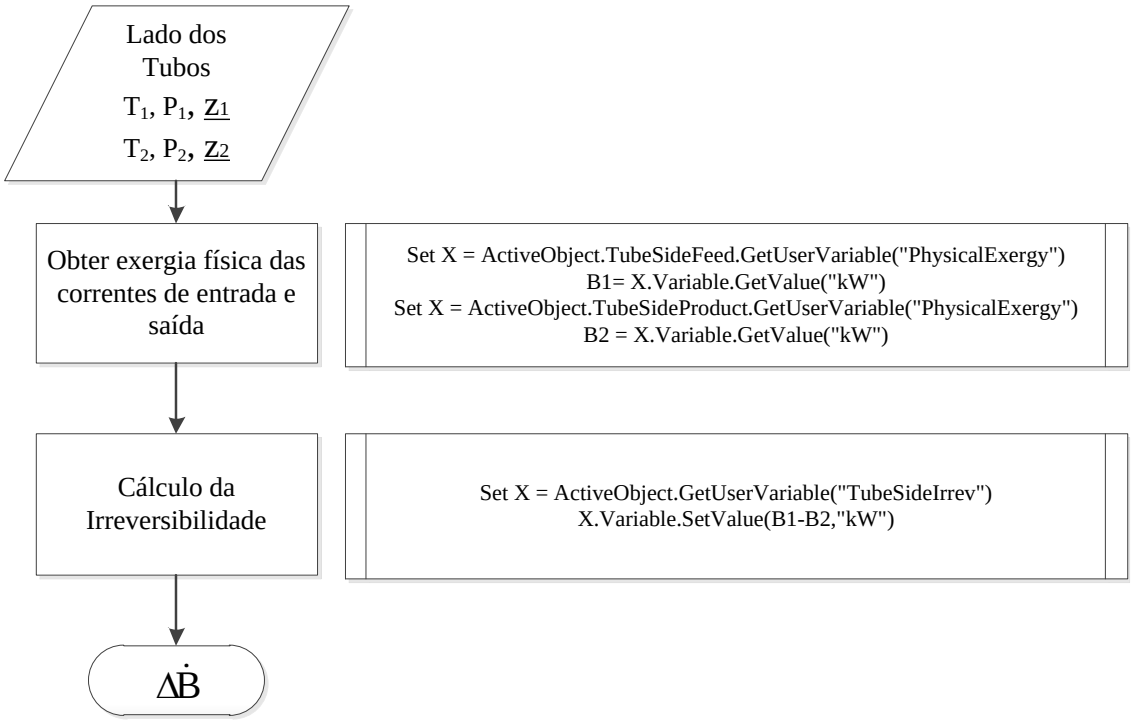
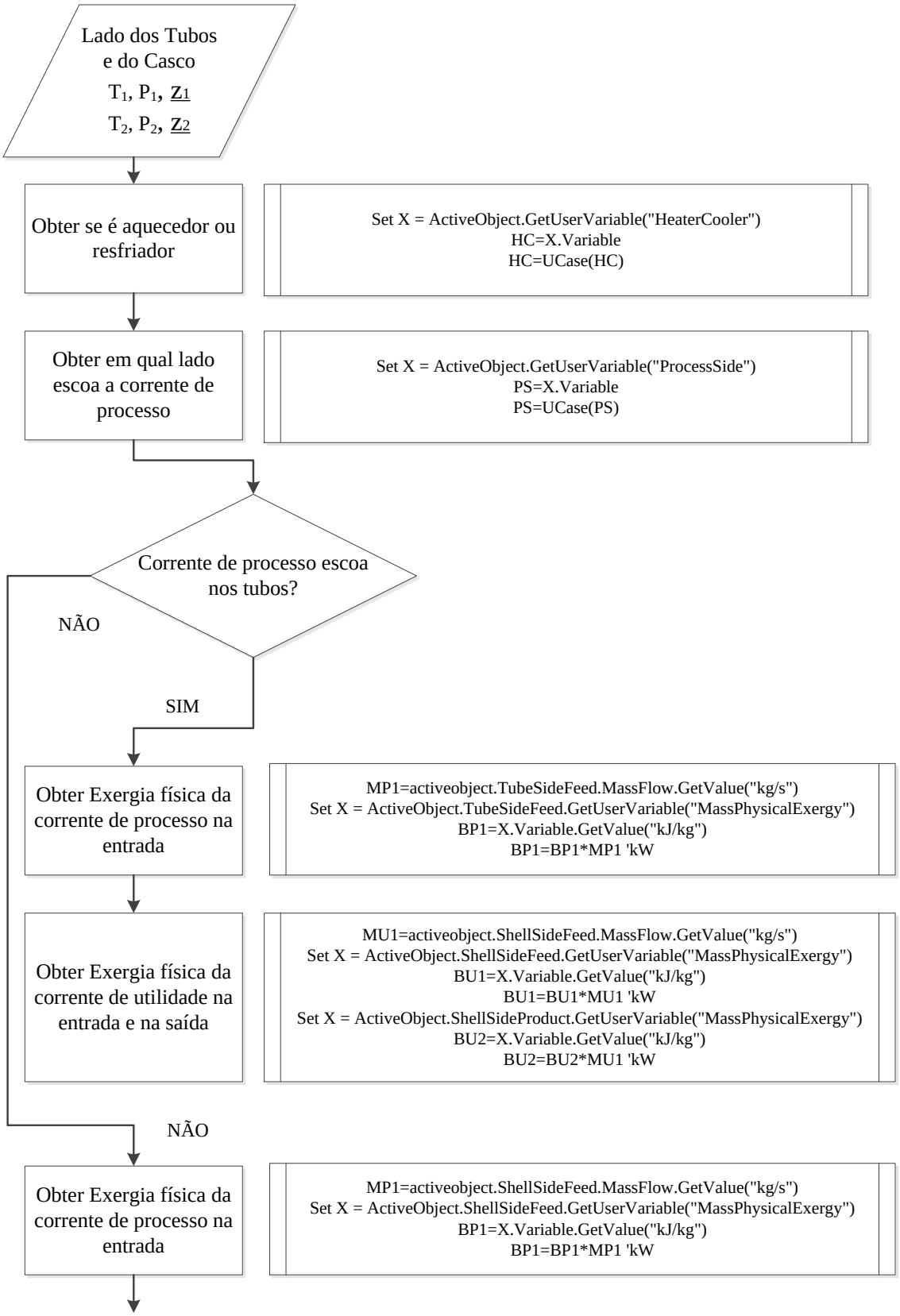


Figura III.29 – Fluxograma da rotina de cálculo da variável do usuário Diferença de exergia em trocadores de calor para o lado dos tubos.

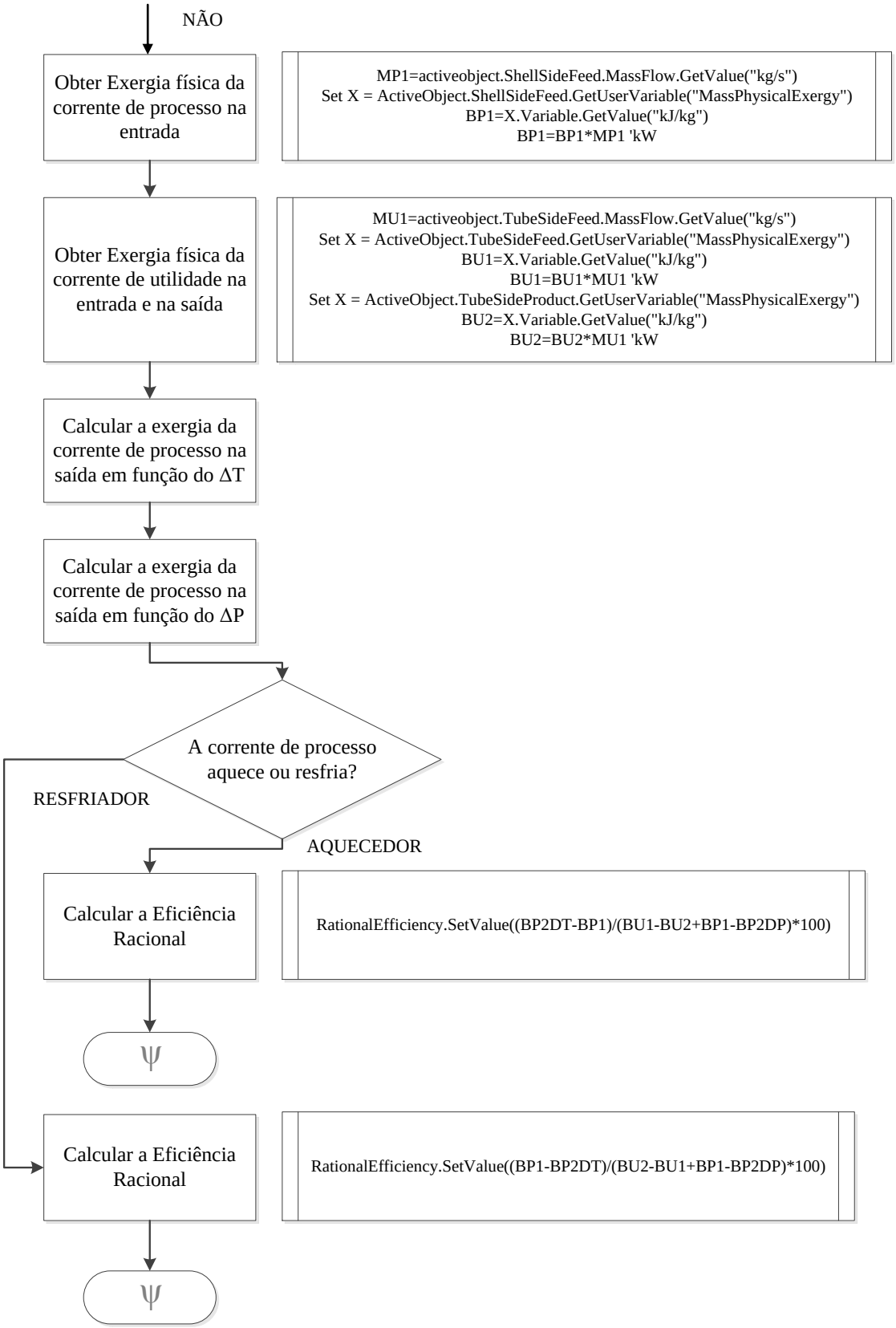
A variável Irreversibilidade é calculada como sendo o módulo da soma das diferenças de exergia do tubo e do casco. Desse modo, toda exergia fornecida pela corrente quente que não foi absorvida pela corrente fria consiste na irreversibilidade da operação.

A variável eficiência racional em trocadores de calor é calculada segundo o seguinte algoritmo ilustrado na Figura III.31:

:


Lado dos Tubos
e do Casco
T1, P1, Z1
T2, P2, Z2
Obter se é aquecedor ou resfriador
Set X = ActiveObject.GetUserVariable("HeaterCooler")
HC=X.Variable
HC=UCase(HC)
Obter em qual lado escoa a corrente de processo
Set X = ActiveObject.GetUserVariable("ProcessSide")
PS=X.Variable
PS=UCase(PS)
Corrente de processo escoa nos tubos?
NÃO
SIM
Obter Exergia física da corrente de processo na entrada
MP1=activeobject.TubeSideFeed.MassFlow.GetValue("kg/s")
Set X = ActiveObject.TubeSideFeed.GetUserVariable("MassPhysicalExergy")
BP1=X.Variable.GetValue("kJ/kg")
BP1=BP1*MP1 'kW
Obter Exergia física da corrente de utilidade na entrada e na saída
MU1=activeobject.ShellSideFeed.MassFlow.GetValue("kg/s")
Set X = ActiveObject.ShellSideFeed.GetUserVariable("MassPhysicalExergy")
BU1=X.Variable.GetValue("kJ/kg")
BU1=BU1*MU1 'kW
Set X = ActiveObject.ShellSideProduct.GetUserVariable("MassPhysicalExergy")
BU2=X.Variable.GetValue("kJ/kg")
BU2=BU2*MU1 'kW
NÃO
Obter Exergia física da corrente de processo na entrada
MP1=activeobject.ShellSideFeed.MassFlow.GetValue("kg/s")
Set X = ActiveObject.ShellSideFeed.GetUserVariable("MassPhysicalExergy")
BP1=X.Variable.GetValue("kJ/kg")
BP1=BP1*MP1 'kW

(a)



(b)

Figura III.30(a) e (b) – Fluxograma da rotina de cálculo da variável do usuário Eficiência Racional em trocadores de calor.

Segundo Wei, et al., (2012) o projeto baseado unicamente em análise exergética conduz para uma solução economicamente inviável. Isto porque a busca por melhorias na eficiência está relacionada a um perfil mínimo de força motriz. Essa condição é denominada de praticamente termodinâmica ou mínima condição termodinâmica (*practical near minimum thermodynamic conditions - MTC),* ou seja, onde quase não há gradientes, e o sistema encontra-se muito próximo do equilíbrio. Para trocadores de calor, por exemplo, uma diferença mínima de temperatura entre as correntes quente e fria, conduziria a um equipamento de área infinita.

Um procedimento para resolver este *trade-off* é proposto por Wei, et al., (2012) e aplicado neste trabalho. Segundo este procedimento, a irreversibilidade (destruição da exergia) e o custo de investimento, podem ser divididos em duas partes: a evitável (atacável) e a inevitável.

$$\dot{I} = \dot{I}^{EV} + \dot{I}^{IN} \tag{III.65}$$

A irreversibilidade inevitável de trocadores de calor é calculada através da temperatura média termodinâmica das correntes quente e fria, consiste da diferença entre a exergia contida no calor cedido pela corrente quente e a exergia capturada pela corrente fria:

$$\dot{I}^{IN} = \dot{B}_Q^{QUENTE} - \dot{B}_Q^{FRIA} \tag{III.66}$$

Sendo:

$$\dot{B}_Q^{QUENTE} = \dot{Q} \cdot \left(1 - \frac{T_0}{\overline{T}_{QUENTE}} \right) \tag{III.67}$$

$$\dot{B}_Q^{FRIA} = \dot{Q} \cdot \left(1 - \frac{T_0}{\overline{T}_{FRIA}} \right) \tag{III.68}$$

Segundo Wei, et al., (2012) tem-se que:

$$\overline{T_{QUENTE}} = \overline{T_{FRIA}} + \Delta T_{MIN} \quad \text{(III.69)}$$

$$\dot{Q} = K \cdot A \cdot \Delta T \quad \text{(III.70)}$$

De acordo com a equação da transferência de calor, para uma determinada taxa de transferência de calor, a diferença de temperatura é inversamente proporcional à área de troca térmica. Desse modo, quanto menor for a diferença de temperatura, maior será a área de transferência de calor, por outro lado, quanto maior for a diferença de temperatura, maior será a irreversibilidade do processo.

Segundo Wei, et al., (2012) o custo de investimento inevitável com o trocador de calor pode ser calculado utilizando uma correlação apropriada, onde a área de transferência de calor deve ser estimada através da máxima diferença de temperatura, que pode ser calculada de acordo com o objetivo do trocador de calor.

Tabela III.20 – Cenários de avaliação de trocadores de calor.

Caso	**Área**	**Custo**	**Irreversibilidade**
ΔT_{MIN}	Maior	Maior	**Inevitável**
$\Delta T_{MÁX}$	Menor	**Inevitável**	Atacável e inevitável

III.2.1.4.1 PROCEDIMENTO PARA CÁLCULO DA IRREVERSIBILIDADE ATACÁVEL E DO CUSTO DE INVESTIMENTO INEVITÁVEL EM TROCADORES DE CALOR COM UTILIDADE QUENTE

O fluido quente mais comum em unidades industriais é o vapor d'água em diferentes patamares de pressão, denominados de: vapor de super alta pressão (*HHP steam*), vapor de alta pressão (*HP steam*), vapor de média pressão (*MP steam*), vapor de baixa pressão (*LP steam*) e vapor de super baixa pressão (*LLP steam*).

Como resultado, para o caso de uma corrente de processo, sendo aquecida por utilidades quentes, a máxima diferença de temperatura permitida pode ser determinada com base na

temperatura de saturação dos diferentes níveis de pressão do vapor. Wei, et al., (2012) fizeram algumas simplificações para o cálculo da máxima diferença de temperatura permitida, conforme apresentado a seguir:

Primeiro, quando o fluido quente é vapor de super baixa pressão (*SLP*), o limite superior da temperatura de operação do fluido quente é o vapor de baixa pressão (*LP*), e para o *LP*, *MP* e *HP* os limites superiores de operação são, respectivamente, *MP*, *HP* e *SHP*. Segundo, se a utilidade quente de trocador é o vapor de super alta pressão *SHP*, é assumido que utilidade quente é o próprio limite superior de operação.

Desse modo, Wei, et al., (2012) fazem uma análise onde consideram um determinado nível de vapor capaz de aquecer a corrente de processo e o nível de vapor imediatamente superior para definir a mínima e a máxima diferença de temperatura, respectivamente. Logo, são calculados a área mínima e o custo inevitável. E por meio da temperatura média termodinâmica, calculam-se as irreversibilidades, inevitável e atacável.

Informações sobre a mínima diferença de temperatura e a máxima diferença de temperatura permitida, podem ser entendidas a partir da Figura III.31, onde as linhas 1-2, 3-4, 3'-4' representam: a corrente fria de processo em um refervedor, a corrente quente de utilidade e nível de utilidade quente imediatamente superior, respectivamente. O algoritmo do procedimento de cálculo, para aquecedores encontra-se na Figura III.32:

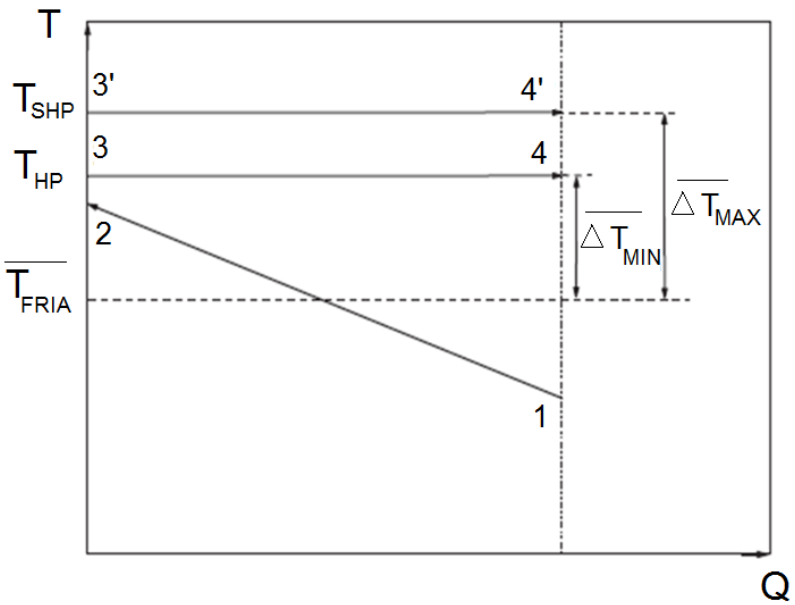


Figura III.31 – Diferenças de temperaturas mínima e máxima permitida em aquecedores. Adaptado de Wei, et al., (2012).

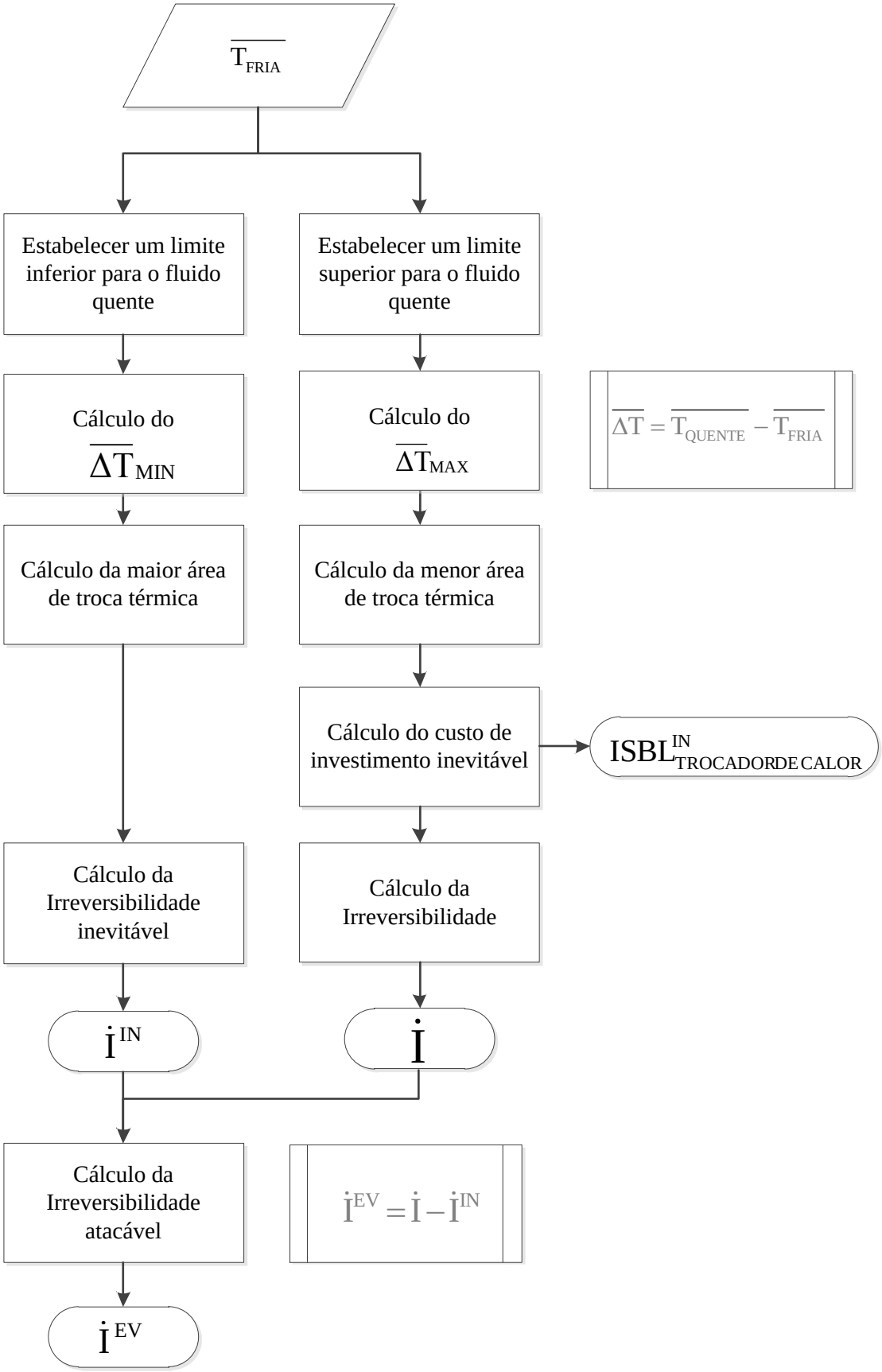


Figura III.32 – Algoritmo para trocadores de calor com utilidade quente.

III.2.1.4.2 PROCEDIMENTO PARA CÁLCULO DA IRREVERSIBILIDADE ATACÁVEL E DO CUSTO DE INVESTIMENTO INEVITÁVEL EM TROCADORES DE CALOR COM UTILIDADE FRIA

A utilidade fria mais comum em unidades industriais é a água de resfriamento. Em aplicações práticas, segundo Wei, et al., (2012) a temperatura de suprimento é de 298 K e a de retorno 308 K. O limite inferior de temperatura é assumido como sendo a temperatura média termodinâmica para água fornecida a 288 K, temperatura esta que os autores consideram como temperatura ambiente média, e retornando a 298 K. Da mesma forma, a máxima diferença de temperatura, corresponde ao custo de investimento inevitável. A Figura III.33 apresenta as médias de temperatura para resfriadores.

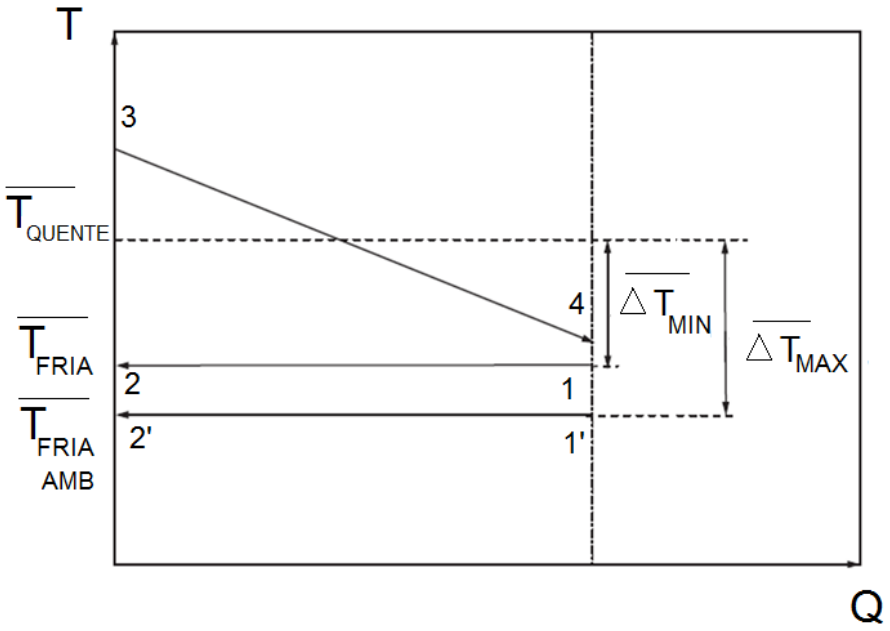


Figura III.33 – Diferença de temperatura mínima e máxima permitida em trocadores de calor resfriadores. Adaptado de Wei, et al., (2012).

O algoritmo do procedimento para trocadores de calor resfriadores encontra-se na Figura III.34:

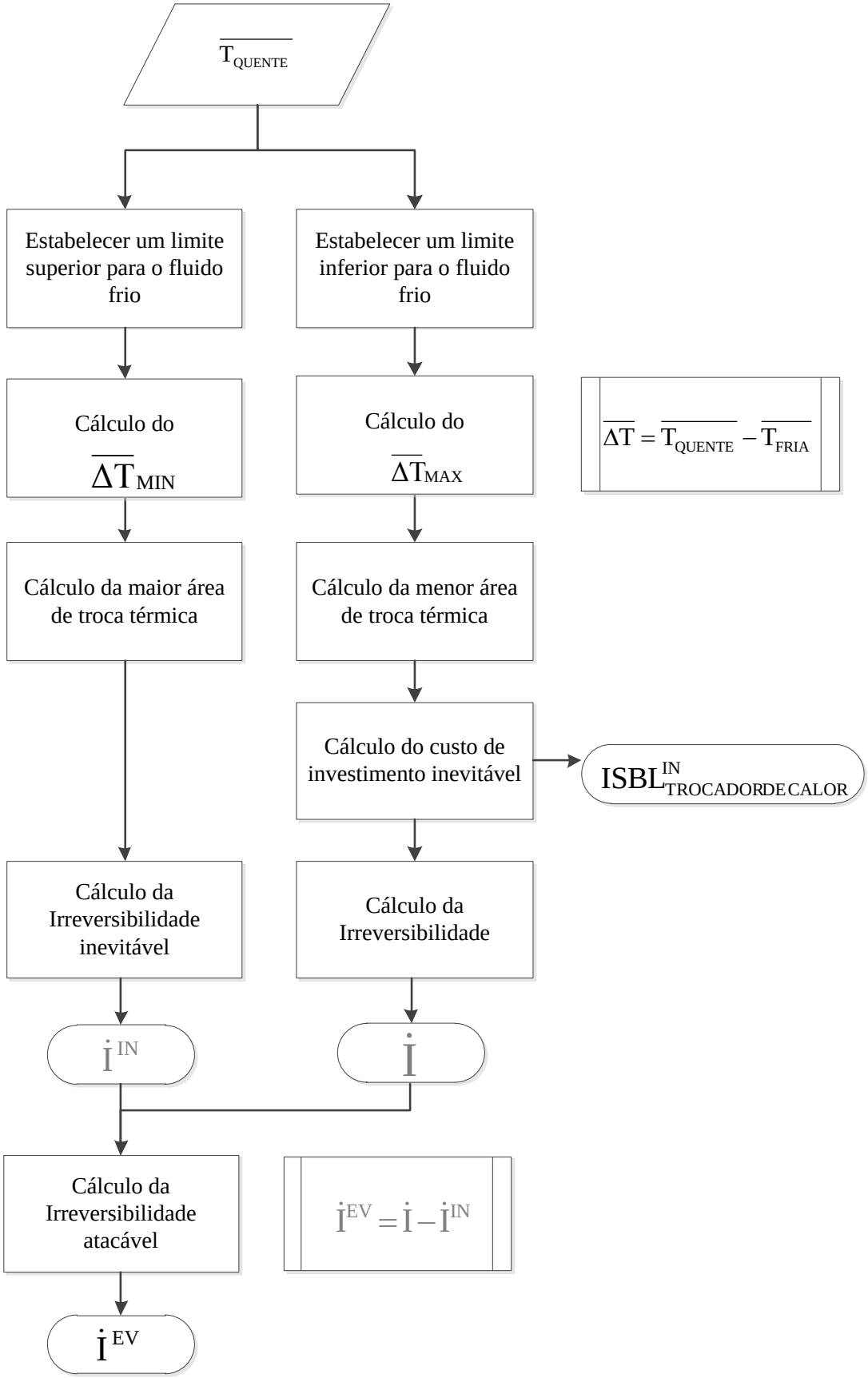


Figura III.34 – Algoritmo para trocadores de calor com utilidade fria.

III.2.1.5 - *COLUNAS DE DESTILAÇÃO*

O projeto de colunas de destilação é, dentre as operações unitárias da engenharia química, uma das mais utilizadas para separação de componentes. É, também, uma operação unitária de grande complexidade, pois envolve não somente fenômenos de transferência de massa, mas, também, possui importantes parâmetros térmicos e de mecânica dos fluidos, relevantes ao seu projeto. Na grande maioria das aplicações, colunas de destilação são grandes consumidores de energia. Além disso, o investimento na compra deste tipo de equipamento é um importante parâmetro do fluxo de caixa do projeto de processos que contém este tipo de operação (Rizk, et al., 2011).

Há diversos livros sobre projeto de colunas de destilação disponíveis na literatura, que abordam desde regras heurísticas até o projeto detalhado (Caldas, et al., 2007) (Branan, 2005) (Walas, 2002). A metodologia para a síntese de sistemas de separação pode ser obtida em Perlingeiro (2005).

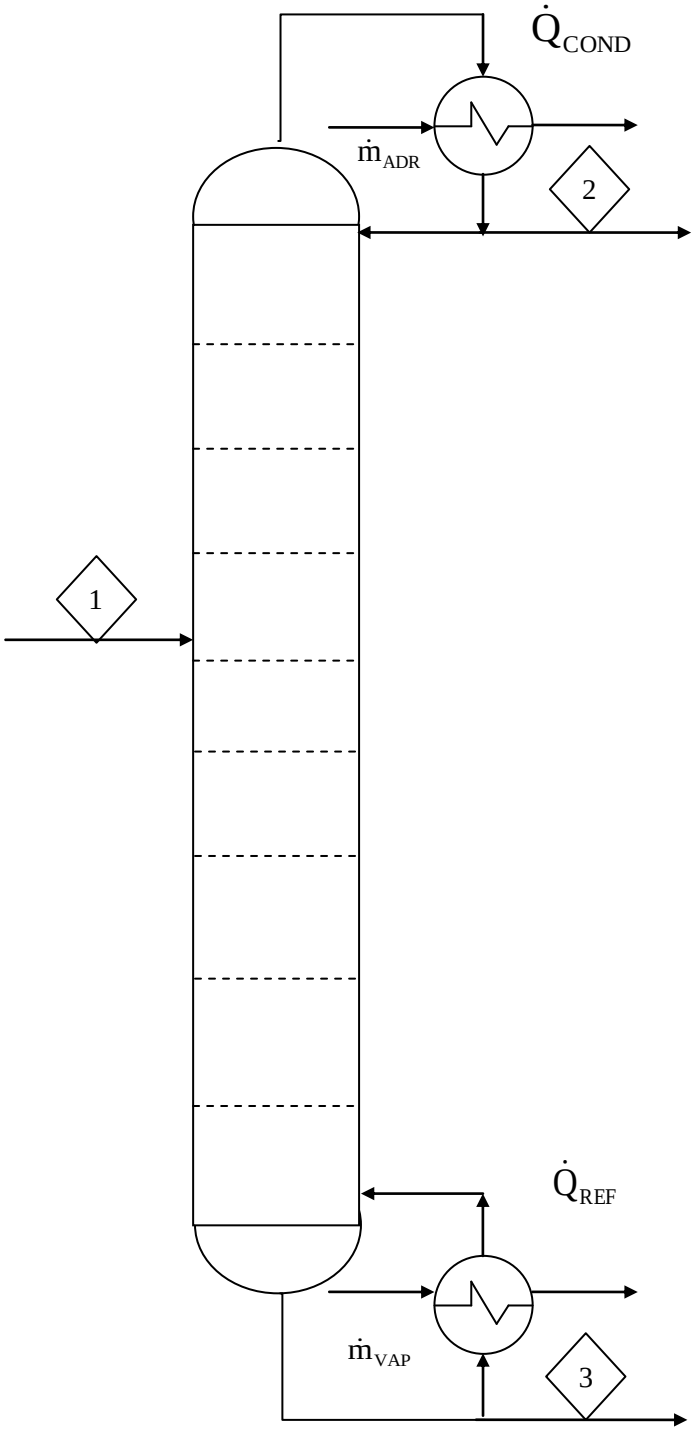
O custo de investimento em colunas de destilação, de acordo com Douglas (1988), é função da altura e do diâmetro da torre, bem como das áreas de transferência de calor (A) do refervedor e do condensador. Uma correlação simples, que utiliza o índice MS (Marshall -Swift) publicado na *Chemical Engineering* para correção de valores é dada por:

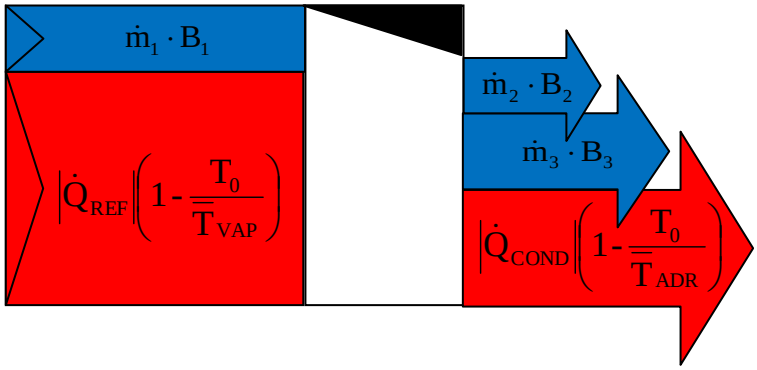
$$\begin{aligned} ISBL_{\text{COLUNA DE DESTILAÇÃO}} &= \left(\frac{MS}{280}\right)\cdot 101{,}9\cdot\left(3{,}28084\cdot d_C\right)^{1{,}066}\cdot\left(3{,}28084\cdot h_C\right)^{0{,}802}\cdot 3{,}18 + \\ &\left(\frac{MS}{280}\right)\cdot 101{,}3\cdot\left(10{,}7639\cdot A_{\text{CONDENSADOR}}\right)^{0{,}65}\cdot\left(3{,}29\right) \\ &+\left(\frac{MS}{280}\right)\cdot 101{,}3\cdot\left(10{,}7639\cdot A_{\text{REFERVEDOR}}\right)^{0{,}65}\cdot\left(3{,}29\right) \end{aligned} \tag{III.71}$$

Sendo, o diâmetro da coluna (d_c) e altura da coluna (h_C), ambos em metros.

Na equação anterior, foram utilizados valores típicos para os coeficientes de material e pressão típicos. O espaçamento entre pratos é suposto como sendo de 24 in. A tabela III.21 apresenta um resumo da análise de disponibilidade em colunas de destilação:

Tabela III.21 – Análise exergética de colunas de destilação.

Colunas de destilação

(a)



(b)

Figura III.35– (a) e (b) Operação unitária coluna de destilação representada em Fluxograma de Processo (a) e em Diagrama de Grassmann (b).

Balanço de energia	$\dot{m}_1 \cdot H_1 + \left\|\dot{Q}_{REF}\right\| = \dot{m}_2 \cdot H_2 + \dot{m}_3 \cdot H_3 + \left\|\dot{Q}_{COND}\right\|$ (III.72)
Parâmetros de projeto	Chave-leve, chave-pesada, número de pratos teóricos, tipo de prato/recheio
Critérios	Especificação dos produtos de topo e fundo
Equação da exergia	$\dot{m}_3 \cdot B_3 + \dot{m}_2 \cdot B_2 - \dot{m}_1 \cdot B_1 + \left\|\dot{Q}_{COND}\right\|\left(1 - \frac{T_0}{\overline{T}_{ADR}}\right) - \left\|\dot{Q}_{REF}\right\|\left(1 - \frac{T_0}{\overline{T}_{VAP}}\right) = - \dot{m}_2 \cdot T_0 \cdot S_2 - \dot{m}_3 \cdot T_0 \cdot S_3 + \dot{m}_1 \cdot T_0 \cdot S_1 - \dot{m}_{ADR} \cdot T_0 \cdot \left(S_{ADR}^{SAÍDA} - S_{ADR}^{ENTRADA}\right) - \dot{m}_{VAP} \cdot T_0 \cdot \left(S_{VAP}^{SAÍDA} - S_{VAP}^{ENTRADA}\right)$ (III.73)
Fonte de irreversibilidade	Gradiente de concentração Sequência de separação imprópria Perda de carga por atrito mecânico Transferência de massa bolha-líquido no prato Gradiente de temperatura
Formas de melhoria	Coluna diabática Usar refervedor intermediário

	Igual partição da força motriz Otimizar a sequência de destilações Otimizar a hidráulica da coluna Alimentação no prato apropriado
Função objetivo	$\psi = \dfrac{\left(\dot{m}_3 \cdot B_3 + \dot{m}_2 \cdot B_2 - \dot{m}_1 \cdot B_1 + \left\|\dot{Q}_{COND}\right\|\left(1 - \dfrac{T_0}{\overline{T}_{ADR}}\right)\right)}{\left\|\dot{Q}_{REF}\right\|\left(1 - \dfrac{T_0}{\overline{T}_{VAP}}\right)}$ (III.74)

Segundo Ghannadzadeh, et al., (2012), na função objetivo de colunas de destilação, o termo referente a exergia do calor retirado no condensador é contabilizado na variação de exergia desejada, uma vez que, o calor perdido para água de resfriamento, necessário para o gradiente de temperatura da coluna, é uma saída do processo que pode ser utilizado em outras aplicações. Desta forma, o dispêndio exergético utilizado corresponde unicamente a exergia do calor fornecido no refervedor.

Rivero (2002) faz uma revisão dos trabalhos de exergia direcionados especificamente a colunas de destilação. Neste trabalho, o autor exemplifica as metodologias aplicadas para este tipo de análise.

Santana (2004) apresenta o conceito de condições praticamente termodinâmica ou mínima condição termodinâmica (*practical near or minimum thermodynamic conditions - MTC)*, condição onde quase não há gradientes de transporte, muito próximo da condição de equilíbrio. Para colunas de destilação, essas condições equivalem a uma coluna que opera de forma reversível, sem perdas por irreversibilidades do transporte de calor e massa. Essa condição pode ser alcançada através da alocação de trocadores de calor laterais, e do aumento do número de pratos. O conceito da condição praticamente termodinâmica para um sistema binário é ilustrado na Figura III.40.

Os trabalhos de Rivero (2002) e Santana (2004), utilizam o o diagrama Entalpia x Temperatura, para análise Pinch de colunas de destilação. Para um sistema binário, a obtenção do perfil entalpia x temperatura é mais simples em função da complexidade do problema. Para sistemas multicomponentes, a distribuição dos componentes intermediários entre as correntes de

topo e fundo é requisito essencial para a reversibilidade da torre. Além disso, para sistemas multicomponentes, o efeito de mistura no prato de carga é um ponto de grande irreversibilidade.

Desse modo, de acordo com Santana (2004), uma solução para o problema seria a obtenção de dois pontos de Pinch, sendo um para seção de absorção e outro para a seção de esgotamento da coluna. Uma possível consideração para tratar as colunas multicomponentes, é definir a mistura como pseudo-binário, onde os componentes mais leves que o chave leve e os componentes mais pesados que o chave pesada são agrupados. As especificações de topo, fundo e alimentação também permanecem as mesmas. A sequência da análise proposta por Santana (2004) é: (1) escolher o prato de carga ótimo; (2) avaliar diferentes condições térmicas da alimentação; (3) redução de refluxo; e (4) alocação de trocadores laterais.

Para análise exergética de coluna de destilação, Santana (2004) recomenda a construção do perfil de irreversibilidades ao longo da coluna. Desse modo, torna-se necessário determinar as irreversibilidades do condensador, de cada estágio e do refervedor.

Para o condensador, tem-se que:

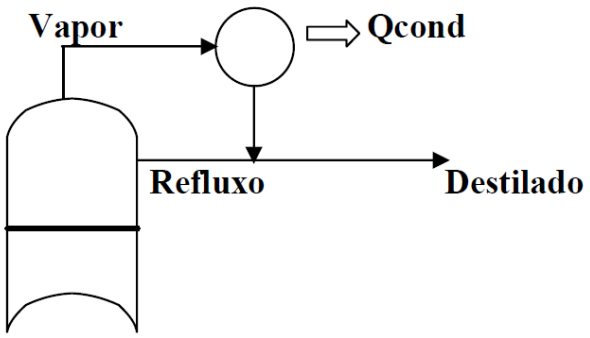


Figura III.36 – Análise exergética do condensador. Adaptado de Santana (2004).

$$\dot{I}_{COND} = \dot{B}_{VAPOR} - \dot{B}_{REFLUXO} - \dot{B}_{DESTILADO} - \dot{Q}_{COND} \cdot \left(1 - \frac{T_0}{T_{ADR}}\right) \qquad \text{(III.75)}$$

A irreversibilidade em cada estágio está relacionada à queda de pressão, ao perfil de temperatura e a mudança de composição. No estágio de alimentação, é válido ressaltar que um termo referente à exergia da alimentação deve ser acrescido.

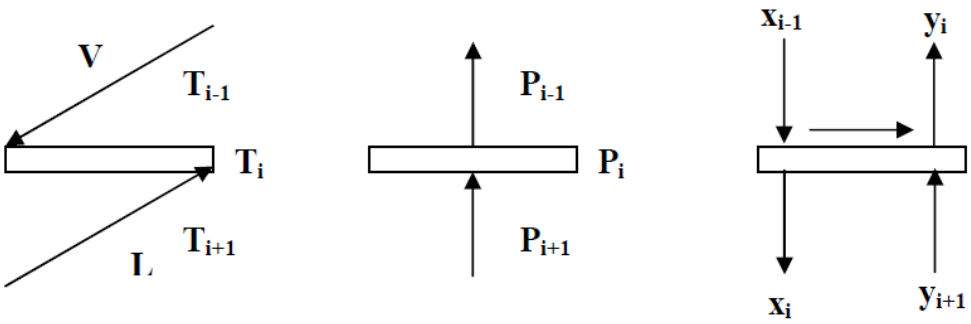


Figura III.37 – Análise exergética do estágio.

$$\dot{I}_{ESTÁGIO} = \dot{B}_{VAPOR,ENTRA} - \dot{B}_{VAPOR,SAI} + \dot{B}_{LÍQUIDO,ENTRA} - \dot{B}_{LÍQUIDO,SAI} \qquad \text{(III.76)}$$

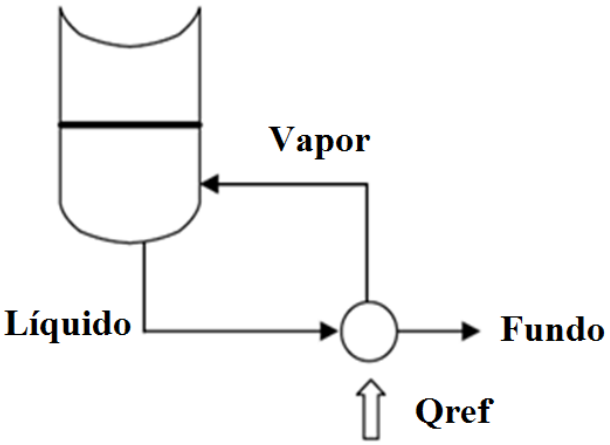


Figura III.38 – Análise exergética do refervedor.

$$\dot{I}_{REF} = \dot{B}_{LÍQUIDO} - \dot{B}_{VAPOR} - \dot{B}_{FUNDO} + \dot{Q}_{REF} \cdot \left(1 - \frac{T_0}{T_{VAP}}\right) \qquad \text{(III.77)}$$

Através das equações acima, é possível construir o perfil de irreversibilidade ao longo da coluna, incluindo os estágios do referverdor e do condensador. Segundo Santana (2004) a análise deste perfil conduz a soluções semelhantes as obtidas a partir da análise Pinch.

Desse modo, a análise exergética em colunas irá demonstrar a grande ineficiência termodinâmica do estágio de alimentação em virtude do efeito de mistura (transferência de massa), bem como a importância da transferência de calor para a reversibilidade da separação.

A condição térmica da alimentação deve ser modificada quando as distribuições de irreversibilidades nas seções de absorção e esgotamento não forem uniformes. Para elevar a vazão na seção de absorção, a alimentação deve ser vaporizada e no caso de aumentar a vazão na seção de esgotamento, a alimentação deve ser resfriada. Quando a distribuição de irreversibilidades permanecer não uniforme, pode-se instalar trocadores de calor laterais, sabendo-se que um condensador intermediário diminui as vazões nos estágios inferiores ao dele e um refervedor lateral aumenta as vazões acima. Outra alternativa é aumentar o número de estágios, já que isso provoca redução nas forças motrizes de transferência de calor e massa (Santana, 2004) .

Diferentemente da análise Pinch, a análise exergética é um procedimento rigoroso para avaliação de colunas de destilação multicomponente, haja vista que, não são necessárias simplificações de modelos pseudo-binários. (Santana, 2004)

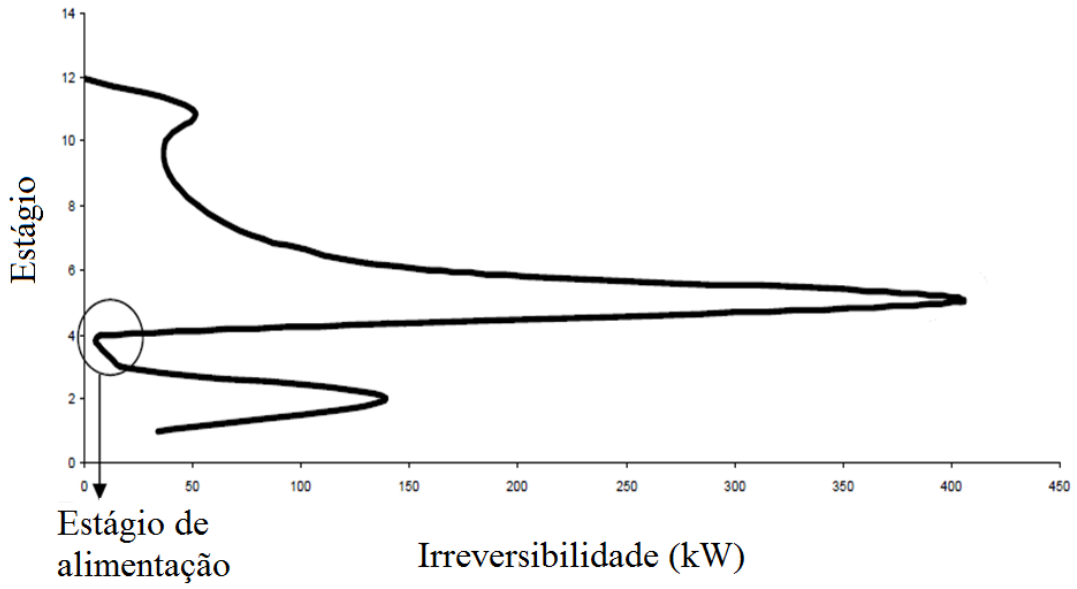
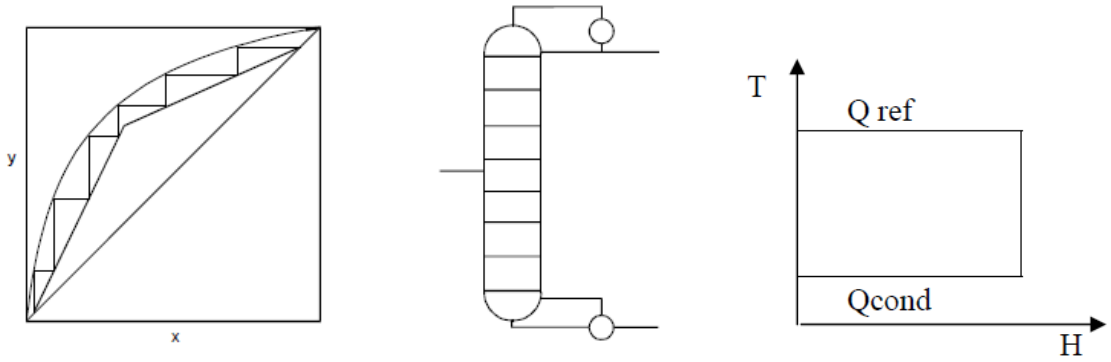
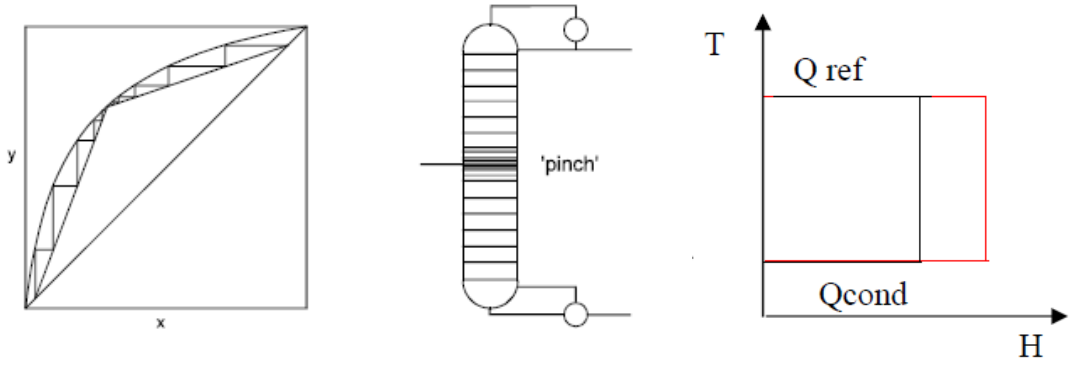


Figura III.39 – Exemplo de perfil de irreversibilidade em uma coluna. Notar o efeito de irreversibilidade no estágio (4) de alimentação. Adaptado de Santana (2004).

COLUNA NORMAL (a)



COLUNA COM REFLUXO MÍNIMO (b)



COLUNA NA CONDIÇÃO PRATICAMENTE TERMODINÂMICA (c)

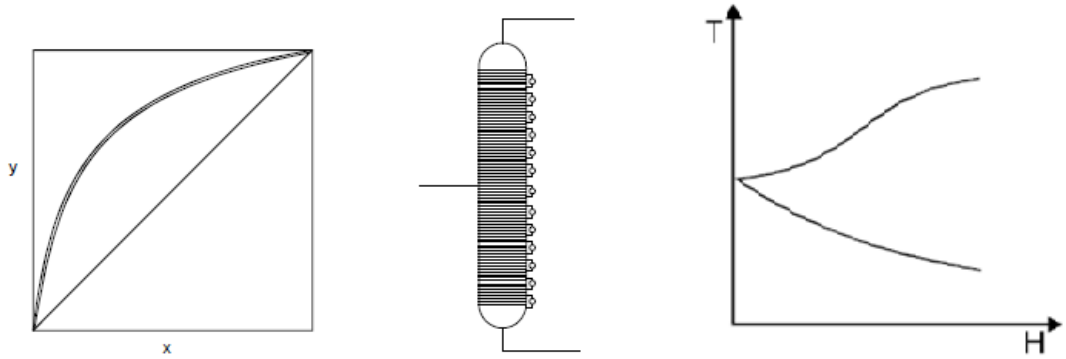


Figura III.40 – Obtenção do perfil da curva entalpia-temperatura para colunas de destilação (binário) nas condições praticamente termodinâmicas (MTC). De (a) para (b) modificação quantitativa nas utilidades. De (b) para (c) modificações qualitativas (condições) nas utilidades e no arranjo do sistema. Adaptado de Santana (2004).

O procedimento detalhado proposto por Santana (2004), foi usado para comparação com o procedimento mais geral, implementado neste trabalho, baseado em Wei, et al., (2012).

Para a operação unitária coluna de destilação foram programadas seguintes variáveis descritas na Tabela III.22:

Tabela III.22 – Variáveis do usuário programadas para a operação unitária coluna de destilação.

Nome	Variável	Significado	Valor	Unid.
Irreversibility	ColIrrev	Irreversibilidade	*	kW
Rational Efficiency	Effic	Eficiência racional	*	-
Distillation Column Cost Estimation	ISBLCOL	Estimativa de custo de investimento da coluna de destilação através do índice MS.	*	US$

Uma vez que, a configuração da coluna de destilação é passível de diversas modificações, ocasionadas devido a alterações nos parâmetros de projeto, como razão de refluxo, ou até mesmo a inserção de trocadores laterais, a programação das variáveis para coluna de destilação foi realizada por *spreadsheet*, que são planilhas disponibilizadas pelo simulador para cálculos. As variáveis podem ser importadas e exportadas usando este tipo de ferramenta.

Os códigos referentes às variáveis mencionadas na Tabela III.22 encontram-se no ANEXO A.26 -IRREVERSIBILIDADE EM COLUNAS DE DESTILAÇÃO , ANEXO A.27 - EFICIÊNCIA RACIONAL EM COLUNAS DE DESTILAÇÃO e ANEXO A.28 - ESTIMATIVA DE CUSTO DE INVESTIMENTO EM COLUNAS DE DESTILAÇÃO.

III.2.1.5.1 PROCEDIMENTO PARA CÁLCULO DA IRREVERSIBILIDADE ATACÁVEL E DO CUSTO DE INVESTIMENTO INEVITÁVEL EM COLUNAS DE DESTILAÇÃO

Para uma coluna de destilação simples com as especificações de separação, de destilado e de fundo, a irreversibilidade é principalmente atribuída à mistura de correntes com composições em desequilíbrio, a diferença de temperatura e pressão ao longo dos estágios. De acordo com os princípios de operações unitárias, reduzir a razão de refluxo e aumentar o número de estágios, podem reduzir substancialmente a irreversibilidade do processo. Na Figura III.41 é possível observar a relação entre a razão de refluxo e o número de estágios de uma coluna de destilação.

O efeito da razão de refluxo no custo de uma coluna de destilação é demonstrado na Figura III.42. Nesta figura, a razão de refluxo mínima (R_{min}) corresponde ao mínimo dispêndio energético. Todavia, a razão de refluxo máxima (R_{max}) corresponde ao máximo dispêndio energético.

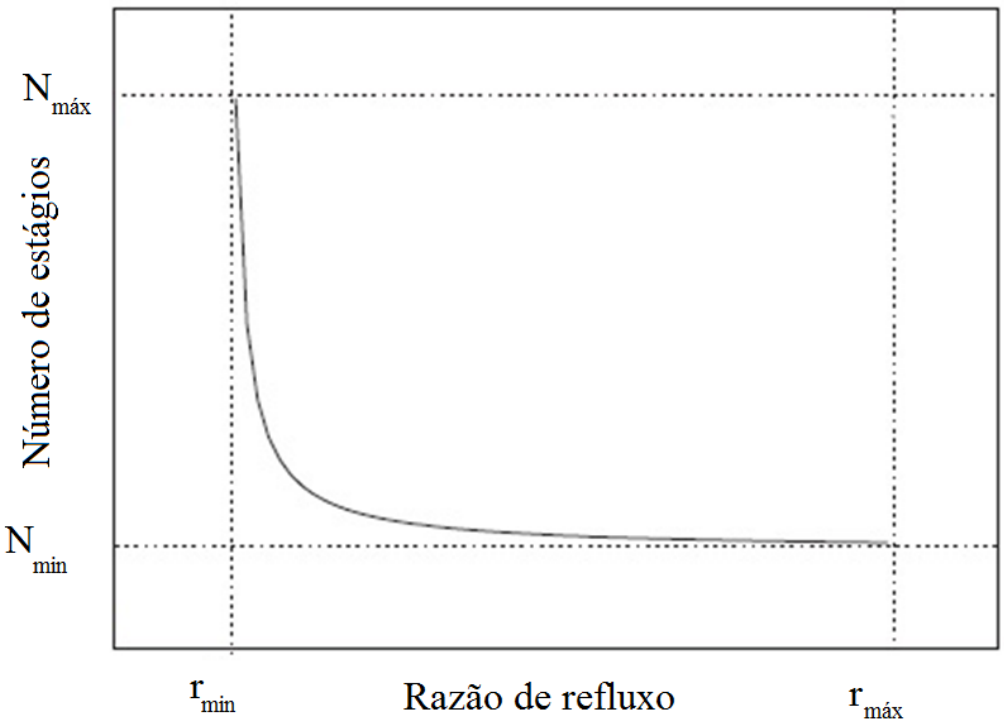


Figura III.41 – Relação entre o número de estágios e a razão de refluxo em uma coluna de destilação. Adaptado de Wei, et al., (2012).

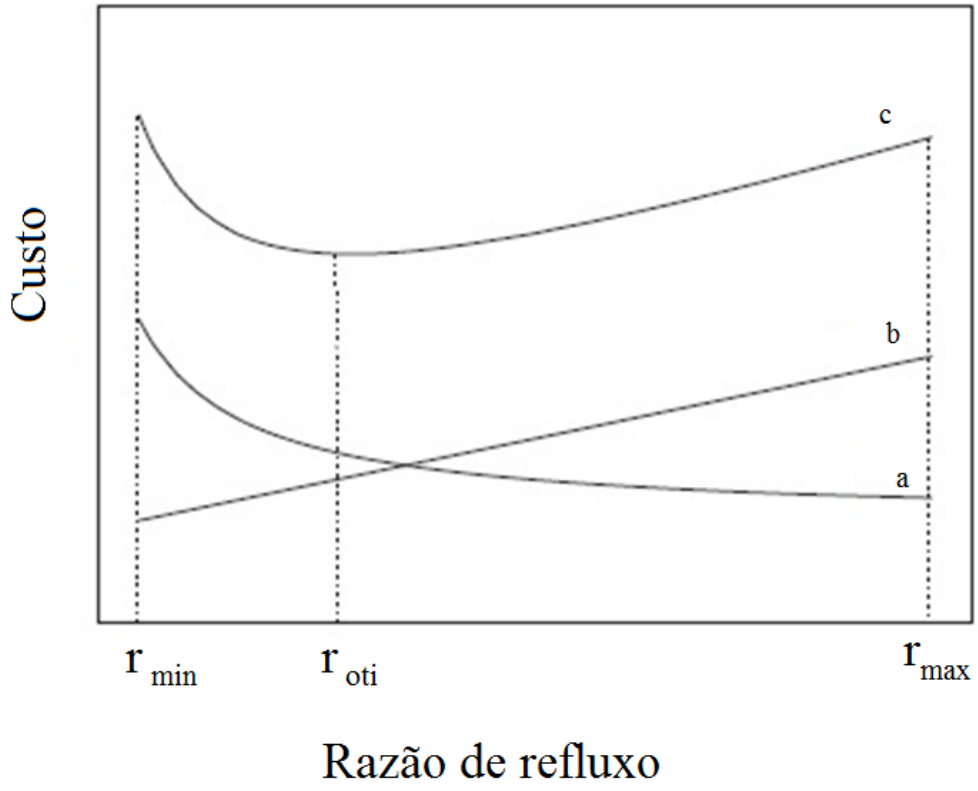


Figura III.42 – Relação entre a razão de refluxo e o custo de investimento (a), custo energético (b) e custo total (c) em uma coluna de destilação. Adaptado de Wei, et al., (2012).

Wei, et al., (2012) revisaram alguns estudos e sugerem a avaliação da irreversibilidade inevitável e evitável em colunas de destilação, através da análise de duas situações extremas, em termos exergéticos. Desse modo, a razão de refluxo mínima pode ser calculada, dada uma especificação de produtos, através do método de *shortcut*. De maneira que, a irreversibilidade inevitável pode então ser calculada. Por outro lado, quando a coluna opera com a máxima razão de refluxo, obtêm-se o custo de investimento inevitável.

Para efetuar o cálculo da irreversibilidade inevitável, a razão de refluxo mínima e o número mínimo de pratos devem ser determinados, usando o método de Underwood.

Encontra-se a raiz teta (θ) por:

$$\sum_{i}^{n} \frac{\alpha_i \cdot x_{F,i}}{\alpha_i - \theta} = 1 - q \qquad \text{(III.78)}$$

E a razão de refluxo mínima (r_{min}) por:

$$r_{min} = \sum_{i}^{n} \frac{\alpha_i \cdot x_{D_T,i}}{\alpha_i - \theta} - 1 \qquad \text{(III.79)}$$

Sendo: α_i a volatilidade do componente i, q a variável referente ao parâmetro térmico da alimentação e $x_{DT,i}$ a concentração molar no destilado do componente i.

Já o número mínimo de estágios pode ser estimado através da equação de Fenske:

$$N_{min} = \frac{\log\left(\frac{x_{D_T,LK}}{x_{D_T,HK}} \cdot \frac{x_{B,HK}}{x_{B,LK}}\right)}{\log(\alpha_{LK\text{-}HK})} - 1 \qquad \text{(III.80)}$$

Sendo que o subscrito LK e HK, são utilizados para referenciar as espécies químicas chave-leve e chave-pesada, respectivamente.

O procedimento utilizado por Wei, et al., (2012) não considera a utilização de trocadores de calor laterais na busca por colunas mais reversíveis. Além disso, despreza as perdas de calor para o ambiente e os efeitos de não idealidade do fluido.

O algoritmo do procedimento para colunas de destilação encontra-se na Figura III.43:

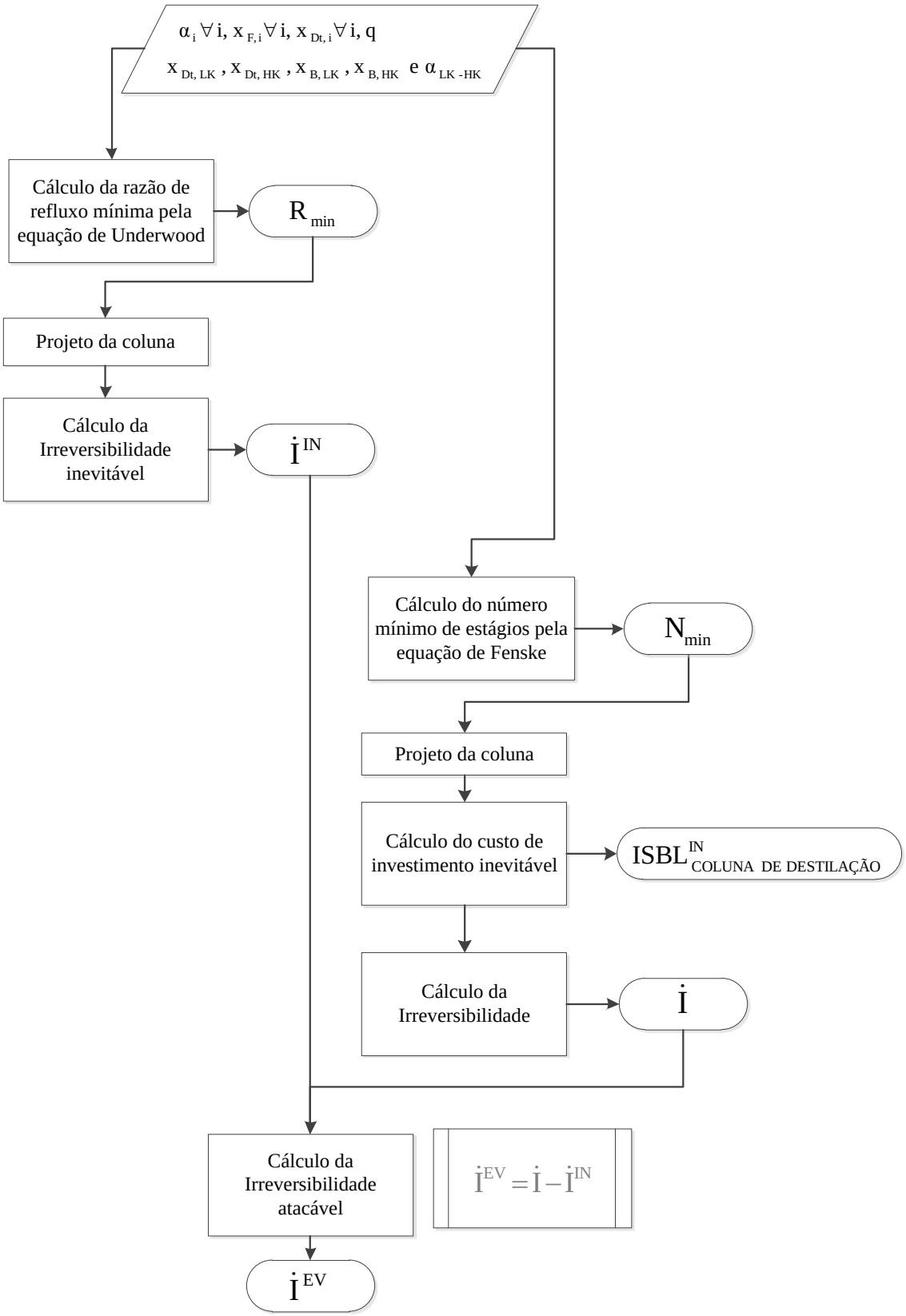


Figura III.43 – Algoritmo para colunas de destilação.

III.2.2 - PROCESSOS QUÍMICOS

Diferentemente dos processos físicos, onde não há fenômeno químico envolvido, os processos químicos envolvem, além do transporte de quantidade de movimento, calor e massa, as reações químicas. Assim como nos processos físicos, em que o aumento da irreversibilidade está relacionado ao aumento das forças motrizes de transporte de momento, massa e calor; para os processos químicos o aumento da destruição da exergia está relacionado à afinidade química.

Desse modo, o equilíbrio químico é a situação onde se anula completamente a irreversibilidade do processo e a afinidade química é zero. De maneira que, a reversibilidade da reação química é tal que não há mais produção de entropia devido à reação.

Define-se a afinidade química de um processo, a partir da condição de equilíbrio de Gibbs (Prigogine, 1965) como sendo:

$$Af_{\rho} = -\sum \upsilon_{\gamma,\rho}\mu_{\gamma} \qquad \text{(III.81)}$$

Sendo:

Af_{ρ} - Afinidade química da reação ρ;

$\upsilon_{\gamma,\rho}$ - Coeficiente estequiométrico do componente γ na reação ρ; e

μ_{γ} - Potencial químico do componente γ.

No equilíbrio químico, tem-se:

$$Af_{\rho} = 0 \; \forall \; \rho \qquad \text{(III.82)}$$

É possível escrever a afinidade química através da derivada parcial da energia de Gibbs total do sistema (G^t, extensivo), em relação a coordenada de reação (ξ_{ρ}) a T e P constantes.

$$Af_\rho = -\left[\frac{\partial(G^t)}{\partial\xi_\rho}\right]_{T,P} \qquad \text{(III.83)}$$

Portanto, a irreversibilidade dos processos químicos está relacionada à taxa de variação da energia de Gibbs do sistema, conforme o avanço da reação. De modo que, quanto maior o módulo da derivada da energia de Gibbs total, em relação ao avanço da reação, maior será a afinidade química e, portanto, a irreversibilidade do processo.

O trabalho máximo relacionado ao processo químico é dado pela variação da energia de Gibbs em um processo reversível.

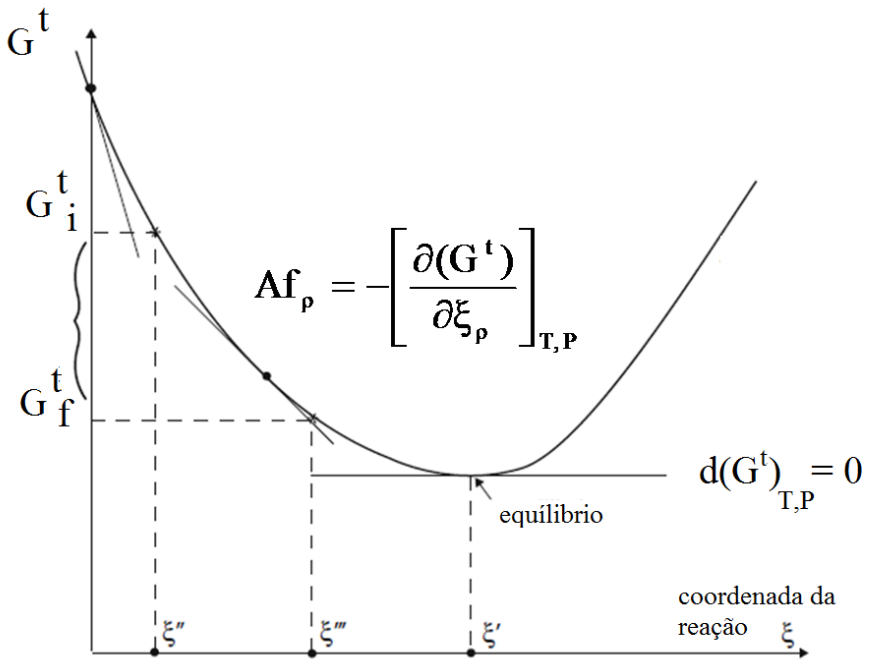


Figura III.44 – Energia livre do sistema conforme a coordenada de reação e cálculo da afinidade química da reação.

É válida a analogia entre a reversibilidade dos processos químicos e físicos. De maneira que, na condição praticamente termodinâmica, ou seja, bem próximo ao equilíbrio (químico, para processos químicos), a irreversibilidade tende a zero. Sabe-se que nesta condição, onde, por exemplo, a diferença de temperatura é muito pequena, e quase não há transporte de calor; da mesma forma, próximo ao equilíbrio químico, quase não há geração dos produtos, já que, as taxas das reações direta e reversas estão muito próximas.

III.2.2.1 - *REAÇÕES DE COMBUSTÃO*

Um sistema de combustão, de forma geral, se caracteriza por uma série de processos dinâmicos acoplados, como convecção e difusão mássica, de momento e de energia com reação química exotérmica. Uma discussão mais detalhada sobre processos de combustão é feita por Lora, et al., (2004).

O trabalho de Som, et al., (2008) estuda o processo de combustão sob o ponto de vista da análise exergética. Segundo Som, et al., (2008) a eficiência exergética de combustores pode ser definida como sendo:

$$\eta = \frac{\dot{B}_{\text{GÁS DE COMBUSTÃO}}}{\dot{B}_{\text{COMBUSTÍVEL}} + \dot{B}_{\text{COMBURENTE}} - \dot{Q}\left(1 - \frac{T_0}{T}\right)} \tag{III.84}$$

Sendo:

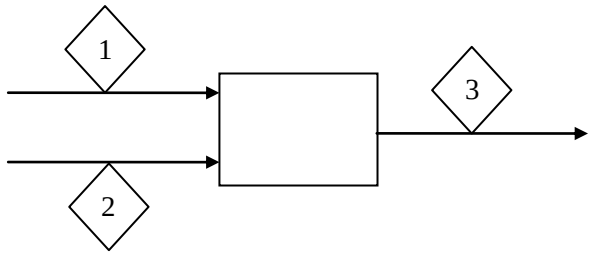
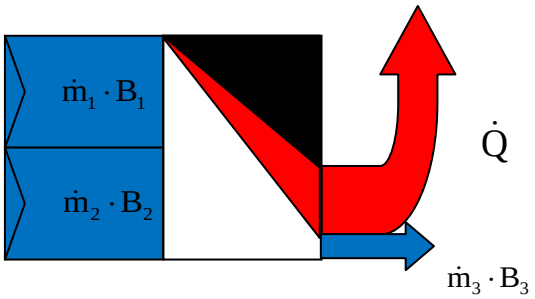
$\dot{Q}$ - Taxa de transferência de calor do sistema de combustão em W; e

T - Temperatura da superfície de contorno do combustor em K.

A formulação da eficiência exergética para combustores proposta por Som, et al., (2008) desconta no termo referente a entrada de exergia, a exergia do calor perdido para o ambiente, como sendo inerente ao processo. De acordo com Ghannadzadeh, et al., (2012), a perda energética não deve ser contabilizada na eficiência exergética. Apenas a exergia referente aos rejeitos materiais deve ser subtraído no numerador, quando for o caso. Desse modo, a perda energética deve ser contabilizada no termo do calor na equação da exergia, uma vez que, não há razão para contabilizar o conteúdo de energia útil em um calor dissipado para o ambiente.

Além disso, as paredes de tijolo refratário de um forno são projetadas com o intuito de minimizar o efeito da dissipação de calor, devido a sua baixa condutividade térmica. De maneira que, o sistema de extração de potência deve ser projetado para extrair o máximo da exergia contida nos gases de combustão. A Tabela III.23 apresenta um resumo da análise de disponibilidade para processos de combustão.

Tabela III.23 – Análise exergética de reações de combustão.

Combustores	
 (a)  (b) **Figura III.45– (a) e (b)** Processo unitário de combustão representada em Fluxograma de Processo (a) e em Diagrama de Grassmann (b).	
Balanço de energia	$\dot{m}_3 \cdot H_3 - \dot{m}_2 \cdot H_2 - \dot{m}_1 \cdot H_1 = -\lvert\dot{Q}\rvert$ (III.85)
Parâmetros de projeto	Carga térmica
Critérios	Excesso de combustível, temperatura dos gases de combustão
Equação da exergia	$\dot{m}_3 \cdot B_3 - \dot{m}_2 \cdot B_2 - \dot{m}_1 \cdot B_1 = -\dot{m}_3 \cdot T_0 \cdot S_3 + \dot{m}_2 \cdot T_0 \cdot S_2 + \dot{m}_1 \cdot T_0 \cdot S_1 - \lvert\dot{Q}\rvert$ (III.86)
Fonte de irreversibilidade	Reação química Transferência de calor interna Mistura Difusão do oxigênio e combustível Alta capacidade calorífica dos produtos de combustão
Formas de melhoria	Aumento da temperatura de chama –

	Enriquecimento de oxigênio no ar Reduzir troca térmica interna devido à mistura – Minimizar gradiente de temperatura no combustor; e Pré-aquecimento e controle da velocidade do ar
Função objetivo	$\eta = \dfrac{\dot{B}_3}{\dot{B}_1 + \dot{B}_2 - \dot{Q}\left(1 - \dfrac{T_0}{T}\right)}$ (III.87)

Desse modo, tem-se que a irreversibilidade de um combustor é dada por:

$$\dot{I} = \dot{B}_{\text{COMBUSTÍVEL}} + B_{\text{COMBURENTE}} - \dot{B}_{\text{GÁS DE COMBUSTÃO}} \qquad \text{(III.88)}$$

Para processo unitário de combustão foram programadas as seguintes variáveis descritas na Tabela III.24:

Tabela III.24 – Variáveis do usuário programadas para o processo unitário de combustão.

Nome	Variável	Significado	Valor	Unid.
Irreversibility	Irrev	Irreversibilidade	*	kW
Exergetic Efficiency	ExergeticEfficiency	Eficiência exergética	*	-

Os códigos referentes às variáveis mencionadas na Tabela III.24 encontram-se no ANEXO A.29 - IRREVERSIBILIDADE EM COMBUSTORES e ANEXO A.30 - EFICIÊNCIA EXERGÉTICA EM COMBUSTORES .

CAPÍTULO IV

RESULTADOS E DISCUSSÕES

IV -RESULTADOS E DISCUSSÕES

IV.1 -VALIDAÇÃO DAS ROTINAS DE CÁLCULO DA EXERGIA

Os dois exemplos numéricos apresentados por Abdollahi-Demneh, et al., (2011) foram simulados, utilizando o mesmo modelo termodinâmico adotado pelo autor (SRK – Soave-Redlich-Kwong), e os resultados foram validados por comparação.

A primeira corrente denominada de Corrente 1, formada por produtos de combustão, apresenta a seguinte composição em fração molar, apresentada na Tabela IV.1:

Tabela IV.1 – Composição da Corrente Exemplo 1.

Componente	Fração molar
H_2O	0,22
N_2	0,75
CO_2	0,02
NO	0,005
CO	0,005

Os dados de temperatura, pressão e vazão da Corrente 1 encontram-se na Tabela IV.2 :

Tabela IV.2 – Temperatura, pressão e vazão da Corrente Exemplo 1.

Grandeza	Valor	Unidade
Temperatura	423,15	K
Pressão	101,325	kPa
Vazão molar	3600	kgmol/h

Os resultados obtidos por Abdollahi-Demneh, et al., (2011) e pelo presente trabalho encontram-se na Tabela IV.3::

Tabela IV.3 – Comparação entre os resultados obtidos para Exergia da Corrente Exemplo 1.

Origem	Exergia Física (kW)	Exergia Química (kW)	Exergia (kW)
(Abdollahi-Demneh, et al., 2011)	1287,4	2446,3	3733,7
Presente trabalho	1289,9	2425,6	3715,5

Já a corrente do segundo exemplo, consiste de um gás natural cuja composição é descrita na Tabela IV.4:

Tabela IV.4 – Composição da Corrente Exemplo 2.

Componente	Fração molar
N_2	0,001
H_2S	0,01544
CO_2	0,02835
CH_4	0,8982
C_2H_6	0,03098
C_3H_8	0,01479
i-C_4H_{10}	0,0059
n-C_4H_{10}	0,003
i-C_5H_{10}	0,001
n-C_5H_{10}	0,0005
H_2O	0,00086

Os dados de temperatura, pressão e vazão da Corrente 2 encontram-se na Tabela IV.5:

Tabela IV.5 – Temperatura, pressão e vazão da Corrente exemplo 2.

Grandeza	Valor	Unidade
Temperatura	303,15	K
Pressão	6200	kPa
Vazão molar	500	kgmol/h

Os resultados obtidos por Abdollahi-Demneh, et al., (2011) e pelo presente trabalho encontram-se na Tabela IV.6:

Tabela IV.6 – Comparação entre os resultados obtidos para Exergia da Corrente Exemplo 2.

Origem	Exergia Física (kW)	Exergia Química (kW)	Exergia (kW)
(Abdollahi-Demneh, et al., 2011)	1376,5	118437,1	119813,6
Presente trabalho	1372,5	118558,7	119931,2

Os resultados obtidos para exergia química e física de correntes de gás natural e de gás de combustão estão de acordo com os publicados por Abdollahi-Demneh, et al., (2011) . É válido ressaltar a diferença no que diz respeito à ordem de grandeza da exergia química da corrente de gás natural, quando comparada a corrente de gás de combustão. A corrente de gás natural

contém espécies que não são de referência do estado morto em grandes concentrações, o que lhe confere alta exergia química. Por outro lado, a corrente de gás de combustão é rica em espécies químicas ditas esgotadas, o que lhe confere baixa exergia química.

Um terceira validação foi conduzida, para a exergia química de algumas substâncias, nas condições de 298,15 K e 1 bar. Estes dados encontram-se apresentados em diversos trabalhos científicos recentes. (Lora, et al., 2004), (Gharagheizi, et al., 2007) e (Zanchini, et al., 2009). Uma vez que, a referência de ambiente utilizada para a elaboração da tabela, é a mesma utilizada no presente trabalho (Szargut, et al., 1988), a comparação procede como uma forma de validação. Os resultados encontram-se na Tabela IV.7:

Tabela IV.7 – Exergia Química Molar de alguns componentes a 298 K e 1 bar. Ambiente de referência: (Szargut, et al., 1988); Modelo termodinâmico utilizado no Aspen HYSYS®: SRK – Soave-Redlich-Kwong.

Componente	**Exergia Química (kJ/kmol)**				
	(Kotas, 1985)	(Gharagheizi, et al., 2007)	(Zanchini, et al., 2009)	(Lora, et al., 2004)	Presente trabalho
H_2	238490	-	235358	235428	235317
CH_4	836510	837479	830494	830891	830619
C_2H_6	1504360	1493749	1494690	1495052	1493320
C_3H_8	2163190	2159909	2147850	2150830	2148343
CO_2	20140	-	-	20189	19802
CO	275430	-	274886	275621	274227
N_2	720	-	-	666	669
O_2	3970	-	-	3948	4020

Verifica-se que os dados obtidos para exergia química estão de acordo com os obtidos nos demais trabalhos da literatura. (Kotas, 1985) (Lora, et al., 2004), (Gharagheizi, et al., 2007) e (Zanchini, et al., 2009). Ambas as verificações configuram uma validação para as rotinas programadas no Aspen HYSYS®.

IV.2 - ESTUDOS DE CASOS DE PROJETO DE PROCESSOS E OPERAÇÕES UNITÁRIAS

IV.2.1 - TUBULAÇÃO PARA ESCOAMENTO DE GÁS

Projeto de uma tubulação para escoar o fluido do Exemplo 2 de Abdollahi-Demneh, et al., (2011). O material da tubulação é aço carbono, cuja rugosidade é de 0,0018 in. A tubulação é de SCH 40, possui 100 m de comprimento, horizontal, sem acessórios e acidentes. A perda de carga foi calculada pela equação de Darcy-Weisbach, supondo escoamento isotérmico, e validada pelos resultados obtidos na simulação no HYSYS®.

Tabela IV.8 – Resultados obtidos para o projeto da tubulação.

Diâmetro nominal (in)	Velocidade (m/s)	Perda de carga (kgf/cm²)	Irreversibilidade (kW)	Eficiência exergética (%)
2	23,0	5,3	26,6	98,0
2,5	16,2	2,0	9,9	99,3
3	10,5	0,7	3,1	99,8

O projeto baseado unicamente no critério de velocidade recomendada, sugere que o diâmetro nominal de 2 in seja adotado. Entretanto, é possível reduzir em aproximadamente 62% da irreversibilidade obtida, utilizando o diâmetro imediatamente superior.

Se dimensionada de maneira apropriada, a tubulação possuirá elevada eficiência exergética, uma vez que, a irreversibilidade do processo está relacionada a perda de carga, que por sua vez, é um parâmetro de projeto. Todavia, é interessante que se apresente o valor da irreversibilidade na memória de cálculo do projeto, para que se obtenha informação, sobre sua ordem de grandeza, para que se possa inferir e discutir a respeito de custo de aquisição diâmetros maiores.

Os resultados obtidos encontram-se no ANEXO A-32 – RESULTADO PARA O PROJETO DA TUBULAÇÃO.

IV.2.2 - COLUNA DE DESTILAÇÃO DESPROPANIZADORA

Uma coluna de destilação despropanizadora proposta por Wei, et al., (2012), foi simulada no HYSYS® utilizando o modelo termodinâmico SRK. Os dados referentes às correntes de alimentação, de fundo e de topo da coluna encontram-se na Figura IV.1.

Primeiramente, foi simulada uma coluna de *shortcut* com o intuito de calcular a razão de refluxo mínima, o número mínimo de estágios, o número de estágios teóricos e o prato de alimentação ótimo. Para tanto, os seguintes dados de entrada foram especificados: propano como componente chave-leve no fundo, com fração molar igual 10^{-6}; e 1-buteno como chave pesada no destilado, com fração molar igual a 10^{-6} e razão de refluxo igual a 3. A pressão ao longo da coluna foi considerada constante e igual a 1,95 MPa.

Posteriormente, uma coluna de destilação completa foi especificada com base nos resultados obtidos através da coluna de *shortcut*. O fluxograma do processo e o balanço de massa encontram-se na Figura IV.1.

As utilidades do condensador e do refervedor foram água de resfriamento e vapor de média pressão, respectivamente. Sendo o suprimento de água de resfriamento a 7 kgf/cm² g e 298 K e o seu retorno a 308 K. Já o vapor de média pressão é suprido a 16,5 kgf/cm² g e 250 ^{0}C. E o retorno de condensado saturado a 205 ^{0}C.

Diferentes cenários de projeto foram conduzidos na simulação e avaliados quanto ao projeto da coluna. A variável de decisão utilizada foi a razão de refluxo. A eficiência racional foi utilizada como função objetivo. A irreversibilidade atacável e o custo de investimento do equipamento foram utilizados como critério de decisão na avaliação dos cenários.

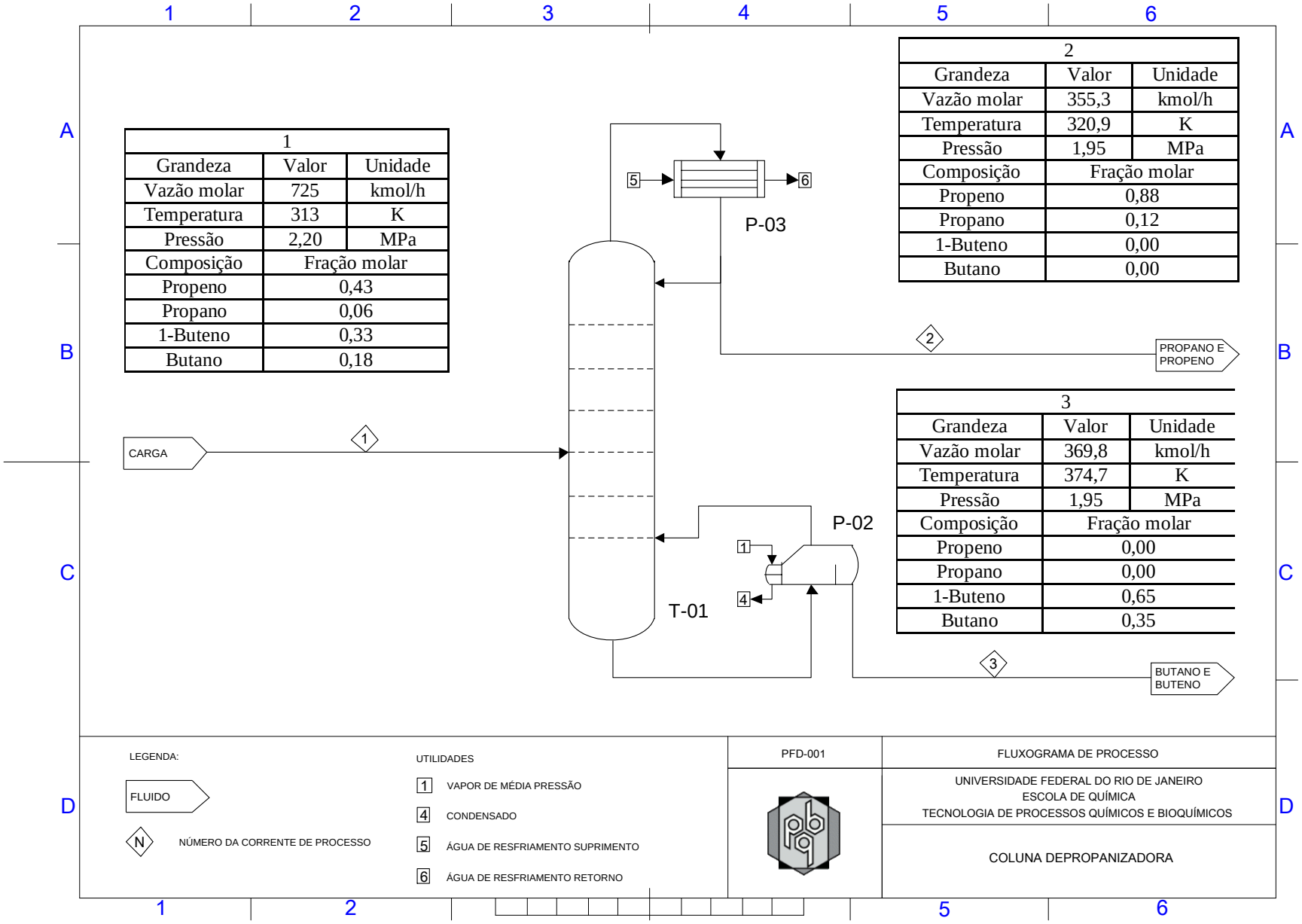
Para a estimativa do custo de investimento na coluna de destilação, um projeto simplificado foi conduzido, baseado em heurísticas disponíveis na literatura (Branan, 2005).

O espaçamento entre os pratos foi adotado como sendo 24 in. O limite máximo de altura para torre foi considerado como 60 metros, por questões de vento e fundação. Buscou-se uma razão entre altura e diâmetro da torre menor que 30. Foram acrescidos 4 ft no topo para retirada do vapor e 6 ft no fundo para nível de líquido e retorno do vapor do refervedor. A eficiência dos pratos foi adotada como sendo 90%. A estimativa da área mínima para troca de calor no refervedor e no condensador foi feita através de um coeficiente global típico para cada trocador, sendo 475 e 300 W/(m² K) para o condensador e o refervedor, respectivamente.

A memória de cálculo foi armazenada em MS Excel, onde a função de estimativa de custo em coluna de destilação fora programada, conforme ANEXO A.28 -ESTIMATIVA DE CUSTO DE INVESTIMENTO EM COLUNAS DE DESTILAÇÃO. Os resultados obtidos encontram-se na Tabela IV.10.

Tabela IV.9 – Resumo do estudo de caso para coluna despropanizadora.

Caso	Coluna despropanizadora
Metodologias aplicadas	Cálculo da exergia em correntes de processo e de energia
	Cálculo da irreversibilidade
	Cálculo da eficiência racional
	Diagramas de exergia
	Cálculo de custos exergéticos
Função objetivo	Eficiência racional
Variável de decisão	Razão de refluxo
Critérios de decisão	Custo de investimento
	Percentual evitado da irreversibilidade atacável
Cenários	C1 – Razão de refluxo mínima
	C2 – Razão de refluxo igual a 2,5
	C3 – Razão de refluxo igual a 3
	C4 – Razão de refluxo igual a 4
	C5 – Número mínimo de estágios



1		
Grandeza	Valor	Unidade
Vazão molar	725	kmol/h
Temperatura	313	K
Pressão	2,20	MPa
Composição	Fração molar	
Propeno	0,43	
Propano	0,06	
1-Buteno	0,33	
Butano	0,18	

2		
Grandeza	Valor	Unidade
Vazão molar	355,3	kmol/h
Temperatura	320,9	K
Pressão	1,95	MPa
Composição	Fração molar	
Propeno	0,88	
Propano	0,12	
1-Buteno	0,00	
Butano	0,00	

3		
Grandeza	Valor	Unidade
Vazão molar	369,8	kmol/h
Temperatura	374,7	K
Pressão	1,95	MPa
Composição	Fração molar	
Propeno	0,00	
Propano	0,00	
1-Buteno	0,65	
Butano	0,35	

Figura IV.1 – Fluxograma de processo – coluna despropanizadora (C2: R = 2,5; N = 86 ; N_F = 51).

Tabela IV.10 – Resultados obtidos para a coluna despropanizadora.

Parâmetro	Cenário				
	C1	**C2**	**C3**	**C4**	**C5**
Razão de refluxo (R)	2,1	2,5	3	4	8
Número de estágios (N)	93	86	72	59	40
Estágio de alimentação	54	51	42	35	22
Irreversibilidade (kW)	1322	1418	1677	2489	5891,19
Eficiência racional (%)	29,75	28,32	25,53	19,73	11,46
Irreversibilidade atacável (kW)	0	96	355	1167	4569,19
Percentual atacado da irreversibilidade evitável (%)	100	98	92	74	0
Diâmetro (m)	2	2	2	1,5	1,5
Altura entre estágios (m)	0,6096	0,6096	0,6096	0,6096	0,6096
Altura (m)	59,69	55,43	46,89	38,97	27,38
Razão altura/diâmetro (L/D)	29,85	27,71	23,45	25,98	18,26
Taxa de transferência de calor condensador (kW)	3905,41	3788,49	4712,93	7001,24	16393,16
Área de troca térmica do condensador (m²)	469,82	455,76	566,97	842,25	1972,11
Taxa de transferência de calor refervedor (kW)	5099,47	5227,13	5953,05	8195,28	17587,75
Área de troca térmica do refervedor (m²)	135,77	139,17	158,49	218,19	468,26
Custo de investimento (US$)	$1.586.492,86	$1.528.158,70	$1.509.125,73	$1.443.162,21	$2.013.103,79

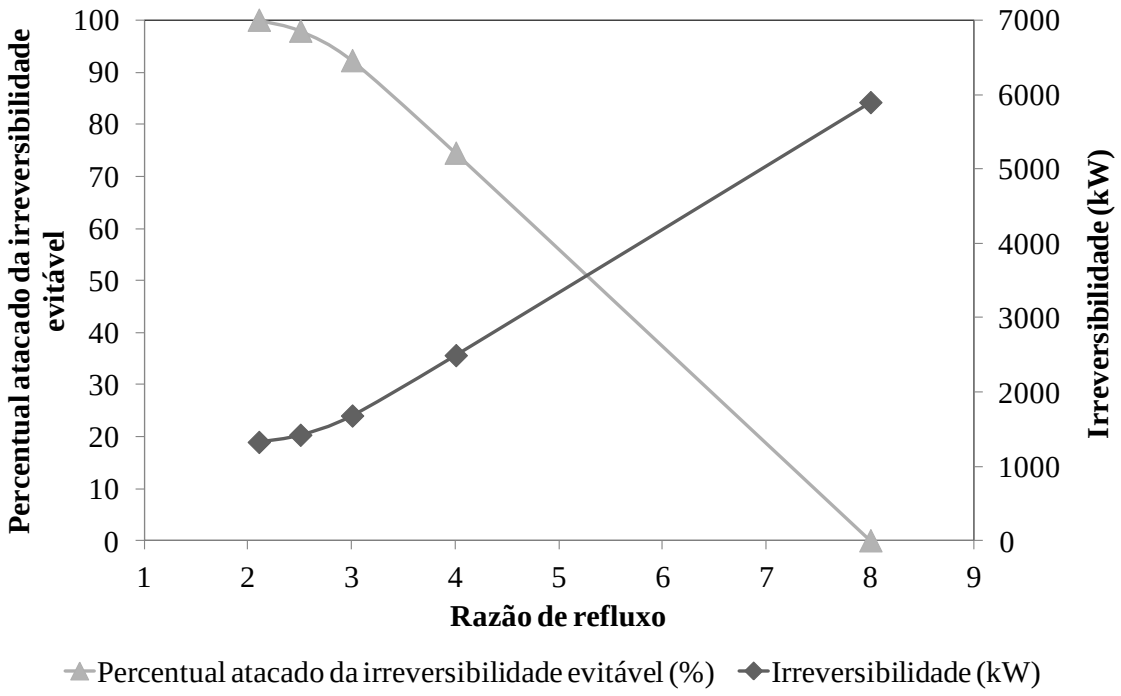


Figura IV.2 – Percentual atacado da irreversibilidade evitável e irreversibilidade para os diferentes cenários de razão de refluxo do estudo de caso da coluna despropanizadora.

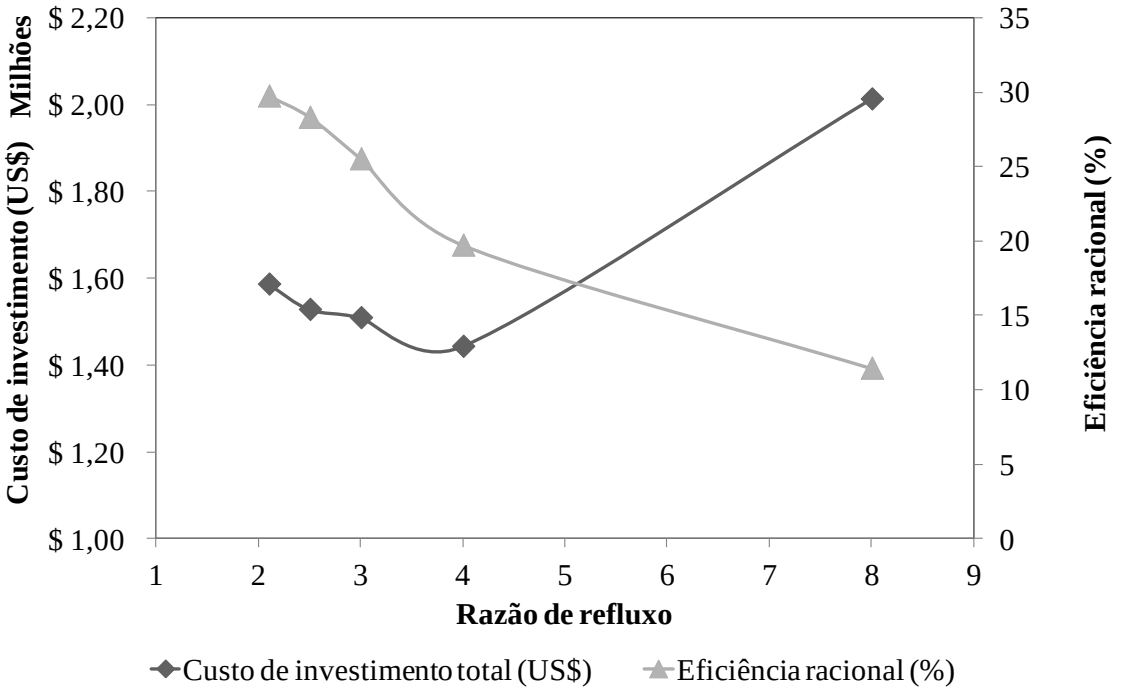


Figura IV.3 – Custo de investimento e eficiência racional para os diferentes cenários de razão de refluxo do estudo de caso da coluna despropanizadora.

Os resultados obtidos confirmam as premissas apontadas por Wei, et al., (2012). De maneira que, é possível observar o aumento da irreversibilidade da coluna de destilação ao elevar a razão de refluxo e reduzindo o número de estágios necessários à separação. Na curva inversa, de percentual da irreversibilidade atacável que é evitado no cenário em questão, é possível mensurar o percentual da irreversibilidade atacável no cenário.

O custo de investimento total na operação unitária decresce à medida que são subtraídos o número de estágios necessários. Entretanto, há uma inversão no perfil, pois a partir de um ponto próximo ao número mínimo de estágios, inicia-se um excessivo consumo energético de utilidades, que ocasiona a necessidade de uma área de transferência de calor elevada, aumentando o investimento no sistema de destilação. Observa-se, também, um ponto de mínimo consumo de água de resfriamento, próximo à condição de razão refluxo mínima.

Desse modo, uma abordagem para resolver este impasse (*trade-off*), onde a busca pela condição favorável sob o ponto de vista termodinâmico é contrário ao econômico, consiste na atribuição de custo exergéticos nas correntes dos produtos. Uma vez que, este custo representará a ineficiência do processo nos valores de venda dos produtos.

A avaliação exergética demonstra algo que um simples fluxograma de processo não permite mostrar. Em todos os cenários desenvolvidos para o caso da coluna despropanizadora, as especificações de topo e de fundo foram atendidas e o processo cumpre a sua finalidade principal de forma quase que idêntica. Entretanto, um diagrama de exergia demonstrará as ineficiências dos diferentes cenários do processo.

Tabela IV.11 – Exergias das correntes da coluna despropanizadora para os diferentes cenários

Exergia da corrente (kW)	**Cenário**				
	C1	**C2**	**C3**	**C4**	**C5**
Razão de refluxo (R)	2,1	2,5	3	4	8
Número de estágios (N)	93	86	72	59	40
Estágio de alimentação	54	51	42	35	22
Entrada	477062	477062	477062	477062	477062
Topo	199579	199579	199578	199578	199578
Fundo	277982	277982	277983	277983	277983
Calor condensador	61	61	76	113	264
Calor refervedor	1882	1978	2252	3101	6654
Irreversibilidade	1322	1418	1677	2489	5891

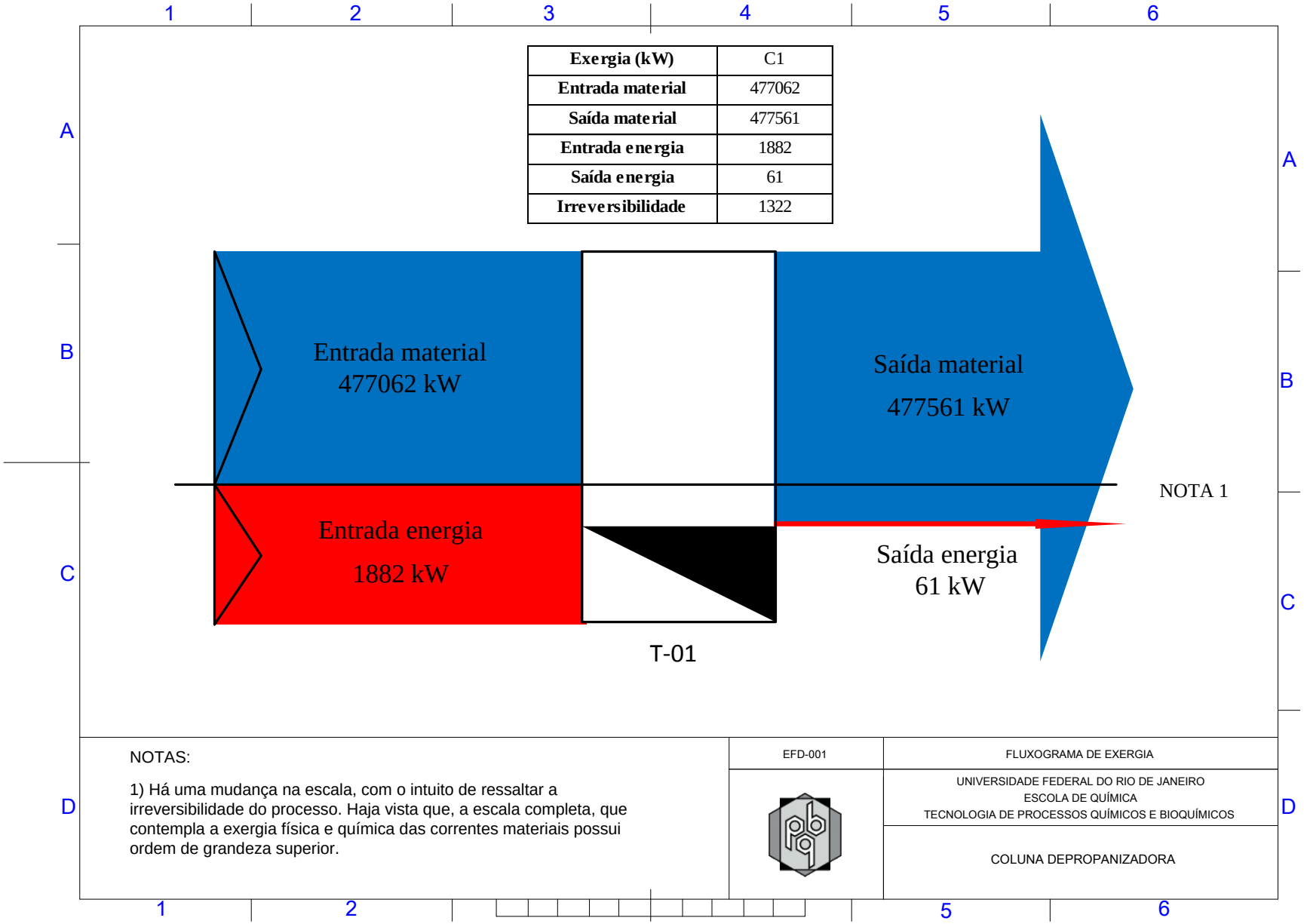


Figura IV.4 – Fluxograma de exergia – coluna despropanizadora (C1: R = 2,1; N = 93 ; N_F = 54).

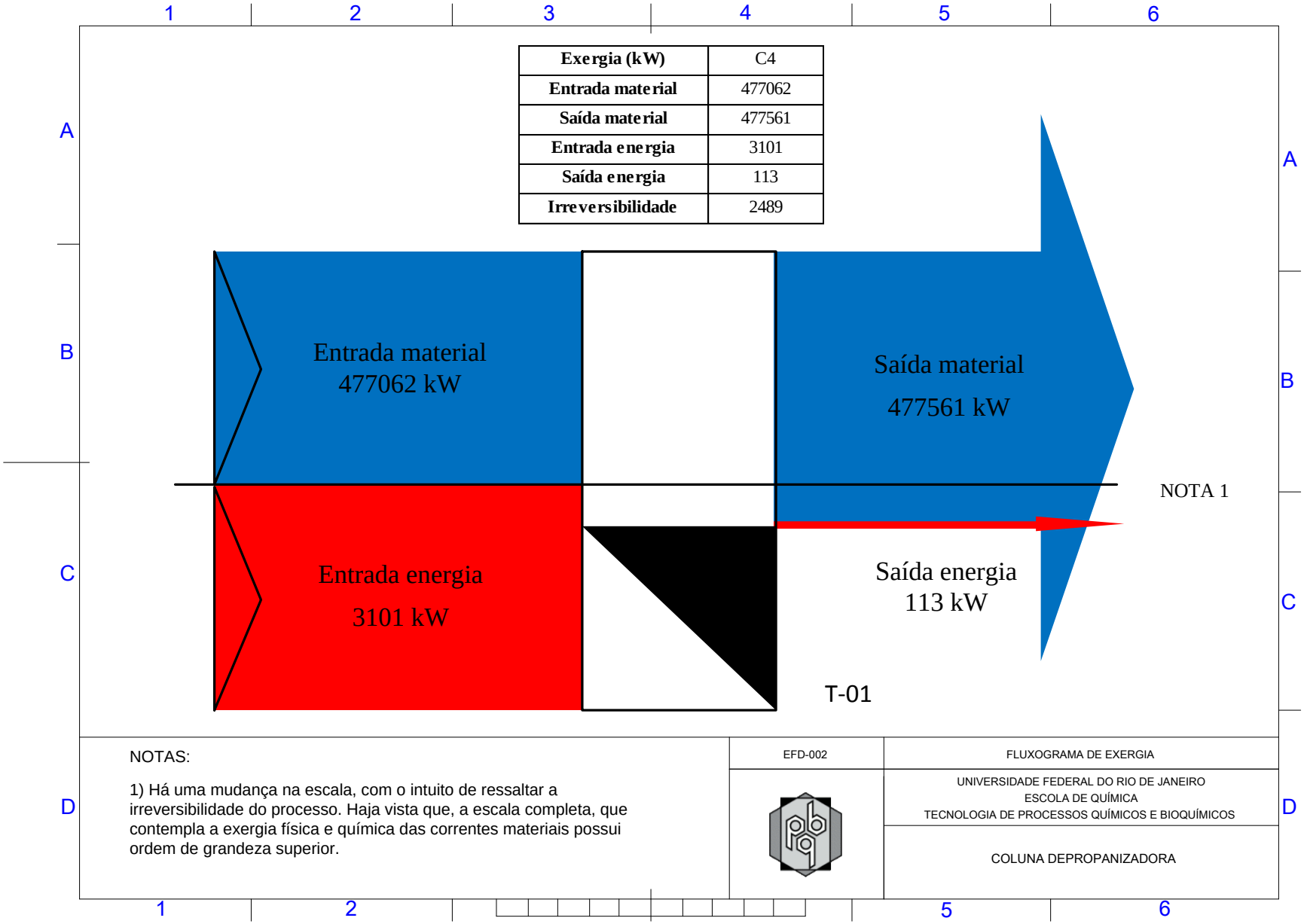


Figura IV.5 – Fluxograma de exergia – coluna despropanizadora (C4: R = 4; N = 59 ; N_F = 35).

A despeito de ser um processo físico, a análise exergética de um processo de destilação necessita da escala completa de exergia, e não somente a exergia física, haja vista que, o valor referente à interação química entre os componentes da mistura é calculado na componente química da exergia.

Através dos fluxogramas de exergia é possível observar que o ganho exergético das correntes de processo (cerca de 500 kW) é o mesmo para todas as situações. Entende-se por ganho exergético a diferença entre as exergia das correntes de saída e entrada do processo, em virtude da separação dos componentes. O ganho exergético, por sua vez, é da ordem de grandeza da irreversibilidade do processo.

Para o Cenário 1 por exemplo, dos 1882 kW de exergia aplicados, 1322 kW são perdidos por irreversibilidades, 61 kW são absorvidos pela água de resfriamento e 499 kW são absorvidos pelas correntes de processo em função da separação dos componentes.

Por outro lado, no Cenário 4, a quantidade de exergia aplicada é maior, em função do menor número de estágios destinados para executar a mesma separação. Desse modo, a irreversibilidade cresce para 2489 kW, enquanto o ganho exergético permanece constante.

Portanto, observa-se que não há aumento de ganho exergético nas correntes de processo com o aumento da razão de refluxo, uma vez que, as mesmas especificações de separação das correntes de processo foram atingidas em todos os cenários. E, de fato, a maior parte da exergia contida na corrente de calor do refervedor é desperdiçada, seja pela irreversibilidade do processo, seja pela exergia absorvida pela água de resfriamento. Sendo que, quanto maior a razão de refluxo, maior o desperdício de energia útil.

É válido ressaltar também que a função objetivo, eficiência racional, consegue lidar com a escala completa de exergia. Uma vez que, o termo invariante é subtraído e a ordem de grandeza da irreversibilidade torna-se compatível a variação de exergia desejada (ganho exergético).

O número de depleção foi calculado para todos os cenários. A curva do índice de sustentabilidade apresentou o mesmo perfil da curva da eficiência exergética. Os resultados encontrados estão de acordo com as premissas estabelecidas por Rosen, et al., (2008). A sustentabilidade do processo está, portanto, relacionada à sua eficiência racional.

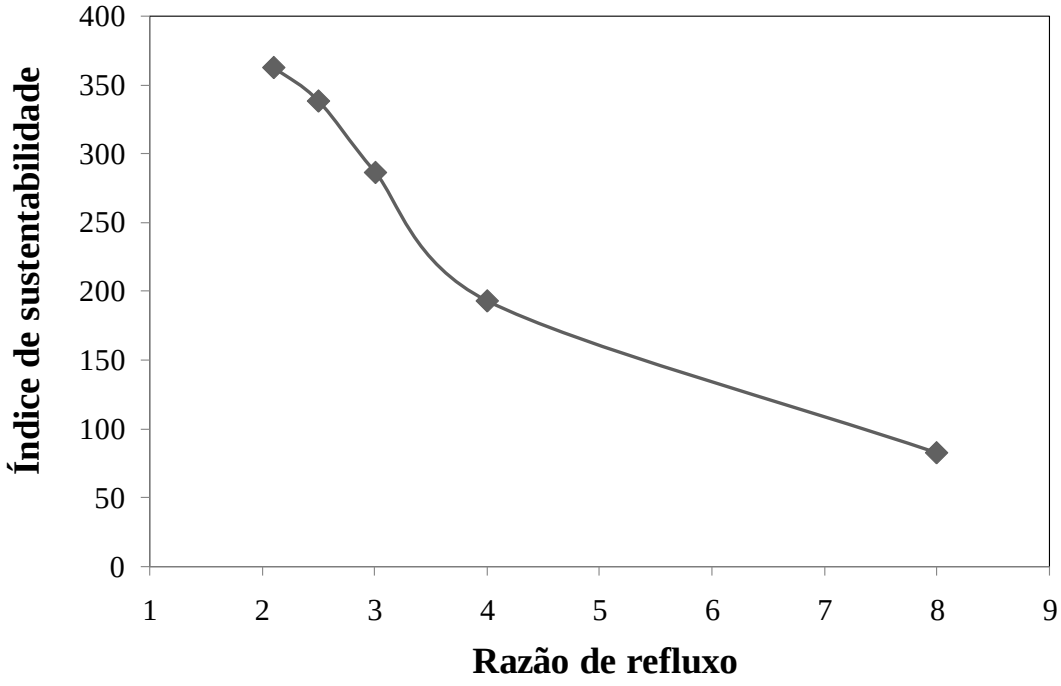


Figura IV.6 –Índice de sustentabilidade da coluna despropanizadora para os diferentes cenários.

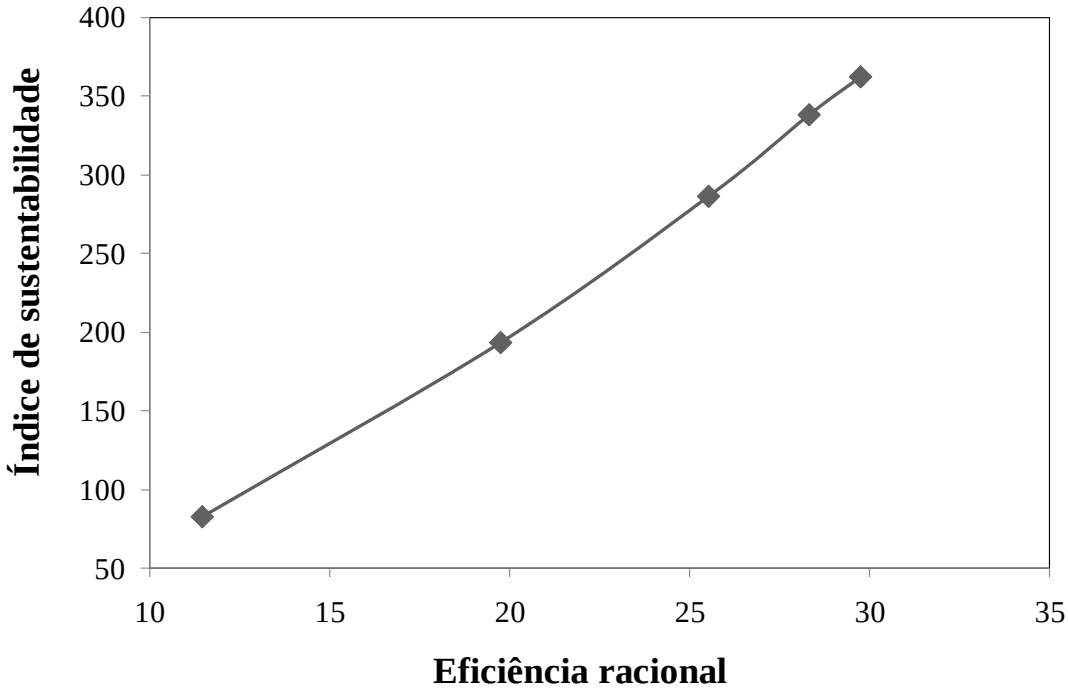


Figura IV.7 – Relação entre o índice de sustentabilidade com a eficiência racional da coluna despropanizadora para os diferentes cenários.

Para atribuição do custo exergético dos produtos da coluna despropanizadora, foram utilizados os conceitos enunciados por Valero e Lozano (1993). Seguindo o entendimento de que o custo exergético de uma corrente ($B^{\$}$) é a quantidade real de exergia que tenha sido necessário para produzi-la, os seguintes custos exergéticos foram atribuídos, de acordo com os critérios mencionados, a saber:

- Para a exergia contida na corrente de calor do condensador foi atribuído custo exergético nulo, uma vez que, a água de resfriamento quente não possui utilidade posterior "a priori". Sendo reciclada para uma torre de resfriamento que exige, por sua vez, trabalho para remoção do calor, para que o ciclo (*loop*) seja completo. Desse modo, tem-se:

$$B^{\$}_{Qcond} = 0 \qquad \text{(IV.1)}$$

- O custo exergético da corrente de alimentação da torre foi definido como sendo igual a sua exergia:

$$B^{\$}_{1} = \dot{m}_1 \cdot B_1 = \dot{B}_1 \qquad \text{(IV.2)}$$

- Para efeito de simplificação, o custo exergético da corrente de vapor foi atribuído como sendo igual a sua exergia, na medida em que, haveria necessidade de avaliar a geração de vapor para correta atribuição do seu custo exergético.

$$B^{\$}_{Qref} = \dot{B}_{Qref} \qquad \text{(IV.3)}$$

- Os custos exergéticos das correntes de alimentação e do calor do refervedor foram repercutidos nas correntes de topo e de fundo da coluna despropanizadora.
- O produto da coluna despropanizadora é composto das correntes de topo e de fundo, e o mesmo custo exergético unitário foi atribuído a ambas as correntes.
- E por fim, o custo exergético é uma propriedade conservativa, tem-se que: $\sum_i B^{\$}_i = 0$.

Os resultados obtidos encontram-se na Tabela IV.11. Dessa forma, é possível observar que, a despeito do custo exergético da alimentação permanecer constante, as especificações de

composição e as condições de temperatura, pressão e vazão das correntes de topo e de fundo permanecerem constantes nos diferentes cenários; o custo exergético contempla as ineficiências do processo na atribuição de valores no custeio dos produtos.

Tabela IV.12 – Custo exergéticos das correntes da coluna despropanizadora para os diferentes cenários

Custo exergético ($)	**Cenário**				
	C1	**C2**	**C3**	**C4**	**C5**
Alimentação	-477062	-477062	-477062	-477062	-477062
Topo	200157	200197	200311	200665	202150
Fundo	278787	278843	279003	279497	281566
Condensador	0	0	0	0	0
Refervedor	-1882	-1978	-2252	-3101	-6654
Somatório	0	0	0	0	0

Concatenando os resultados da análise termoeconômica com o cálculo do índice ambiental, é possível observar que quanto maior o custo exergético do produto de topo, menor é o índice de sustentabilidade do processo. Este resultado está de acordo com as premissas estabelecidas (Rosen, et al., 2008). Portanto, quanto maior o custo exergético do produto de uma unidade, maior sua irreversibilidade ou consumo de recursos exergéticos, logo, menor será sua eficiência e índice de sustentabilidade.

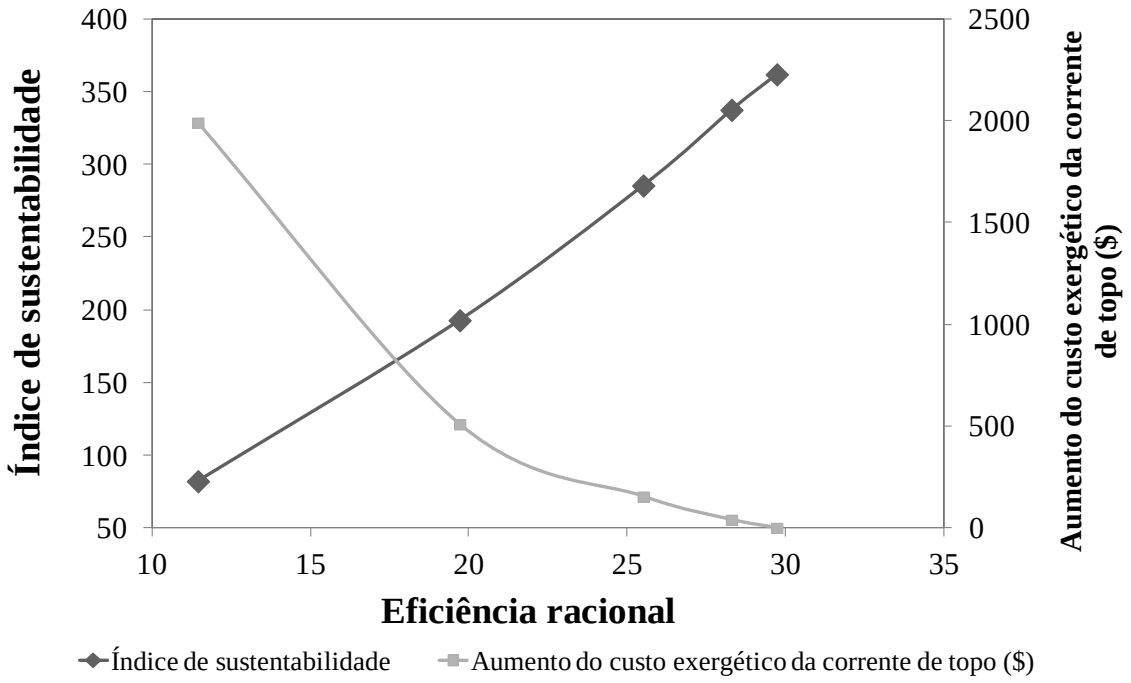


Figura IV.8 – Índice de sustentabilidade e impacto ambiental, mensurado por meio do aumento do custo exergético da corrente de topo em relação ao cenário C1 da coluna despropanizadora, contra a eficiência racional do processo.

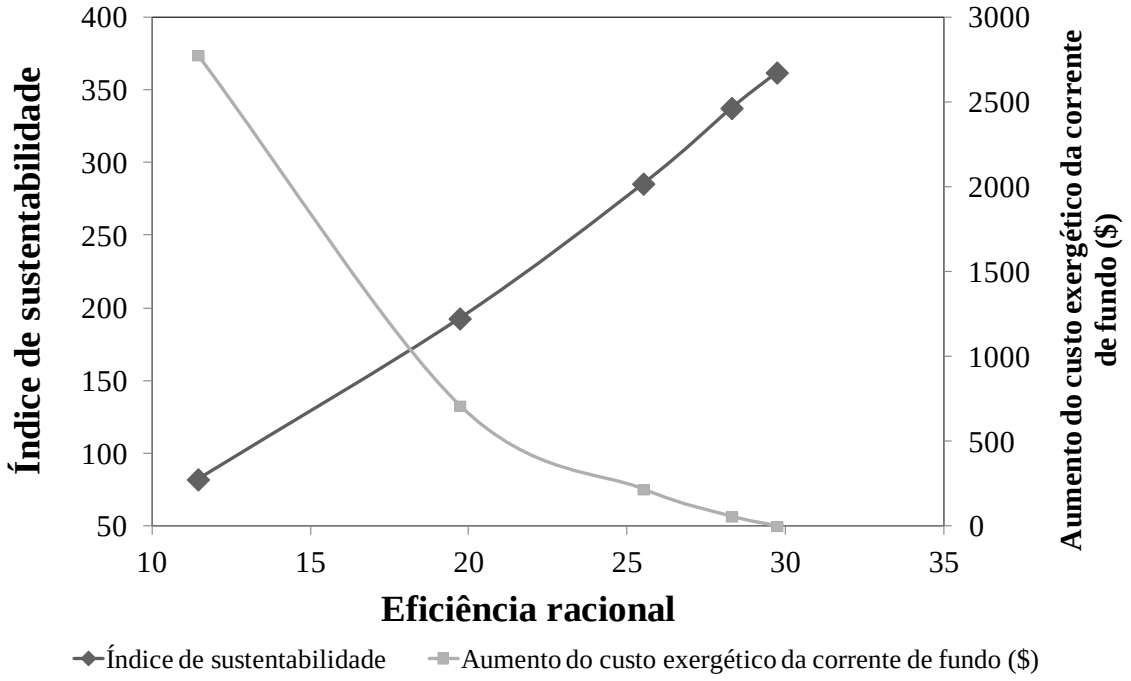


Figura IV.9 – Índice de sustentabilidade e impacto ambiental, mensurado por meio do custo exergético da corrente de fundo em relação ao cenário C1 da coluna despropanizadora, contra a eficiência racional do processo.

IV.2.3 - COMPARAÇÃO ENTRE COMBUSTÍVEIS DE UMA PLANTA TÉRMICA

Uma planta térmica hipotética de 100 kW, cuja geração é realizada por uma turbina a vapor, de eficiência constante igual a 75%, foi simulada no HYSYS®. Para geração do vapor, foi empregado um combustível hipotético, cuja composição consiste de um determinado hidrocarboneto puro. O fluxograma do processo encontra-se na Figura IV.10.

Combustível e comburente são alimentos ao combustor com pressão de 1 atm e temperatura de 298 K. A vazão de ar corresponde à quantidade estequiométrica. O combustor é suposto como sendo adiabático.

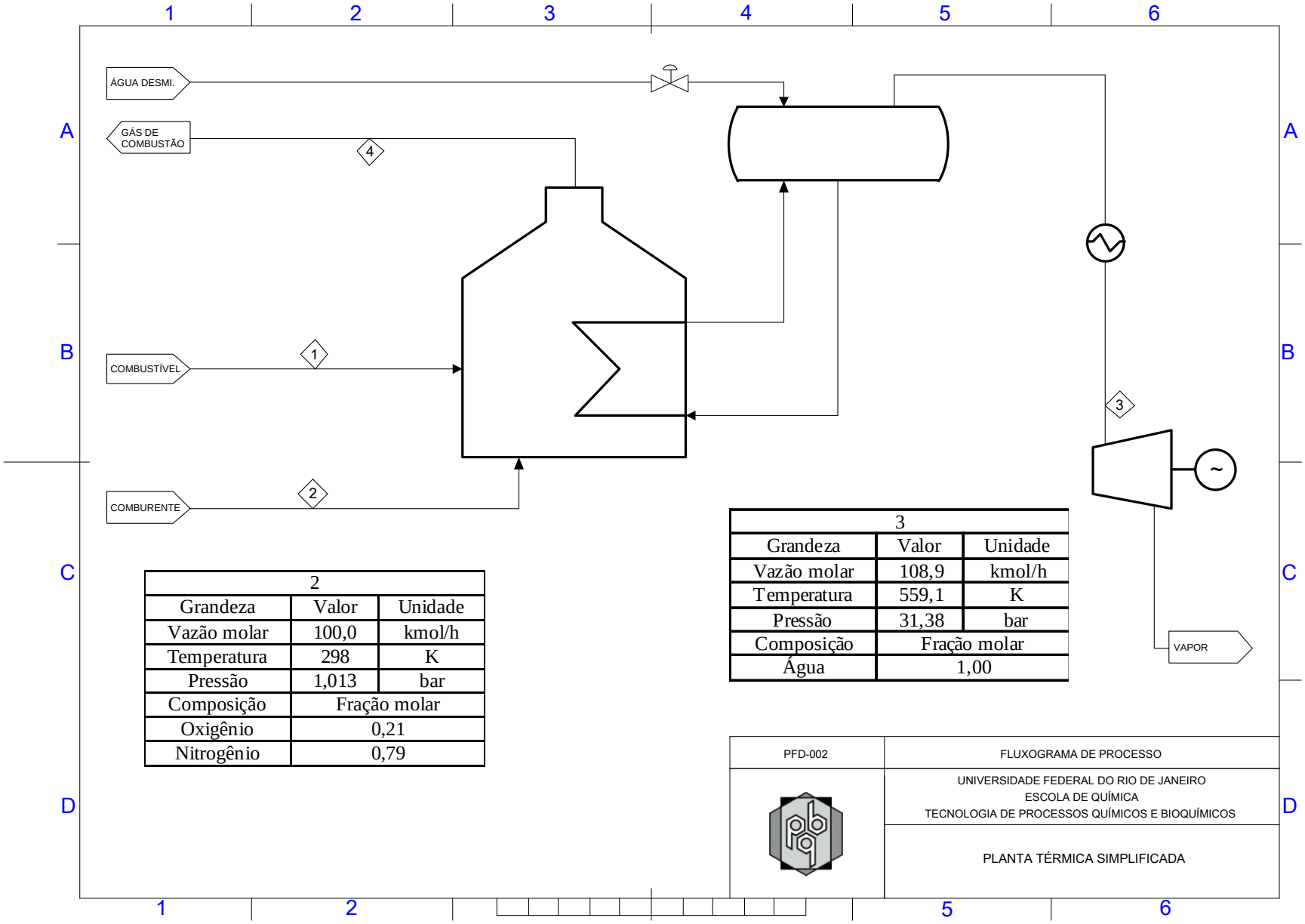
O sistema de vapor é suprido por água desmineralizada pressurizada a 40 kgf/cm² a. Esta corrente é saturada na caldeira que opera com pressão de 32 kgf/cm² a. O vapor saturado é superaquecido 50 K acima da saturação e fornecido a turbina de contra-pressão. A pressão de descarga da turbina foi definida como sendo 10,0 kgf/cm² a.

A premissa utilizada para comparação entre os diferentes cenários foi: a exergia da corrente de combustível é constante em todos os cenários. Este critério define, portanto, a vazão de combustível a ser utilizada. Os cenários encontram-se na Tabela IV.13:

Tabela IV.13 – Resumo do estudo de caso para planta térmica.

Caso	Planta térmica
Metodologias aplicadas	Cálculo da exergia em correntes de processo e de energia
	Cálculo da irreversibilidade
	Cálculo da eficiência exergética
	Diagramas de exergia
Função objetivo	Custo exergético
Variável de decisão	Combustível
Restrição	Exergia da corrente de combustível
Cenários - Combustível	C1 – Metano
	C2 – Etano
	C3 – Propano
	C4 – n-Butano
	C5 – n-Pentano
	C6 – n-hexano
	C7 – n-heptano

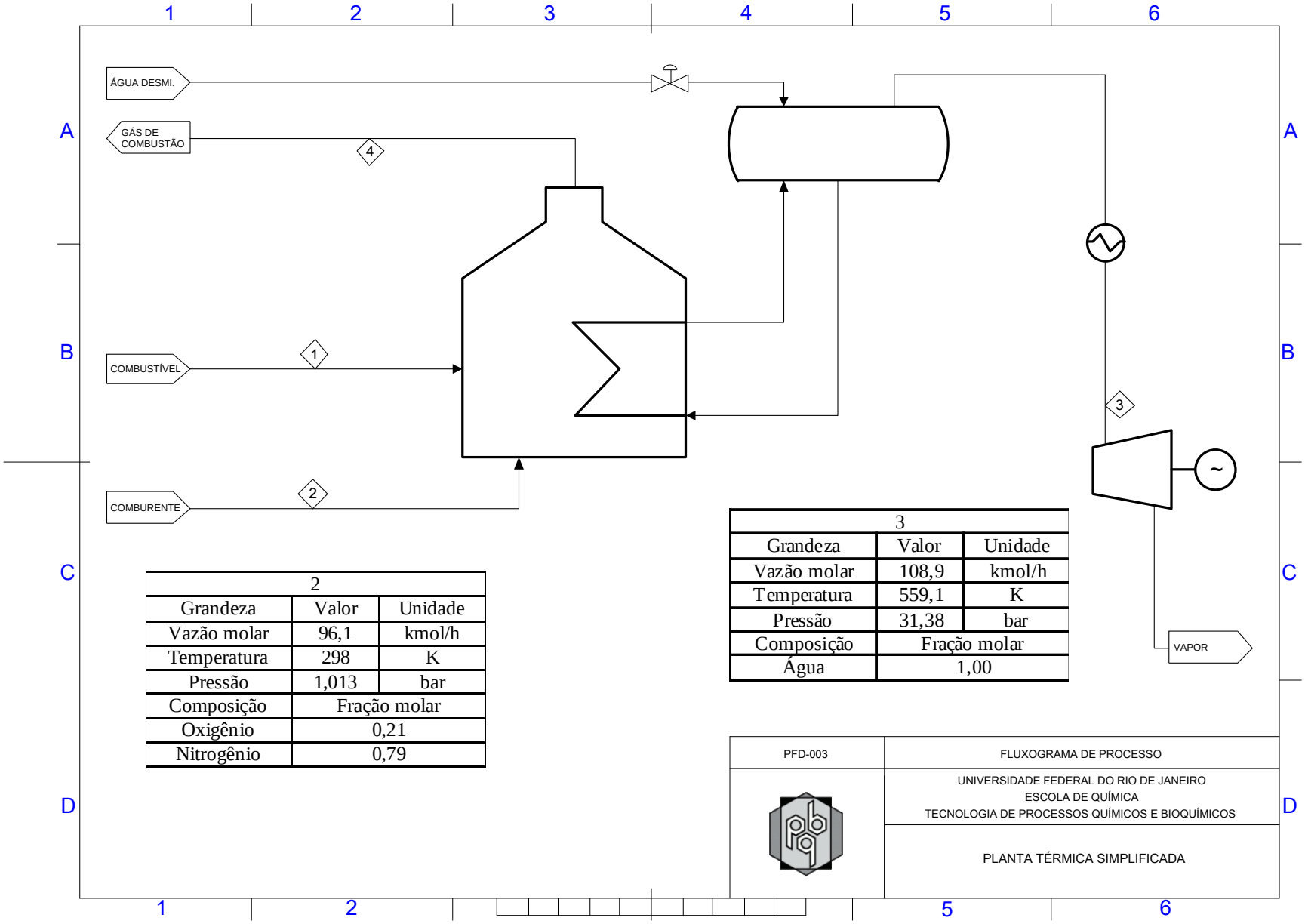
Os resultados encontram-se na Tabela IV.14.



2		
Grandeza	Valor	Unidade
Vazão molar	100,0	kmol/h
Temperatura	298	K
Pressão	1,013	bar
Composição	Fração molar	
Oxigênio	0,21	
Nitrogênio	0,79	

3		
Grandeza	Valor	Unidade
Vazão molar	108,9	kmol/h
Temperatura	559,1	K
Pressão	31,38	bar
Composição	Fração molar	
Água	1,00	

Figura IV.10 – Fluxograma de processo – planta térmica (C1: Metano).



2		
Grandeza	Valor	Unidade
Vazão molar	96,1	kmol/h
Temperatura	298	K
Pressão	1,013	bar
Composição	Fração molar	
Oxigênio	0,21	
Nitrogênio	0,79	

3		
Grandeza	Valor	Unidade
Vazão molar	108,9	kmol/h
Temperatura	559,1	K
Pressão	31,38	bar
Composição	Fração molar	
Água	1,00	

Figura IV.11 – Fluxograma de processo – planta térmica (C6: Hexano).

Tabela IV.14 – Resultados do estudo de caso planta térmica.

Parâmetro	Cenário						
	C1	**C2**	**C3**	**C4**	**C5**	**C6**	**C7**
Número de carbonos	1	2	3	4	5	6	7
Exergia da corrente de combustível, kW	2423	2423	2423	2423	2423	2423	2423
Exergia da corrente de comburente , kW	3,6	3,5	3,5	3,5	3,4	3,4	3,4
Exergia da corrente de gás de combustão, kW	1740	1733	1728	1725	1706	1706	1706
Exergia da corrente de gás de combustão exausto, kW	474	463	457	454	438	438	438
Irreversibilidade da combustão, kW	686	693	699	702	720	720	720
Exergia da água de caldeira, kW	489	489	489	489	489	489	489
Exergia do vapor a jusante da turbina, kW	931	931	931	931	931	931	931
Geração de potência da turbina, kW	100	100	100	100	100	100	100
Irreversibilidade da turbina, kW	21	21	21	21	21	21	21
Diferença de número de moles da reação de combustão	0,0	2,9	4,1	4,7	5,1	5,3	5,5
Vazão molar de CO_2 no gás de combustão exausto, kmol/h	10,5	11,7	12,2	12,5	12,6	12,8	12,8
Acréscimo na emissão de CO_2 em relação ao metano, % molar	0,0	11,3	16,0	19,0	20,3	21,4	22,3
Vazão molar de combustível, kmol/h	10,5	5,8	4,1	3,1	2,5	2,1	1,8
Consumo de combustível em relação ao metano, % molar	100	55,6	38,7	29,5	24,1	20,2	17,1
Vazão molar de ar, kmol/h	100,0	97,4	96,7	96,4	96,2	96,1	96,1
Vazão molar de gás de combustão, kmol/h	110,5	106,1	104,8	104,2	103,8	103,59	103,4
Temperatura do gás de combustão exausto, K	1058	1063	1061	1058	1040	1040	1040

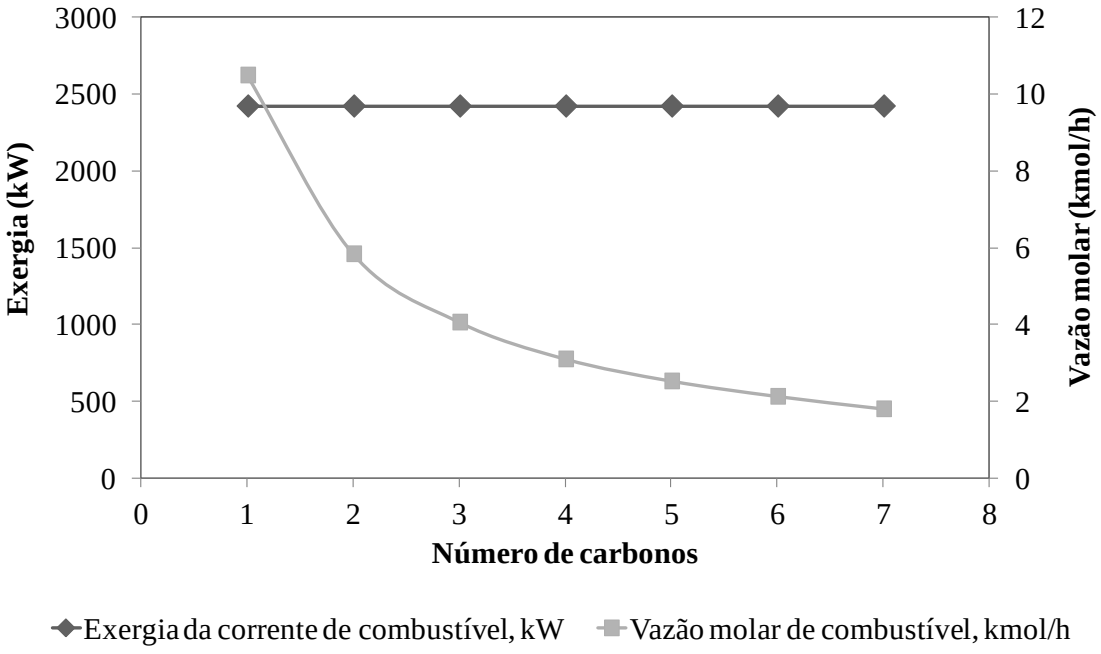


Figura IV.12 – Exergia da corrente de combustível constante para todos os cenários e vazão molar de combustível nos diferentes cenários.

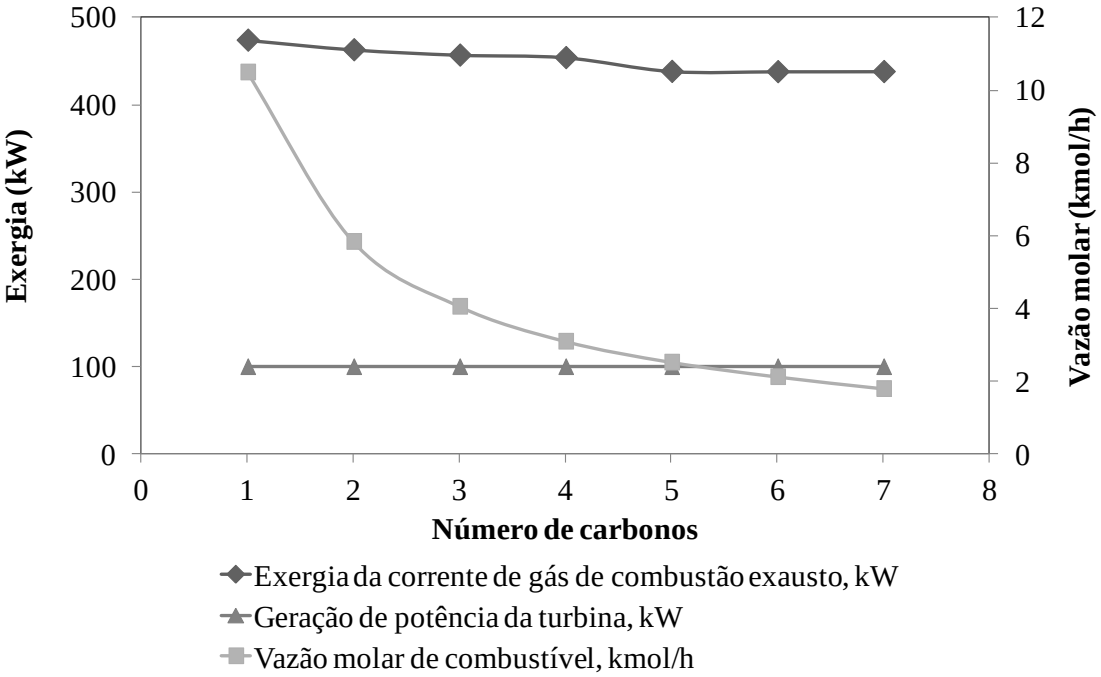


Figura IV.13 – Perda externa de exergia pela corrente de gás de combustão exausto, potência da turbina a vapor e vazão molar de combustível nos diferentes cenários.

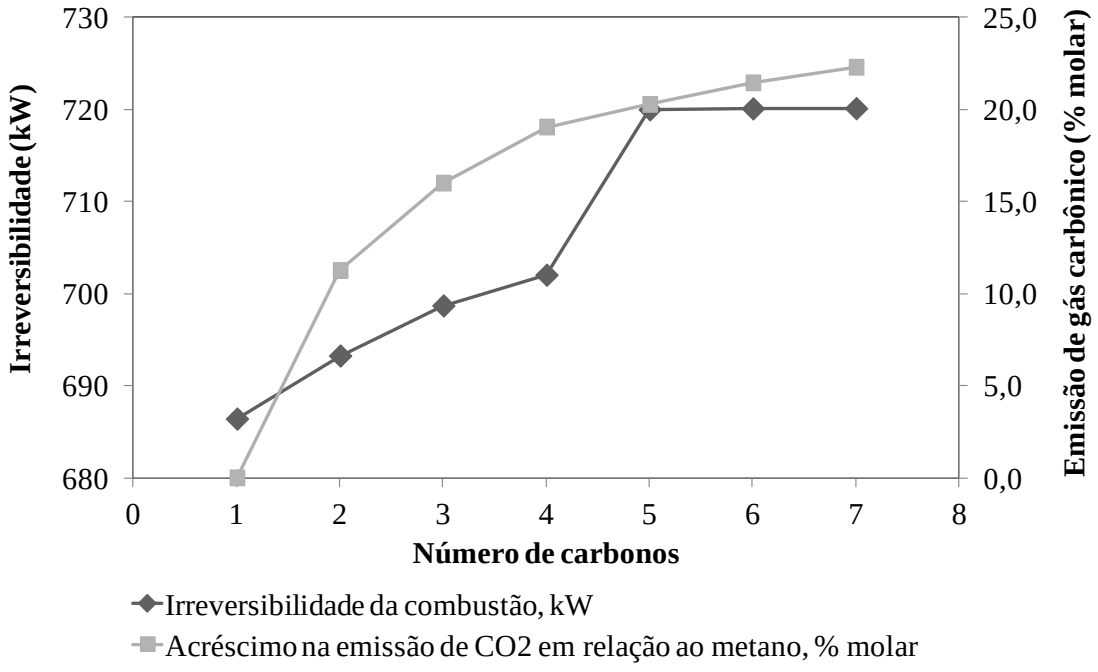


Figura IV.14 – Irreversibilidade do processo de combustão nos diferentes cenários e percentual de acréscimo da emissão de gás carbônico em relação a emissão do cenário um.

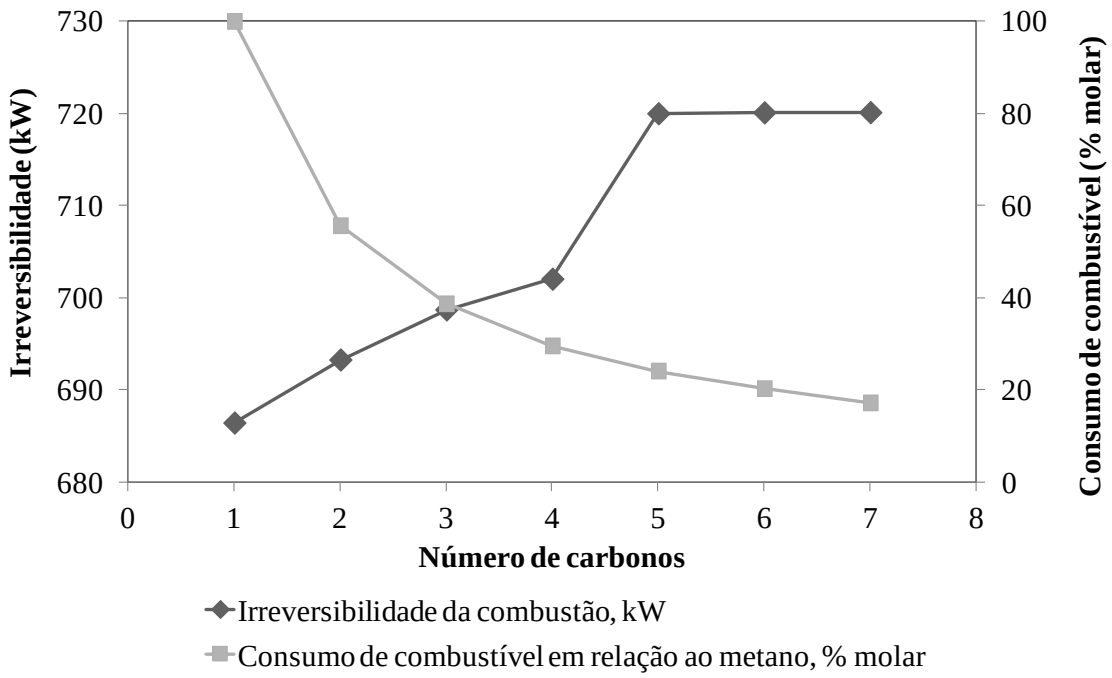
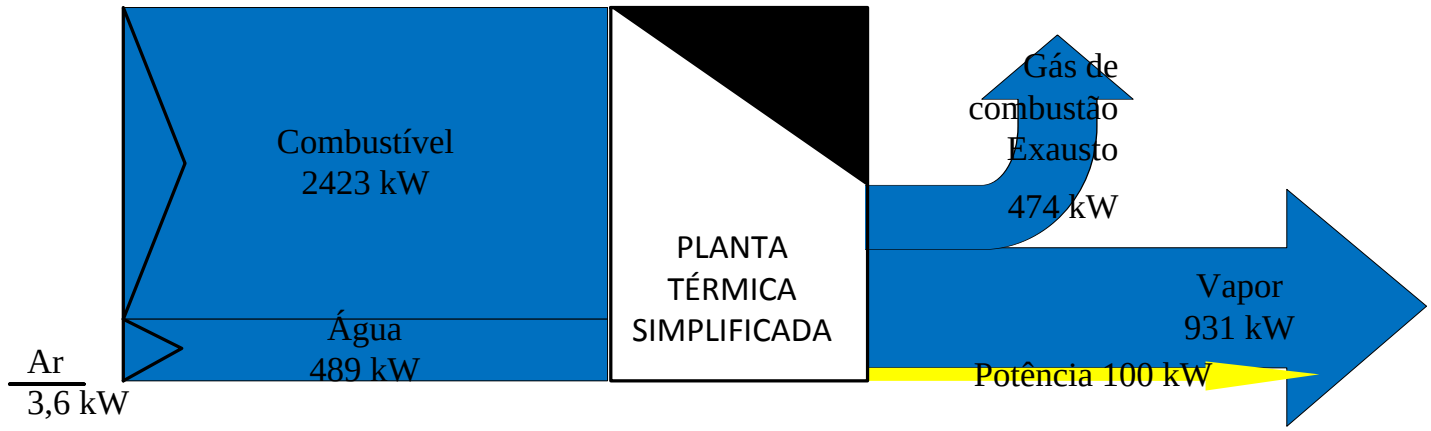


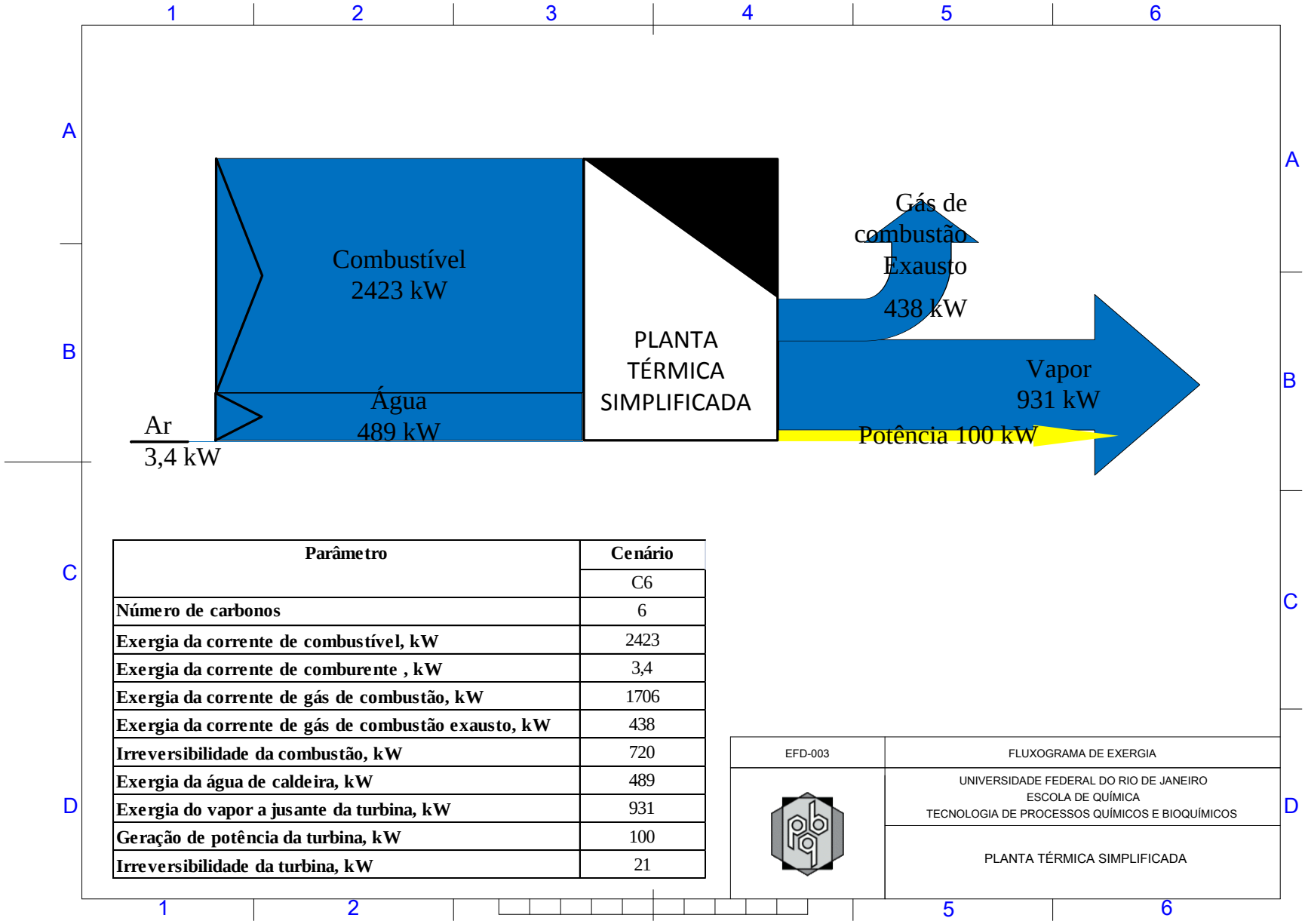
Figura IV.15 – Irreversibilidade do processo de combustão nos diferentes cenários cenários e percentual molar de consumo de combustível em relação ao consumo do cenário um.



Parâmetro	Cenário
	C1
Número de carbonos	1
Exergia da corrente de combustível, kW	2423
Exergia da corrente de comburente , kW	3,6
Exergia da corrente de gás de combustão, kW	1740
Exergia da corrente de gás de combustão exausto, kW	474
Irreversibilidade da combustão, kW	686
Exergia da água de caldeira, kW	489
Exergia do vapor a jusante da turbina, kW	931
Geração de potência da turbina, kW	100
Irreversibilidade da turbina, kW	21

EFD-004	FLUXOGRAMA DE EXERGIA
	UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO ESCOLA DE QUÍMICA TECNOLOGIA DE PROCESSOS QUÍMICOS E BIOQUÍMICOS
	PLANTA TÉRMICA SIMPLIFICADA

Figura IV.16 – Fluxograma de exergia – planta térmica (C1: Metano).



Parâmetro	Cenário
	C6
Número de carbonos	6
Exergia da corrente de combustível, kW	2423
Exergia da corrente de comburente , kW	3,4
Exergia da corrente de gás de combustão, kW	1706
Exergia da corrente de gás de combustão exausto, kW	438
Irreversibilidade da combustão, kW	720
Exergia da água de caldeira, kW	489
Exergia do vapor a jusante da turbina, kW	931
Geração de potência da turbina, kW	100
Irreversibilidade da turbina, kW	21

Figura IV.17 – Fluxograma de exergia – planta térmica (C6: Hexano).

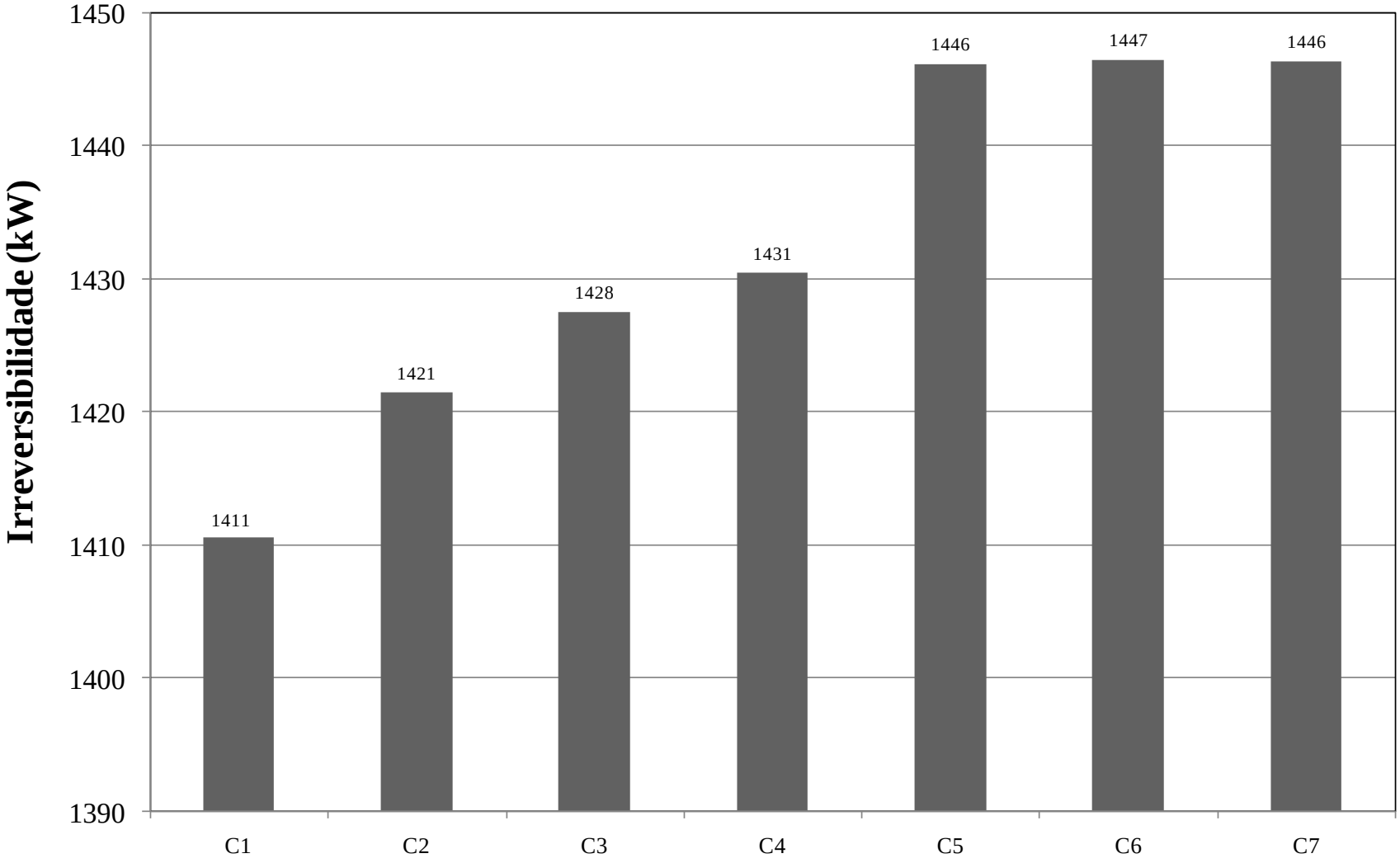


Figura IV.18 – Irreversibilidade da planta térmica para os diversos cenários.

A partir dos resultados obtidos, é possível observar que quanto maior o número de carbonos do combustível, menor é a vazão molar necessária para se tenha uma mesma exergia da corrente de combustível.

Em virtude das condições de temperatura e pressão, a vazão da corrente de combustível foi calculada com base na exergia química molar do combustível, haja vista que, a exergia física tende a zero nas condições de 298 K e 1,013 bar.

Para todos os cenários, o sistema de vapor opera de maneira idêntica. A corrente de água desmineralizada pressurizada, cuja exergia é de 489 kW, é fornecida a uma válvula de controle de pressão, alocada a montante do tubulão de vapor. Na válvula há uma perda de pressão de 8 bar. O calor necessário a vaporização da água é constante em todos os cenários e igual 1469 kW. Da mesma forma, o calor de superaquecimento do vapor é igual a 82 kW. A exergia da corrente de trabalho da turbina é igual ao trabalho gerado de 100 kW, e a exergia da corrente de vapor a jusante da turbina é igual 931 kW.

Para os diversos cenários, foram obtidos processos semelhantes sob o ponto de vista exergético. O ganho exergético desejado, ou seja, a potência da turbina, acrescida da exergia da corrente de vapor exportada (a jusante da turbina), subtraída da exergia da corrente de água de alimentação da caldeira; é o mesmo para todos os cenários e igual a 542 kW. Por outro lado, o dispêndio exergético utilizado, ou seja, a soma das exergias das correntes de combustível e comburente, subtraída da exergia dos gases de combustão exaustos, é de 1953 kW para o cenário C1 e 1988 kW para o cenário C6. O que confere uma eficiência racional a planta térmica de 28% no caso C1 e 27% no caso C6.

Se a análise for efetuada através da eficiência exergética, observa-se que no cenário C1, tem-se na saída de exergia a potência da turbina e a exergia do vapor, totalizando 1031 kW. Sendo que, são utilizados como entrada de exergia 2915 kW. Desse modo, tem-se uma eficiência exergética de 35% para ambos os cenários C1 e C6.

Todavia, há um parâmetro importante que distingue os cenários sob o ponto de vista exergético: a irreversibilidade da reação de combustão. Observa-se que quanto maior a irreversibilidade da reação de combustão menor a energia disponível nos gases de combustão. É importante ressaltar que, a despeito do fato de que os gases de combustão são direcionados a uma chaminé, ou seja, não são úteis ao processo, mas sim um rejeito; a irreversibilidade da reação extingue a possibilidade de extração de uma parte da exergia, que é destruída (extinguida) no próprio combustor. Ambos os cenários resultam em perda de exergia, sendo que a reação consiste em uma perda interna, enquanto a exaustão dos gases, uma perda externa.

Desse modo, quanto menor a cadeia carbônica de um combustível, maior será a possbilidade de extração de energia útil através da combustão.

Na Figura IV.14 é possível observar que o aumento da irreversibilidade no processo de combustão está relacionado ao aumento da emissão de gás carbônico. A despeito da redução na vazão molar do combustível, conforme o aumento da cadeia, há um aumento na emissão de gás carbônico, uma vez atendido o critério de exergia da corrente de combustível constante. Quanto maior a cadeia carbônica, maior será a variação do número de mols da reação. Logo, maior será a geração de entropia do sistema e, portanto maior a sua irreversibilidade. De onde conclui-se que a irreversibilidade da reação de combustão de um combustível é proporcional a sua emissão de gás carbônico.

Na Figura IV.15 é possível observar o decréscimo de consumo do combustível, associado ao aumento da cadeia carbônica. Entretanto, observa-se que a despeito da redução da vazão molar, há um aumento na irreversibilidade. A vazão dos combustíveis de maior cadeia carbônica poderia ser otimizada até o ponto que a emissão de gás carbônico ou a exergia da corrente de gás de combustão fosse a mesma da obtida no cenário do metano. Entretanto, no cenário do metano, também há graus de liberdade para otimização nesse sentido. De maneira que, em algum momento, o conteúdo de energia útil nos combustíveis não seria suficiente para o processo. E neste momento, ambos os cenários possuirão exergias semelhantes na corrente de combustível e o processo menos irreversível possuirá menor emissão de gás carbônico.

Através da análise exergética é possível identificar os pontos de maior irreversibilidade do processo. Na planta referente ao cenário C1, tem-se: 686 kW na reação de combustão, 680 kW na transferência de calor na caldeira de geração de vapor, 24 kW no superaquecedor, 0,4 kW na válvula redutora da água de alimentação de caldeira e 21 kW na turbina. Somados, totalizam a irreversibilidade da planta térmica no cenário C1 de 1411 kW, conforme Figura IV.19.

Na planta referente ao cenário C6 tem-se: 720 kW no reação de combustão, 683 kW na transferência de calor na caldeira de geração de vapor, 23 kW no superaquecedor, 0,4 kW na válvula redutora da água de alimentação de caldeira e 21 kW na turbina. Somados, totalizam a irreversibilidade da planta térmica no cenário C6 de 1447 kW, conforme a Figura IV.20.

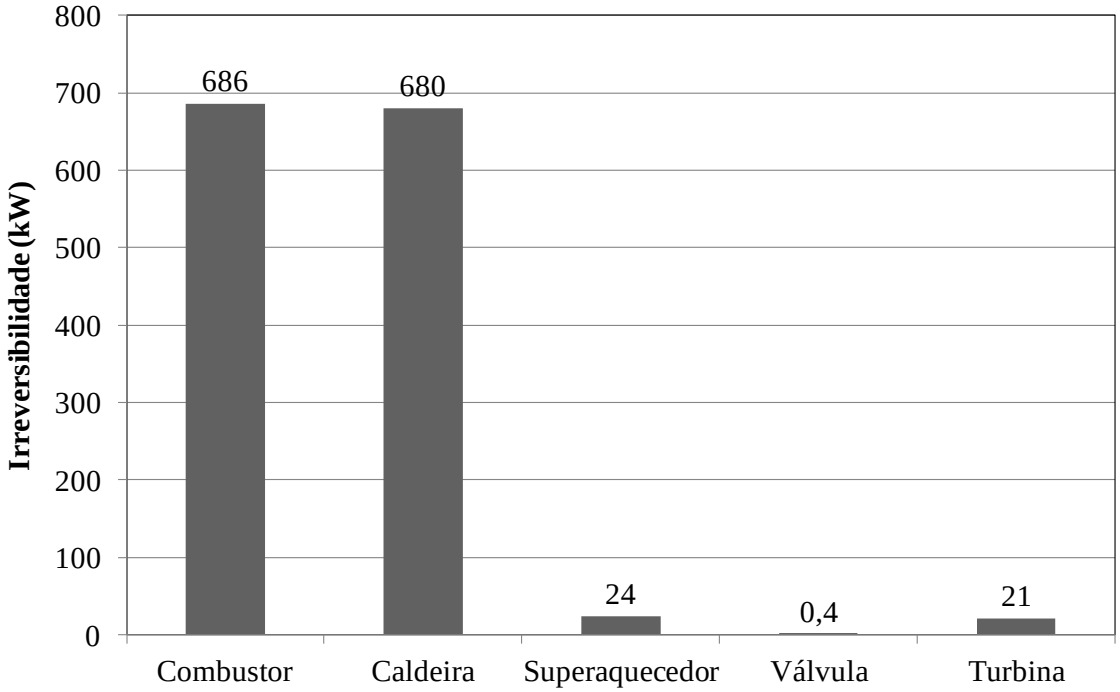


Figura IV.19 – Irreversibilidades por operação ou processo unitário – planta térmica (C1: Metano).

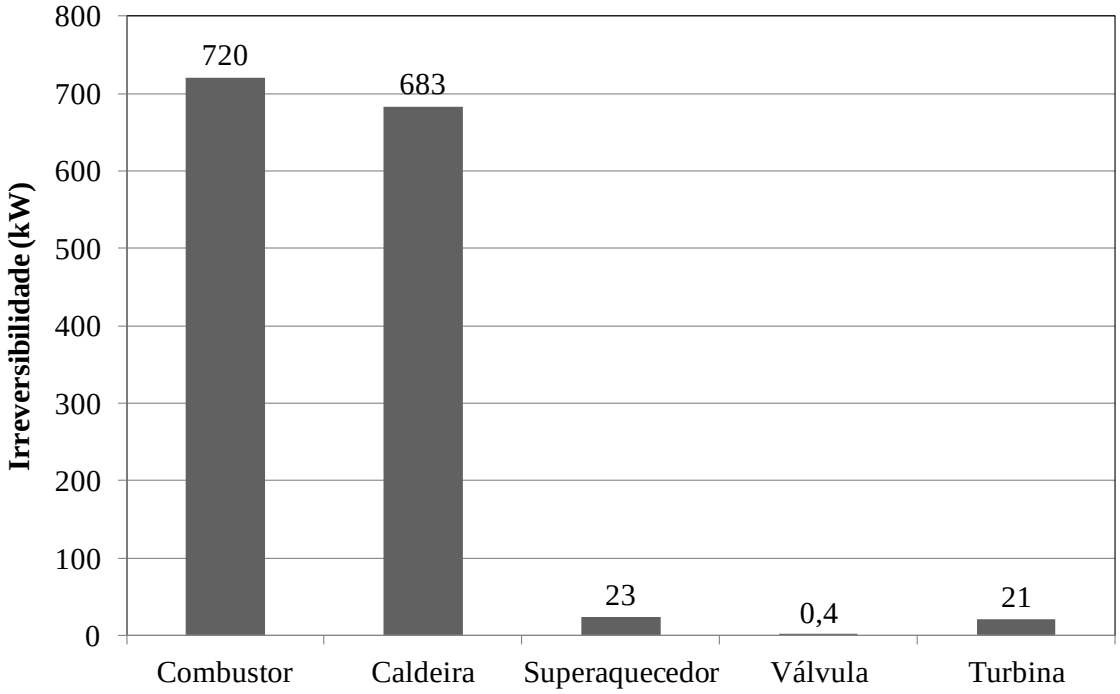


Figura IV.20 – Irreversibilidades por operação ou processo unitário – planta térmica (C6: Hexano).

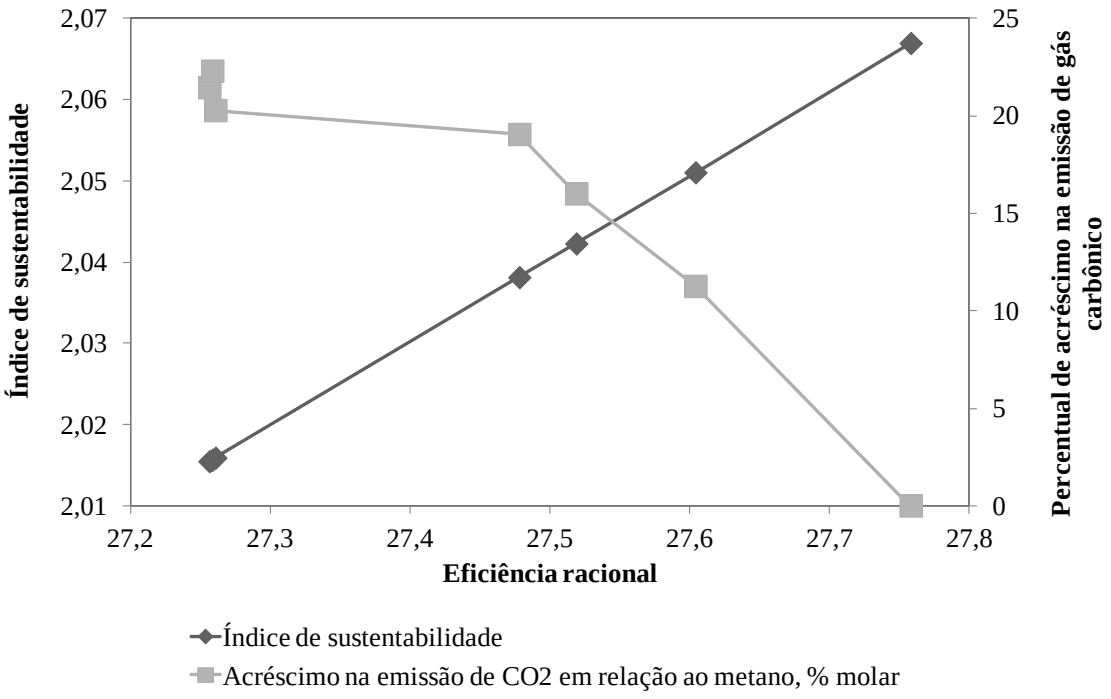


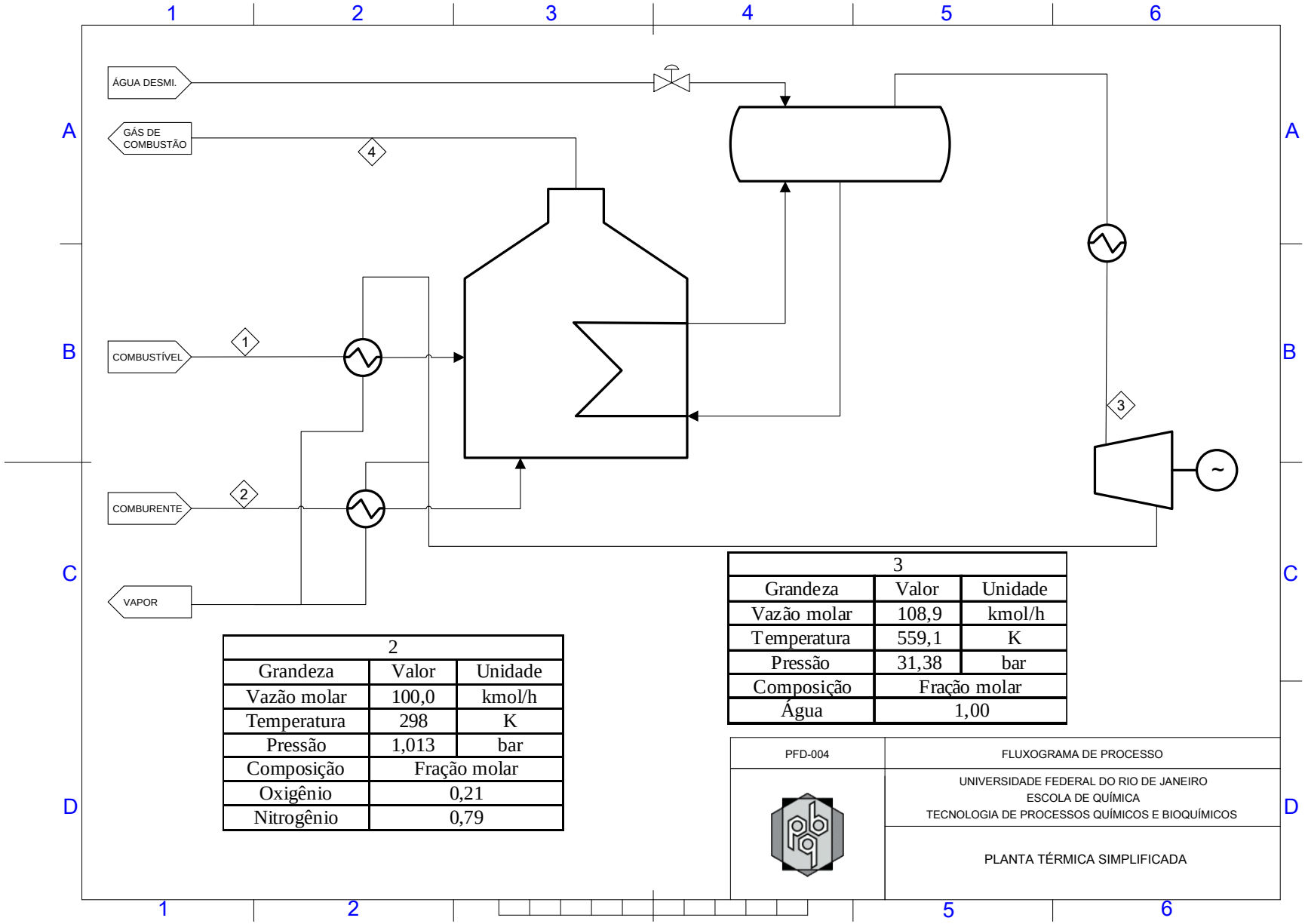
Figura IV.21 – Índice de sustentabilidade e percentual de acréscimo de emissão de gás carbônico (impacto ambiental), contra a eficiência racional.

É válido ressaltar também que, uma vez atribuído alguma utilidade a corrente de gás de combustão exausta, menor será o custo exergético atribuído ao trabalho gerado pela turbina a vapor.

Desse modo, é possível, por exemplo, utilizar a exergia térmica da corrente de gás de combustão exausto para pré-aquecimento das correntes de comburente e do combustível. Medida esta, que minimizará a irreversibilidade do processo de combustão e aumentará a eficiência racional da unidade.

Da mesma forma, é possível utilizar a exergia térmica da corrente de vapor a jusante da turbina para pré-aquecimento das correntes de comburente e combustível. Esta troca térmica será menos irreversível, quando comparada com a utilização do gás de combustão exausto como fluido quente, uma vez que, a diferença de temperatura entre a corrente de vapor e as correntes de combustível e comburente é menor, quando comparada a diferença de temperatura entre a corrente de gás de combustão exausto e as correntes de combustível e comburente.

Para esta modificação, as temperaturas das correntes de combustível e comburente foram pré-aquecidas até 400 K utilizando a corrente de vapor a jusante da turbina. A potência da turbina a vapor foi mantida constante e igual 100 kW.



2		
Grandeza	Valor	Unidade
Vazão molar	100,0	kmol/h
Temperatura	298	K
Pressão	1,013	bar
Composição	Fração molar	
Oxigênio	0,21	
Nitrogênio	0,79	

3		
Grandeza	Valor	Unidade
Vazão molar	108,9	kmol/h
Temperatura	559,1	K
Pressão	31,38	bar
Composição	Fração molar	
Água	1,00	

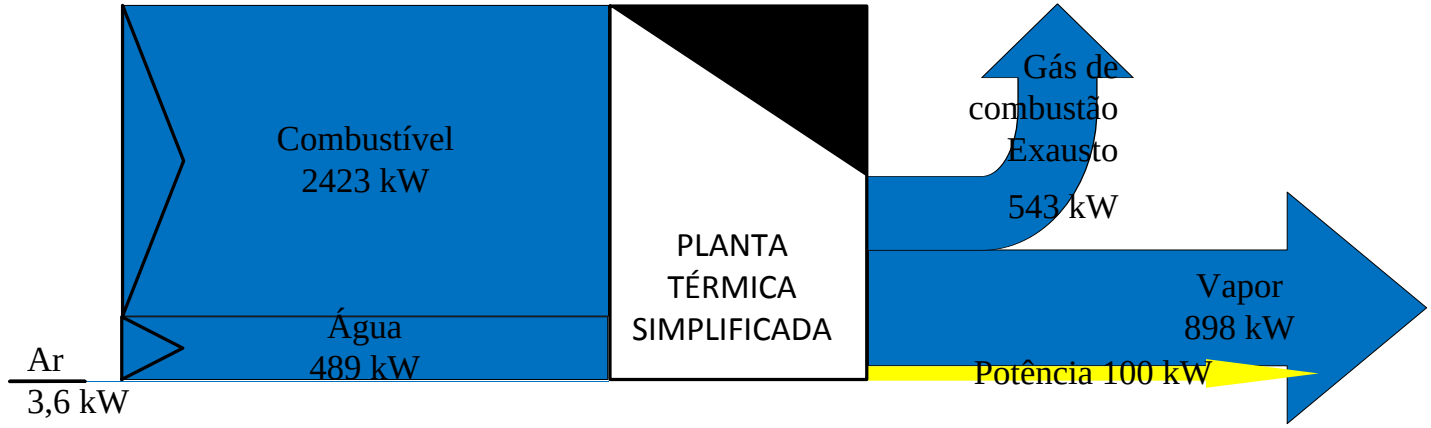
Figura IV.22 – Fluxograma de processo – planta térmica com modificações (C1-B: Metano).

Para esta modificação, tem-se que, o ganho exergético desejado, ou seja, a potência da turbina, acrescida da exergia da corrente de vapor exportada (a jusante dos trocadores pré-aquecedores), subtraída da exergia da corrente de água de alimentação de caldeira; é 509 kW. Por outro lado, o dispêndio exergético utilizado, ou seja, a soma das exergia da corrente de combustível e comburente, subtraída da exergia dos gases de combustão exaustos, é de 1884 kW. O que confere uma eficiência racional a planta térmica de 27,0 %.

A comparação visual entre os valores mencionados pode ser feita através da análises dos fluxogramas de exergia dos cenário C1 e C1-B. É válido ressaltar que no processo C1-B, em virtude das trocas de calor para pré-aquecimento, há um melhor aproveitamento da exergia, de modo que, a irreversibilidade da combustão se reduz a 617 kW, entretanto, a perda externa de exergia na corrente de gás de combustão exausto é aumentada, uma vez que no cenário C1-B, 543 kW de exergia são exaustos na chaminé, ao passo que no cenário C1, apenas 474 kW são rejeitados. Isso abre espaço para otimizações no processo, uma vez que, se destrói menos exergia, mas, se rejeita mais exergia.

Evidencia-se então, que a minimização das irreversibilidades em operações e reações químicas não resulta diretamente, e por si só, em uma melhor eficiência no processo global. Todavia, abrem espaços para que otimizações possam ser conduzidas, no intuito de melhor aproveitamento da exergia que não fora destruída pelas irreversibilidades.

O avanço pode ser observado através do cálculo do índice de sustentabilidade. O novo cenário C1-B possui maior índice que o anterior, o que mostra a relação entre redução da geração de entropia com a sustentabilidade.



Parâmetro	Cenário
	C1-B
Número de carbonos	1
Exergia da corrente de combustível, kW	2423
Exergia da corrente de comburente , kW	3,6
Exergia da corrente de gás de combustão, kW	1823
Exergia da corrente de gás de combustão exausto, kW	543
Irreversibilidade da combustão, kW	617
Exergia da água de caldeira, kW	489
Exergia do vapor a jusante dos trocadores, kW	898
Geração de potência da turbina, kW	100
Irreversibilidade da turbina, kW	21

EFD-005	FLUXOGRAMA DE EXERGIA
	UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO ESCOLA DE QUÍMICA TECNOLOGIA DE PROCESSOS QUÍMICOS E BIOQUÍMICOS
	PLANTA TÉRMICA SIMPLIFICADA

Figura IV.23 – Fluxograma de exergia – planta térmica (C1-B: Metano).

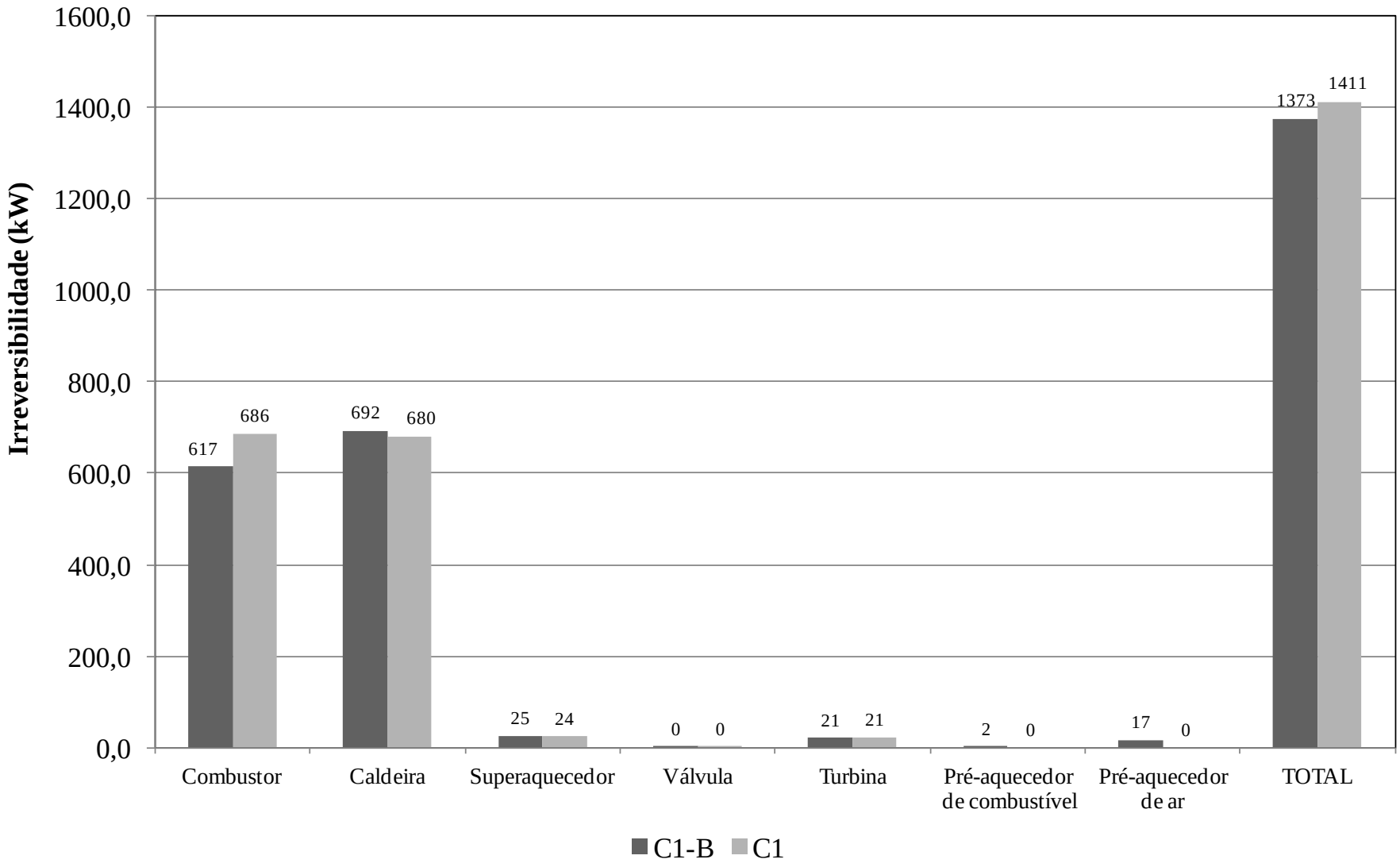


Figura IV.24 – Irreversibilidades por operação ou processo unitário – planta térmica (C1 e C1-B).

A interpretação microscópica da exergia está relacionada à interpretação microscópica da entropia. Os processos onde há a maior geração de entropia no sistema da planta térmica são justamente os que promovem maior aumento de desordem.

Primeiro, a reação exotérmica de combustão, em um reator adiabático, promove um forte aquecimento da corrente de gás de combustão, cuja vazão em quantidade de matéria é superior a da entrada de combustível e comburente. A escala de temperatura, que está relacionada a energia interna do sistema, retrata o grau de agitação molecular. Desse modo, o número de mols após a queima é superior que antes da reação, e a temperatura após a queima também é elevada. Estes dois fatores configuram o aumento da desordem.

Em segundo lugar, a geração de vapor. O processo de vaporização consiste em uma mudança de fase, partindo do estado líquido, de baixa entropia, para o estado gasoso, de alta entropia.

O pré-aquecimento proporciona redução da irreversibilidade da reação de combustão. A minimização da irreversibilidade da combustão conduz a redução significativa da irreversibilidade da planta. Observa-se um pequeno aumento da irreversibilidade da geração de vapor em virtude do aumento do gradiente térmico da operação, uma vez que, os gases de combustão da caldeira ganham maior exergia térmica com pré-aquecimento.

Sabe-se que quanto maior for a geração de vapor da planta térmica, maior será sua irreversibilidade. E o pré-aquecimento pode ser utilizado para minimizar este efeito, de maneira que, se tenha um melhor aproveitamento exergético da combustão, com menor destruição de energia útil.

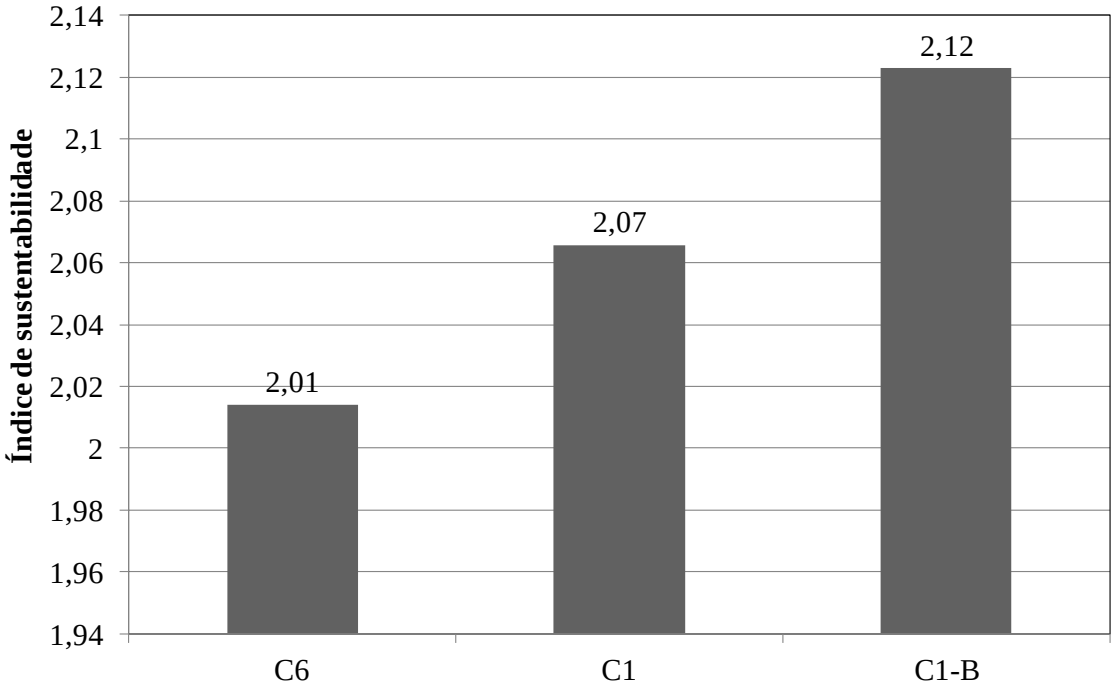


Figura IV.25 – Índice de sustentabilidade da planta térmica para os cenários C1, C1-B e C-6.

Verifica-se que o índice de sustentabilidade, assim como a eficiência exergética (ou racional) são parâmetros intensivos, que independem da magnitude (ordem de grandeza) do sistema, de modo que, plantas industriais de escalas maiores (*scale-up*) produzirão maior impacto ambiental como o mesmo índice de sustentabilidade de unidades menores.

CAPÍTULO V

CONCLUSÕES

V - CONCLUSÕES

A análise exergética de processos permite a identificação e a discussão dos aspectos causadores da perda de energia útil em diversos tipos de processos. A exergia é baseada na segunda lei da termodinâmica e depende de um referencial (grandeza relativa). A implementação da função de estado exergia em simuladores de processos é o ponto de partida para que uma série de análises possam ser conduzidas.

Considerar somente o estado morto proposto por Szargut, et al., (1988) acarreta a limitação no número de espécies químicas que podem ser tratadas, pois, apenas dez elementos químicos estão presentes. Correntes de processo contendo compostos halogenados, por exemplo, não podem ter sua exergia determinada, uma vez que, tais espécies não podem ser convertidas, em nenhuma das espécies do estado morto de referência.

Verifica-se que a irreversibilidade nos processos físicos é proporcional às forças motrizes de transporte de massa, calor e momento. Por outro lado, nos processos químicos, a irreversibilidade é proporcional à afinidade química da reação. Desse modo, é possível definir, para ambos os tipos de processos, que próximo da condição de equilíbrio se obtém a melhor eficiência exergética. Essas condições são denominadas de praticamente termodinâmicas. É válido ressaltar que, a reversibilidade de processos químicos possui a mesma implicação da reversibilidade de processos físicos. De maneira que, na condição praticamente termodinâmica, bem próximo ao equilíbrio (equilíbrio químico, para processos químicos), o processo terá sua irreversibilidade tendendo a zero. Entretanto, sabe-se que nesta condição a força motriz do processo é muito pequena, seja ela dada pelo gradiente de temperatura, de concentração, de velocidade, ou afinidade química. Portanto, o processo praticamente não ocorre, ou seja, quase não há transporte ou geração de produtos. Há, em vários projetos um *trade-off* entre custo eficiência, que tona necessário a introdução de novos conceitos, relacionados a sustentabilidade, para o uso de critérios de disponibilidade em projeto de processos.

Primeiramente, verificou-se o efeito da razão de refluxo na atribuição dos custos exergéticos das correntes de topo e fundo de uma coluna despropanizadora. O aumento da razão de refluxo proporciona que a separação seja efetuada como um menor número de estágios. Entretanto, há um aumento no dispêndio exergético principalmente na corrente de vapor do refervedor e na irreversibilidade da operação, cuja consequência é o aumento do custo exergéticos dos produtos. Entende-se que os custos exergéticos devem, de alguma forma, ser atribuídos na formulação do custeio econômico operacional.

No segundo exemplo, baseado em uma planta térmica simplificada, verificou-se que combustíveis com menor número de carbono são capazes de fornecer a mesma disponibilidade de energia que combustíveis de cadeias maiores, com quantidade inferior de emissão de gás carbônico, uma vez que, possuem um processo de combustão menos irreversível.

De uma forma geral, verificou-se que os diagramas de exergia possibilitam visualizar o processo sob uma ótica diferente, evidenciando a destruição da disponibilidade de energia. Já os gráficos de irreversibilidades por operação ou processo unitário comparam quantitativamente as perdas de disponibilidade de energia em toda a planta industrial.

Verificou-se que a eficiência racional consegue descontar a exergia invariante. Uma vez que, em diversos projetos, a ordem de grandeza da irreversibilidade poderá ser bem inferior comparada a entrada de exergia no sistema. Desse modo, não há problema em se trabalhar com a escala completa de disponibilidade de energia.

Sabe-se que, processos reversíveis são intangíveis e inviáveis, o êxito da análise exergética se dá na atribuição de critérios de projeto capazes de alinhar a eficiência exergética à ecoeficiência, através de soluções economicamente viáveis.

Verificou-se, também, que o índice de sustentabilidade pode ser utilizado para projetos de *scale-up*. Ressaltou-se, entretanto, o fato do índice de sustentabilidade ser um parâmetro adimensional com característica intensiva, de modo que, plantas industriais de escalas maiores produzirão maior impacto ambiental com o mesmo índice de plantas menores.

Enfim, a análise exergética é útil ao projeto de processos, sendo capaz de concatenar eficiência e sustentabilidade. Através de critérios de projeto de operações ou processos unitários, é possível efetuar modificações capazes de melhorar a eficiência e reduzir seu impacto ambiental. O custo exergético contabiliza, portanto, o custo ambiental. A utilização deste parâmetro na formulação de custos econômicos pode ajudar a induzir a viabilidade de tecnologias sustentáveis.

CAPÍTULO VI

SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

VI - SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

- Aplicar as rotinas de eficiência e de custo implementadas no HYSYS®, em outros exemplos de projeto de operações unitárias.
- Avaliar o desempenho de sistemas de controle industriais, com válvulas de controle com perda de carga reduzida.
- Avaliar o projeto de trocadores de calor, mediante os critérios de disponibilidade apresentados, utilizando programas específicos como Aspen TASC® ou HTRI®.
- Implementar outro estado morto de referência e deixar como opção ao usuário.
- Implementar o cálculo do Índice de Sustentabilidade como variável do usuário nas operações unitárias do simulador.
- Simular processos criogênicos de separação de N_2 e CH_4, comparando, em termos de exergia, os processos com uma, duas e três colunas.
- Simular processos de captura de CO_2 usando membranas não isotérmicas.
- Utilizar os resultados da análise de disponibilidade em estudos de viabilidade técnica e econômica.

CAPÍTULO VII

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

VII -REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ANEEL. Atlas de energia elétrica do Brasil. 2 edição. ed. Brasília: ANEEL, 2005. Acesso em: 2012.

ANP. Regulamento Técnico n001/2000, Portaria n 009. [S.l.]. 2000.

ANP. Boletins Anuais de Reservas ANP/SDP. ANP. Rio de Janeiro. 2006.

Augusto, B. L.; Reis, Ranielly C.; Costa, Lidia O. O.; Noronha, Fábio B.; Colman, Rita C.; Mattos, Lisiane V. Desenvolvimento de catalisadores a base de Ni/CeGd com baixo teor de Ni para serem usados como anodos em células a combustível do tipo SOFC alimentadas com etanol. 16 CBCat - Congresso Brasileiro de Catálise. Campos do Jordão - SP: SBCat. 2011. p. 2126-2131.

Ausubel, J. H. Resources and Environment in the 21st Century: Seeing Past the Phantoms. World Energy Council Journal, Julho 1998. 8-16.

Baniasadi, E.; Naterer, D. G. F. Exergy and environmental impact assessment of solar photoreactors for catalytic hydrogen production. Chemical Engineering Journal, 2012. 213 (2012) 330–337.

BNDES. Bioetanol de cana-de-açúcar - Energia para o desenvolvimento sustentável. Rio de Janeiro. 2008.

Branan, C. Rules of Thumb for Chemical Engineers. 4a edição. ed. Burlington: Gulf Professional Publishing, 2005.

BRASIL, MINISTÉRIO DA AGRICULTURA. PNAR - Plano Nacional de Agroenergia 2006-2011. Brasília, DF. 2006.

BRASIL, MINISTÉRIO DE MINAS E ENERGIA. Matriz Energética Nacional 2030. Brasília: EPE, 2007.

BRASIL, MINISTÉRIO DE MINAS E ENERGIA. Plano Decenal de Expansão de Energia 2019. In: BRASIL, M. D. M. E. E. Plano Decenal de Expansão de Energia 2019. Brasília: EPE, v. 2, 2010.

Caldas, J. N.; Lacerda, A. I.; Veloso, E.; Paschoal, L. C. M. Internos de torres - pratos e recheios. 2ª edição. ed. Rio de Janeiro: Interciência, 2007.

Camargo, J. C. O etanol como fonte de hidrogênio para células a combustível. Campinas, SP: Unicamp, 2004.

CRANE CO. Flow of fluids through valves, fittings and pipe. Technical paper n 410, 1988.

Douglas, J. M. Conceptual Design of Chemical Processes. [S.l.]: McGraw-Hill International, 1988.

Abdollahi-Demneh, F.; Mohammad, A. M.; Mohammad, R. O.; Hossein, B. Calculating exergy in flowsheeting simulators: A HYSYS implementation. Energy, 23 Julho 2011. 36 5320-5327.

Ghannadzadeh, A.; Raphaele, T.; Olivier, B.; Philippe, B.; Pascal, F.; Xavier, J. General methodology for exergy balance in ProSimPlus process simulator. Energy, 10 Fevereiro 2012. in press.

Gharagheizi, F.; Mehrpooya, M. Prediction of standard chemical exergy by a three descriptors QSPR model. Energy conversion & management, 4 junho 2007. 2453-2460.

Green, M. A. Solar cell efficiency tables: version 16. Progress in Photovoltaics: Research and Ap-plications, p. p. 377-384, 2000.

HALDOR TOPSOE A/S. The Process Principles in sulphur recovery by the WSA process. Hydrocarbon engineering, 2007.

Hinderink, A. P.; Kerkhof, F. P. J. M.; Lie, A. B. K.; De Swaan Arons, J.; Van der Koo, H. J. Exergy analysis with a flowsheeting simulator. Chemical Engineering Science, 1996. 4693-4700.

HYDROCARBON PROCESSING. 2008 Refining Processes Handbook. Houston: Hydrocarbon Processing, 2008.

Keenan, J. H. Availbility and irreversibilities. Journal App Physics, 1951. 83-92.

Kern, D. Q. Processos de transferência de calor. 1. ed. [S.l.]: MCGRAW HILL BOOK COMPANY, INC., 1965.

Kotas, T. The exergy method of thermal plants analysis. London: Butterworths, 1985.

Lora, E. E. S.; Nascimento, M. A. R. Geração Termelétrica - Planejamento, Projeto e Operação. Rio de Janeiro: Interciência, 2004.

Ludwig, E. E. Applied process design for chemical and petrochemical plants. Houston: Gulf Publishing Company, 1999.

Manninen, J.; Zhu, X. X. Thermodynamic analysis and mathematical optimisation of power plants, UK, v. 22, p. S537-S544, 1998.

MASONEILAN. Masoneilan Control Valve Sizing Handbook. Dresser Industries. Stafford. 2000.

Mattos, E. E.; Falco, R. D. Bombas Industriais. 2ª edição. ed. Rio de Janeiro: Interciência, 1998.

Midilli, A.; Dincer, I. Development of some exergetic parameters for PEM fuel cells for measuring environmental impact and sustainability. International Journal for Hydrogen Energy, 2009. 34 3858 - 3872.

Montelongo-Luna, J. E. A. An exergy calculator tool. Asia-pacific journal of chemical engineering, 13 Setembro 2007. 431-437.

Mu, H.; Feng, X.; Chu, K. H. Calculation of emergy flows within complex chemical production systems. Ecological engineering, 26 Abril 2012. 44 88-93.

Norton, B. Enhancing the performance of building integrated photovoltaics. Solar Energy 85, p. 1629–1664, 2011.

Paulino, P. N. Fotorredução catalítica de CO2 para geração de produtos de alto teor energético. Rio de Janeiro: Dissertação (mestrado) – UFRJ/ COPPE/ Programa de Engenharia Química, 2011.

Perlingeiro, C. A. G. Engenharia de Processos. Rio de Janeiro: Edgard Blucher, 2005.

PETROBRAS. Destaques Operacionais - Produção Mensal de Óleo e Gás Natural - Brasil e Internacional. Petrobras.com.br, 2012. Disponivel em: <http://www.petrobras.com.br/>. Acesso em: 07/04/2012 abril 2012.

Prigogine, I. Steady states and entropy production. Physica 31, 1965. 719-724.

Querol, E.; Gonzalez-Regueral, B.; Ramos, A; Perez, Benedicto J. L.. Novel application for exergy and thermoeconomic analysis of processes simulated with Aspen Plus. Energy, 2011. 964-974.

Rant, Z. Exergy, a new word for technical avaiable work. Allg Warmetech, 1957. 25-32.

Rivero, R. Application of the exergy concept in the petroleum refining and petrochemical industry. Energy conversion & management, 2002. 1199-1220.

Rivero, R.; Koeijer, G. D. Entropy production and exergy loss in experimental distillation columns. Chemical engineering science, 2003. 58 1587 – 1597.

Rizk, J.; Nemer, M.; Clodic, D. A real column design exergy optimization of a cryogenic air separation unit. Energy, v. 37, p. 417 - 429, Dezembro 2011.

Rosen, M. A.; Dincer, I.; Kanoglu, M. Role of exergy in increasing efficiency and sustainability and reducing environmental impact. Energy Policy, 2008. 128–137.

Santana, E. I. S. D. Dissertação: Análise termodinâmica de uma coluna de fracionamento de petróleo. Campinas: Unicamp, 2004.

Schoonman, J. Sustainable energy conversion and storage. Stanford Center for Professional Education, 2010. Disponivel em: <www.stanford.edu>. Acesso em: 12/04/2012 abril 2012.

Sciubba, E. On the Second-Law inconsistency of Emergy Analysis. Energy 35, Junho 2010. 3696-3706.

Silla, H. Chemical Process Engineering - Design and Economics. 1ª edição. ed. New York: MARCEL DEKKER, INC, 2003.

Smith, J. M.; Van Ness, H. C. Introdução à Termodinâmica da Engenharia Química. 5ª. ed. São Paulo: LTC, 1987.

Som, S. K.; Datta, A. Thermodynamic irreversibilities and exergy balance in combustion processes. Progress in Energy and Combustion science, 2008. (34) 351–376.

Szargut, J.; Morris, D.; Steward, F. Exergy analysis of thermal, chemical, and metallurgical processes. Nova Iorque: Hemisphere Publishing Corporation, 1988.

Tilley, D. R. Dynamic accounting of emergy cycling. Ecological Modelling, 12 Setembro 2011. 222 3734– 3742.

UOP. Refining Flow Scheme. uop.com, 2011. Disponivel em: <http://www.uop.com/refining-flowscheme-2/>. Acesso em: 15/04/2012 abril 2012.

Valero, A.; Lozano, M. A. Theory of the Exergetic Cost. Energy Vol. 18, Janeiro 1993. 939-960.

Van Gool, W. Thermodynamics of chemical references for exergy analysis. Energy conversion and management, 1998. 1719-1728.

Walas, S. M. Chemical Process Equipment Selection and Design. 2 ed. ed. Boston: Butterworth-Heinemann, 2002.

Wei, Z.; Zhang, B.; Wu, S.; Chen, Q.; Tsatsaronis, G. Energy-use analysis and evaluation of distillation systems through avoidable exergy destruction and investment costs. Energy 42, Abril 2012. 424 e 433.

Zanchini, E.; Terlizzese, T. Molar exergy and flow exergy of pure chemical fuels. Energy, 13 junho 2009. 1246-1259.

Zargarzadeh, M.; Karimi, I. A.; Alfadala, H. Olexan: a tool for online exergy analysis. European symposium on computer-aided process engineering. Bucharest, Romenia: [s.n.]. 2007. p. CD-rom.

Zhang, G.; Long, W. A key review on emergy analysis and assessment of biomass resource for a sustainable future. Energy Policy, 21 Fevereiro 2010. 38 2948-2955.

ANEXO A

CÓDIGOS DAS VARIÁVEIS DO USUÁRIO E RESULTADOS NO HYSYS®

A.1 - TEMPERATURA AMBIENTE

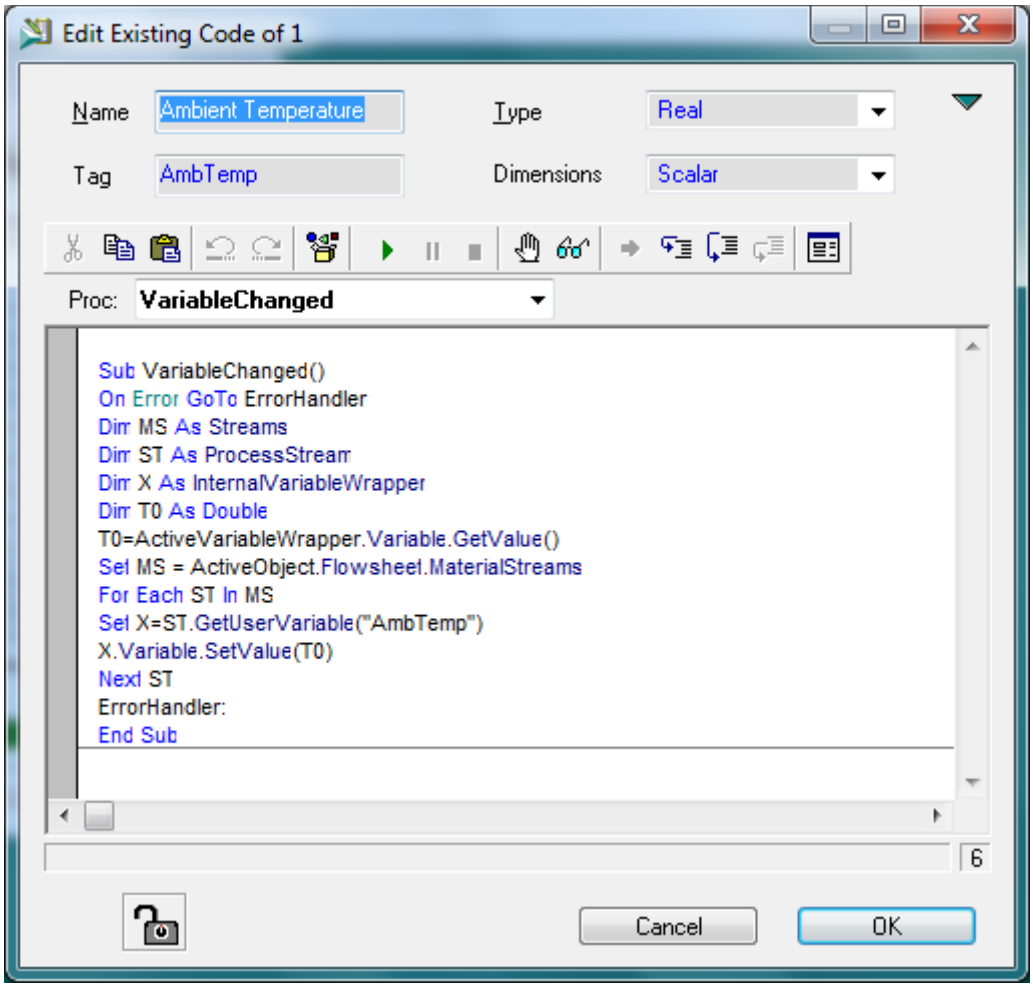


Figura A.1 – Código referente à variável do usuário temperatura ambiente.

A.2 - PRESSÃO AMBIENTE

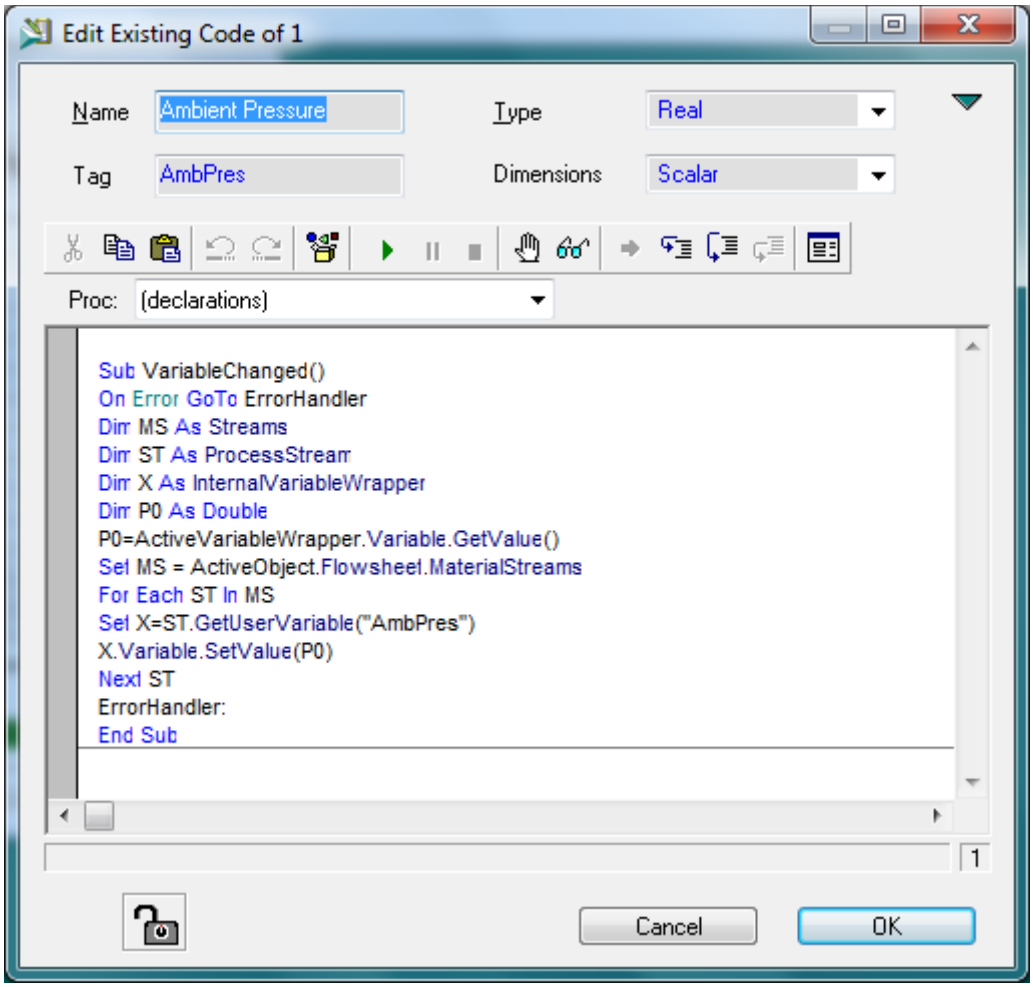


Figura A.2 – Código referente à variável do usuário pressão ambiente.

A.3 - PRESSÃO PARCIAL DE XENÔNIO / OXIGÊNIO / NEÔNIO / NITROGÊNIO / KRIPTÔNIO / HÉLIO / ÁGUA / ÓXIDO DE DEUTÉRIO / DIÓXIDO DE CARBONO / ARGÔNIO NO ESTADO MORTO DE REFERÊNCIA

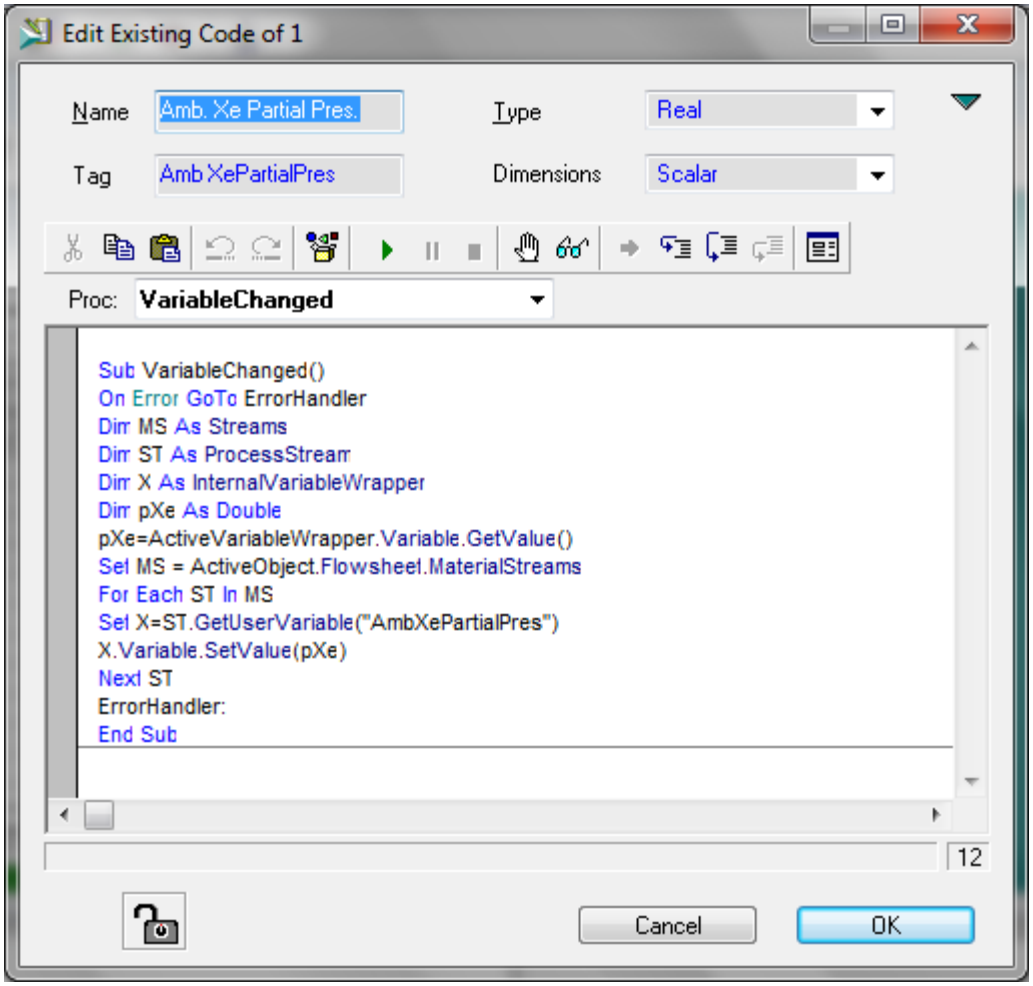


Figura A.3 – Código referente à variável do usuário pressão parcial de XENÔNIO / OXIGÊNIO / NEÔNIO / NITROGÊNIO / KRIPTÔNIO / HÉLIO / ÁGUA / ÓXIDO DE DEUTÉRIO / DIÓXIDO DE CARBONO / ARGÔNIO no estado morto de referência.

A.4 - EXERGIA FÍSICA EM UNIDADE DE POTÊNCIA

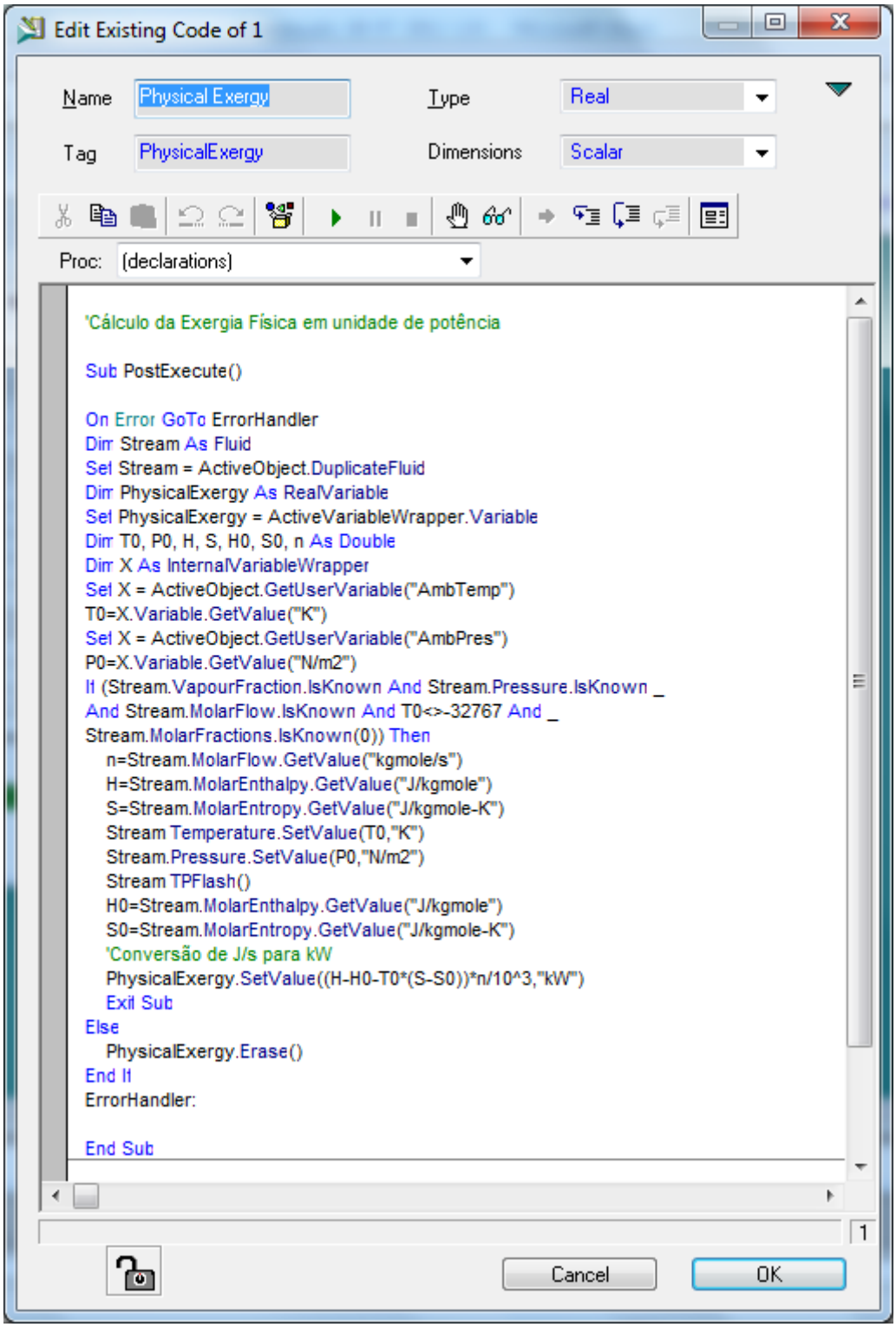
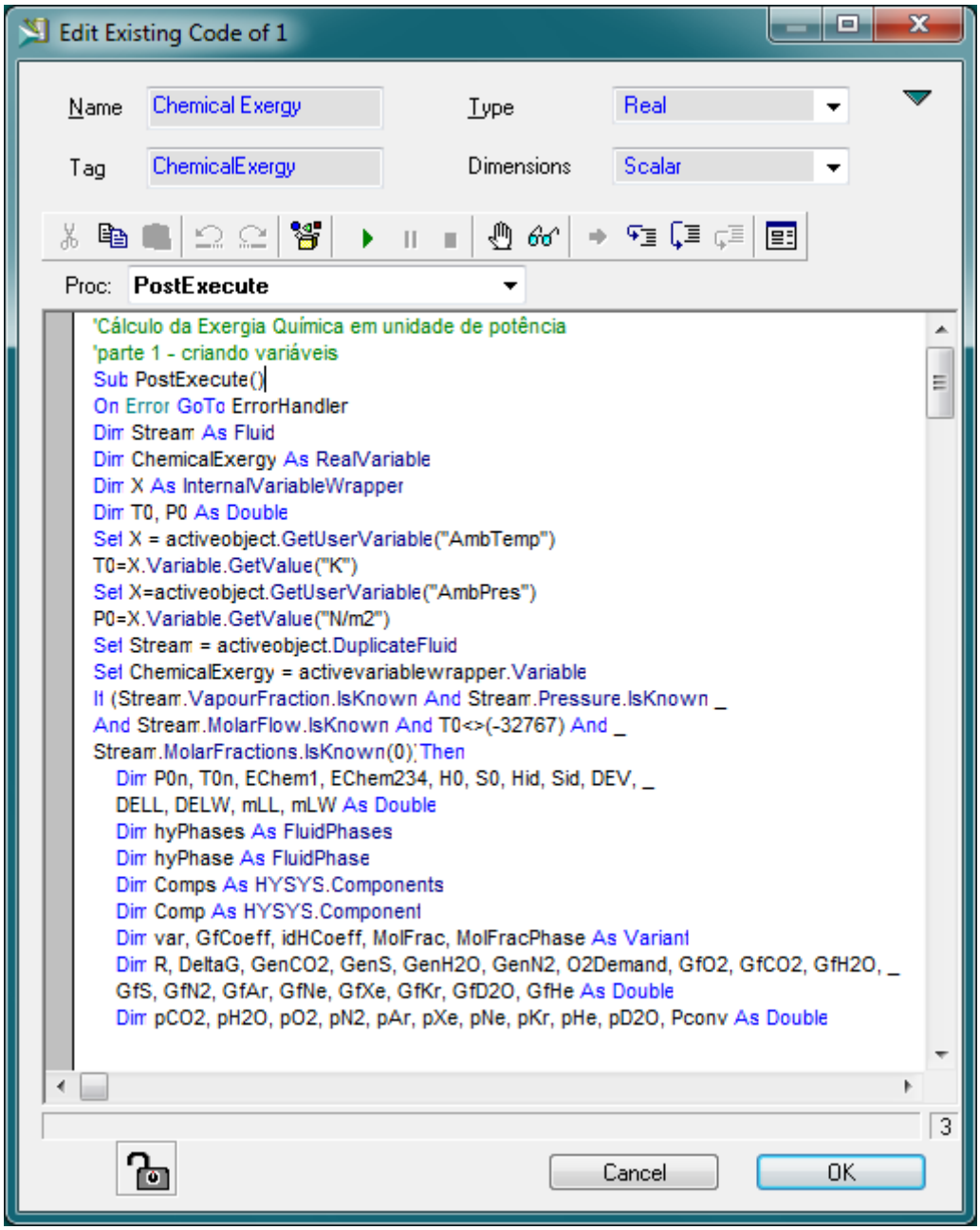
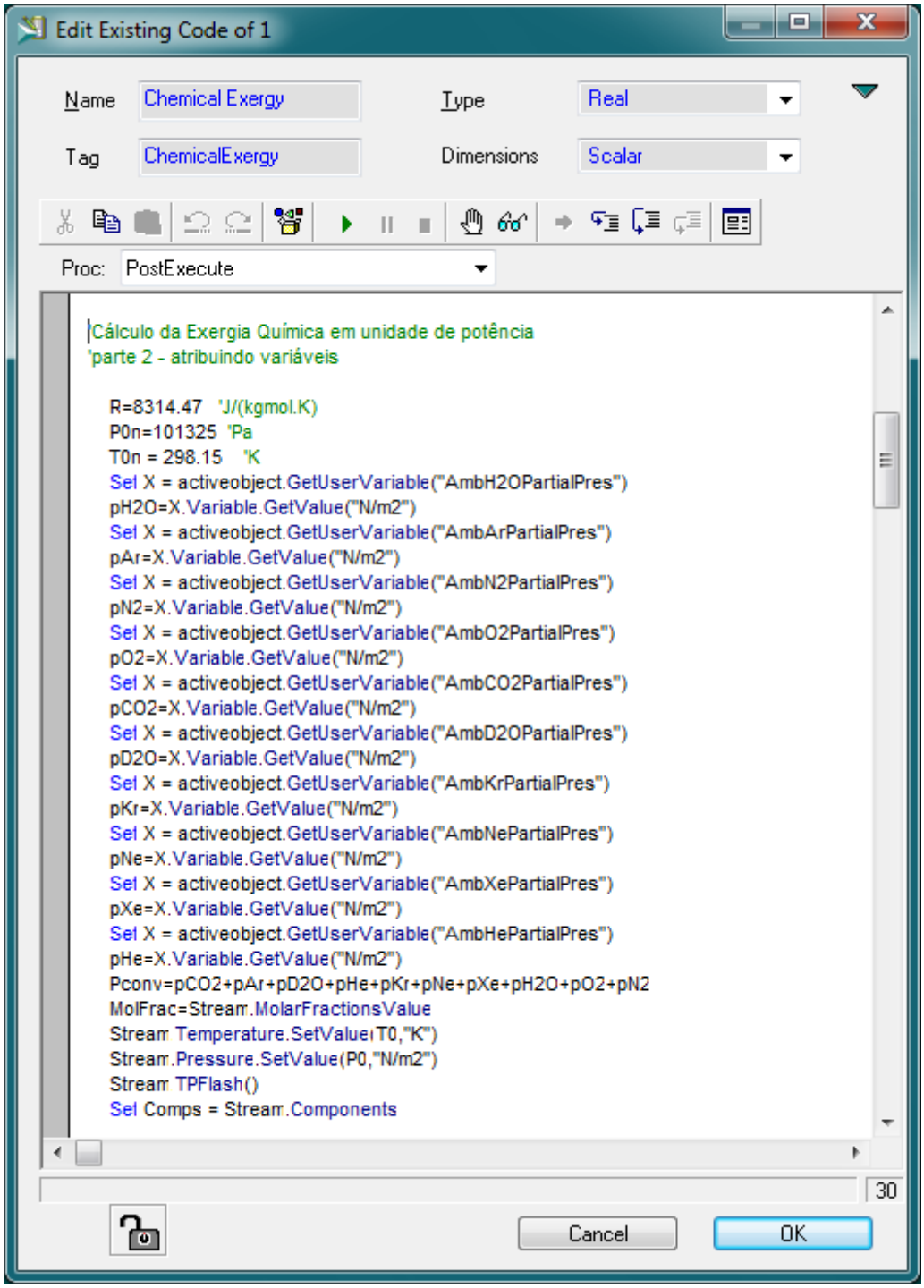


Figura A.4 – Código referente à variável do usuário exergia física em unidade de potência.

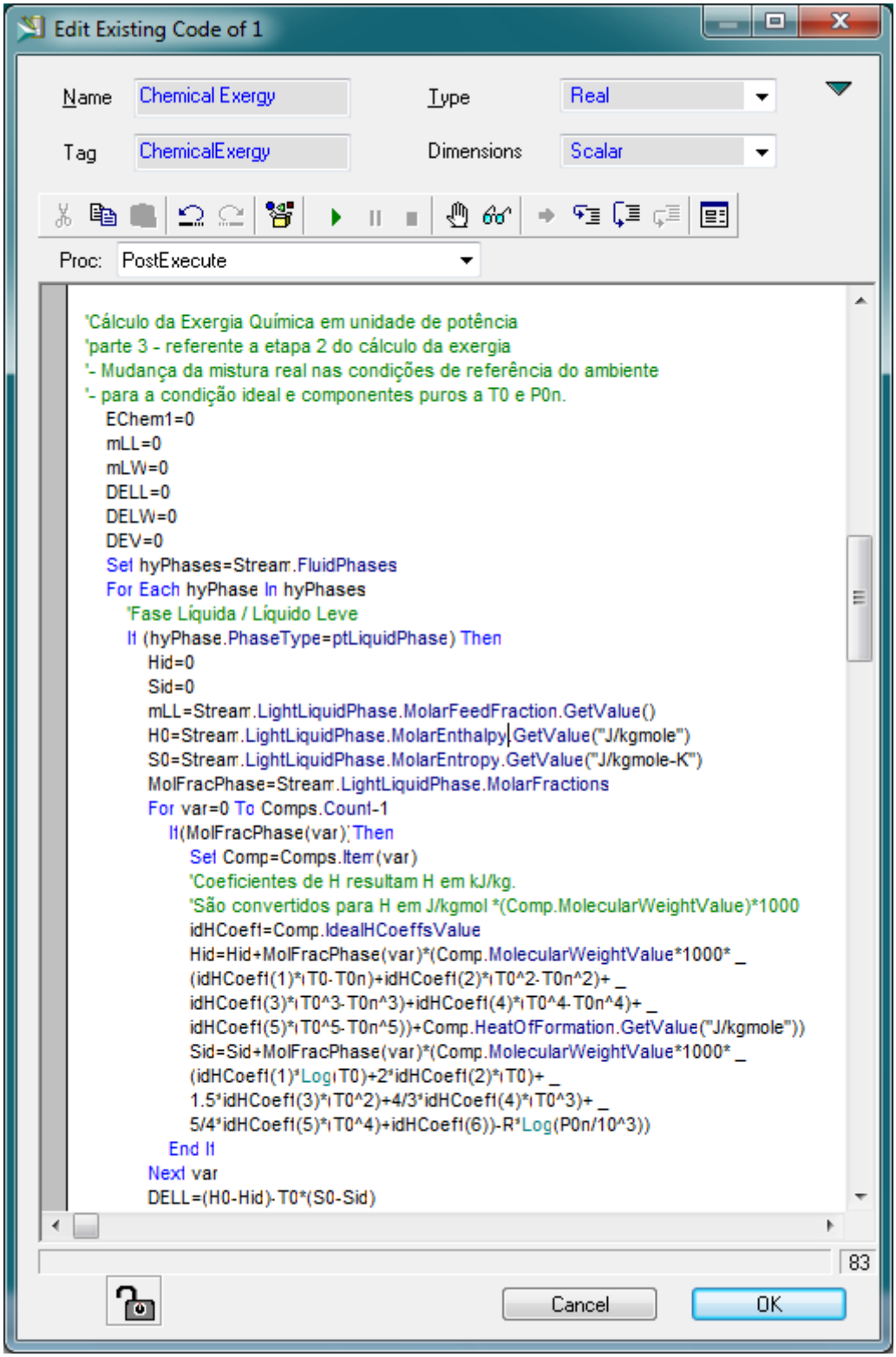
A.5 - EXERGIA QUÍMICA EM UNIDADE DE POTÊNCIA



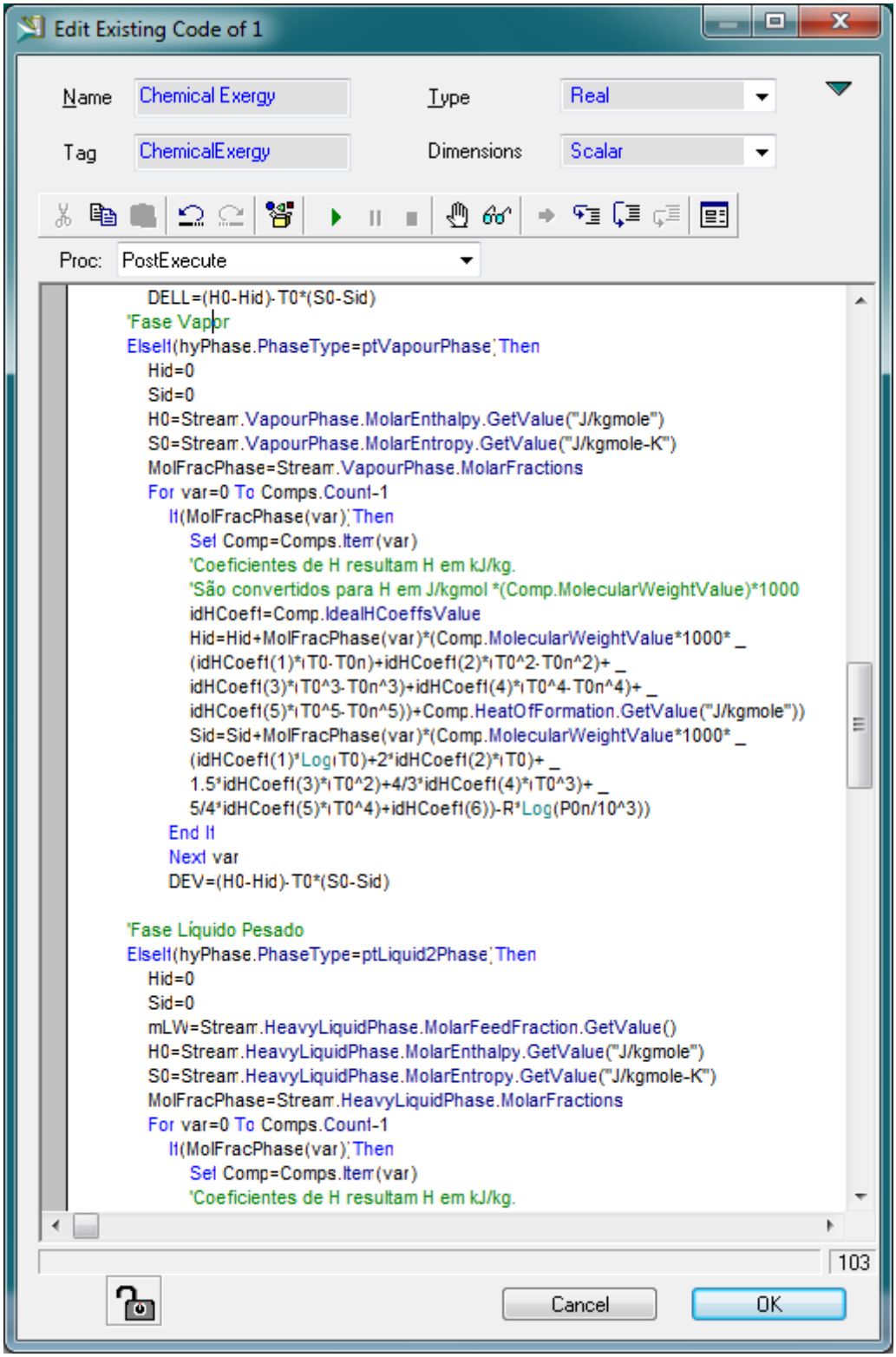
(a)


Edit Existing Code of 1
Name
Chemical Exergy
Type
Real
Tag
ChemicalExergy
Dimensions
Scalar
Proc:
PostExecute
'Cálculo da Exergia Química em unidade de potência
'parte 2 - atribuindo variáveis
R=8314.47 'J/(kgmol.K)
P0n=101325 'Pa
T0n = 298.15 'K
Set X = activeobject.GetUserVariable("AmbH2OPartialPres")
pH2O=X.Variable.GetValue("N/m2")
Set X = activeobject.GetUserVariable("AmbArPartialPres")
pAr=X.Variable.GetValue("N/m2")
Set X = activeobject.GetUserVariable("AmbN2PartialPres")
pN2=X.Variable.GetValue("N/m2")
Set X = activeobject.GetUserVariable("AmbO2PartialPres")
pO2=X.Variable.GetValue("N/m2")
Set X = activeobject.GetUserVariable("AmbCO2PartialPres")
pCO2=X.Variable.GetValue("N/m2")
Set X = activeobject.GetUserVariable("AmbD2OPartialPres")
pD2O=X.Variable.GetValue("N/m2")
Set X = activeobject.GetUserVariable("AmbKrPartialPres")
pKr=X.Variable.GetValue("N/m2")
Set X = activeobject.GetUserVariable("AmbNePartialPres")
pNe=X.Variable.GetValue("N/m2")
Set X = activeobject.GetUserVariable("AmbXePartialPres")
pXe=X.Variable.GetValue("N/m2")
Set X = activeobject.GetUserVariable("AmbHePartialPres")
pHe=X.Variable.GetValue("N/m2")
Pconv=pCO2+pAr+pD2O+pHe+pKr+pNe+pXe+pH2O+pO2+pN2
MolFrac=Stream.MolarFractionsValue
Stream.Temperature.SetValue(T0,"K")
Stream.Pressure.SetValue(P0,"N/m2")
Stream.TPFlash()
Set Comps = Stream.Components
30
Cancel
OK

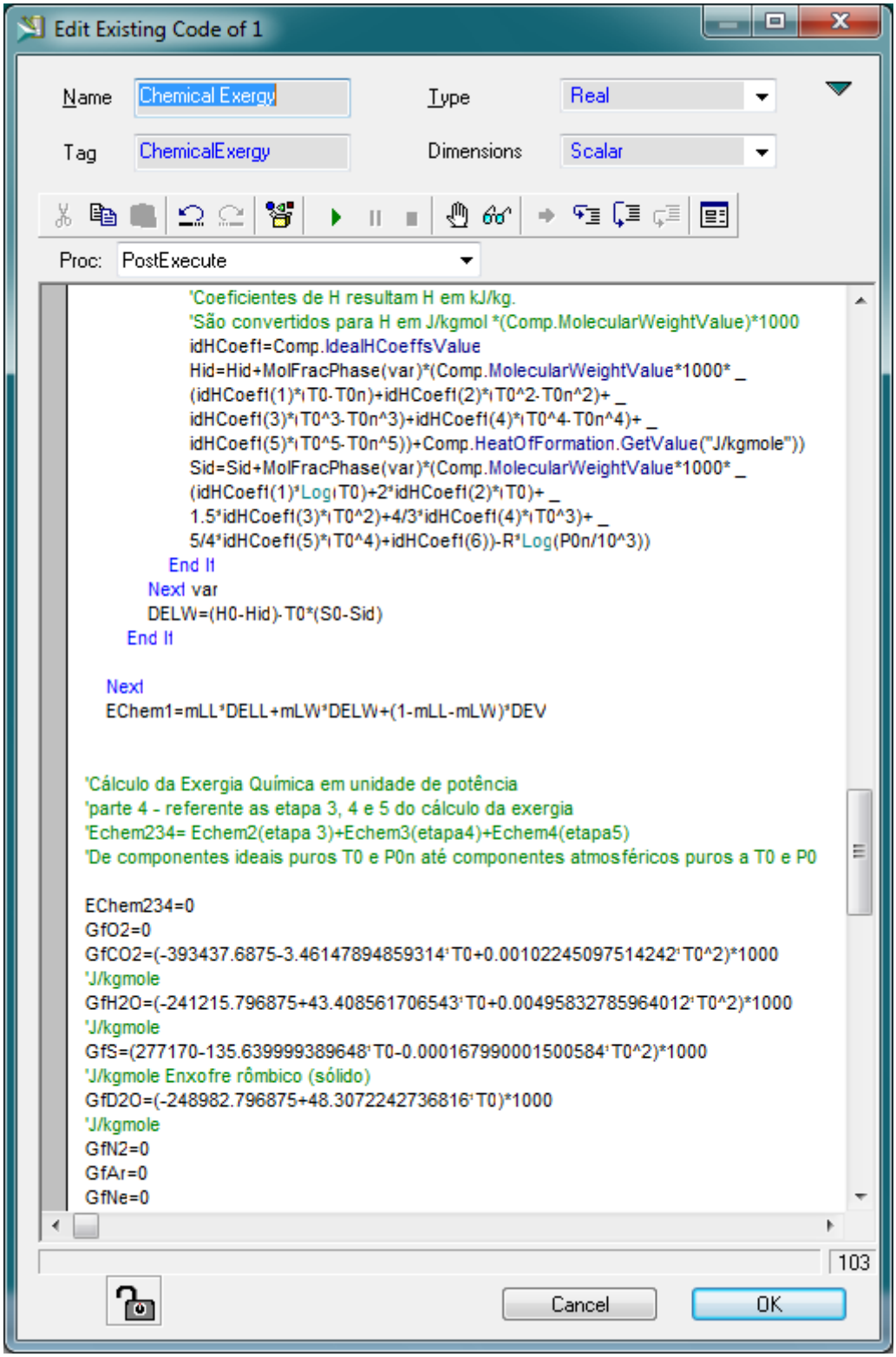
(b)


Edit Existing Code of 1
Name
Chemical Exergy
Type
Real
Tag
ChemicalExergy
Dimensions
Scalar
Proc:
PostExecute
'Cálculo da Exergia Química em unidade de potência
'parte 3 - referente a etapa 2 do cálculo da exergia
'- Mudança da mistura real nas condições de referência do ambiente
'- para a condição ideal e componentes puros a T0 e P0n.
EChem1=0
mLL=0
mLW=0
DELL=0
DELW=0
DEV=0
Set hyPhases=Stream.FluidPhases
For Each hyPhase In hyPhases
'Fase Líquida / Líquido Leve
If (hyPhase.PhaseType=ptLiquidPhase) Then
Hid=0
Sid=0
mLL=Stream.LightLiquidPhase.MolarFeedFraction.GetValue()
H0=Stream.LightLiquidPhase.MolarEnthalpy.GetValue("J/kgmole")
S0=Stream.LightLiquidPhase.MolarEntropy.GetValue("J/kgmole-K")
MolFracPhase=Stream.LightLiquidPhase.MolarFractions
For var=0 To Comps.Count-1
If(MolFracPhase(var)) Then
Set Comp=Comps.Item(var)
'Coeficientes de H resultam H em kJ/kg.
'São convertidos para H em J/kgmol *(Comp.MolecularWeightValue)*1000
idHCoef1=Comp.IdealHCoeffsValue
Hid=Hid+MolFracPhase(var)*(Comp.MolecularWeightValue*1000* _
(idHCoef1(1)*(T0-T0n)+idHCoef1(2)*(T0^2-T0n^2)+ _
idHCoef1(3)*(T0^3-T0n^3)+idHCoef1(4)*(T0^4-T0n^4)+ _
idHCoef1(5)*(T0^5-T0n^5))+Comp.HeatOfFormation.GetValue("J/kgmole"))
Sid=Sid+MolFracPhase(var)*(Comp.MolecularWeightValue*1000* _
(idHCoef1(1)*Log(T0)+2*idHCoef1(2)*(T0)+ _
1.5*idHCoef1(3)*(T0^2)+4/3*idHCoef1(4)*(T0^3)+ _
5/4*idHCoef1(5)*(T0^4)+idHCoef1(6))-R*Log(P0n/10^3))
End If
Next var
DELL=(H0-Hid)-T0*(S0-Sid)
83
Cancel
OK

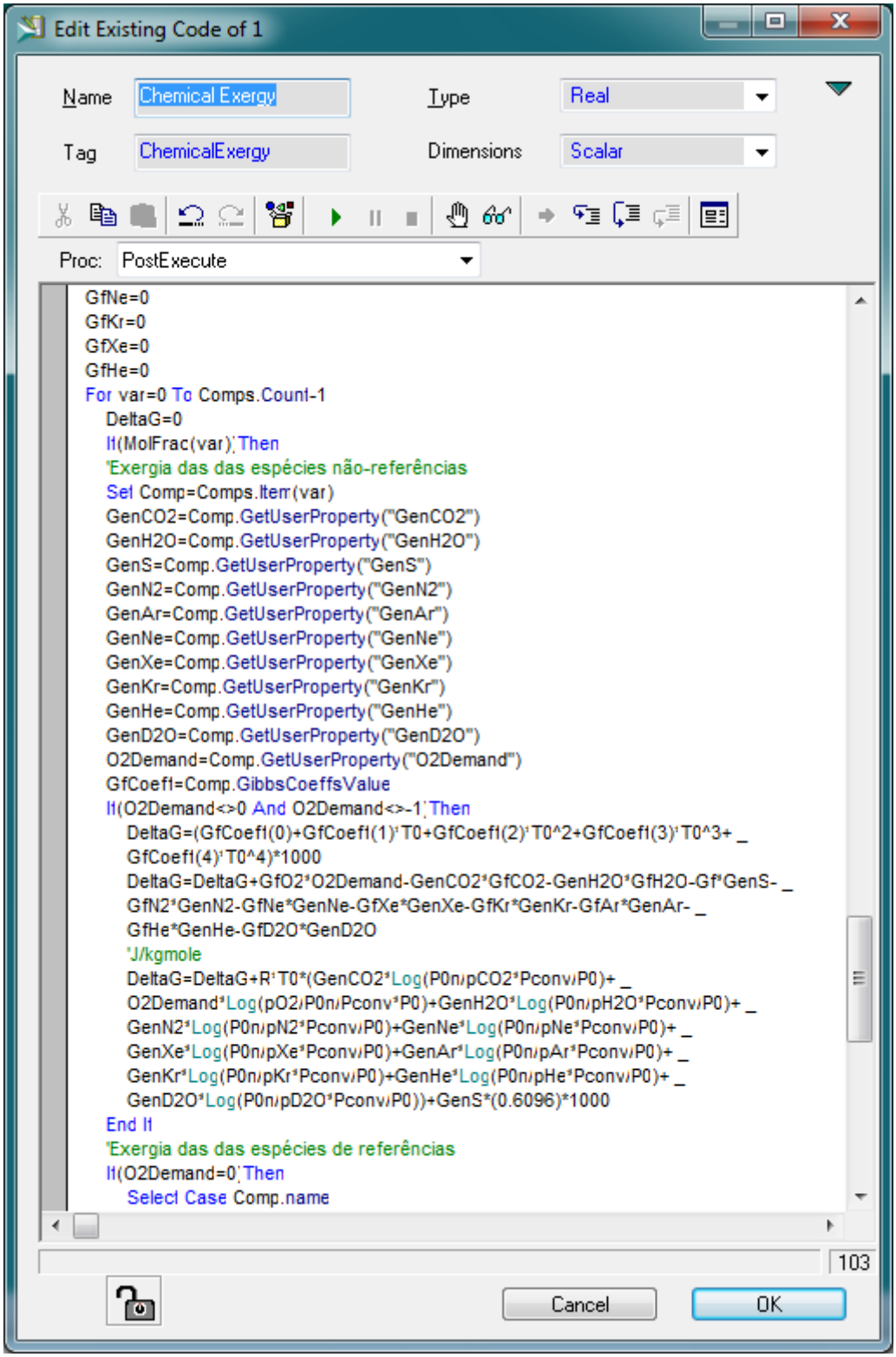
(c)


Edit Existing Code of 1
Name
Chemical Exergy
Type
Real
Tag
ChemicalExergy
Dimensions
Scalar
Proc:
PostExecute
DELL=(H0-Hid)-T0*(S0-Sid)
'Fase Vapor
ElseIf(hyPhase.PhaseType=ptVapourPhase) Then
Hid=0
Sid=0
H0=Stream.VapourPhase.MolarEnthalpy.GetValue("J/kgmole")
S0=Stream.VapourPhase.MolarEntropy.GetValue("J/kgmole-K")
MolFracPhase=Stream.VapourPhase.MolarFractions
For var=0 To Comps.Count-1
If(MolFracPhase(var)) Then
Set Comp=Comps.Item(var)
'Coeficientes de H resultam H em kJ/kg.
'São convertidos para H em J/kgmol *(Comp.MolecularWeightValue)*1000
idHCoef1=Comp.IdealHCoeffsValue
Hid=Hid+MolFracPhase(var)*(Comp.MolecularWeightValue*1000* _
(idHCoef1(1)*(T0-T0n)+idHCoef1(2)*(T0^2-T0n^2)+ _
idHCoef1(3)*(T0^3-T0n^3)+idHCoef1(4)*(T0^4-T0n^4)+ _
idHCoef1(5)*(T0^5-T0n^5))+Comp.HeatOfFormation.GetValue("J/kgmole"))
Sid=Sid+MolFracPhase(var)*(Comp.MolecularWeightValue*1000* _
(idHCoef1(1)*Log(T0)+2*idHCoef1(2)*(T0)+ _
1.5*idHCoef1(3)*(T0^2)+4/3*idHCoef1(4)*(T0^3)+ _
5/4*idHCoef1(5)*(T0^4)+idHCoef1(6))-R*Log(P0n/10^3))
End If
Next var
DEV=(H0-Hid)-T0*(S0-Sid)
'Fase Líquido Pesado
ElseIf(hyPhase.PhaseType=ptLiquid2Phase) Then
Hid=0
Sid=0
mLW=Stream.HeavyLiquidPhase.MolarFeedFraction.GetValue()
H0=Stream.HeavyLiquidPhase.MolarEnthalpy.GetValue("J/kgmole")
S0=Stream.HeavyLiquidPhase.MolarEntropy.GetValue("J/kgmole-K")
MolFracPhase=Stream.HeavyLiquidPhase.MolarFractions
For var=0 To Comps.Count-1
If(MolFracPhase(var)) Then
Set Comp=Comps.Item(var)
'Coeficientes de H resultam H em kJ/kg.
103
Cancel
OK

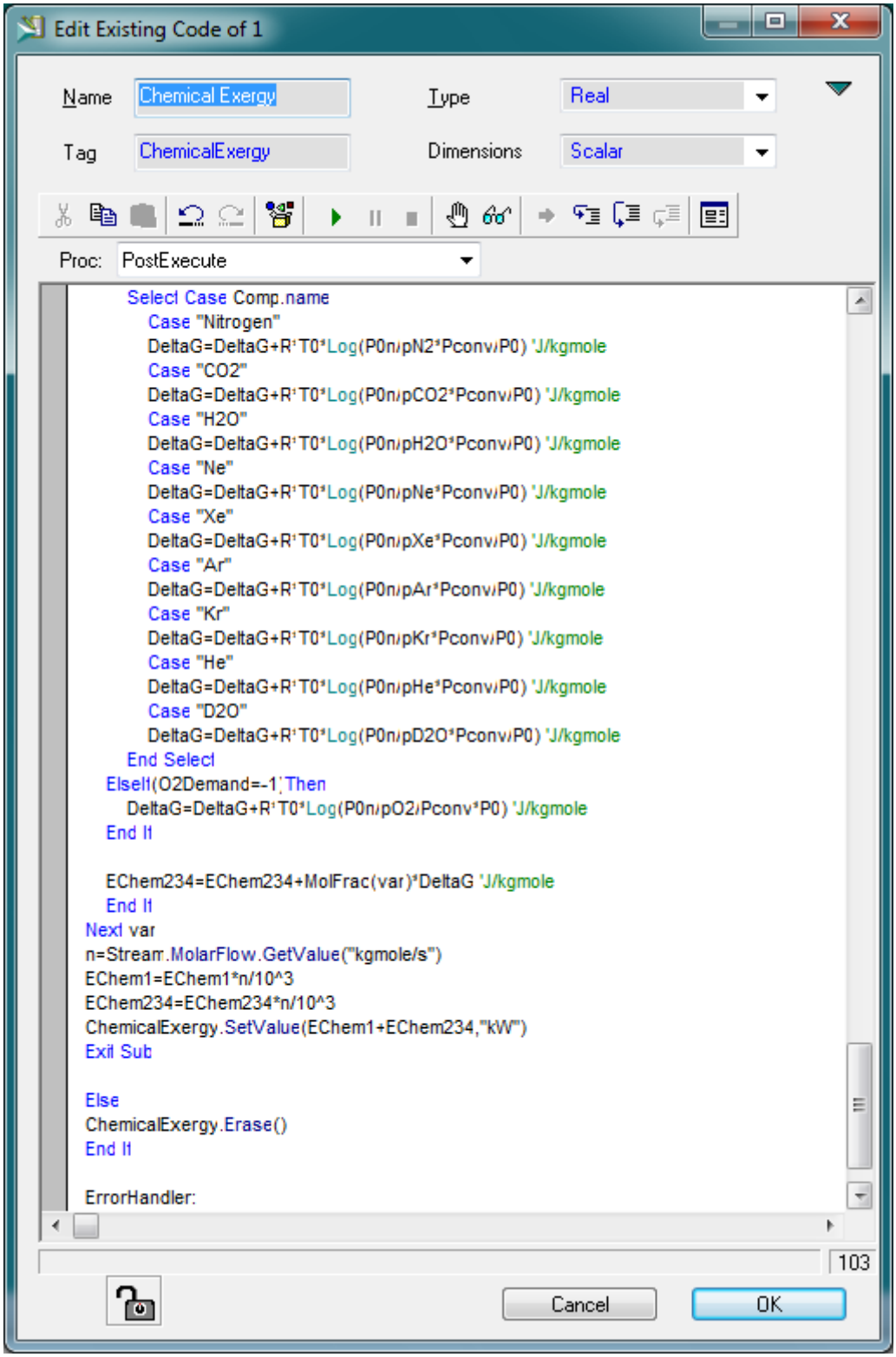
(d)


Edit Existing Code of 1
Name
Chemical Exergy
Type
Real
Tag
ChemicalExergy
Dimensions
Scalar
Proc:
PostExecute
'Coeficientes de H resultam H em kJ/kg.
'São convertidos para H em J/kgmol *(Comp.MolecularWeightValue)*1000
idHCoef1=Comp.IdealHCoeffsValue
Hid=Hid+MolFracPhase(var)*(Comp.MolecularWeightValue*1000* _
(idHCoef1(1)*T0-T0n)+idHCoef1(2)*T0^2-T0n^2)+ _
idHCoef1(3)*T0^3-T0n^3)+idHCoef1(4)*T0^4-T0n^4)+ _
idHCoef1(5)*T0^5-T0n^5))+Comp.HeatOfFormation.GetValue("J/kgmole"))
Sid=Sid+MolFracPhase(var)*(Comp.MolecularWeightValue*1000* _
(idHCoef1(1)*Log(T0)+2*idHCoef1(2)*T0)+ _
1.5*idHCoef1(3)*T0^2)+4/3*idHCoef1(4)*T0^3)+ _
5/4*idHCoef1(5)*T0^4)+idHCoef1(6))-R*Log(P0n/10^3))
End If
Next var
DELW=(H0-Hid)-T0*(S0-Sid)
End If
Next
EChem1=mLL*DELL+mLW*DELW+(1-mLL-mLW)*DEV
'Cálculo da Exergia Química em unidade de potência
'parte 4 - referente as etapa 3, 4 e 5 do cálculo da exergia
'Echem234= Echem2(etapa 3)+Echem3(etapa4)+Echem4(etapa5)
'De componentes ideais puros T0 e P0n até componentes atmosféricos puros a T0 e P0
EChem234=0
GfO2=0
GfCO2=(-393437.6875-3.46147894859314*T0+0.00102245097514242*T0^2)*1000
'J/kgmole
GfH2O=(-241215.796875+43.408561706543*T0+0.00495832785964012*T0^2)*1000
'J/kgmole
GfS=(277170-135.639999389648*T0-0.000167990001500584*T0^2)*1000
'J/kgmole Enxofre rômbico (sólido)
GfD2O=(-248982.796875+48.3072242736816*T0)*1000
'J/kgmole
GfN2=0
GfAr=0
GfNe=0
103
Cancel
OK

(e)


Edit Existing Code of 1
Name
Chemical Exergy
Type
Real
Tag
ChemicalExergy
Dimensions
Scalar
Proc:
PostExecute
GfNe=0
GfKr=0
GfXe=0
GfHe=0
For var=0 To Comps.Count-1
DeltaG=0
If(MolFrac(var)' Then
'Exergia das das espécies não-referências
Set Comp=Comps.Item(var)
GenCO2=Comp.GetUserProperty("GenCO2")
GenH2O=Comp.GetUserProperty("GenH2O")
GenS=Comp.GetUserProperty("GenS")
GenN2=Comp.GetUserProperty("GenN2")
GenAr=Comp.GetUserProperty("GenAr")
GenNe=Comp.GetUserProperty("GenNe")
GenXe=Comp.GetUserProperty("GenXe")
GenKr=Comp.GetUserProperty("GenKr")
GenHe=Comp.GetUserProperty("GenHe")
GenD2O=Comp.GetUserProperty("GenD2O")
O2Demand=Comp.GetUserProperty("O2Demand")
GfCoef1=Comp.GibbsCoeffsValue
If(O2Demand<>0 And O2Demand<>-1' Then
DeltaG=(GfCoef1(0)+GfCoef1(1)*T0+GfCoef1(2)*T0^2+GfCoef1(3)*T0^3+ _
GfCoef1(4)*T0^4)*1000
DeltaG=DeltaG+GfO2*O2Demand-GenCO2*GfCO2-GenH2O*GfH2O-Gf*GenS- _
GfN2*GenN2-GfNe*GenNe-GfXe*GenXe-GfKr*GenKr-GfAr*GenAr- _
GfHe*GenHe-GfD2O*GenD2O
'J/kgmole
DeltaG=DeltaG+R*T0*(GenCO2*Log(P0n/pCO2*Pconv/P0)+ _
O2Demand*Log(pO2/P0n/Pconv*P0)+GenH2O*Log(P0n/pH2O*Pconv/P0)+ _
GenN2*Log(P0n/pN2*Pconv/P0)+GenNe*Log(P0n/pNe*Pconv/P0)+ _
GenXe*Log(P0n/pXe*Pconv/P0)+GenAr*Log(P0n/pAr*Pconv/P0)+ _
GenKr*Log(P0n/pKr*Pconv/P0)+GenHe*Log(P0n/pHe*Pconv/P0)+ _
GenD2O*Log(P0n/pD2O*Pconv/P0))+GenS*(0.6096)*1000
End If
'Exergia das das espécies de referências
If(O2Demand=0' Then
Select Case Comp.name
103
Cancel
OK

(f)



(g)

Figura A.5 – de (a) até (g) Código referente à variável do usuário exergia química em unidade de potência.

A.6 - EXERGIA EM UNIDADE DE POTÊNCIA

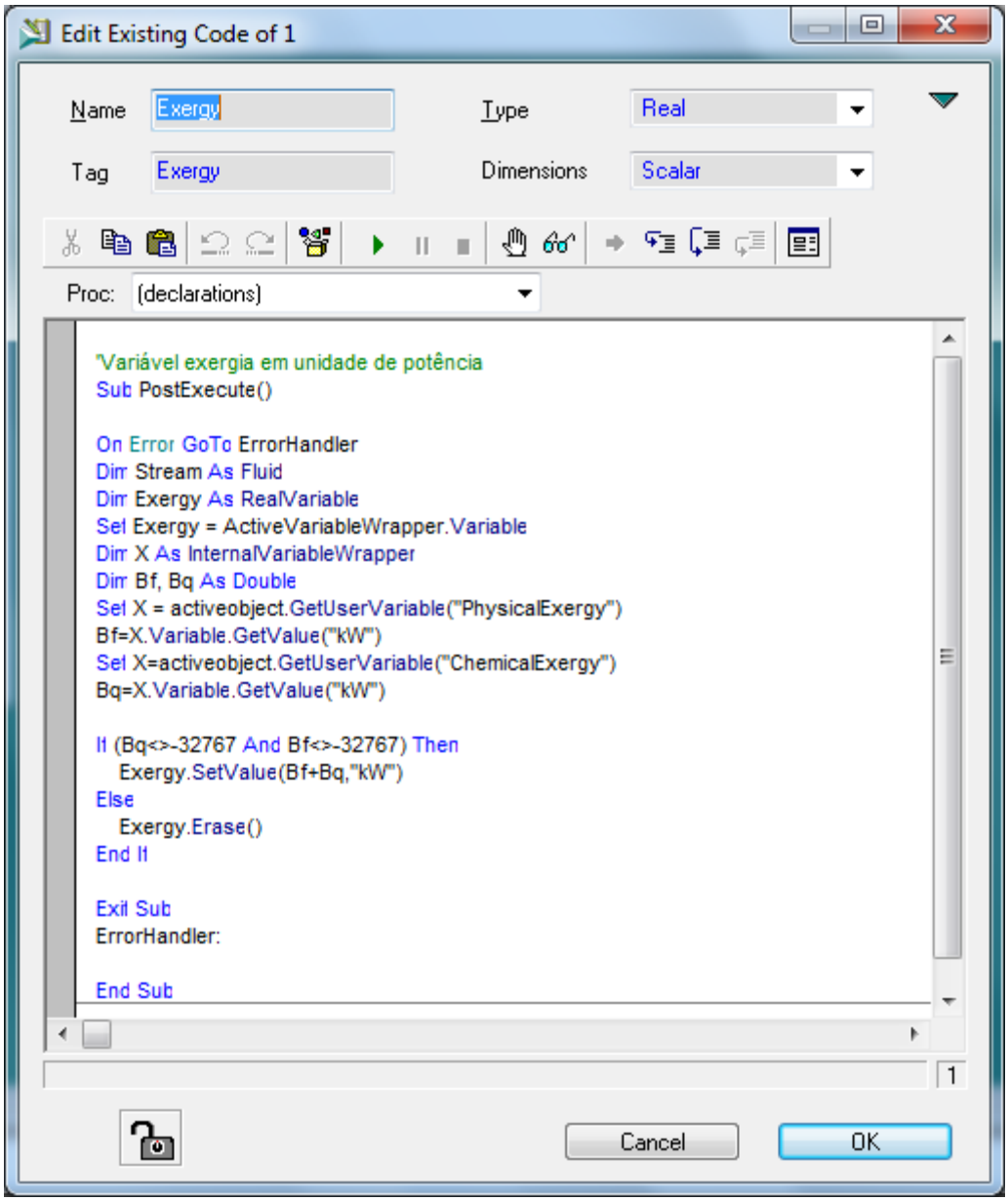
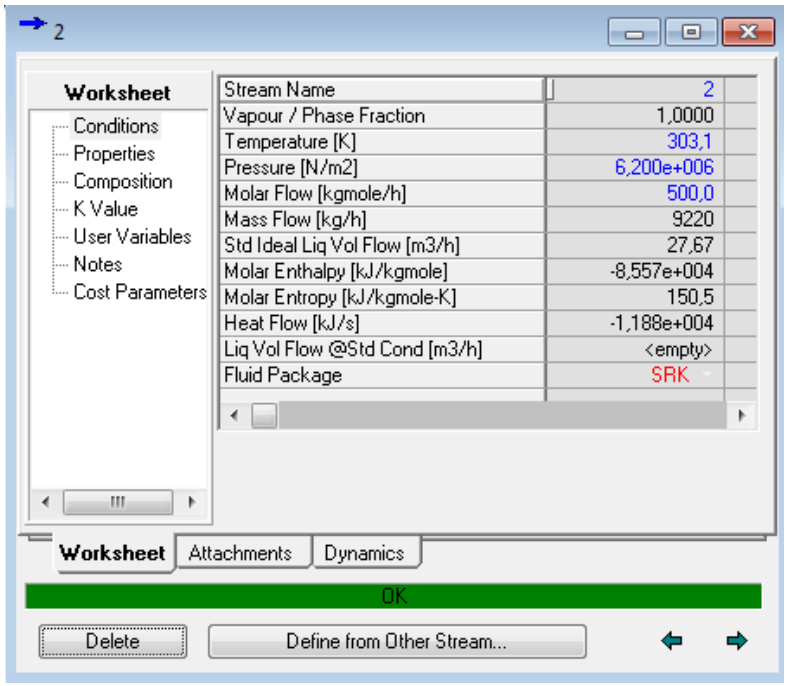
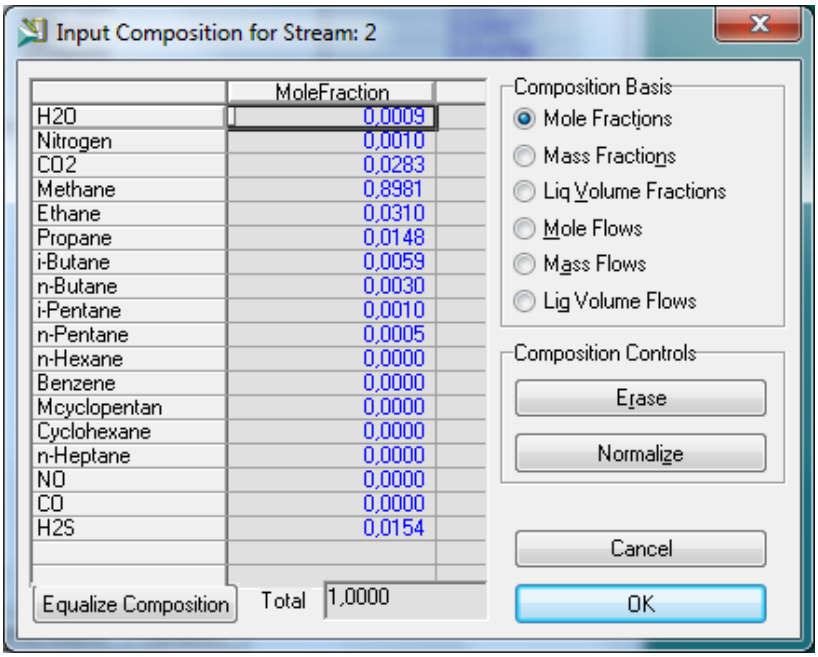


Figura A.6 – Código referente à variável do usuário exergia em unidade de potência.

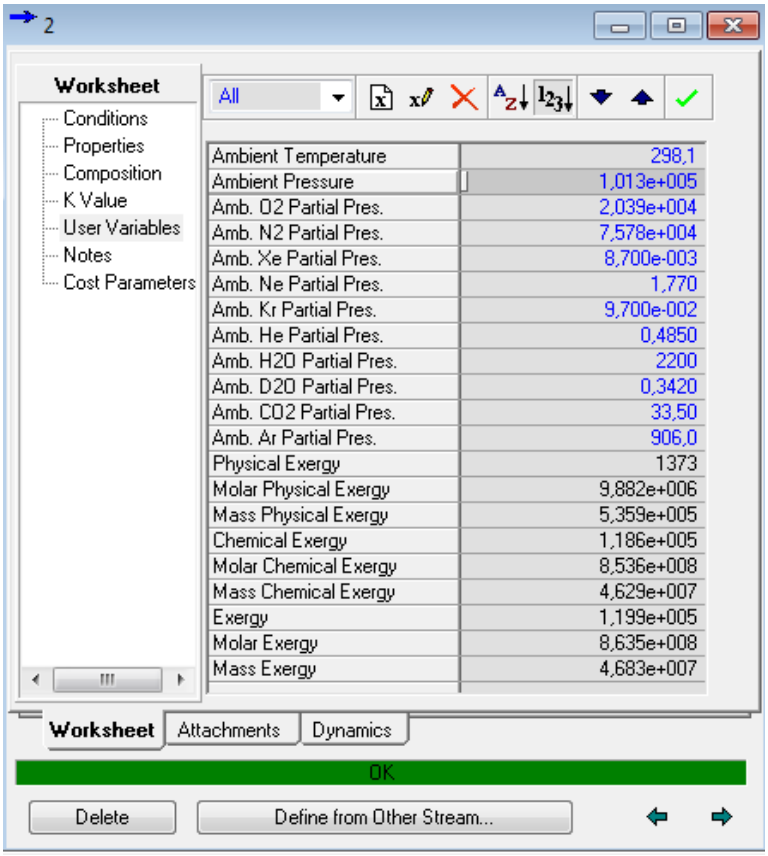
A.7 - EXEMPLO VARIÁVEIS DO USUÁRIO EM CORRENTES DE PROCESSO



(a)



(b)



(c)

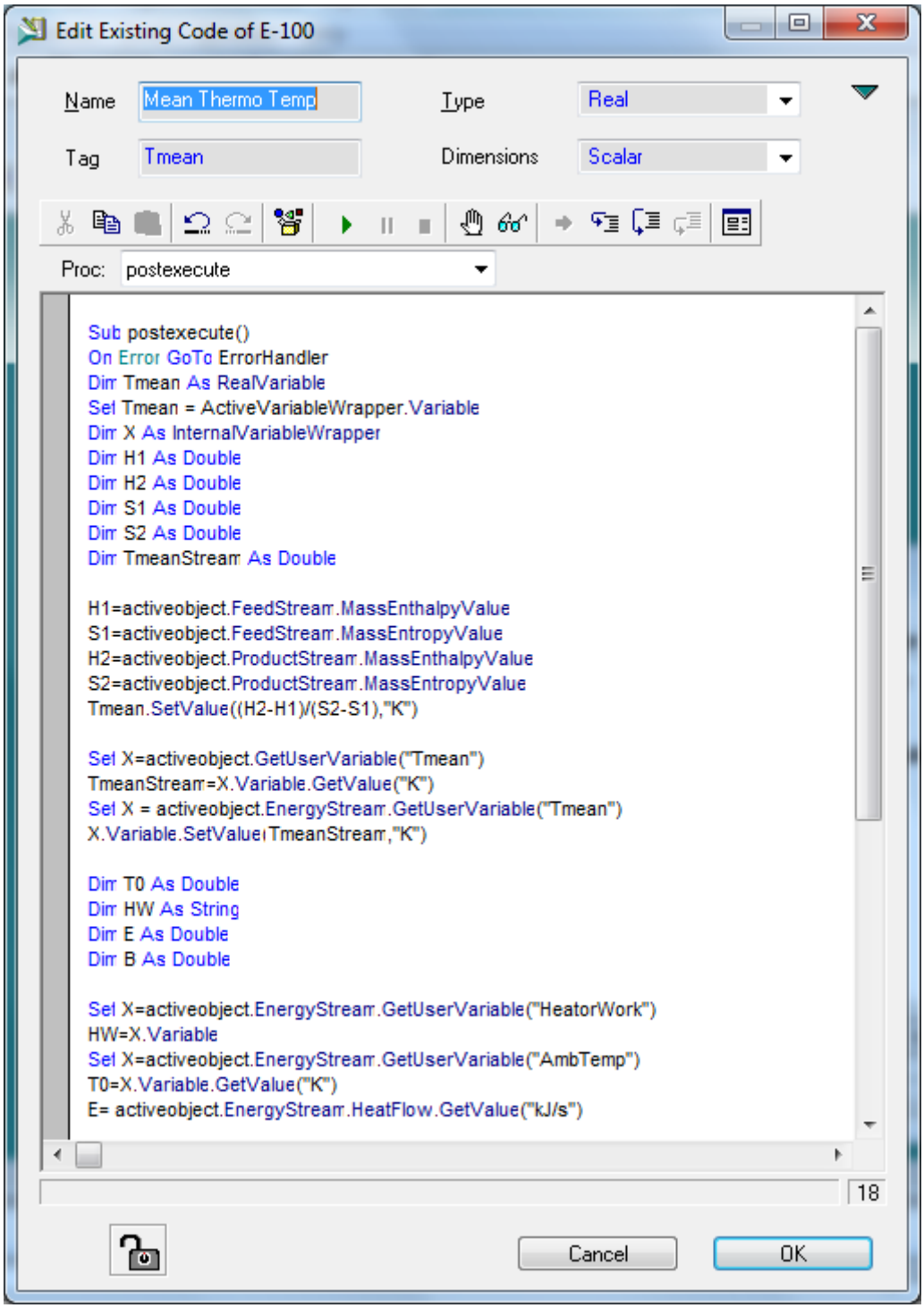
Modelo Termodinâmico: SRK

Unidades:

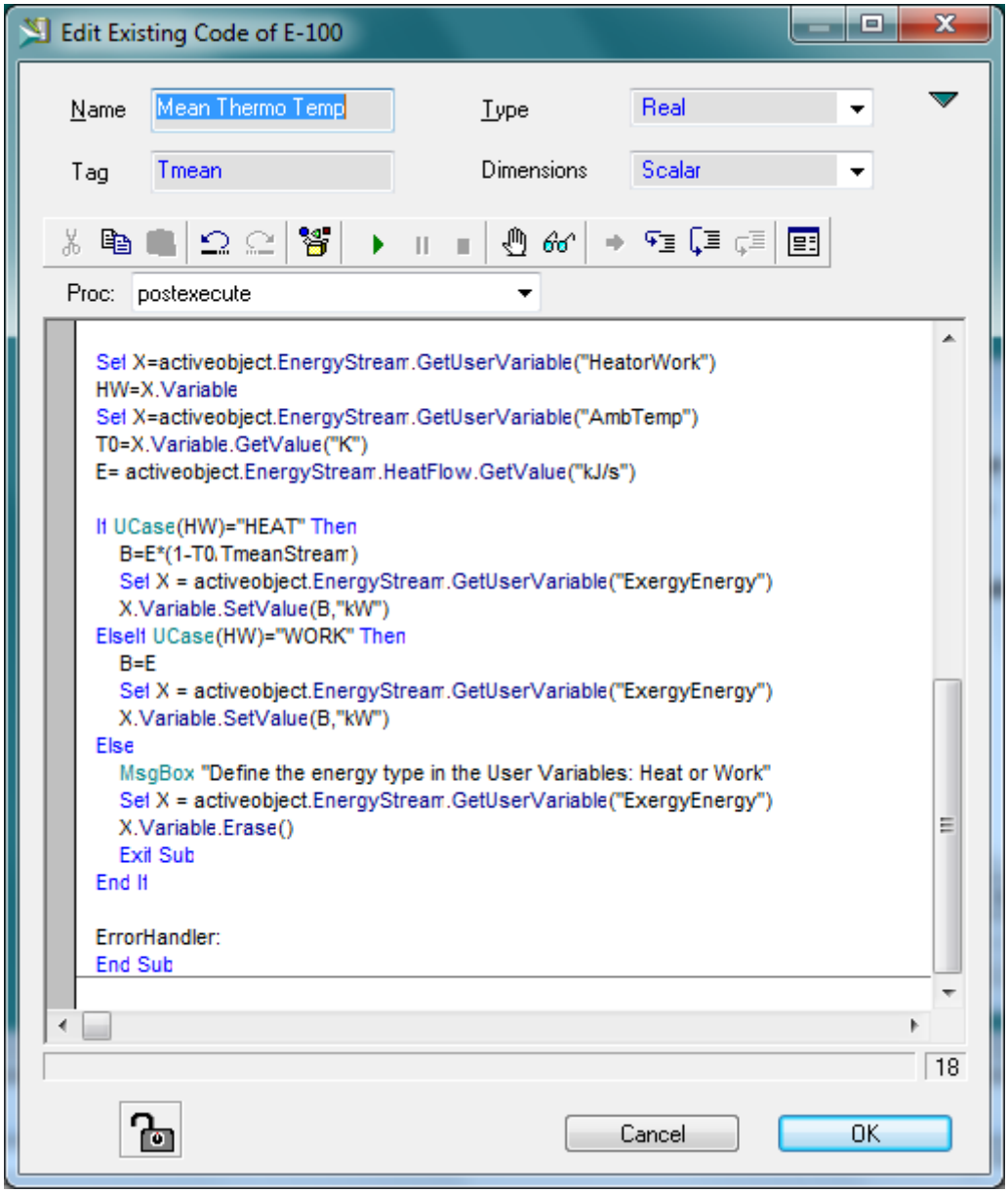
Temperatura: K; Pressão: Pa; Exergia: kW; Exergia molar: J/kgmol; Exergia mássica: J/kg

Figura A.7 – De (a) até (c) Janelas contendo temperatura, pressão, vazão e composição e variáveis do usuário de uma corrente material.

A.8 – TEMPERATURA MÉDIA TERMODINÂMICA



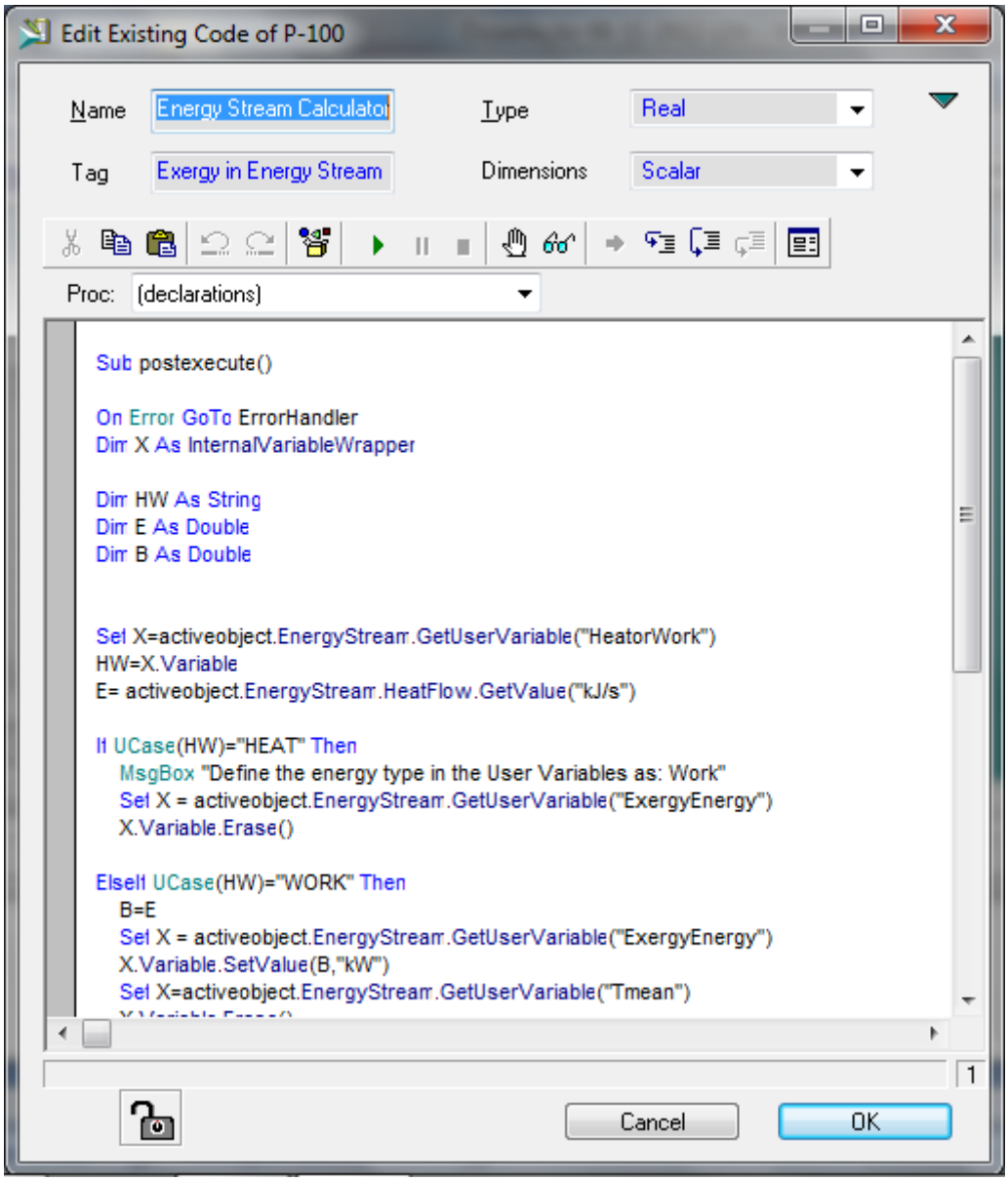
(a)



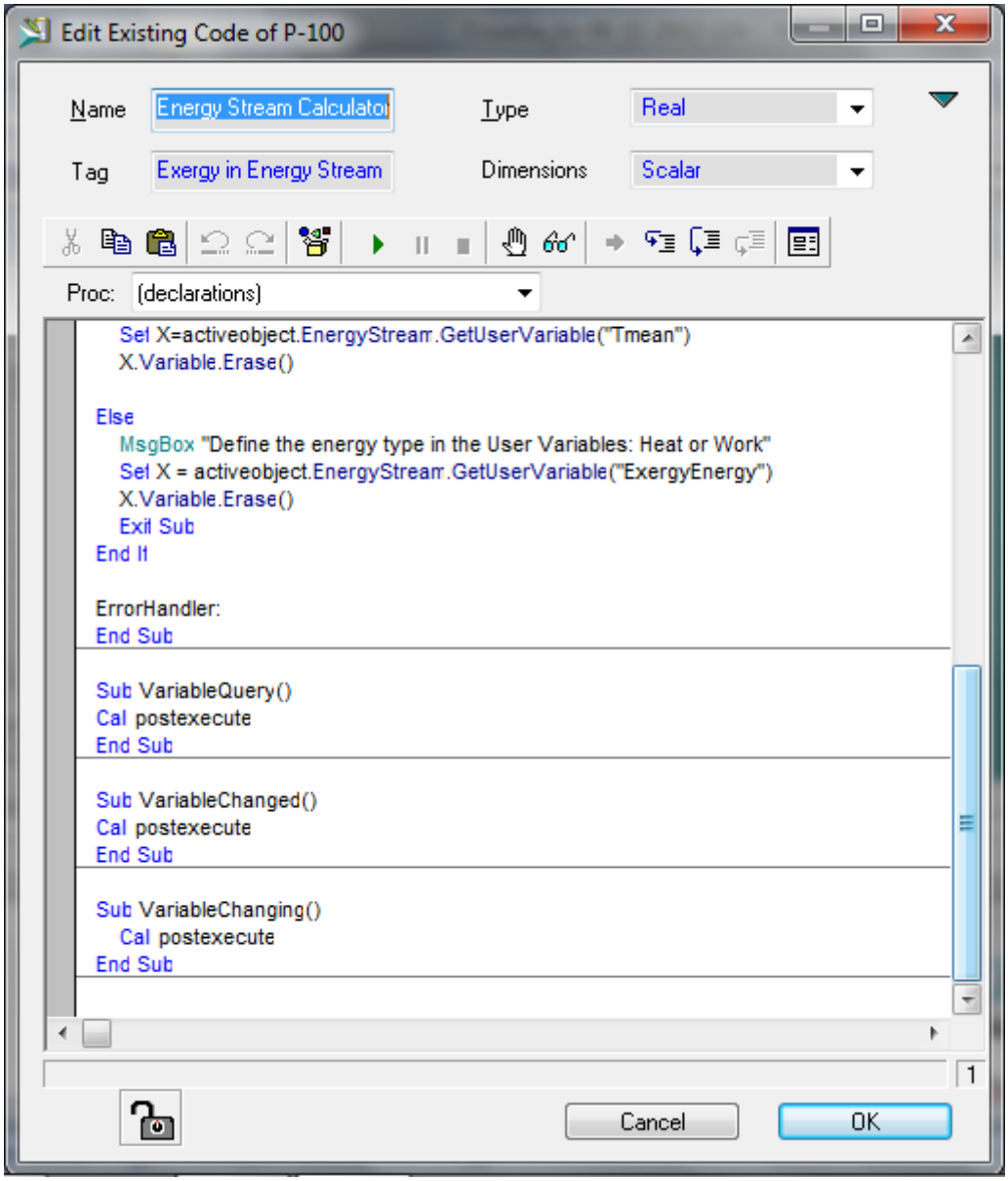
(b)

Figura A.8 – (a) e (b) Código referente à variável do usuário Temperatura Média Termodinâmica. Esta variável também identifica o tipo de corrente de energia em questão, calcula e atribui o valor da Exergia contida na corrente de energia. (utilizada em trocadores de calor)

A.9 – EXERGIA DE UMA CORRENTE DE ENERGIA



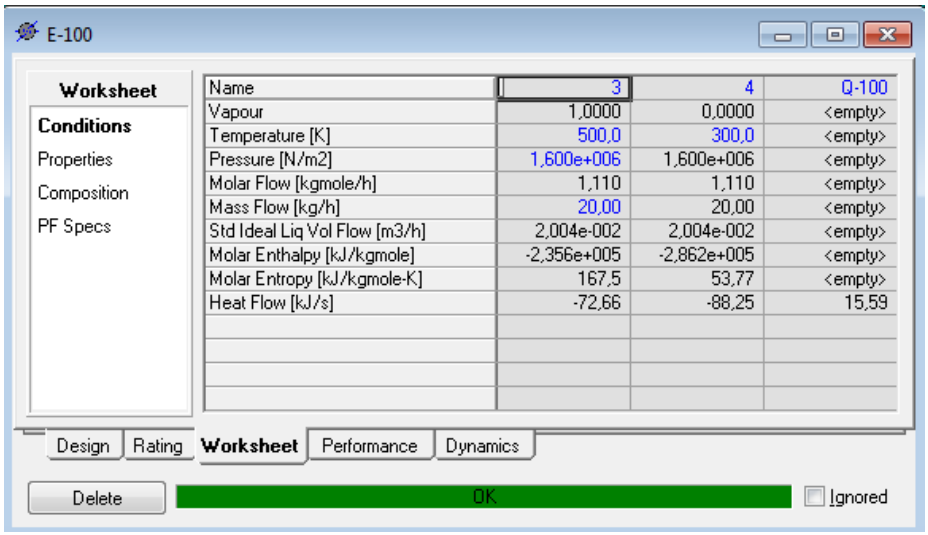
(a)



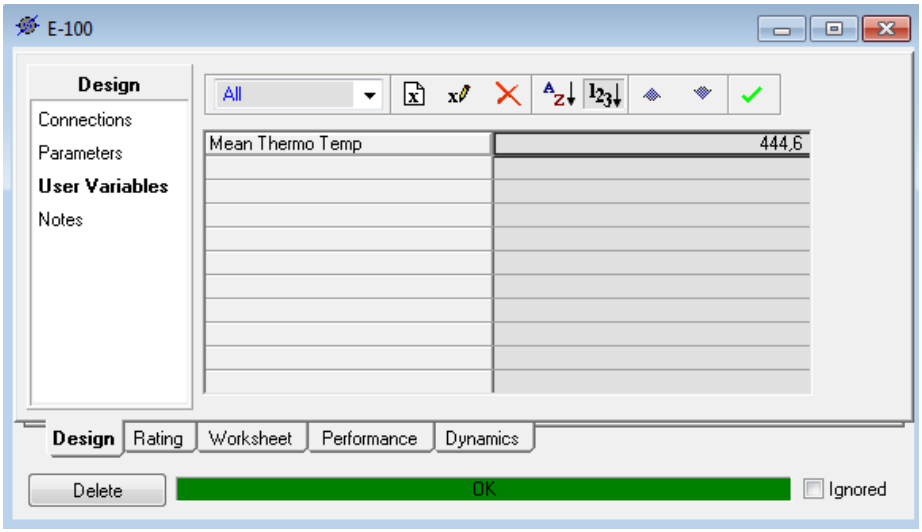
(b)

Figura A.9 – (a) e (b) Código referente à variável do usuário Cálculo da Exergia em Correntes de Energia. Esta variável também identifica o tipo de corrente de energia em questão, calcula e atribui o valor da Exergia contida na corrente de energia. (utilizada em máquinas de fluxo)

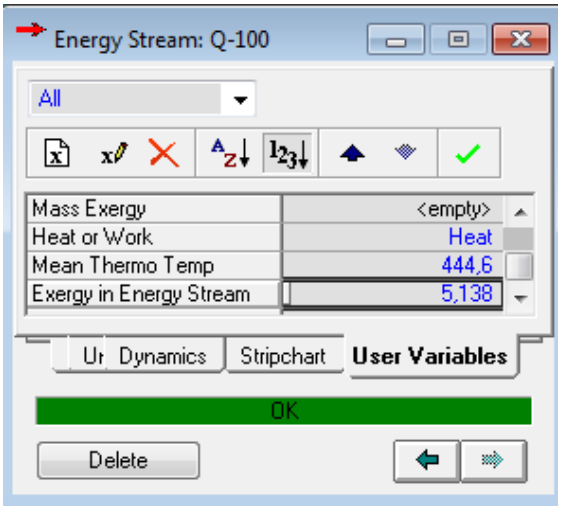
A.10 - EXEMPLO VARIÁVEIS DO USUÁRIO EM CORRENTES DE ENERGIA



(a)



(b)



(c)

Composição da corrente material: Água

Modelo Termodinâmico: SRK

Unidades: Temperatura: K; Exergia: kW

Figura A.10 De (a) até (c) – Janelas com os dados de entrada e as variáveis do usuário programadas em um trocador e em uma corrente de energia.

A.11 - PROPRIEDADES DO USUÁRIO

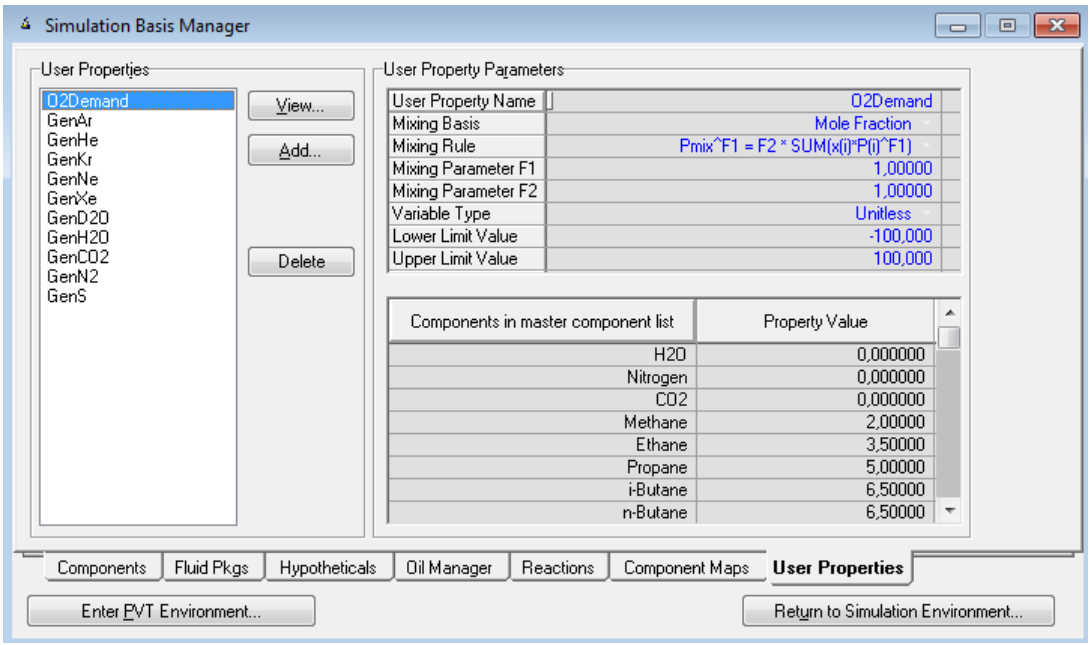


Figura A.11 – Janela com as propriedades do usuário necessárias ao funcionamento das rotinas.

A.12 - IRREVERSIBILIDADE DE TUBULAÇÕES

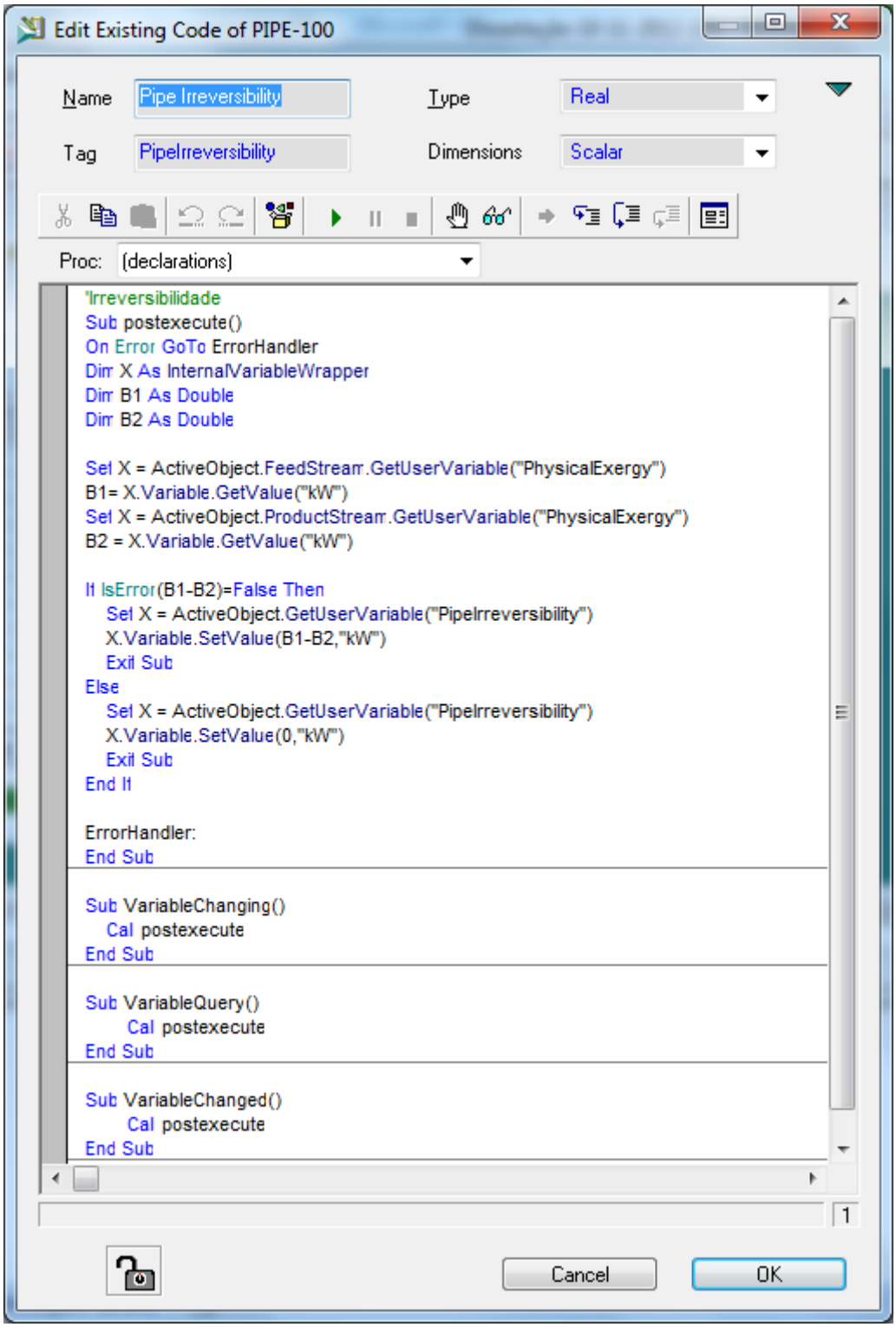


Figura A.12 – Código referente à variável do usuário irreversibilidade de tubulações.

A.13 - EFICIÊNCIA EXERGÉTICA DE TUBULAÇÕES

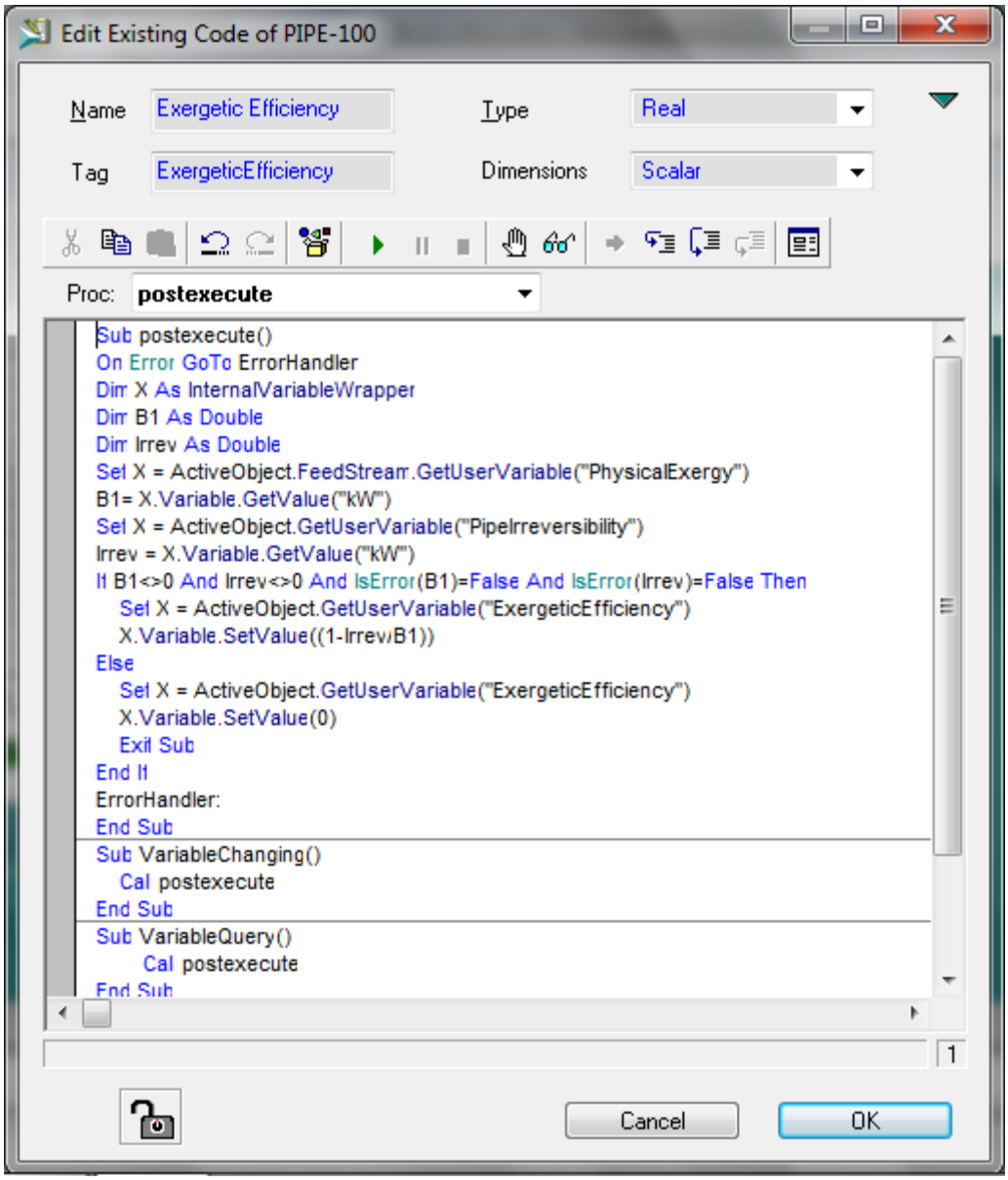


Figura A.13 – Código referente à variável do usuário eficiência exergética de tubulações.

A.14 - IRREVERSIBILIDADE DE VÁLVULAS

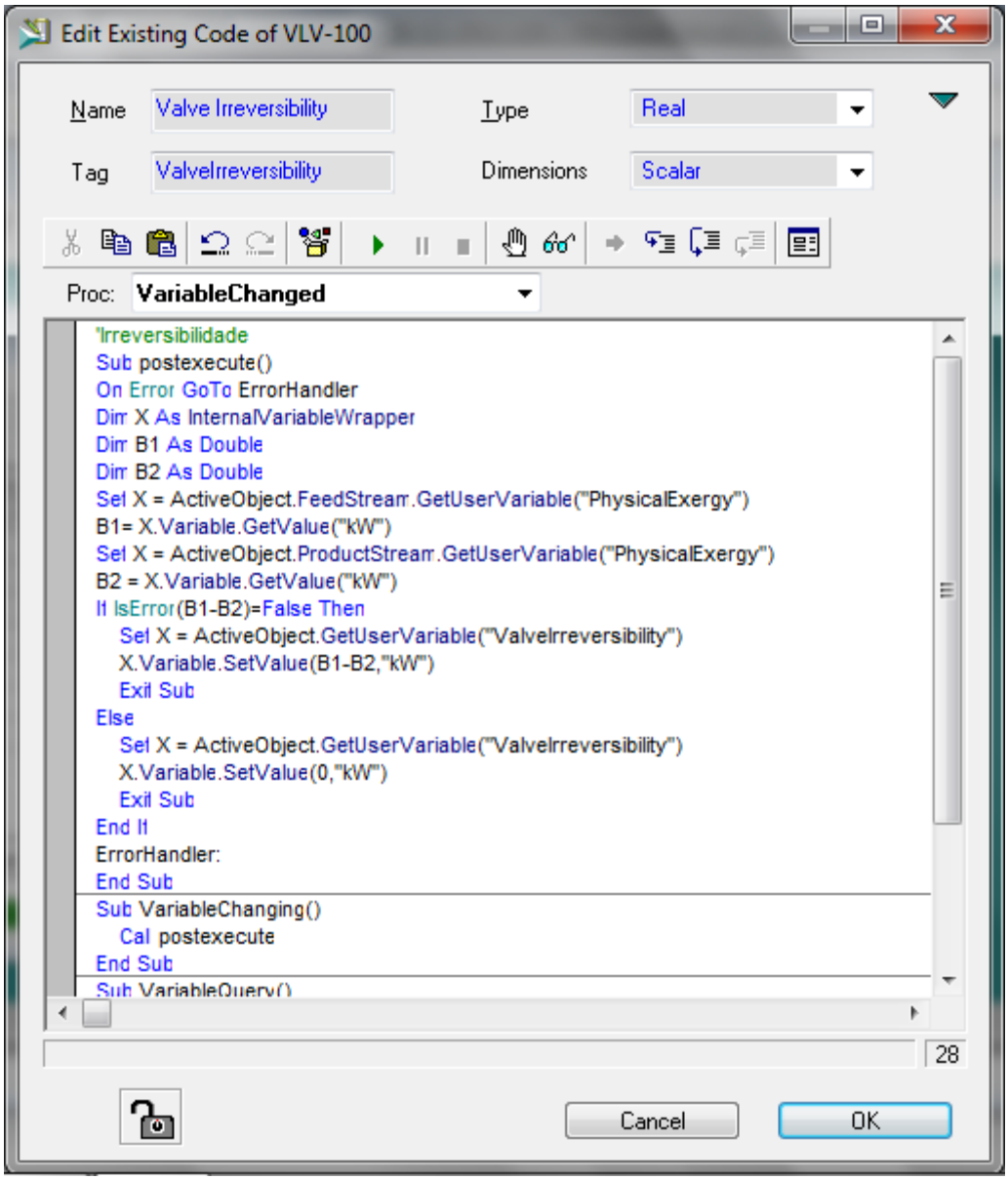


Figura A.14 – Código referente à variável do usuário irreversibilidade de válvulas.

A.15 - EFICIÊNCIA EXERGÉTICA DE VÁLVULAS

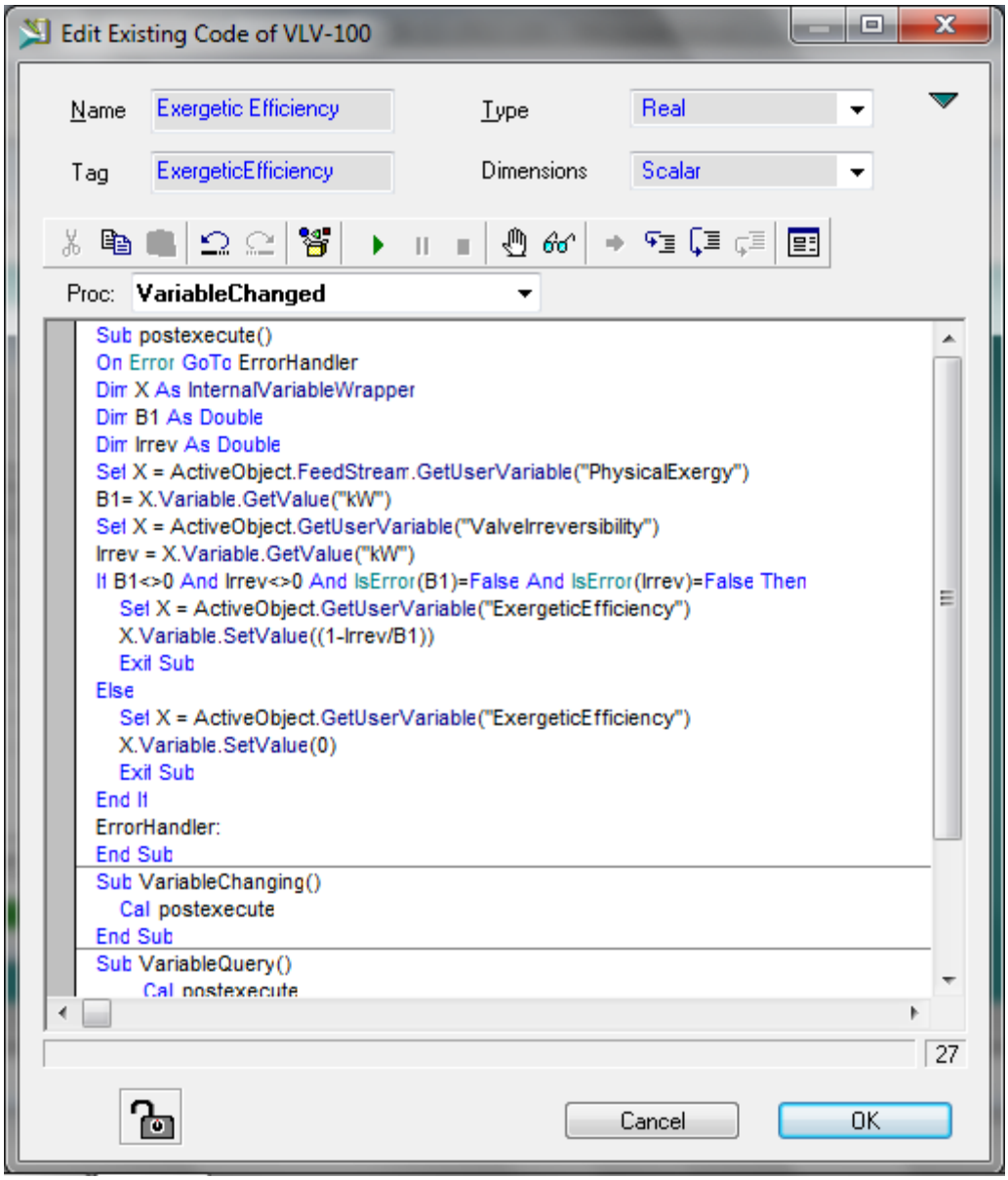


Figura A.15 – Código referente à variável do usuário eficiência exergética de válvulas.

A.16 - IRREVERSIBILIDADE DE BOMBAS

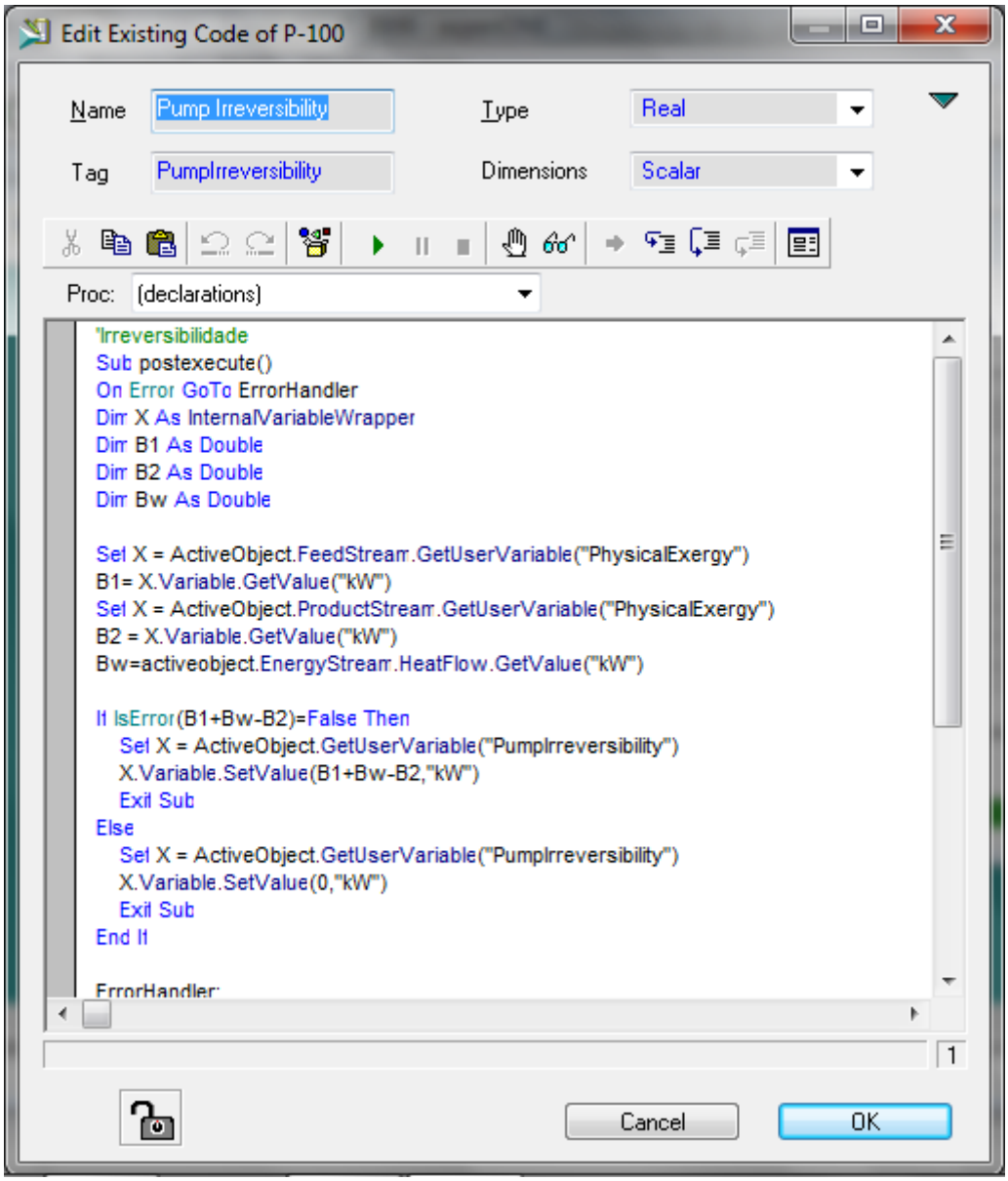
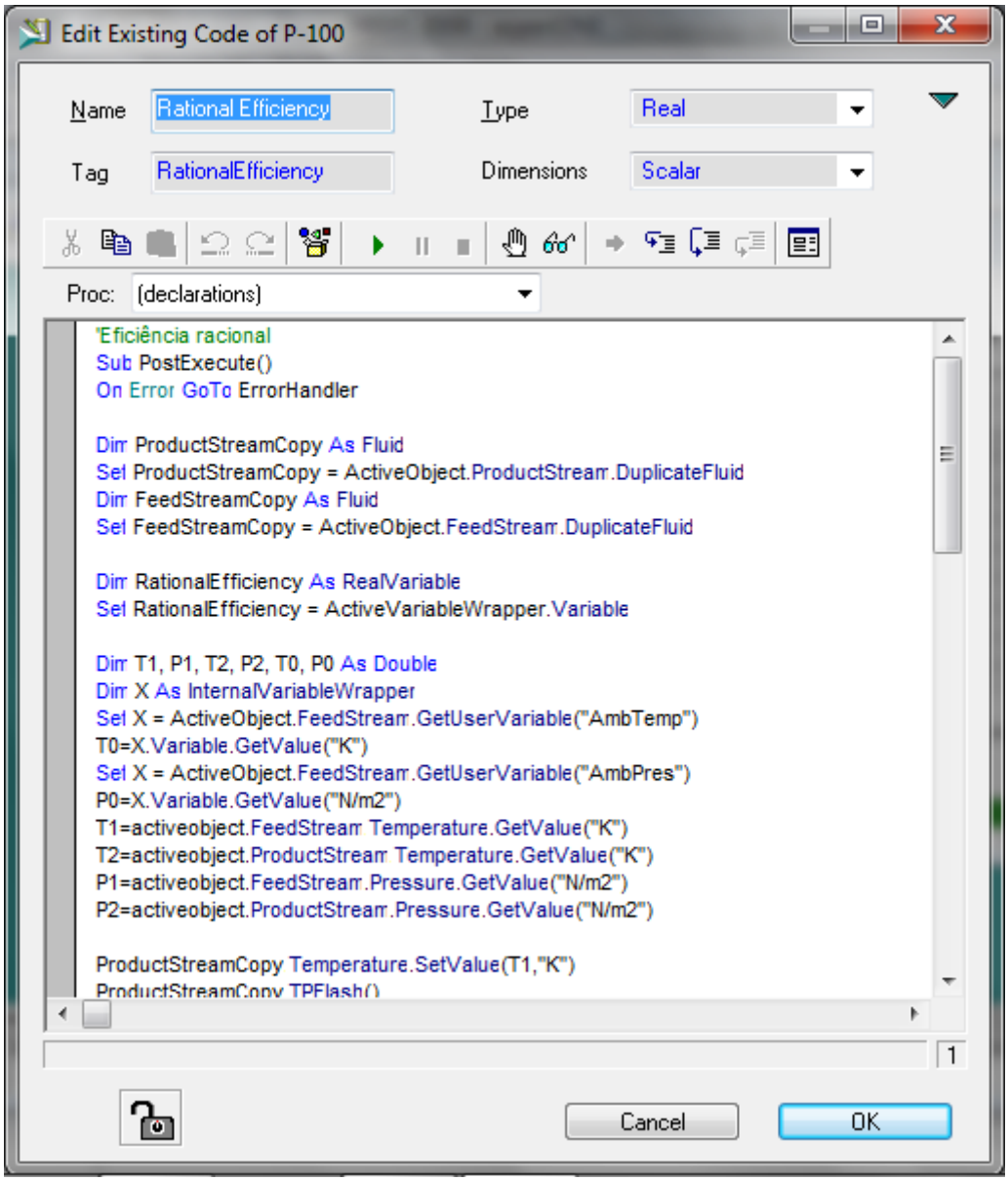
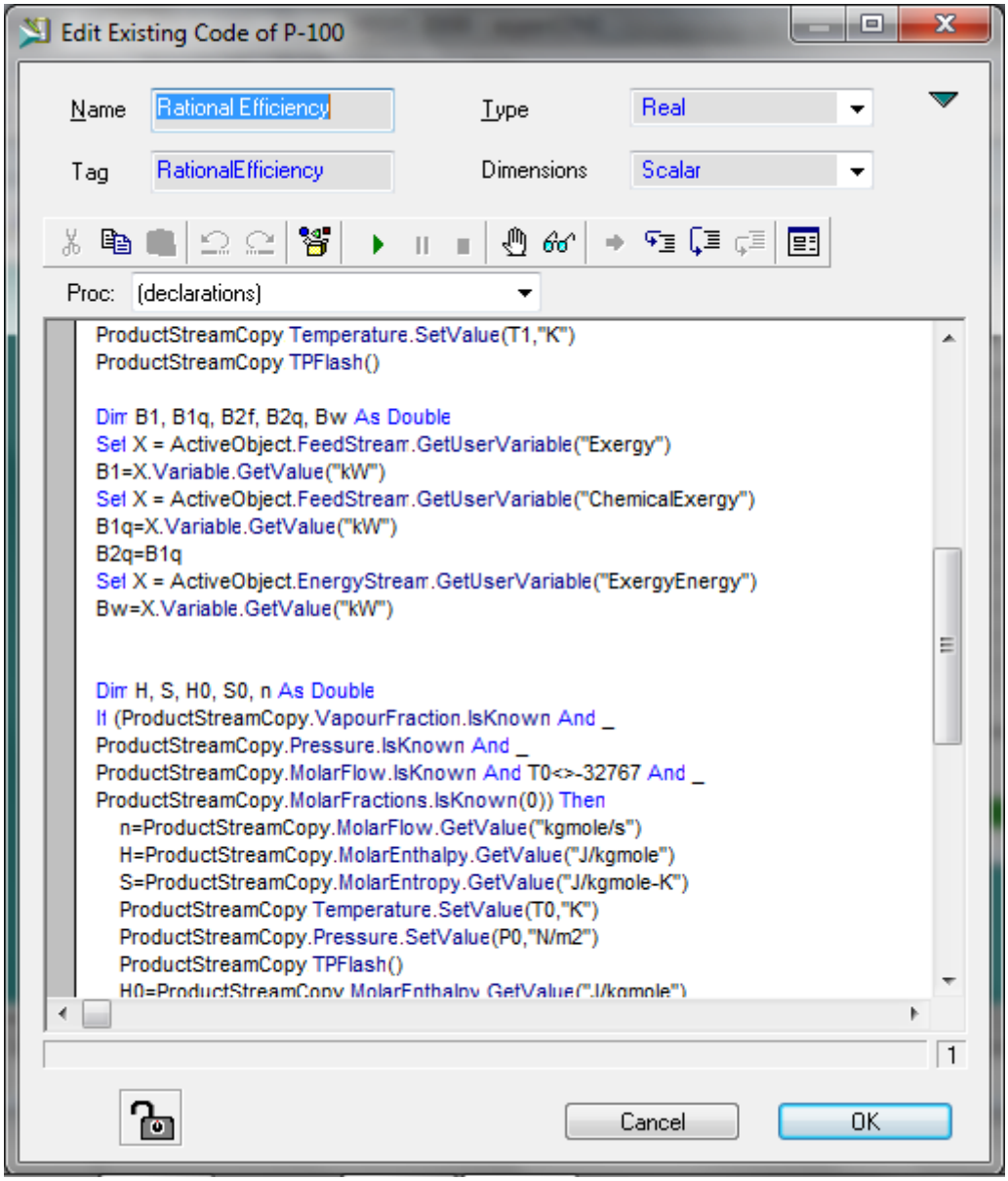


Figura A.16 – Código referente à variável do usuário irreversibilidade de bombas.

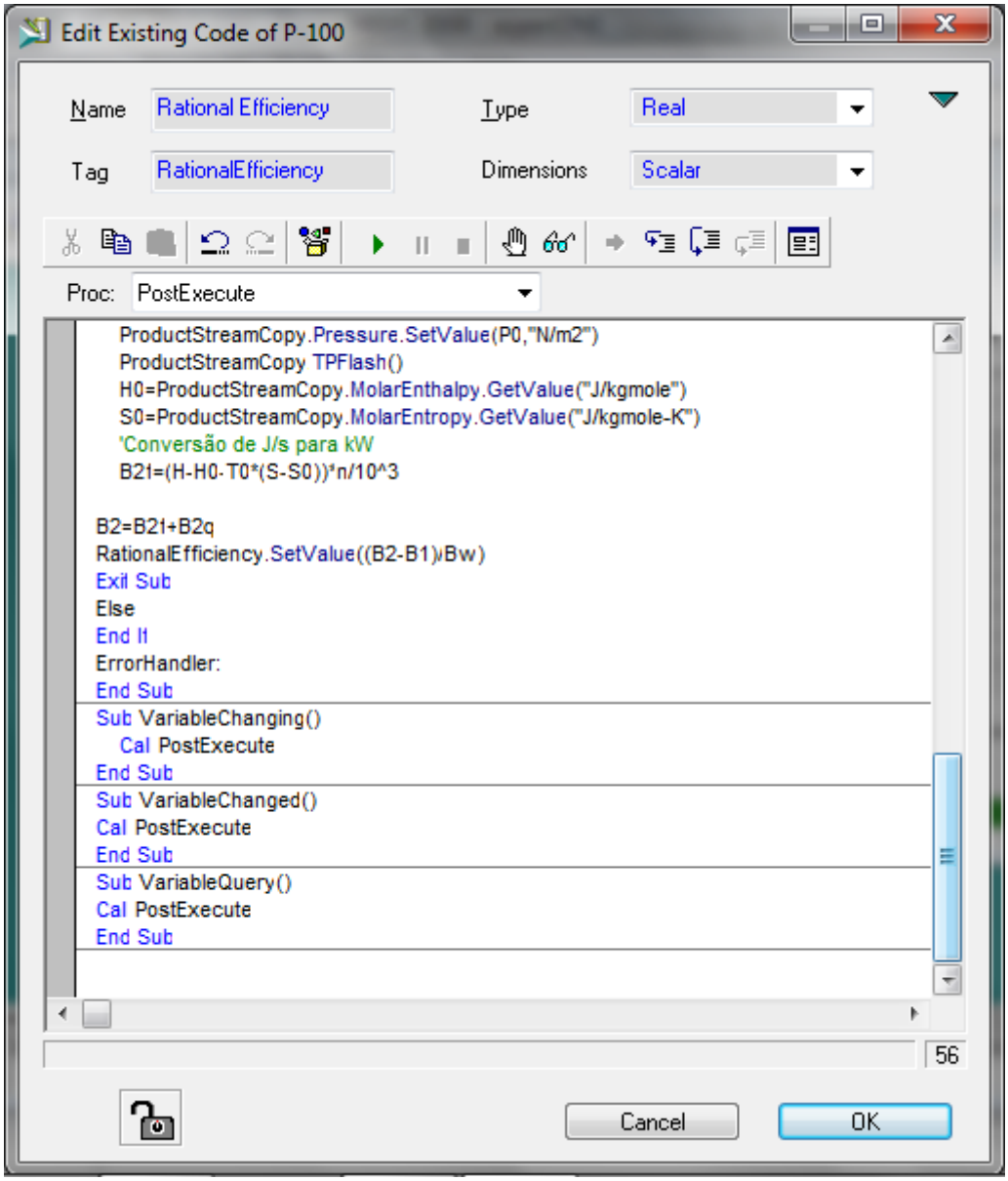
A.17 - EFICIÊNCIA RACIONAL DE BOMBAS



(a)


Edit Existing Code of P-100
Name
Rational Efficiency
Type
Real
Tag
RationalEfficiency
Dimensions
Scalar
Proc:
(declarations)
ProductStreamCopy Temperature.SetValue(T1,"K")
ProductStreamCopy TPFlash()
Dim B1, B1q, B2f, B2q, Bw As Double
Set X = ActiveObject.FeedStream.GetUserVariable("Exergy")
B1=X.Variable.GetValue("kW")
Set X = ActiveObject.FeedStream.GetUserVariable("ChemicalExergy")
B1q=X.Variable.GetValue("kW")
B2q=B1q
Set X = ActiveObject.EnergyStream.GetUserVariable("ExergyEnergy")
Bw=X.Variable.GetValue("kW")
Dim H, S, H0, S0, n As Double
If (ProductStreamCopy.VapourFraction.IsKnown And _
ProductStreamCopy.Pressure.IsKnown And _
ProductStreamCopy.MolarFlow.IsKnown And T0<>-32767 And _
ProductStreamCopy.MolarFractions.IsKnown(0)) Then
n=ProductStreamCopy.MolarFlow.GetValue("kgmole/s")
H=ProductStreamCopy.MolarEnthalpy.GetValue("J/kgmole")
S=ProductStreamCopy.MolarEntropy.GetValue("J/kgmole-K")
ProductStreamCopy Temperature.SetValue(T0,"K")
ProductStreamCopy.Pressure.SetValue(P0,"N/m2")
ProductStreamCopy TPFlash()
Cancel
OK

(b)



(c)

Figura A.17 de (a) até (c) – Código referente à variável do usuário eficiência racional de bombas.

A.18 - IRREVERSIBILIDADE DE COMPRESSORES

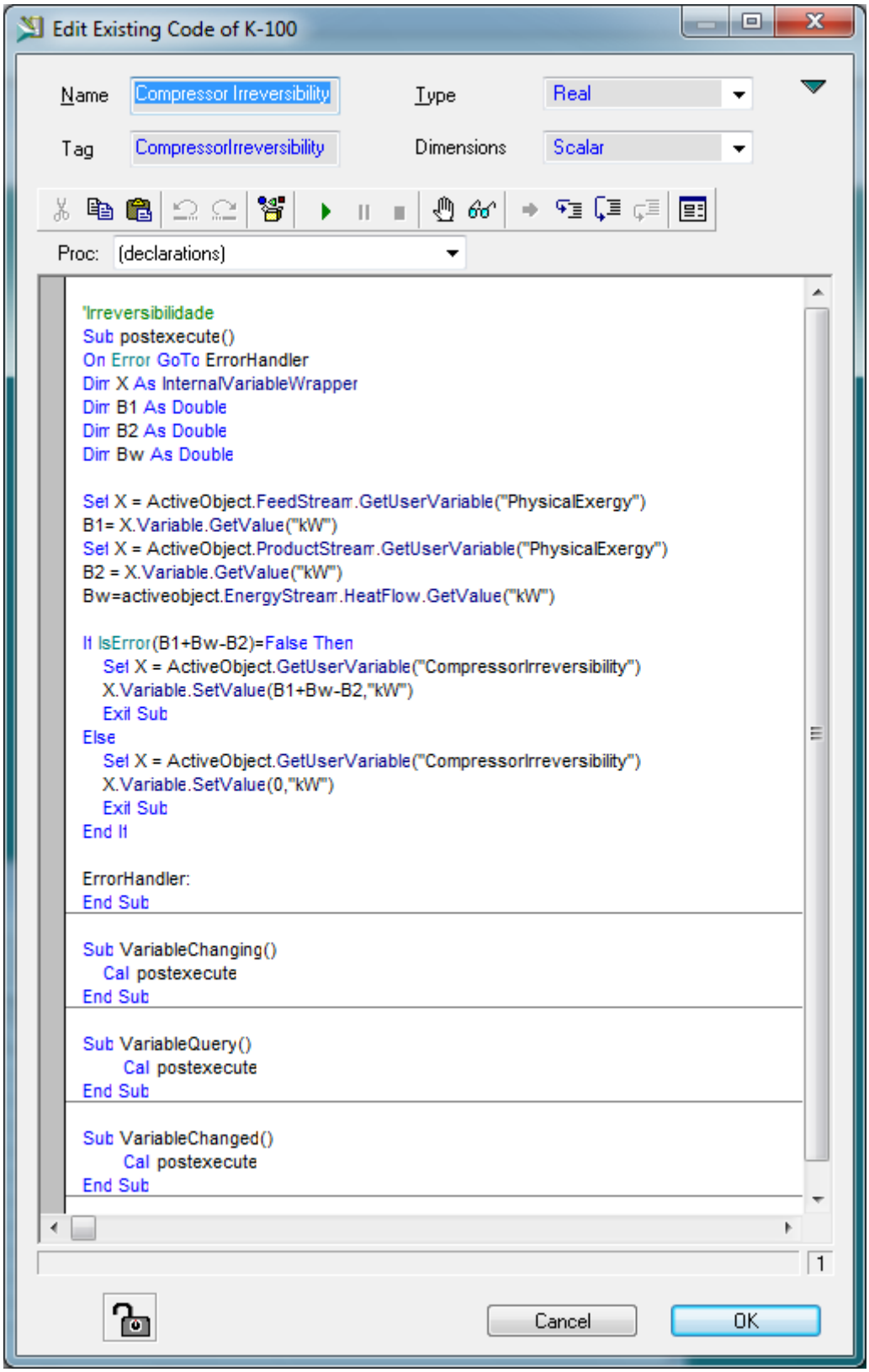
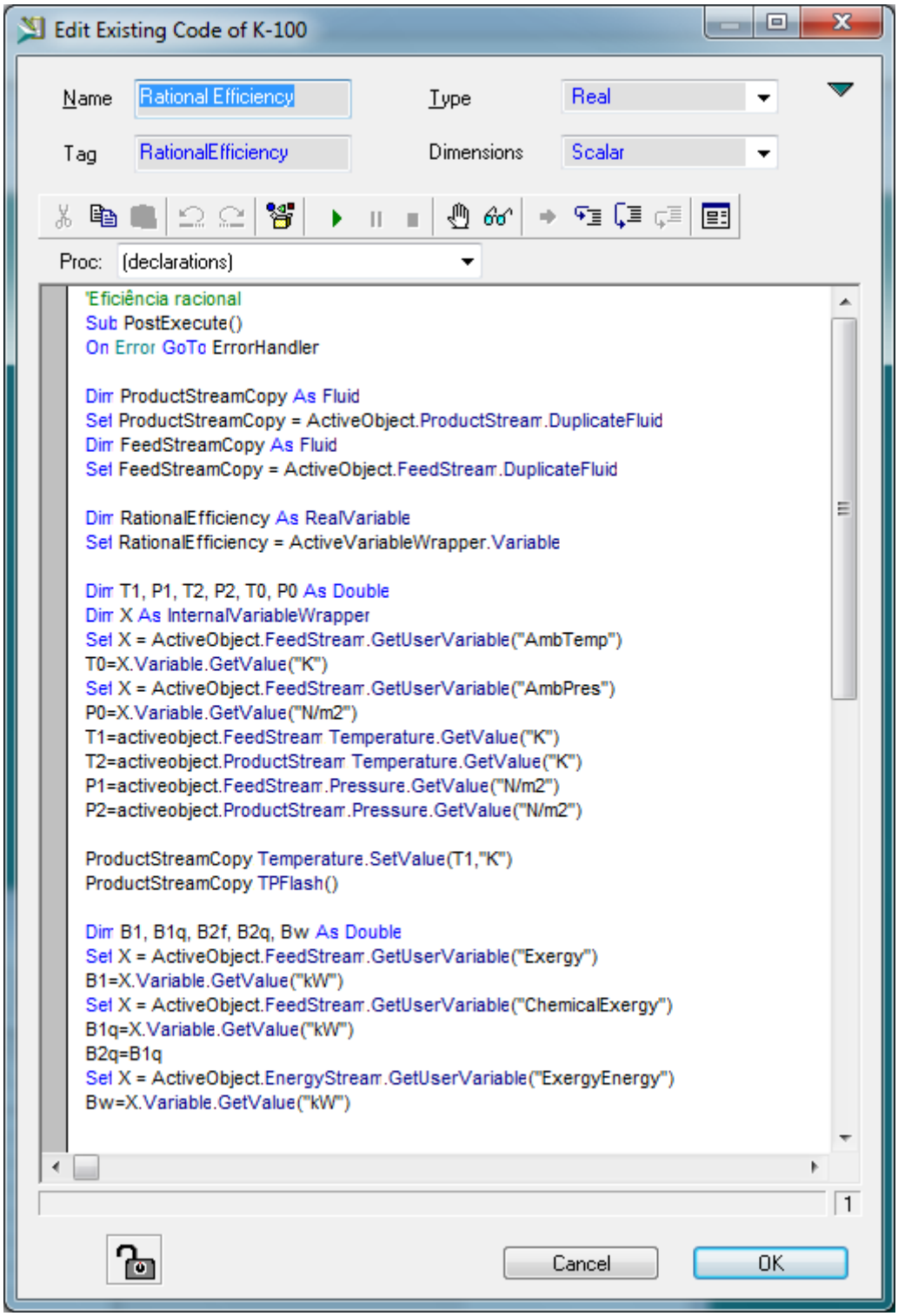
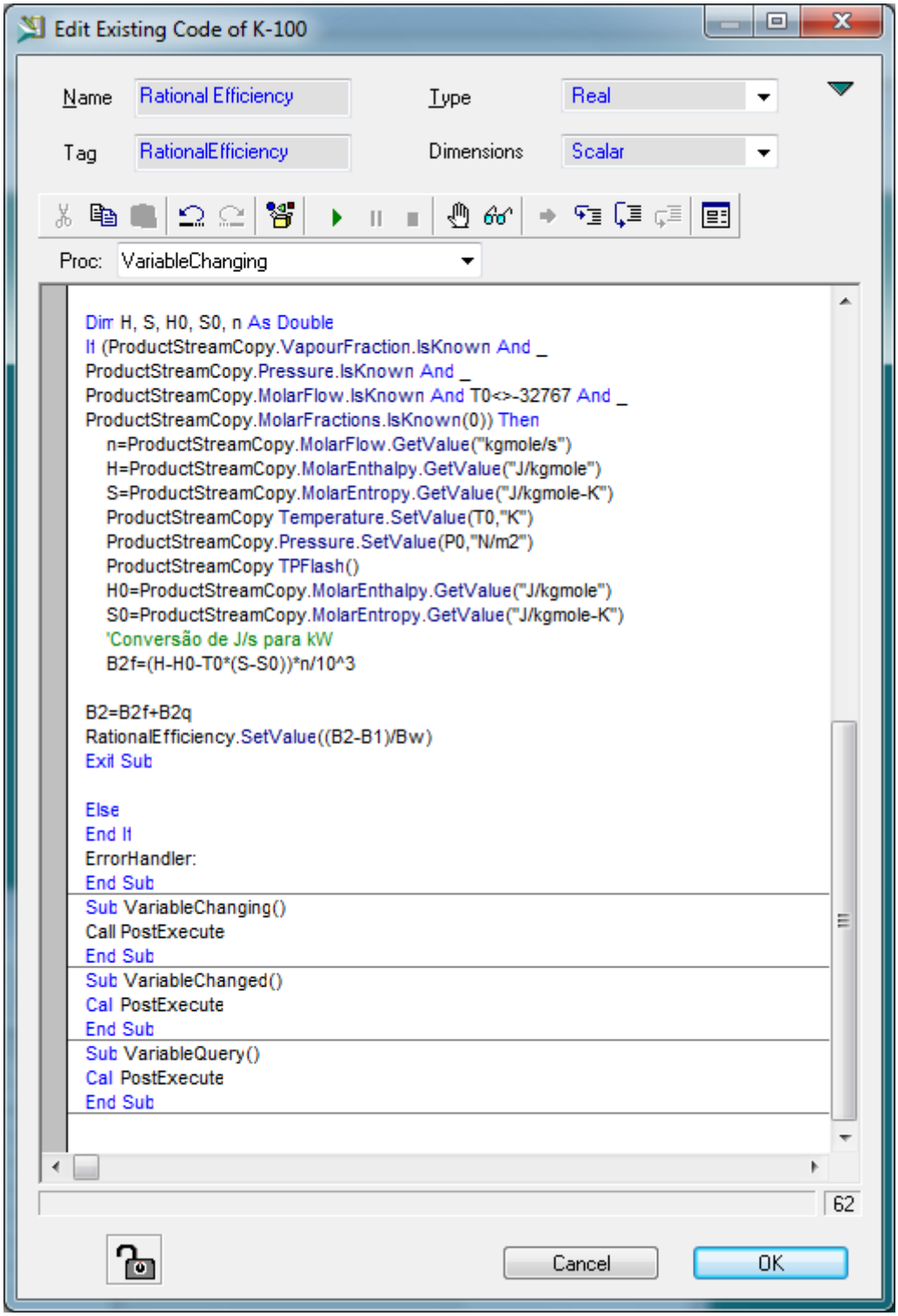


Figura A.18 – Código referente à variável do usuário irreversibilidade de compressores.

A.19 - EFICIÊNCIA RACIONAL DE COMPRESSORES



(a)



(b)

Figura A.19 (a) e (b) – Código referente à variável do usuário eficiência racional de compressores.

A.20 - ESTIMATIVA DE CUSTO DE COMPRESSORES

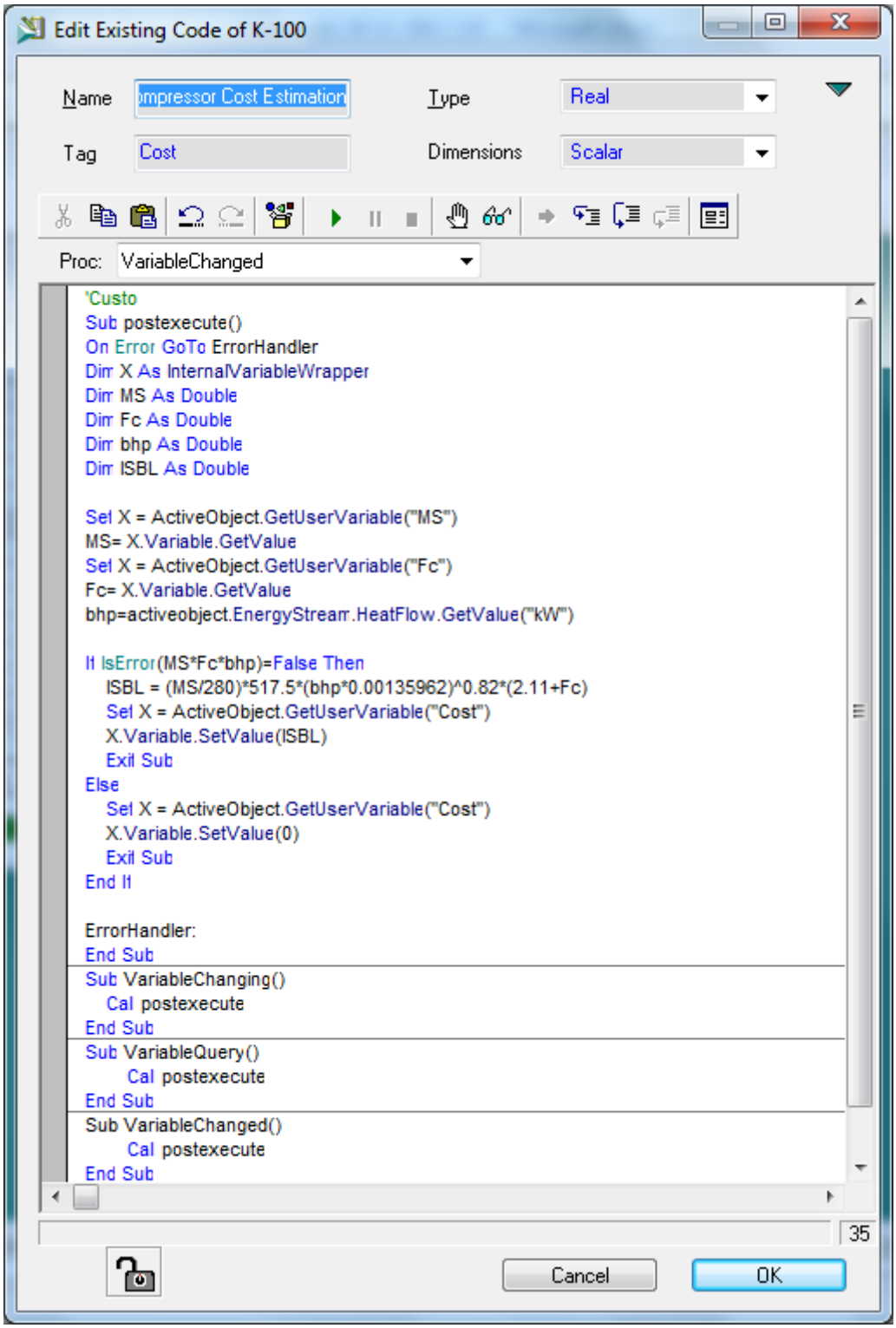


Figura A.20 – Código referente à variável do usuário estimativa do custo de investimento em compressores.

A.21 - IRREVERSIBILIDADE DE EXPANSORES

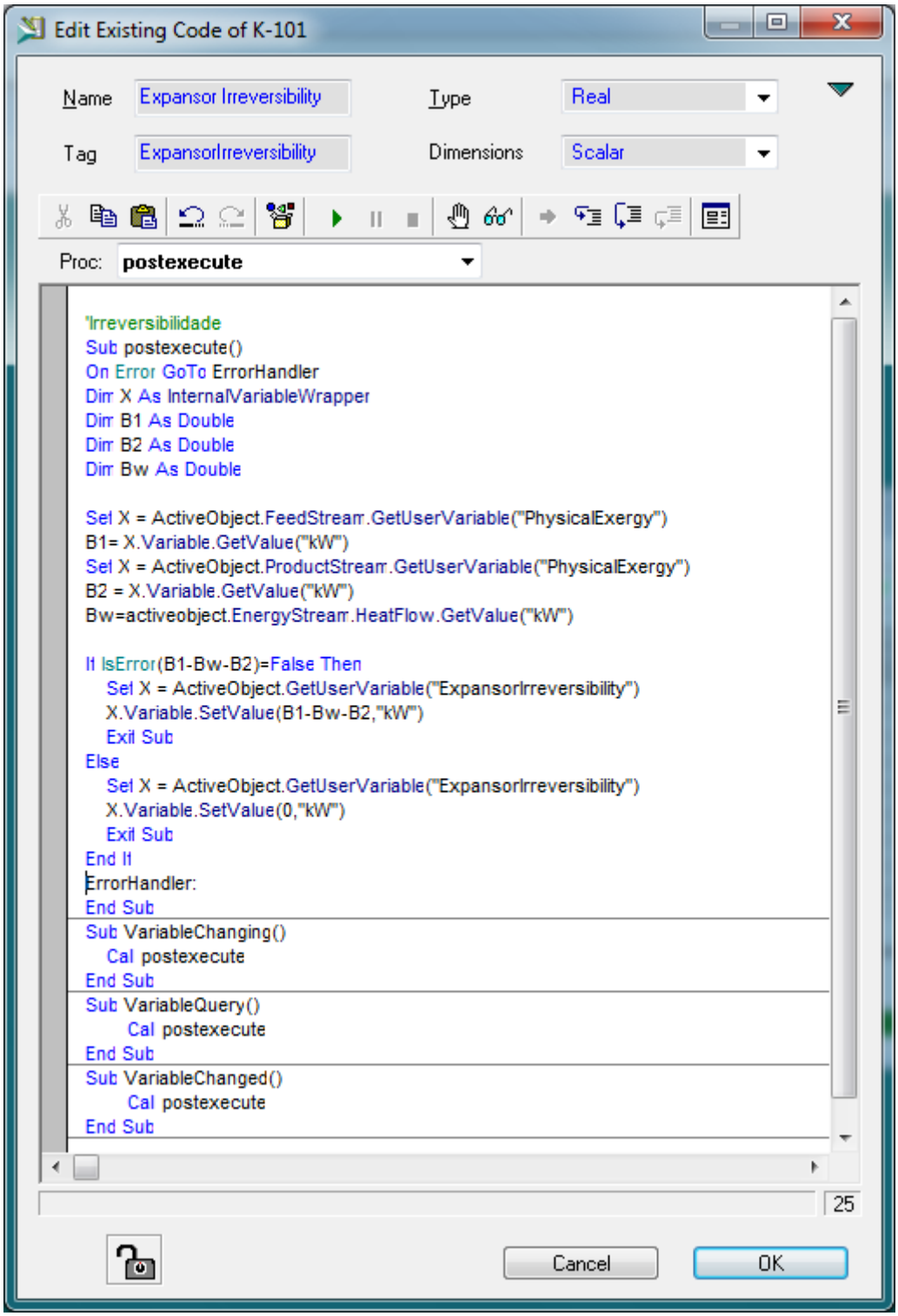


Figura A.21 – Código referente à variável do usuário irreversibilidade de expansores.

A.22 - EFICIÊNCIA RACIONAL DE EXPANSORES

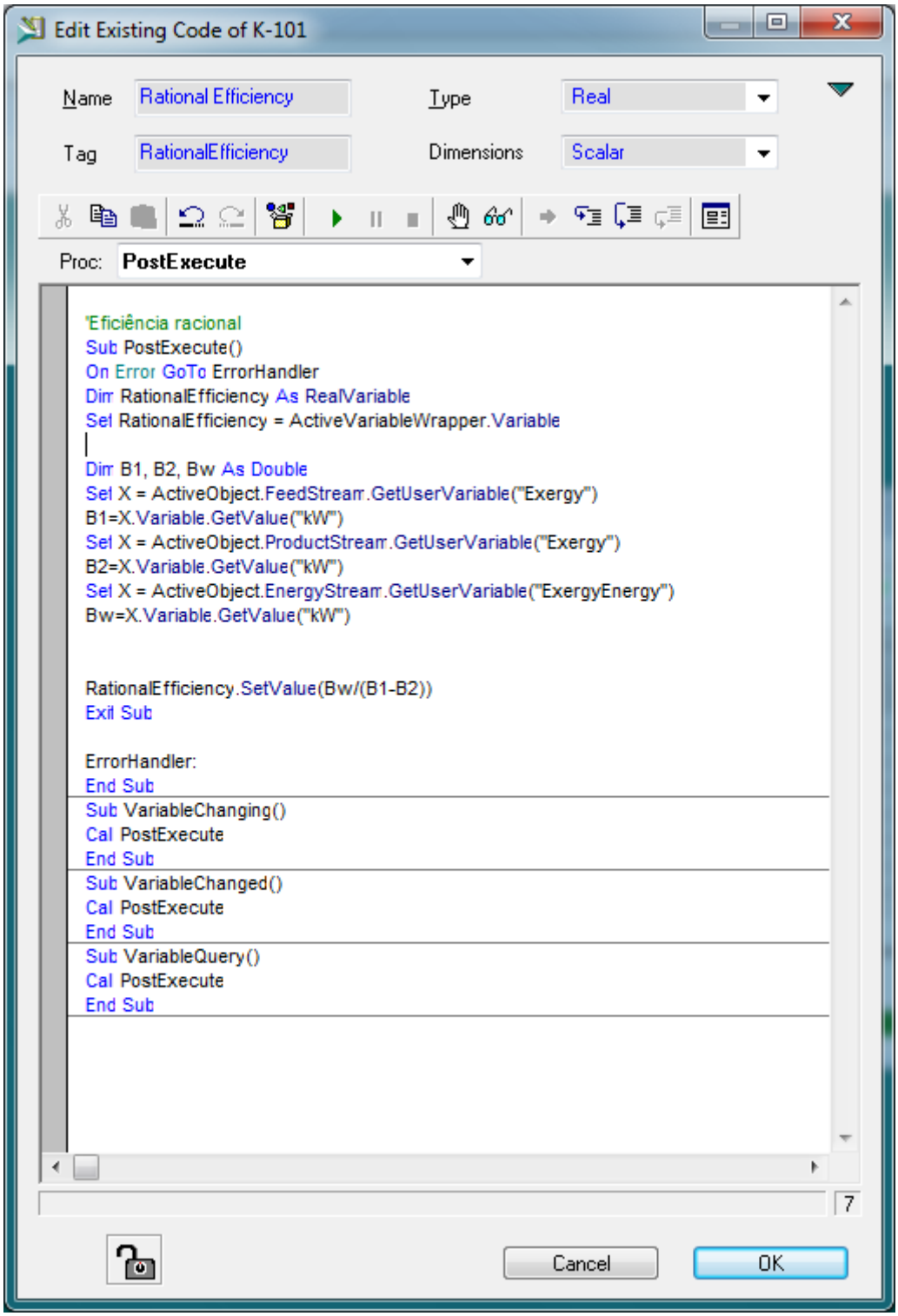
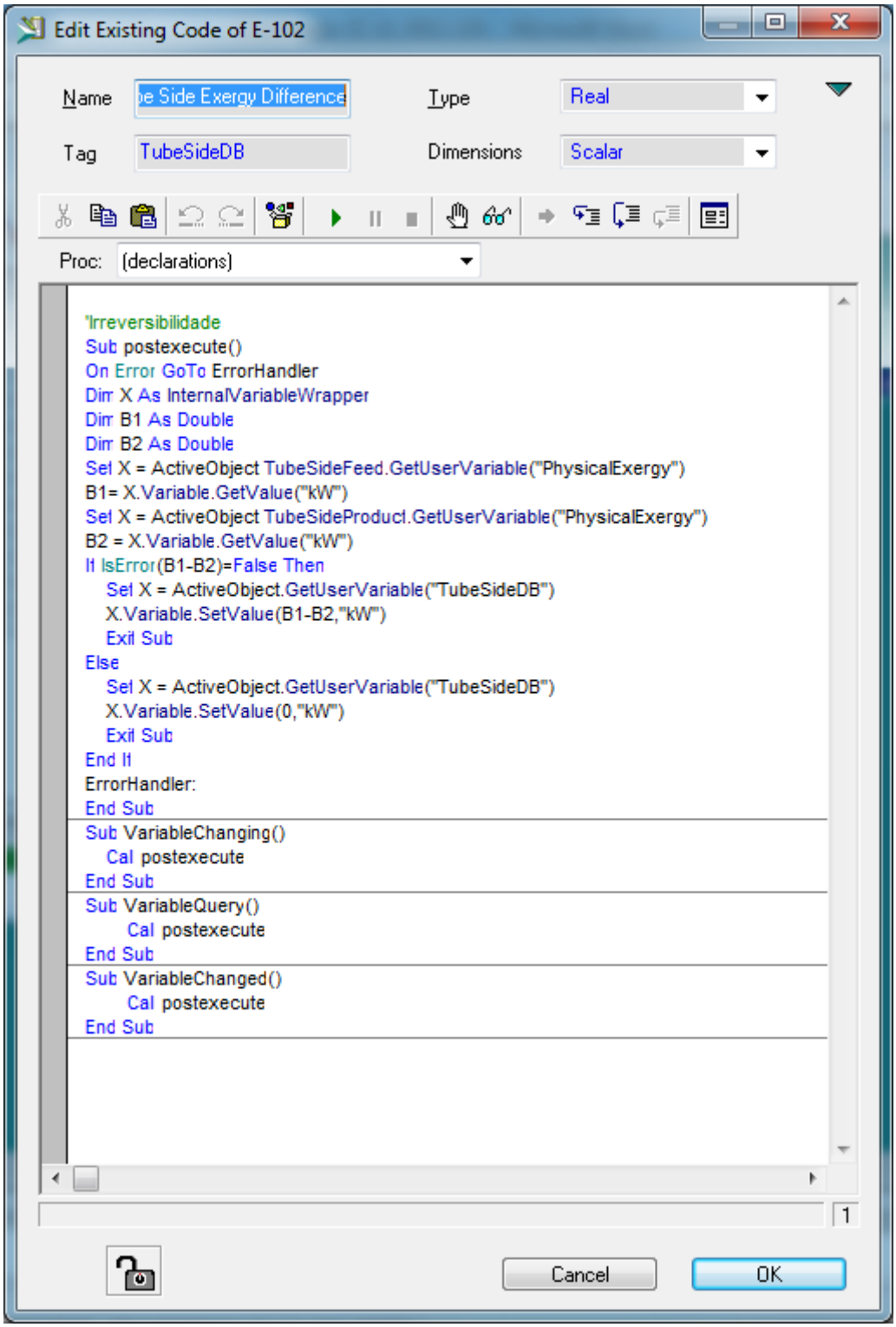
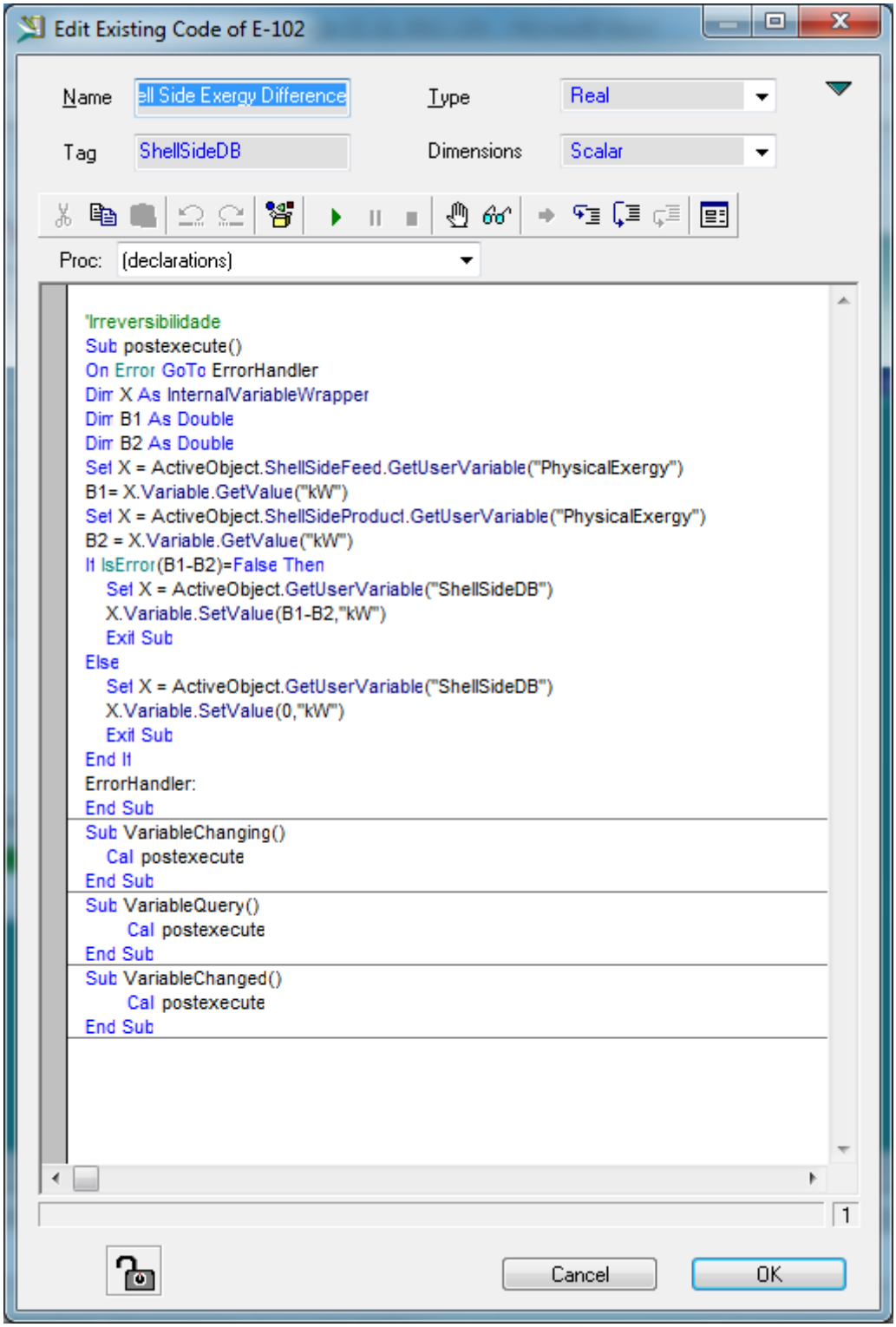


Figura A.22 – Código referente à variável do usuário eficiência racional de expansores (caso específico de turbinas a vapor) .

A.23 - DIFERENÇA DE EXERGIA EM TROCADORES DE CALOR



(a)



(b)

Figura A.23 (a) e (b) – Código referente à variável do usuário Diferença de exergia nos tubos (a) e no casco (b).

A.24 - IRREVERSIBILIDADE EM TROCADORES DE CALOR

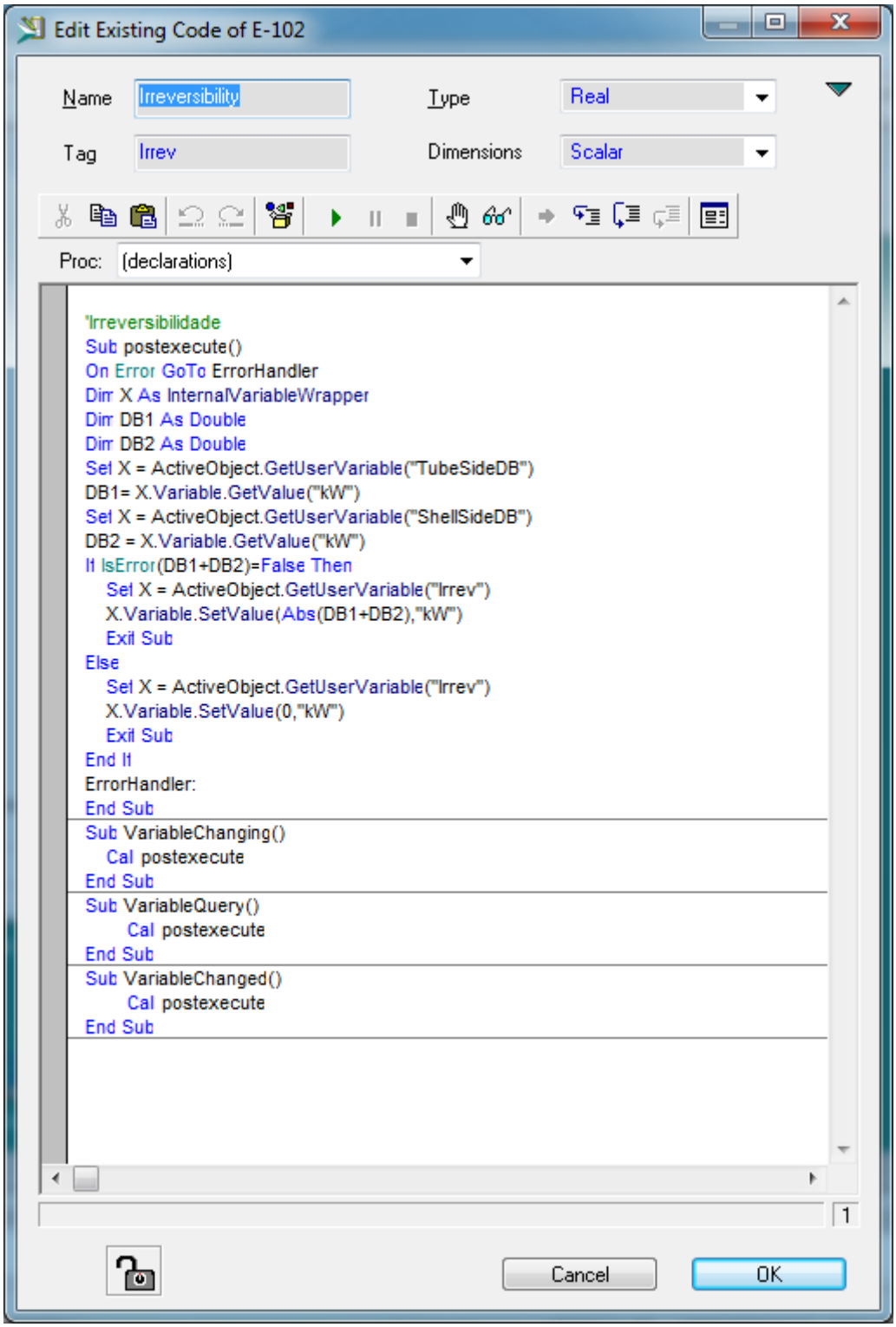
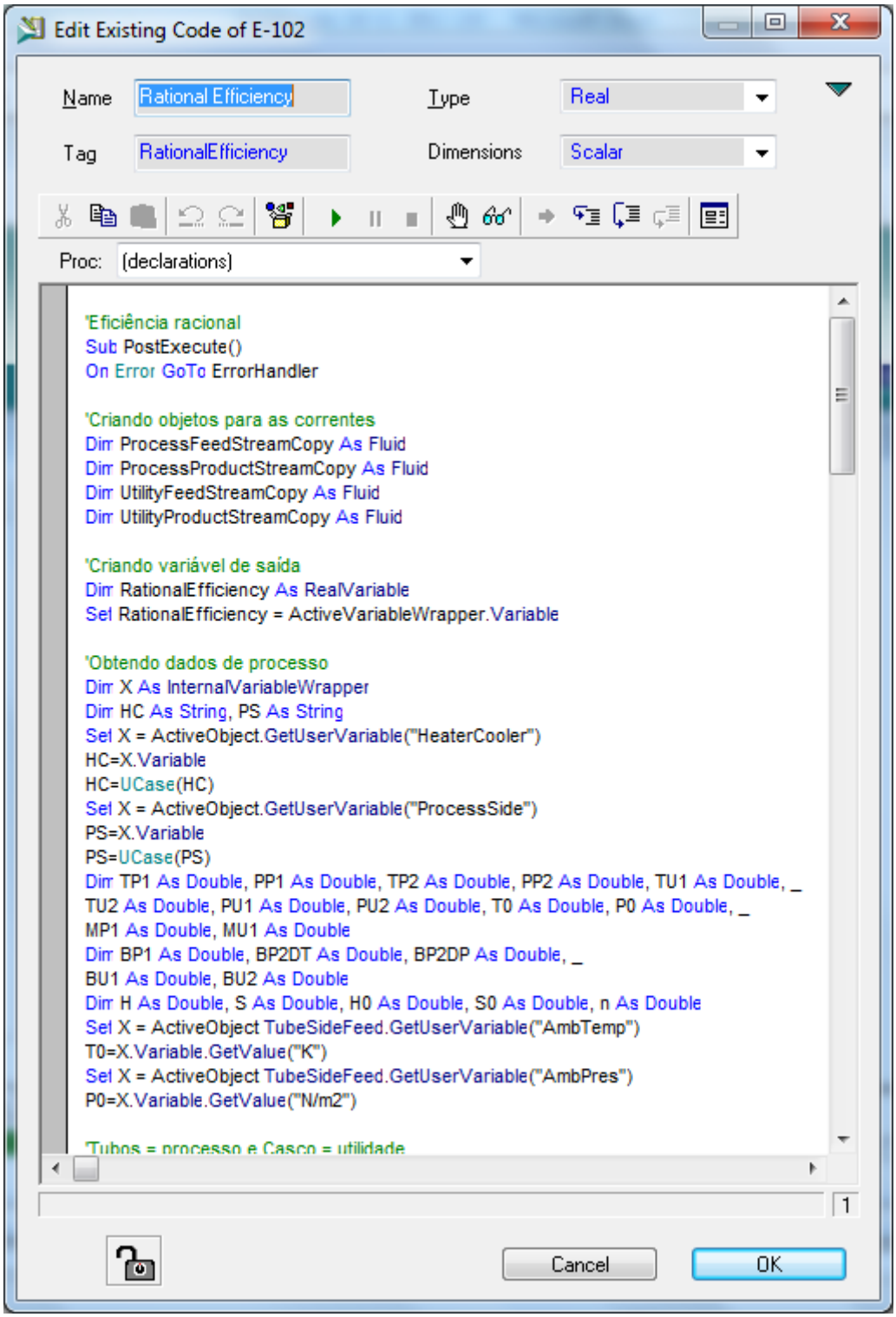
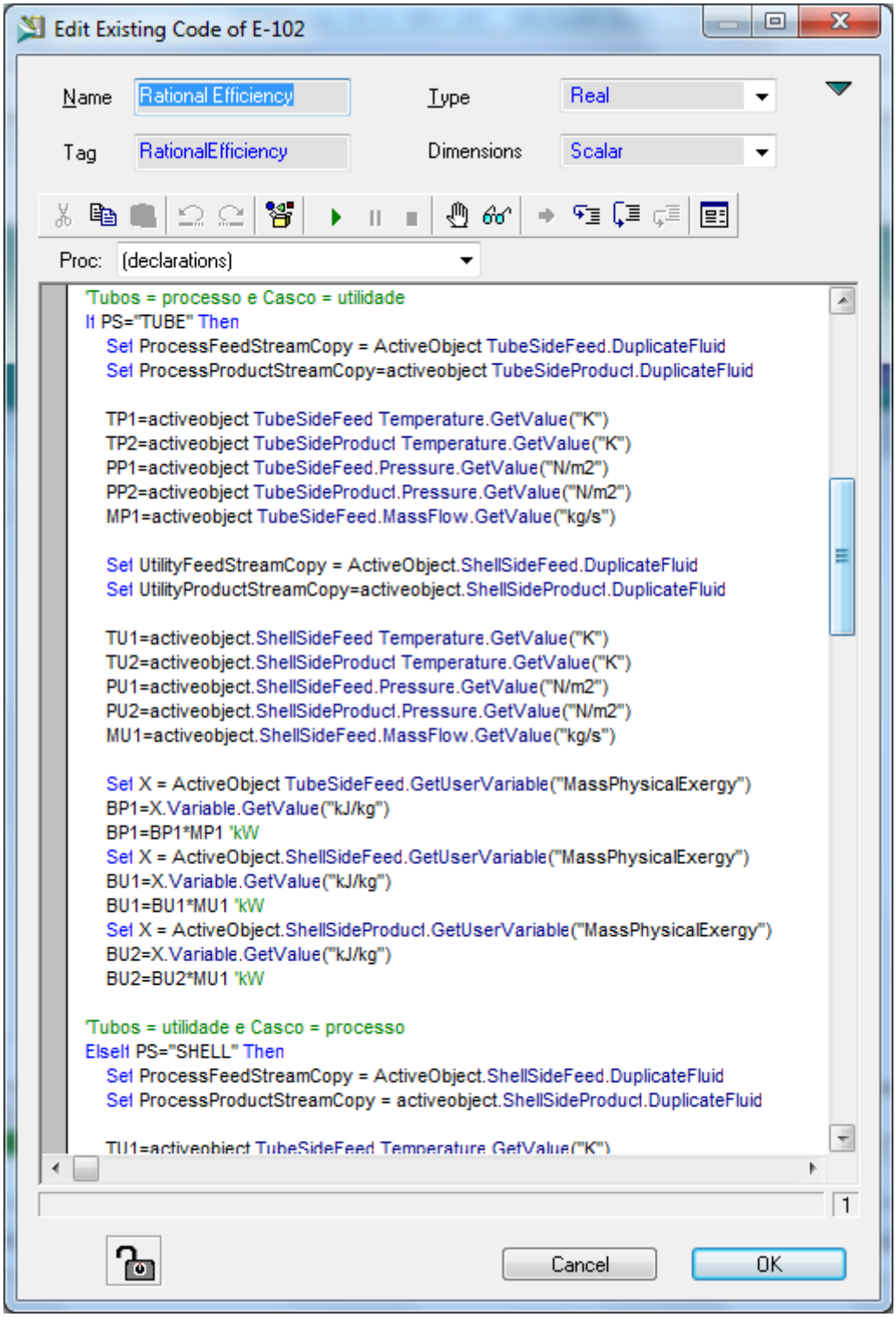


Figura A.24 – Código referente à variável do usuário irreversibilidade em trocadores de calor.

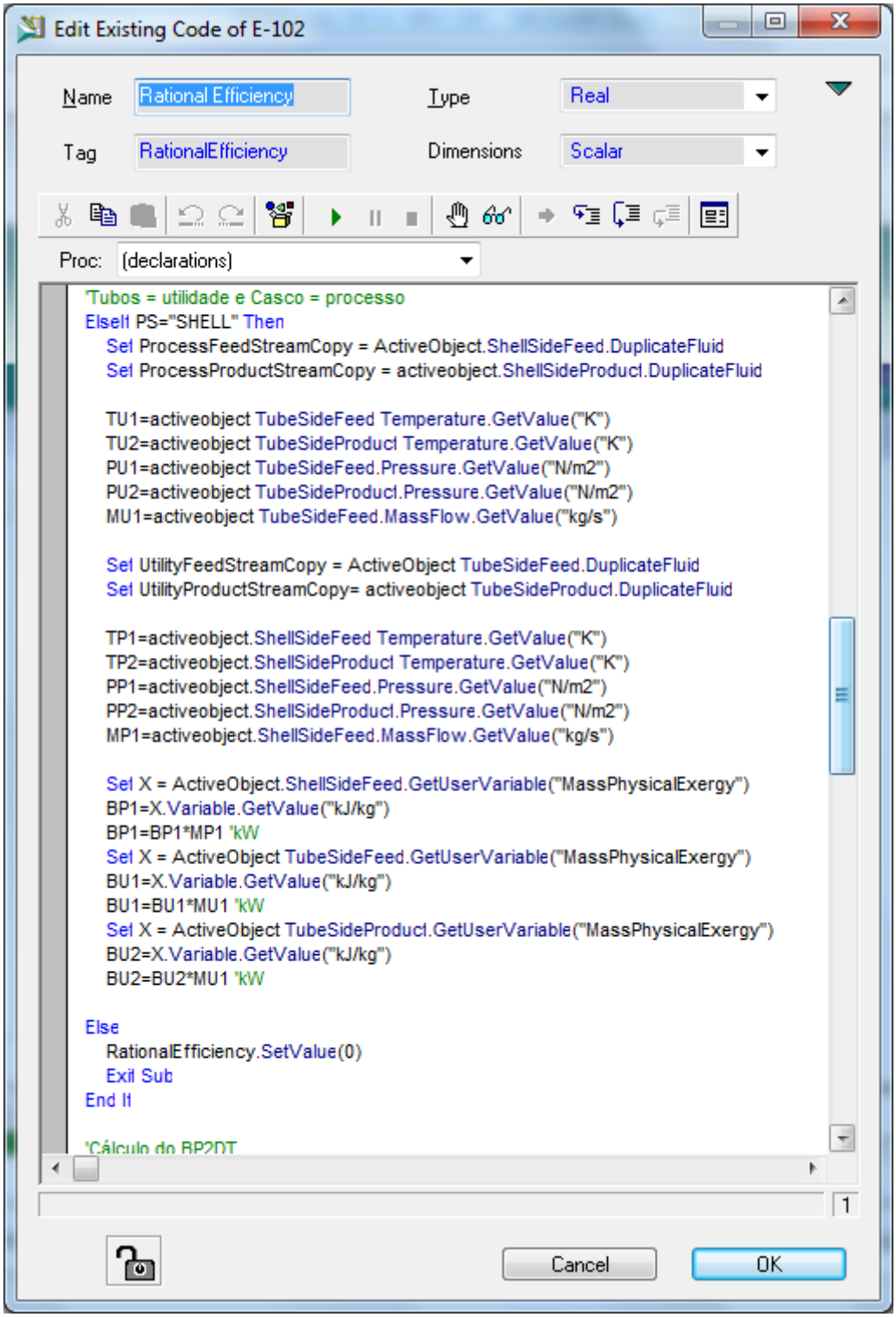
A.25 - EFICIÊNCIA RACIONAL DE TROCADORES DE CALOR



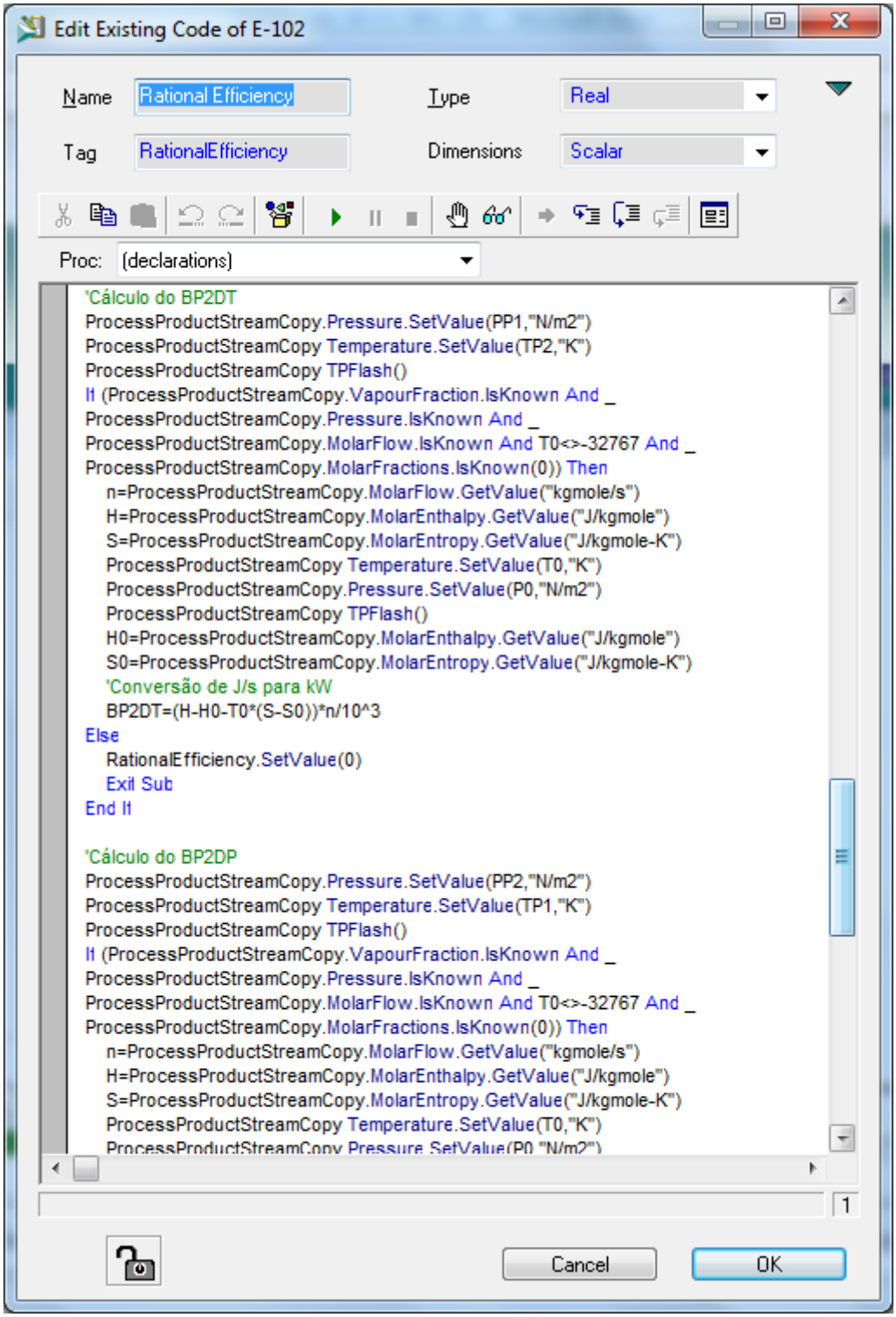
(a)


Edit Existing Code of E-102
Name
Rational Efficiency
Type
Real
Tag
RationalEfficiency
Dimensions
Scalar
Proc:
(declarations)
'Tubos = processo e Casco = utilidade
If PS="TUBE" Then
Set ProcessFeedStreamCopy = ActiveObject TubeSideFeed.DuplicateFluid
Set ProcessProductStreamCopy=activeobject TubeSideProduct.DuplicateFluid
TP1=activeobject TubeSideFeed Temperature.GetValue("K")
TP2=activeobject TubeSideProduct Temperature.GetValue("K")
PP1=activeobject TubeSideFeed.Pressure.GetValue("N/m2")
PP2=activeobject TubeSideProduct.Pressure.GetValue("N/m2")
MP1=activeobject TubeSideFeed.MassFlow.GetValue("kg/s")
Set UtilityFeedStreamCopy = ActiveObject.ShellSideFeed.DuplicateFluid
Set UtilityProductStreamCopy=activeobject.ShellSideProduct.DuplicateFluid
TU1=activeobject.ShellSideFeed Temperature.GetValue("K")
TU2=activeobject.ShellSideProduct Temperature.GetValue("K")
PU1=activeobject.ShellSideFeed.Pressure.GetValue("N/m2")
PU2=activeobject.ShellSideProduct.Pressure.GetValue("N/m2")
MU1=activeobject.ShellSideFeed.MassFlow.GetValue("kg/s")
Set X = ActiveObject TubeSideFeed.GetUserVariable("MassPhysicalExergy")
BP1=X.Variable.GetValue("kJ/kg")
BP1=BP1*MP1 'kW
Set X = ActiveObject.ShellSideFeed.GetUserVariable("MassPhysicalExergy")
BU1=X.Variable.GetValue("kJ/kg")
BU1=BU1*MU1 'kW
Set X = ActiveObject.ShellSideProduct.GetUserVariable("MassPhysicalExergy")
BU2=X.Variable.GetValue("kJ/kg")
BU2=BU2*MU1 'kW
'Tubos = utilidade e Casco = processo
ElseIf PS="SHELL" Then
Set ProcessFeedStreamCopy = ActiveObject.ShellSideFeed.DuplicateFluid
Set ProcessProductStreamCopy = activeobject.ShellSideProduct.DuplicateFluid
Cancel
OK

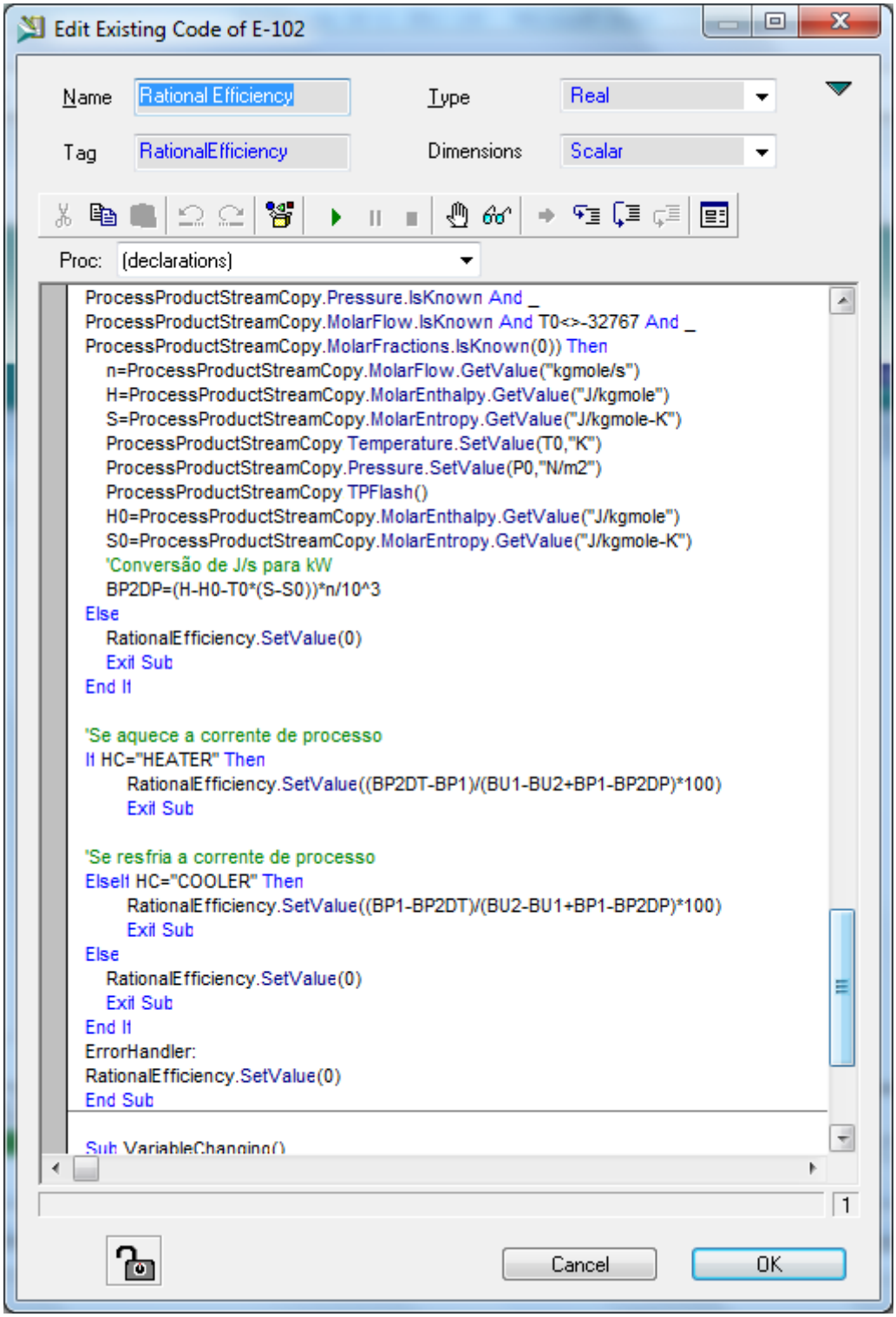
(b)


Edit Existing Code of E-102
Name
Rational Efficiency
Type
Real
Tag
RationalEfficiency
Dimensions
Scalar
Proc:
(declarations)
'Tubos = utilidade e Casco = processo
ElseIf PS="SHELL" Then
Set ProcessFeedStreamCopy = ActiveObject.ShellSideFeed.DuplicateFluid
Set ProcessProductStreamCopy = activeobject.ShellSideProduct.DuplicateFluid
TU1=activeobject TubeSideFeed Temperature.GetValue("K")
TU2=activeobject TubeSideProduct Temperature.GetValue("K")
PU1=activeobject TubeSideFeed.Pressure.GetValue("N/m2")
PU2=activeobject TubeSideProduct.Pressure.GetValue("N/m2")
MU1=activeobject TubeSideFeed.MassFlow.GetValue("kg/s")
Set UtilityFeedStreamCopy = ActiveObject TubeSideFeed.DuplicateFluid
Set UtilityProductStreamCopy= activeobject TubeSideProduct.DuplicateFluid
TP1=activeobject.ShellSideFeed Temperature.GetValue("K")
TP2=activeobject.ShellSideProduct Temperature.GetValue("K")
PP1=activeobject.ShellSideFeed.Pressure.GetValue("N/m2")
PP2=activeobject.ShellSideProduct.Pressure.GetValue("N/m2")
MP1=activeobject.ShellSideFeed.MassFlow.GetValue("kg/s")
Set X = ActiveObject.ShellSideFeed.GetUserVariable("MassPhysicalExergy")
BP1=X.Variable.GetValue("kJ/kg")
BP1=BP1*MP1 'kW
Set X = ActiveObject TubeSideFeed.GetUserVariable("MassPhysicalExergy")
BU1=X.Variable.GetValue("kJ/kg")
BU1=BU1*MU1 'kW
Set X = ActiveObject TubeSideProduct.GetUserVariable("MassPhysicalExergy")
BU2=X.Variable.GetValue("kJ/kg")
BU2=BU2*MU1 'kW
Else
RationalEfficiency.SetValue(0)
Exit Sub
End If
'Cálculo do BP2DT
1
Cancel
OK

(c)


Edit Existing Code of E-102
Name
Rational Efficiency
Type
Real
Tag
RationalEfficiency
Dimensions
Scalar
Proc:
(declarations)
'Cálculo do BP2DT
ProcessProductStreamCopy.Pressure.SetValue(PP1,"N/m2")
ProcessProductStreamCopy Temperature.SetValue(TP2,"K")
ProcessProductStreamCopy TPFlash()
If (ProcessProductStreamCopy.VapourFraction.IsKnown And _
ProcessProductStreamCopy.Pressure.IsKnown And _
ProcessProductStreamCopy.MolarFlow.IsKnown And T0<>-32767 And _
ProcessProductStreamCopy.MolarFractions.IsKnown(0)) Then
n=ProcessProductStreamCopy.MolarFlow.GetValue("kgmole/s")
H=ProcessProductStreamCopy.MolarEnthalpy.GetValue("J/kgmole")
S=ProcessProductStreamCopy.MolarEntropy.GetValue("J/kgmole-K")
ProcessProductStreamCopy Temperature.SetValue(T0,"K")
ProcessProductStreamCopy.Pressure.SetValue(P0,"N/m2")
ProcessProductStreamCopy TPFlash()
H0=ProcessProductStreamCopy.MolarEnthalpy.GetValue("J/kgmole")
S0=ProcessProductStreamCopy.MolarEntropy.GetValue("J/kgmole-K")
'Conversão de J/s para kW
BP2DT=(H-H0-T0*(S-S0))*n/10^3
Else
RationalEfficiency.SetValue(0)
Exit Sub
End If
'Cálculo do BP2DP
ProcessProductStreamCopy.Pressure.SetValue(PP2,"N/m2")
ProcessProductStreamCopy Temperature.SetValue(TP1,"K")
ProcessProductStreamCopy TPFlash()
If (ProcessProductStreamCopy.VapourFraction.IsKnown And _
ProcessProductStreamCopy.Pressure.IsKnown And _
ProcessProductStreamCopy.MolarFlow.IsKnown And T0<>-32767 And _
ProcessProductStreamCopy.MolarFractions.IsKnown(0)) Then
n=ProcessProductStreamCopy.MolarFlow.GetValue("kgmole/s")
H=ProcessProductStreamCopy.MolarEnthalpy.GetValue("J/kgmole")
S=ProcessProductStreamCopy.MolarEntropy.GetValue("J/kgmole-K")
ProcessProductStreamCopy Temperature.SetValue(T0,"K")
Cancel
OK

(d)



(e)

Figura A.25 de (a) até (e) – Código referente à variável do usuário eficiência racional de trocadores de calor.

A.26 - ESTIMATIVA DE CUSTO DE TROCADORES DE CALOR

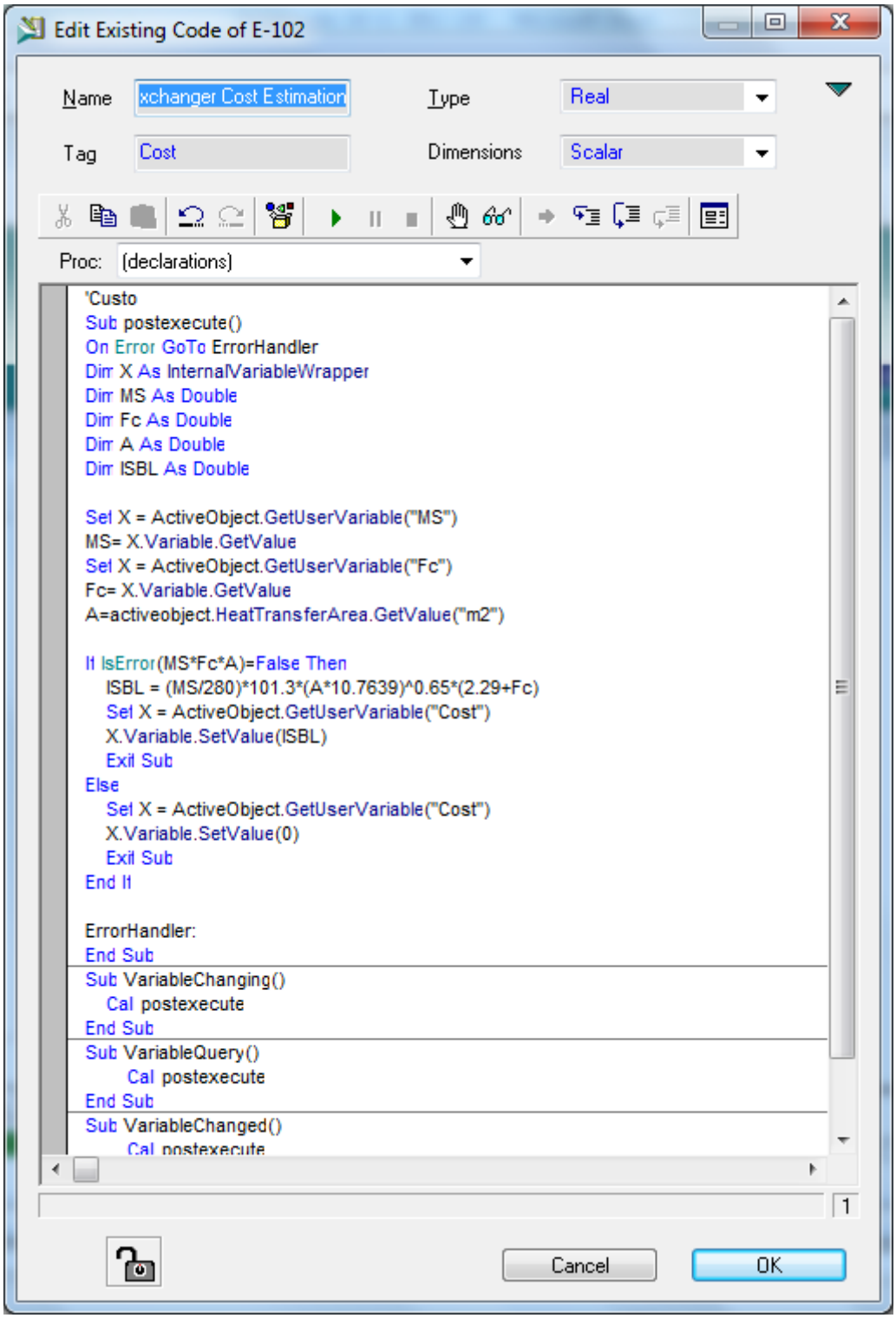


Figura A.26 – Código referente à variável do usuário estimativa do custo de investimento em trocadores de calor.

A.27 - IRREVERSIBILIDADE EM COLUNAS DE DESTILAÇÃO

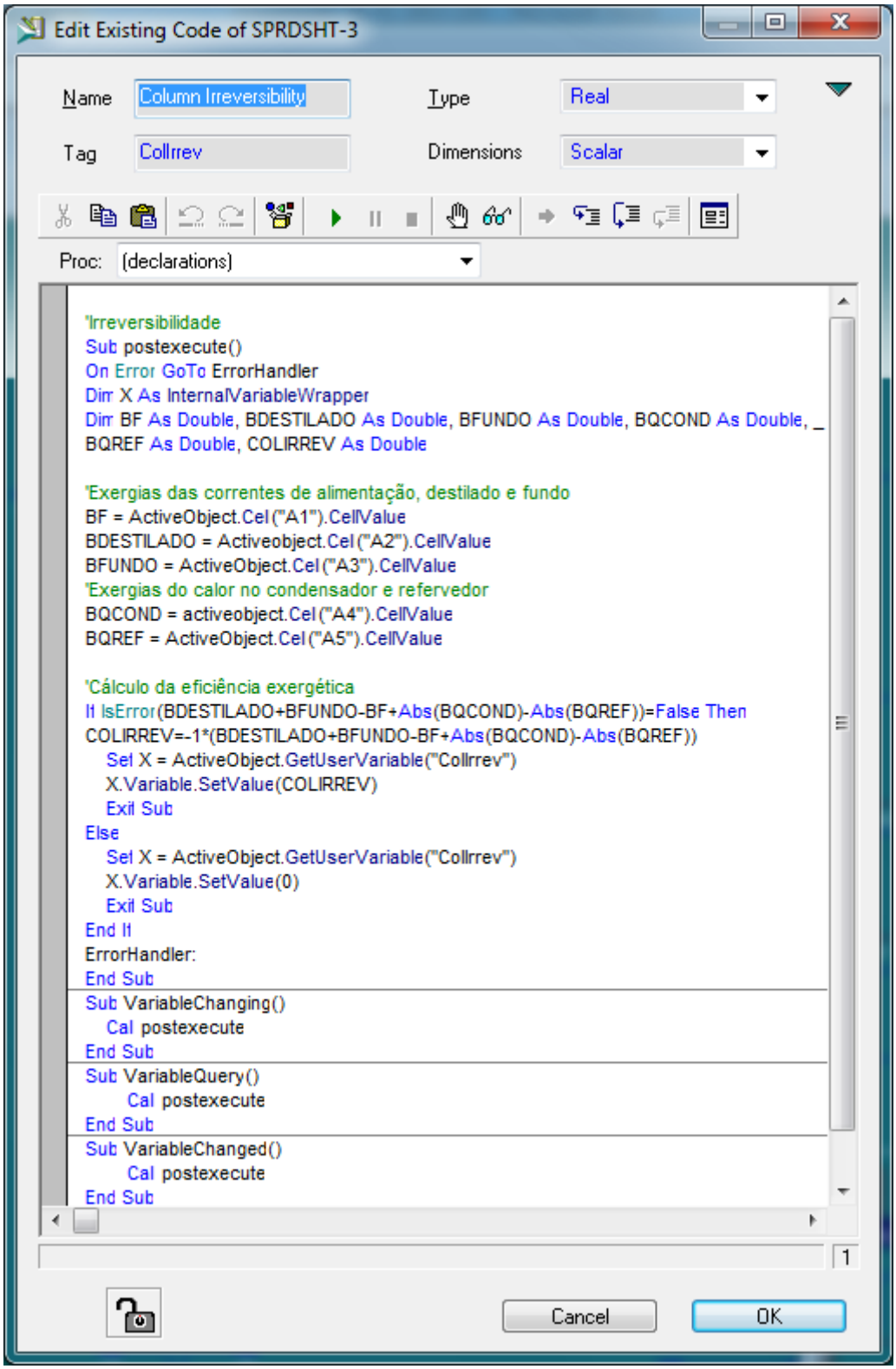


Figura A.27 – Código referente à variável do usuário irreversibilidade em colunas de destilação.

A.28 - EFICIÊNCIA RACIONAL EM COLUNAS DE DESTILAÇÃO

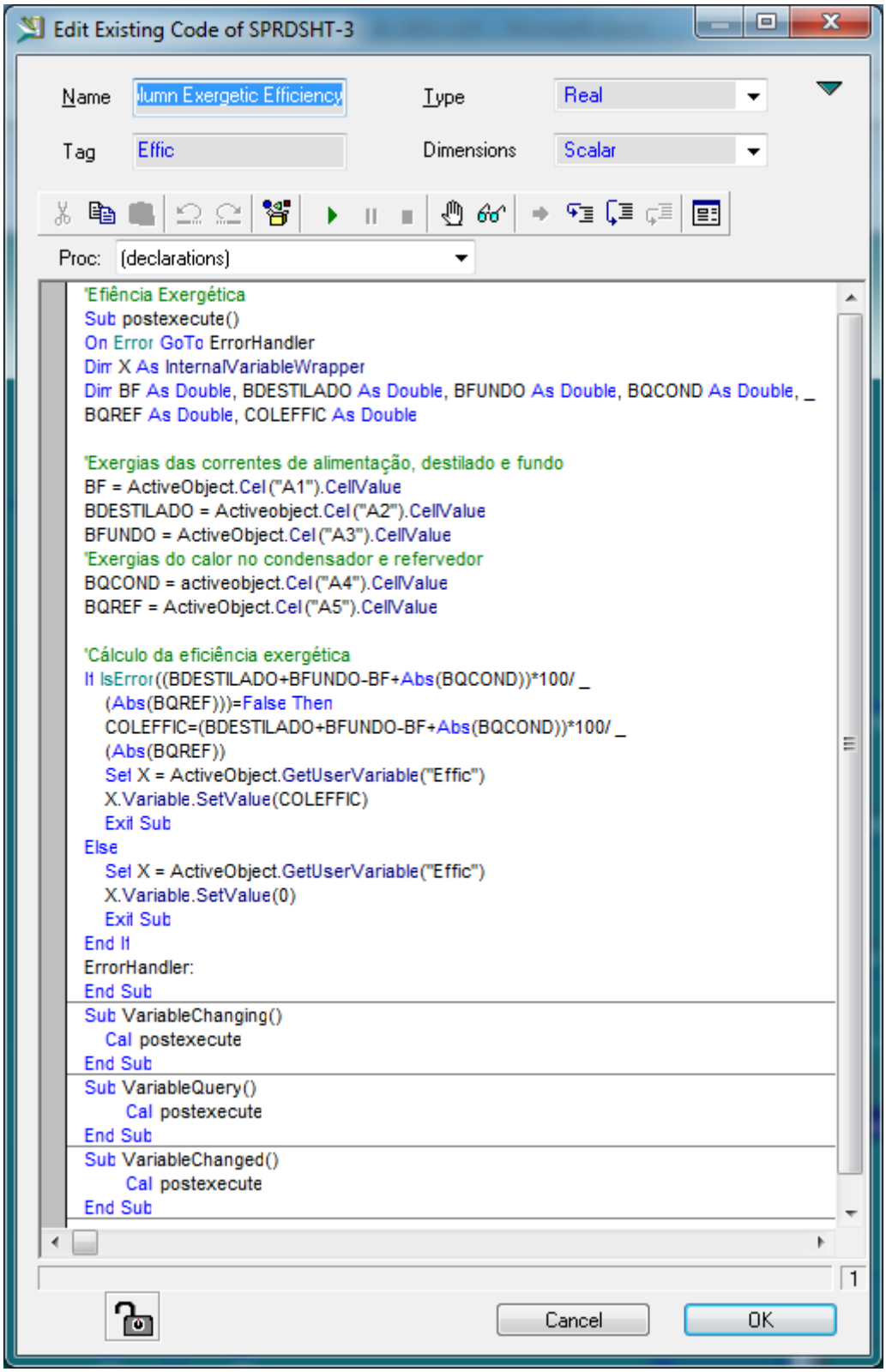


Figura A.28 – Código referente à variável do usuário eficiência racional em colunas de destilação.

A.29 - ESTIMATIVA DE CUSTO DE INVESTIMENTO EM COLUNAS DE DESTILAÇÃO

```
(Geral)                                                    ISBLCOL

Function ISBLCOL(MS As Double, DC As Double, _
HC As Double, ACOND As Double, AREF As Double)
'Função para cálculo do custo de investimento _
em coluna de destilação
'MS - índice Marshall e Swift da Chemical engineering
'Dc e Hc - diâmetro e altura da coluna em metro
'ACOND e AREF - áreas de transferência de calor do _
condensador e do refervedor em metros quadrados

ISBLCOL = (MS / 280) * 101.9 * (3.28084 * DC) ^ 1.066 * _
(3.28084 * HC) ^ 0.802 * 3.18 + _
(MS / 280) * 101.3 * (10.7639 * ACOND) ^ 0.65 * 3.29 + _
(MS / 280) * 101.3 * (10.7639 * AREF) ^ 0.65 * 3.29

End Function
```

Figura A.29 – Código referente à variável estimativa de custo de investimento em colunas de destilação.

A.30 - IRREVERSIBILIDADE EM COMBUSTORES

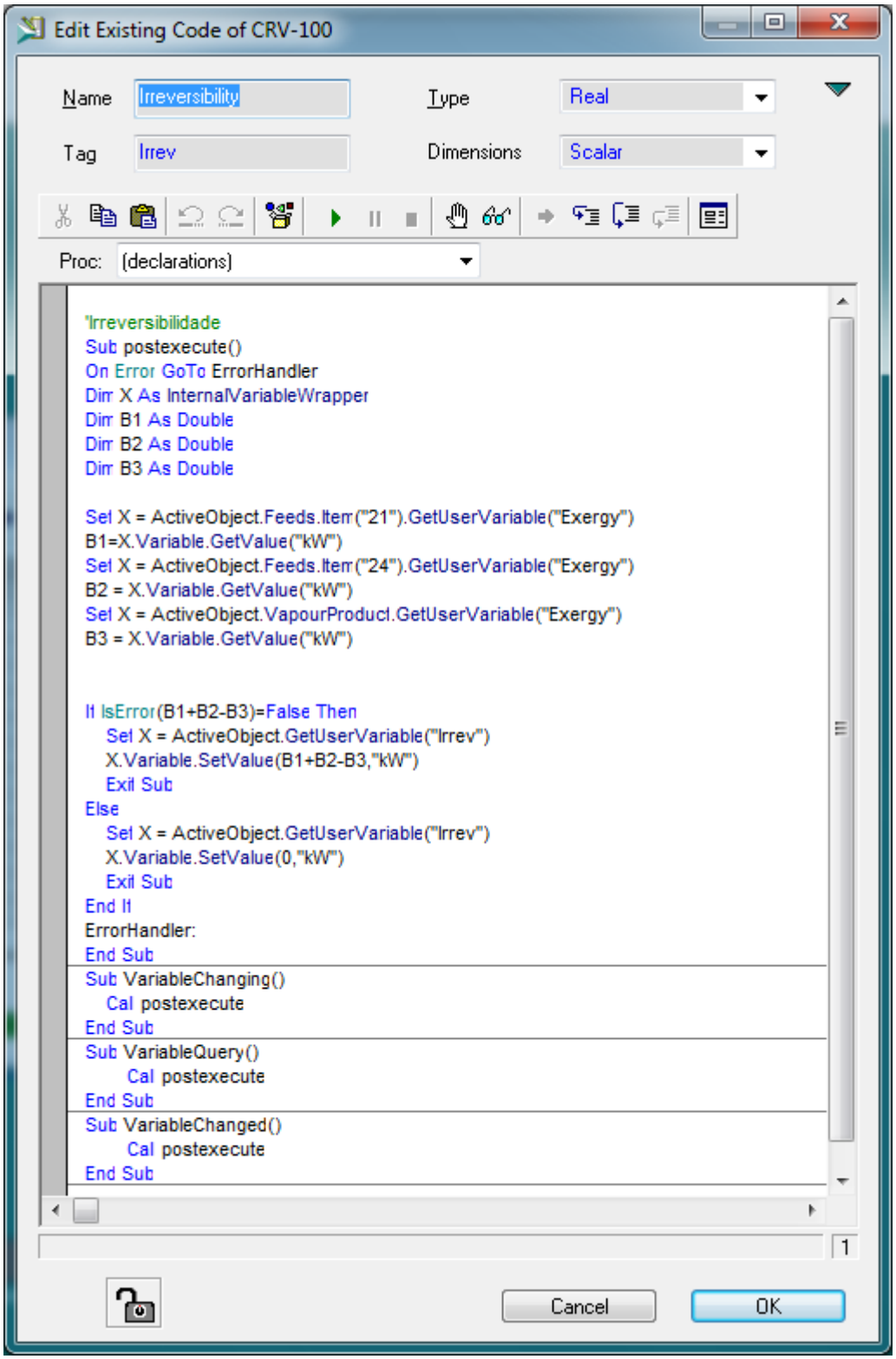


Figura A.30 – Código referente à variável do usuário irreversibilidade em combustores.

A.31 - EFICIÊNCIA EXERGÉTICA EM COMBUSTORES

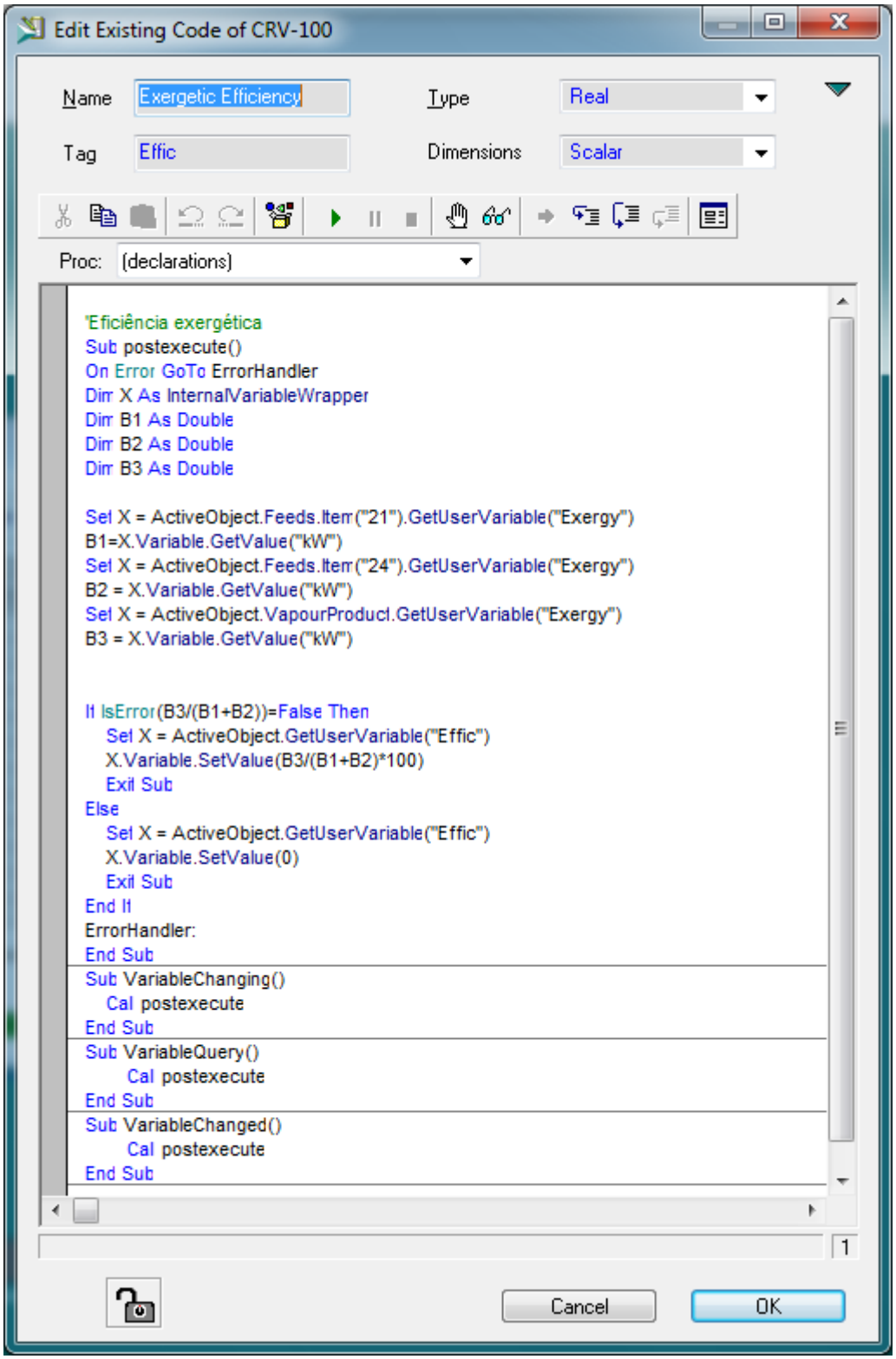


Figura A.31 – Código referente à variável do usuário eficiência exergética combustores.

A.32 – RESULTADO PARA O PROJETO DA TUBULAÇÃO

Memória de Cálculo:

Vazão, kg/h	P, kgf/cm² g	ρ, kg/m³	μ, cP	Schedule	Diâmetro nominal, in	T, °C	cp/cv	MM, kg/kmol	Trecho reto, m
9220,00	61,00	51,32	1,30E-02	40	2	30	1,53	18,44	100,00
9220,00	61,00	51,32	1,30E-02	40	2,5	30	1,53	18,44	100,00
9220,00	61,00	51,32	1,30E-02	40	3	30	1,53	18,44	100,00

Compressibilidade	Diâmetro Interno, mm	Velocidade, m/s	Fator de atrito	Perda De carga, kgf/cm²
0,87	52,5	23,05	0,0191	5,3043
0,87	62,7	16,16	0,0183	2,0353
0,87	77,9	10,47	0,0175	0,6476

Resultados no HYSYS®:

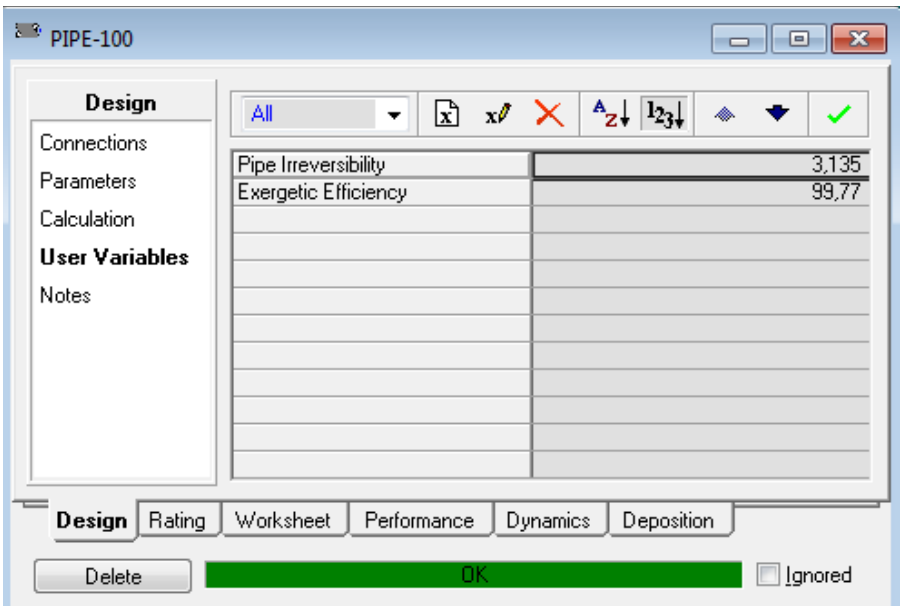


Figura A.32 – Resultado obtido para o projeto da tubulação.

ANEXO B

ANÁLISE DE DISPONIBILIDADE EM OUTROS TIPOS DE PROCESSOS

B.1 - REAÇÕES ENDOTÉRMICAS AQUECIDAS POR MÉTODOS CONVENCIONAIS

Há uma variedade de processos químicos endotérmicos, que dependem da aplicação de calor para suprir o calor de reação, e manter a temperatura de operação em um valor cujo rendimento seja satisfatório. Diferentes meios de aquecimento podem ser utilizados, como resistência elétrica (efeito Joule), vapor d'água e fornos. Algumas regras heurísticas encontram-se disponíveis na literatura (Ludwig, 1999) (Walas, 2002). A Tabela B.1 mostra uma comparação em termos de fluxo de calor.

Tabela B.1 – Tipo de aquecimento comumente (método heurístico) utilizado conforme fluxo máximo de calor. Adaptado de Walas (2002).

Tipo de aquecimento	**Fluxo máximo de calor (kW/m^2)**
Vapor	31
Forno seção de convecção	12
Forno seção de radiação	38

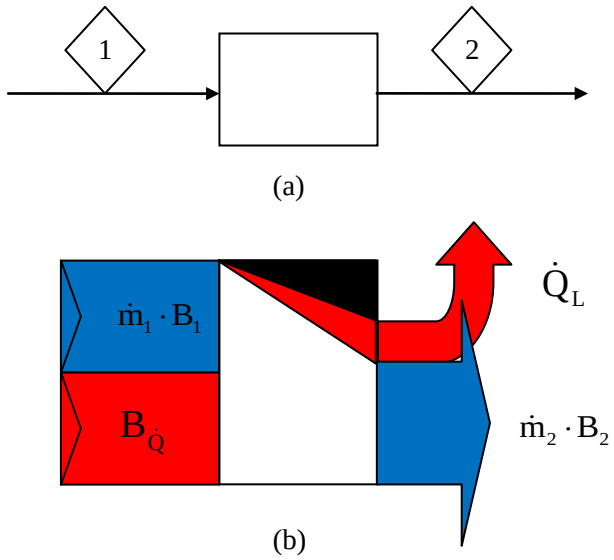
Em grande parte das aplicações, o calor atua como elemento de deslocamento do equilíbrio químico da reação endotérmica. Em alguns casos específicos, um controle da temperatura no reator se faz necessário para minimizar reações indesejadas ou paralelas.

O trabalho de Ghannadzadeh, et al., (2012) define a eficiência racional em processos químicos endotérmicos como sendo:

$$\psi = \frac{\dot{B}_{PRODUTO} - \dot{B}_{REAGENTE}}{\dot{B}_{Q}} \tag{B.1}$$

O projeto térmico de reatores químicos depende da situação específica e pode ser feito de modo adiabático, onde não há perda de calor; isotérmico ou com especificações de transferência de calor. A tabela B.2 mostra um resumo da análise de disponibilidade em reações endotérmicas.

Tabela B.2 – Análise exergética de reações endotérmicas.

Reações endotérmicas	
 **Figura B.1– (a) e (b)** Processo unitário com reação endotérmica representada em Fluxograma de Processo (a) e em Diagrama de Grassmann (b).	
Balanço de energia	$\dot{m}_2 \cdot H_2 - \dot{m}_1 \cdot H_1 = \lvert\dot{Q}\rvert - \lvert\dot{Q}_L\rvert$ (B.2)
Parâmetros de projeto	Rendimento, seletividade, parâmetros específicos
Critérios	Reciclo, *bypass*, temperatura e pressão de operação
Equação da exergia	$\dot{m}_2 \cdot B_2 - \dot{m}_1 \cdot B_1 - \lvert B_{\dot{Q}}\rvert = - \dot{m}_2 \cdot T_0 \cdot S_2 + \dot{m}_1 \cdot T_0 \cdot S_1 - \lvert\dot{Q}_L\rvert$ (B.3)
Fonte de irreversibilidade	Reação química (geração de entropia) Baixa conversão Gradiente de temperatura
Formas de melhoria	Reciclo Redução da temperatura de operação Pré-aquecimento da carga
Função objetivo	$\psi = \frac{\dot{B}_2 - \dot{B}_1}{\dot{B}_Q}$ (B.4)

B.2 - REAÇÕES ELETROQUÍMICAS

Os processos eletroquímicos utilizados para geração de energia possuem a grande vantagem da conversão direta da exergia química em trabalho. De modo que, não é necessário a conversão de calor em trabalho, o que é suficiente para reduzir a eficiência do sistema a valores menores que de uma máquina de Carnot (Smith, et al., 1987).

Além disso, o armazenamento de energia proveniente de fontes renováveis, como solar e eólica, em particular, é necessário porque essas fontes são descontinuas. Nesse âmbito, as seguintes formas de armazenamento são consideradas por Schoonman (2010) como as opções mais promissoras para armazenamento e conversão de energia sustentável: as baterias recarregáveis lítio-íon e o hidrogênio. Sendo que, o hidrogênio merece grande destaque. A sua utilização em células a combustível para a conversão da energia química em energia elétrica é uma forma limpa e eficiente de se produzir energia. Todavia, ainda é necessária a busca por tecnologias limpas para produção de hidrogênio. Para o armazenamento de energia em unidades isoladas de sistemas fotovoltaicos ou eólicos, consideram-se outras opções como: baterias eletromecânicas, ar comprimido, bobinas supercondutoras e outros tipos de baterias recarregáveis.

Entende-se por baterias, uma ou mais pilhas eletroquímicas conectadas eletricamente, com terminais de contato para o suprimento de energia elétrica. As baterias secundárias ou de segunda geração, são aquelas que após serem descarregadas, podem ser retornadas ao seu estágio inicial de carregamento, por meio de uma corrente elétrica com direção oposta a corrente de descarga. Há pelo menos sete tipos de pilhas eletroquímicas disponíveis no mercado: chumbo ácido; níquel-cádmio; níquel-hidreto metálico; lítio-íon; lítio-polímero; lítio-cerâmica; zinco-ar (Schoonman, 2010).

Tabela B.3 – Tensão média adotada na descarga de baterias recarregáveis. Adaptado de Schoonman (2010)

Bateria	Tensão (V)	Observação
Chumbo-ácido	2,0	Tecnologia de menor custo
Níquel-Cádmio	1,2	Apresenta efeito de memória
Níquel-Hidreto metálico	1,2	Sensível a mudanças de temperatura
Lítio-íon	3,0	Segura, pois não contém lítio metálico
Lítio-polímero	3,0	Contém lítio metálico
Zinco-Ar	1,2	Necessita de regulação do sistema de ar para evitar auto-descarregamento.

Dentre os tipos mencionados, em termos de armazenamento de energia, as baterias de lítio-íon merecem grande destaque. Primeiro, porque possuem maior capacidade de armazenamento em termos mássicos, o que as torna mais leves; além disso, trabalham com tensões de descarga maiores, o que amplifica suas possibilidades de aplicação; e são seguras, uma vez que, não contém lítio metálico. Além dessas vantagens, as baterias de lítio-íon não apresentam efeito de memória. (Schoonman, 2010)

Em um processo eletroquímico, sabe-se que a energia de Gibbs se relaciona com a diferença de potencial da célula, de acordo com a lei de Faraday. Sendo a diferença de potencial obtida através da equação de Nernst aplicada ao sistema eletroquímico em questão.

A tecnologia de células a combustível tem sido intensamente estudada e futuramente poderá substituir alguns tradicionais métodos de obtenção de energia. Do ponto de vista da instalação, as células a combustível podem ser aplicadas em unidade móveis ou estacionárias (Midilli, et al., 2009) (Camargo, 2004).

Midilli, et al., (2009) efetuaram a análise exergética de sistemas de células a combustível de membrana polimérica (PEMFC – *Proton Exchange Menbrane Fuel Cell*).

A reação global desse processo é dada pela equação abaixo:

$$H_{2(g)} + ½\ O_{2(g)} \longleftrightarrow H_2O_{(l)} \qquad \text{(B.5)}$$

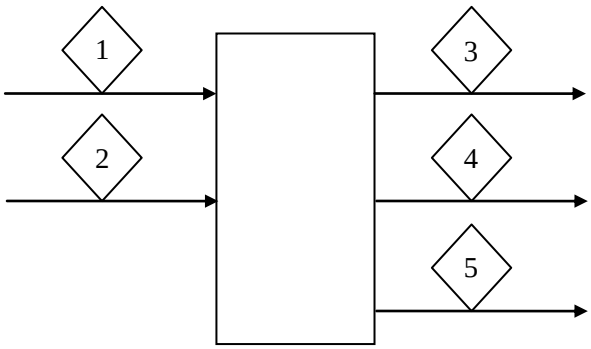
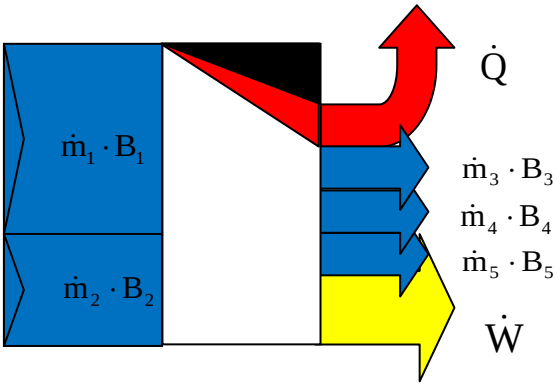
Midilli, et al., (2009) utilizaram os conceitos de correntes úteis e rejeitos. De acordo com os autores, a irreversibilidade de um sistema PEMFC é dada por:

$$\dot{I} = \dot{B}_{H_2}^{ENTRADA} + \dot{B}_{O_2}^{ENTRADA} - \dot{B}_{H_2}^{SAÍDA} - \dot{B}_{O_2}^{SAÍDA} - \dot{B}_{H_2 0}^{SAÍDA} - \left|\dot{W}\right| \qquad \text{(B.6)}$$

Neste trabalho, Midilli, et al., (2009) concluíram que há um *trade-off* entre a eficiência exergética e a potência da unidade. Sendo que, esse *trade-off* pode ser observado como função da densidade de corrente, como pela razão de exergia desperdiçada.

Entende-se por razão de exergia desperdiçada, o conteúdo exergético das correntes de hidrogênio não utilizado, oxigênio não reagido, água como produto e calor perdido para a atmosfera divido pelas correntes de entrada de exergia.

Tabela B.4 – Análise exergética de reações eletroquímicas.

Reações eletroquímicas	
 (a)  (b) **Figura B.2– (a) e (b)** Processo unitário com reação eletroquímica célula PEMFC representada em Fluxograma de Processo (a) e em Diagrama de Grassmann (b). Numeração das correntes 1: alimentação de hidrgênio, 2: alimentação de ar, 3: produto água líquida, 4: hidrogênio não utilizado, 5: ar não utilizado.	
Balanço de energia	$\dot{m}_3 \cdot H_3 + \dot{m}_4 \cdot H_4 + \dot{m}_5 \cdot H_5 - \dot{m}_1 \cdot H_1 - \dot{m}_2 \cdot H_2 = -\lvert\dot{Q}\rvert - \lvert\dot{W}\rvert$ (B.7)
Parâmetros de projeto	Tensão, potência
Critérios	Pressão, temperatura, espessura de membrana, densidade de corrente
Equação da exergia	$\dot{m}_3 \cdot B_3 + \dot{m}_4 \cdot B_4 + \dot{m}_5 \cdot B_5 - \dot{m}_1 \cdot B_1 - \dot{m}_2 \cdot B_2 + \lvert\dot{W}\rvert = \dot{m}_3 \cdot S_3 + \dot{m}_4 \cdot S_4 + \dot{m}_5 \cdot S_5 - \dot{m}_1 \cdot S_1 - \dot{m}_2 \cdot S_2 - \lvert\dot{Q}\rvert$ (B.8)

Fonte de irreversibilidade	Alta densidade de corrente Alto desperdício de exergia nos reagentes não convertidos
Formas de melhoria	Minimizar a densidade de corrente Redução de potência Maximizar o aproveitamento de hidrogênio
Função objetivo	$\eta = \dfrac{\lvert \dot{W} \rvert}{\dot{m}_1 \cdot B_1 + \dot{m}_2 \cdot B_2}$ (B.9)

B.3 - REAÇÕES COM EXERGIA FOTÔNICA

O cálculo da exergia contida na radiação solar uniforme e direta, que chega na atmosfera terrestre é descrito por Baniasadi, et al., (2012).

De acordo com Baniasadi, et al., (2012), utilizando T_0 = 293 K, tem-se:

$$\dot{B}_{SOL} = 1{,}2835\ \text{kW/m}^2 \tag{B.10}$$

Sendo que, na faixa do visível, de acordo com Baniasadi, et al., (2012), tem-se:

$$\dot{B}_{VIS} = 0{,}5155\ \text{kW/m}^2 \tag{B.11}$$

A exergia de uma emissão de radiação de uma superfície a temperatura ambiente (T_0) é zero. Por outro lado, a exergia de uma emissão de radiação de uma superfície cuja temperatura (T_S) seja diferente da temperatura ambiente, pode ser calculada por meio da seguinte equação:

$$\dot{B}_{SUP} = \alpha_S \cdot \frac{\varepsilon_b}{3} \cdot \left(3 \cdot T_s^4 + T_0^4 - 4 \cdot T_0 \cdot T_s^3\right) \tag{B.12}$$

Sendo:

α_S - Absortividade da superfície;

ε_b – Constante de Stefan–Boltzmann;

Com o intuito de avaliar a irreversibilidade de processos foto-catalíticos, a equação da exergia deve contabilizar todas as mudanças de entropia ocorridas como conseqüência do processo. Como o Sol ou a fonte de luz emite radiação, o espaço do reator é preenchido por trocas de radiação e sua respectiva produção de entropia. Quando um reator é iluminado com

uma fonte de luz, uma porção da radiação incidente é absorvida pelo catalisador. Outros efeitos inerentes são a transferência de calor por convecção e radiação da superfície do reator para o ambiente.

Para a produção de hidrogênio, o desenvolvimento de um concentrador eficiente de luz solar, na faixa de comprimento de onda adequado a reação, é o ponto chave para o sucesso deste tipo de processo, uma vez que, a luz solar é difusa e possui relativamente baixa intensidade de energia. Pesquisas recentes com BIPV (*Building Integrated Photovoltaics*) enfatizam em uma série de estratégias de integração de sistemas de geração de energia solar, com o intuito de aumentar a eficiência de conversão e a viabilidade econômica. Essas técnicas utilizam inversores, concentradores óticos e sistemas de gerenciamento térmico (Norton, 2011) (ANEEL, 2005).

Baniasadi, et al., (2012) apresentam as equações de exergia para dois sistemas pilotos de geração de hidrogênio diferentes. Ambos utilizam um concentrador parabólico que envolve o reator. O primeiro é um foto-reator híbrido utilizado para geração de hidrogênio através da quebra da molécula de água.

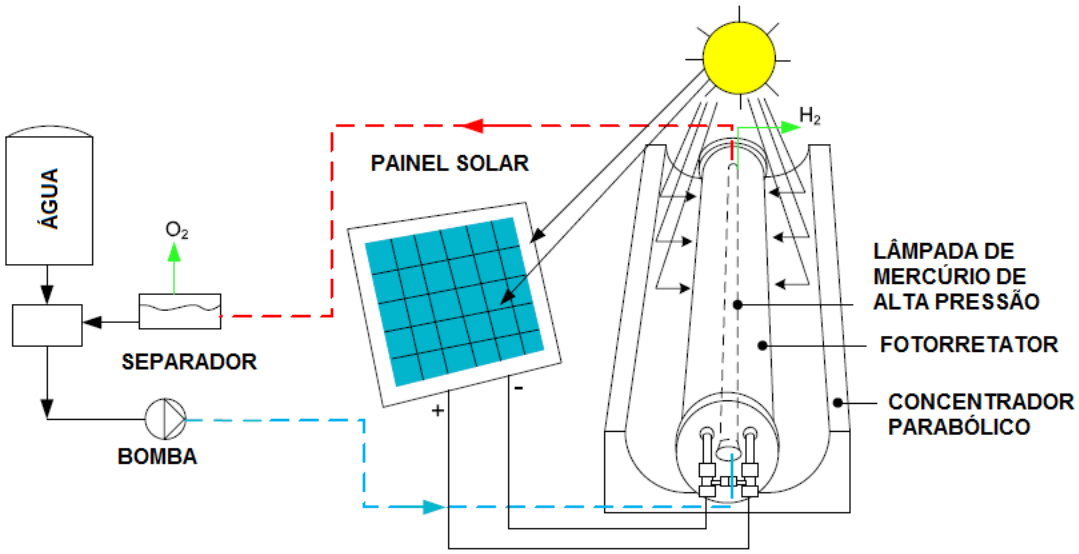


Figura B.3– Sistema piloto com fotorreator híbrido contínuo com iluminação solar e artificial. Adaptado de Baniasadi, et al., (2012)

A fotorredução da água ocorre de acordo com a seguinte reação:

$$2H_2O_{(l)} + 2e^- \xrightarrow{hf} H_{2(g)} + 2OH^- \quad ddp^0_{red} = -0{,}82V \qquad \text{(B.13)}$$

A membrana retém o catalisador, enquanto permite a passagem de íons hidroxila. O hidrogênio é então separado da água. Para controle de pH o excesso de carga é neutralizado:

$$2OH^- \longrightarrow 1/2O_{2(g)} + H_2O_{(l)} + 2e^- \quad ddp^0_{red} = 0{,}41V \qquad \text{(B.14)}$$

E a equação da exergia é dada por:

$$\begin{aligned} &\gamma \cdot A \cdot \left(\alpha_{VIS} \cdot \dot{B}_{VIS} + \alpha_{VIS} \cdot \left(\dot{B}_{SUP} - \dot{B}_{VIS}\right)\right) + \dot{m}^{ENTRADA}_{H_2O} \cdot B^{ENTRADA}_{H_2O} = \\ &\dot{m}_{O_2} \cdot B_{O_2} + \dot{m}_{H_2} \cdot B_{H_2} + \dot{m}^{SAÍDA}_{H_2O} \cdot B^{SAÍDA}_{H_2O} + \dot{I} \end{aligned} \qquad \text{(III.15)}$$

Sendo:

γ - fator de enfraquecimento da radiação.

O segundo exemplo, estudado por Baniasadi, et al., (2012) consiste de um sistema de reforma termo-solar do metanol:

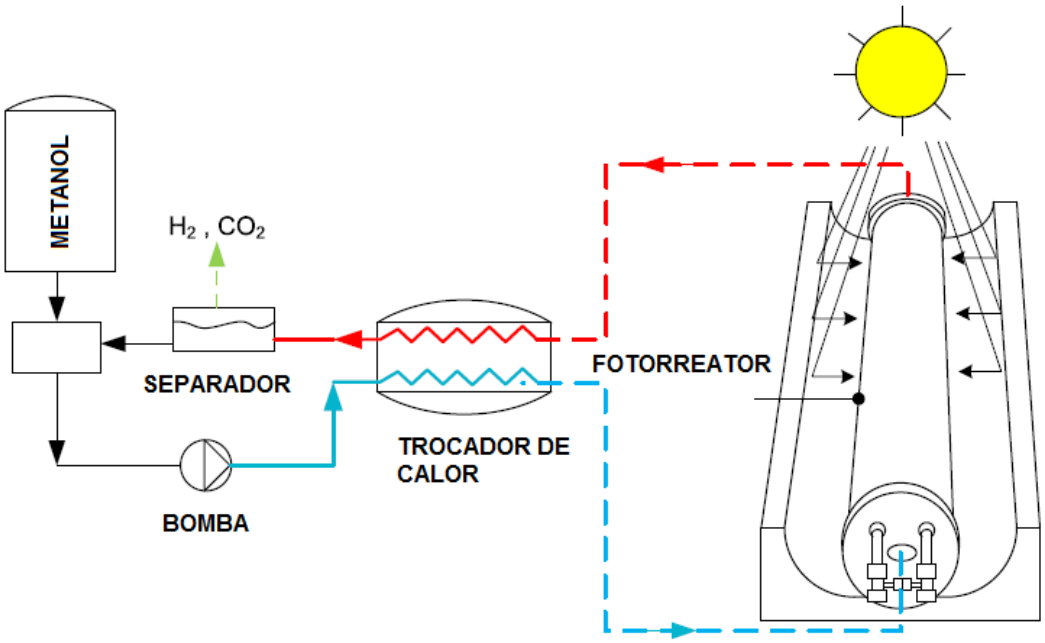


Figura B.4– Sistema piloto com fotorreator contínuo com iluminação solar. Adaptado de Baniasadi, et al., (2012).

A reação do processo é dada por:

$$CH_3OH + H_2O \xrightarrow{hf} CO_2 + 3H_2 \tag{B.16}$$

E a equação da exergia:

$$\begin{aligned} &\gamma \cdot A \cdot \dot{B}_{SUP} + \dot{m}_{CH_3OH} \cdot B_{CH_3OH} + + \dot{m}_{H_2O}^{ENTRADA} \cdot B_{H_2O}^{ENTRADA} = \\ &\dot{m}_{CO_2} \cdot B_{CO_2} + \dot{m}_{H_2} \cdot B_{H_2} + \dot{m}_{H_2O}^{SAÍDA} \cdot B_{H_2O}^{SAÍDA} + \dot{I} \end{aligned} \tag{B.17}$$

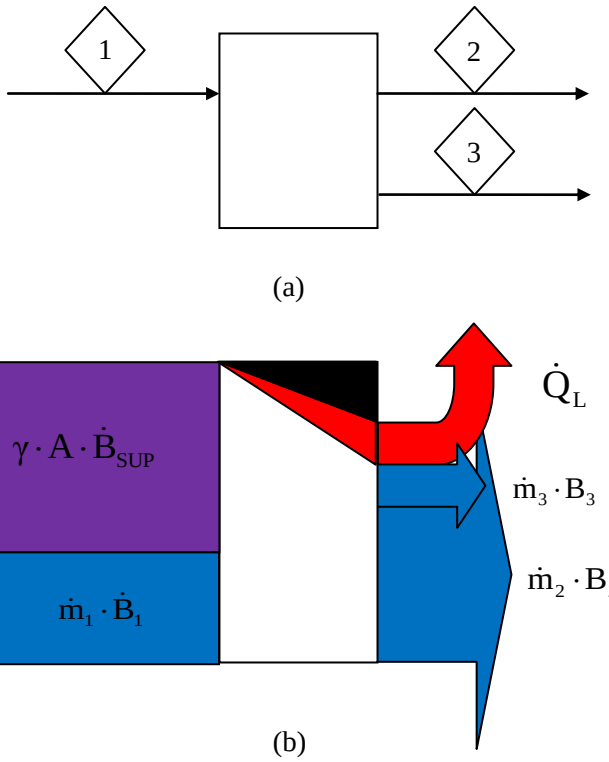
Os autores atribuem os seguintes dados de entrada nas variáveis: temperatura ambiente: T_0 = 293 K; pressão ambiente P_0 = 101,325 kPa; fator de enfraquecimento da radiação γ = 0,8; absortividade do catalisador incluindo a região do visível (VIS) α_{VIS} = 0.31; absortividade do catalisador na região além do visível α_L = 1.8 (Baniasadi, et al., 2012).

De acordo com Baniasadi, et al., (2012), apesar de hidrogênio e oxigênio serem produzidos, apenas o hidrogênio é considerado como saída útil. A perda por irreversibilidade engloba quatro componentes: reação química, mudança na condição da corrente de água e transferência de calor por radiação e convecção da superfície do reator.

Baniasadi, et al., (2012) também consideram no cálculo da eficiência exergética a componente cinética da exergia. De acordo com os autores, uma maior exergia cinética é capaz de aumentar as interações entre os sítios ativos do catalisador e as moléculas de água.

A Tabela B.5 apresenta um resumo para análise de disponibilidade em reações com exergia fotônica.

Tabela B.5 – Análise exergética de reações com exergia fotônica.

Reações com exergia fotônica	
 **Figura B.5– (a) e (b)** Processo unitário de reação com exergia fotônica Fluxograma de Processo (a) e em Diagrama de Grassmann (b).	
Balanço de energia	$-\dot{m}_1 \cdot H_1 + \dot{m}_2 \cdot H_2 + \dot{m}_3 \cdot H_3 = \lvert\dot{Q}\rvert - \lvert\dot{Q}_L\rvert$ (B.18)
Parâmetros de projeto	Rendimento
Critérios	Concentração de catalisador, vazão, intensidade da radiação solar
Equação da exergia	$-\dot{m}_1 \cdot B_1 - \gamma \cdot A \cdot \dot{B}_{SOL} + \dot{m}_3 \cdot B_3 + \dot{m}_2 \cdot B_2 = \dot{m}_2 \cdot S_2 + \dot{m}_3 \cdot S_3 - \dot{m}_1 \cdot S_1 - \lvert\dot{Q}_L\rvert$ (B.19)
Fonte de irreversibilidade	Reação química Mudança na condição da corrente de água Transferência de calor por radiação e convecção da superfície do reator
Formas de melhoria	Menor concentração de catalisador Menor vazão

	Aumento da intensidade de energia solar
Função objetivo	$$\eta = \frac{\dot{m}_2 \cdot B_2}{\gamma \cdot A \cdot \dot{B}_{SUP} + \dot{m}_1 \cdot \dot{B}_1} \quad (B.20)$$

ANEXO C

RELAÇÃO INTERDISCIPLINAR DA EXERGIA

C.1 – RELAÇÃO INTERDISCIPLINAR DA EXERGIA

Os resultados da análise exergética permitem inferir em diferentes áreas de conhecimento. As características dos processos físico-químicos reversíveis e irreversíveis são contrapostos na Tabela C.1

Tabela C.1 – Característica dos processos físico-químicos reversíveis e irreversíveis para diferentes áreas de conhecimento.

Área de conhecimento	**Processo irreversível**	**Processo reversível**
Termodinâmica	Possui ineficiência	Intangível Adiabático e com variação de entropia nula
Química	Maior afinidade química e taxa de produção de entropia	Tende ao equilíbrio químico
Transporte	Maior força motriz, fluxo e taxa de transferência de massa, calor e momento	É o limite onde força motriz, fluxo e taxa de transferência de massa, calor e momento tendem a zero
Meio ambiente e Sustentabilidade	Maior uso dos recursos, Maior produção de rejeitos, Maior produção de desordem, Maior impacto ambiental	Melhor aproveitamento dos recursos, Menor produção de rejeitos, Menor impacto ambiental
Termoeconomia	Investimento viável, Produtos com alto custo exergético	Investimento inviável, Produtos com baixo custo exergético

O êxito da análise exergética consiste na busca pelo alinhamento entre sustentabilidade e viabilidade econômica. Podendo ser utilizada como instrumento para configurar viabilidade a tecnologias sustentáveis, uma vez que, consiste de uma iniciativa para contabilizar as externalidades através do custo exergético.