

Universidade Federal de Ouro Preto

Escola de Minas

Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica

PROPEM

Dissertação

**AVALIAÇÃO TÉCNICA,
ECONÔMICA E AMBIENTAL DE
UMA PLANTA DE CAPTURA E
USO DE CARBONO
EMPREGANDO OS GASES
PROVENIENTES DE UM
PROCESSO SIDERÚRGICO:
ESTUDO DE CASO COM UMA
TURBINA A GÁS.**

Natália Ribeiro

2022

Ouro Preto



UFOP

NATÁLIA RIBEIRO

**AVALIAÇÃO TÉCNICA, ECONÔMICA E AMBIENTAL DE UMA PLANTA DE
CAPTURA E USO DE CARBONO EMPREGANDO OS GASES PROVENIENTES DE UM
PROCESSO SIDERÚRGICO: ESTUDO DE CASO COM UMA TURBINA A GÁS**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Ouro Preto, como requisito parcial à obtenção do título de Mestre em Engenharia Mecânica.

Área de concentração: Térmica e Fluidos

Orientador: Prof^a. Elisângela Martins Leal, D.Sc.

Ouro Preto, MG

2022

SISBIN - SISTEMA DE BIBLIOTECAS E INFORMAÇÃO

R484a Ribeiro, Natalia.

Avaliação técnica, econômica e ambiental de uma planta de captura e uso de carbono empregando os gases provenientes de um processo siderúrgico [manuscrito]: estudo de caso com uma turbina a gás. / Natalia Ribeiro. - 2022.

137 f.: il.: color., gráf., tab..

Orientadora: Profa. Dra. Elisângela Martins Leal.

Dissertação (Mestrado Acadêmico). Universidade Federal de Ouro Preto. Departamento de Engenharia Mecânica. Programa de Pós- Graduação em Engenharia Mecânica.

1. Captura e Utilização de Carbono (CCU). 2. Turbinas à gás - Análise energética. 3. Turbinas à gás - Análise exergética. 4. Turbinas à gás- Análise econômica. 5. Turbinas à gás - Análise ambiental. 6. Siderurgia - Processo siderúrgico. I. Leal, Elisângela Martins. II. Universidade Federal de Ouro Preto. III. Título.

CDU 621

Bibliotecário(a) Responsável: Maristela Sanches Lima Mesquita - CRB-1716



FOLHA DE APROVAÇÃO

Natália Ribeiro

Avaliação técnica, econômica e ambiental de uma planta de captura e uso de carbono empregando os gases provenientes de um processo siderúrgico: estudo de caso com uma turbina a gás

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Ouro Preto como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Engenharia Mecânica

Aprovada em 11 de julho de 2022

Membros da banca

Ph.D. Elisângela Martins Leal - Orientadora - Universidade Federal de Ouro Preto
D.Sc. Luiz Gustavo Monteiro Guimarães - Universidade Federal de São João Del-Rei
D.Sc. Paulo Santos Assis - Universidade Federal de Ouro Preto
D.Sc. Luís Antônio Bortolaia - Universidade Federal de Ouro Preto

Elisângela Martins Leal, orientadora do trabalho, aprovou a versão final e autorizou seu depósito no Repositório Institucional da UFOP em 11/07/2022



Documento assinado eletronicamente por **Elisangela Martins Leal**, **PROFESSOR DE MAGISTERIO SUPERIOR**, em 11/07/2022, às 09:00, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



A autenticidade deste documento pode ser conferida no site http://sei.ufop.br/sei/controlador_externo.php?acao=documento_conferir&id_orgao_acesso_externo=0, informando o código verificador **0359597** e o código CRC **445F8753**.

Aos meus pais, Edna e Vanderlei.

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente a Deus por guiar e iluminar o meu caminho, possibilitando que eu chegasse até aqui.

Aos meus pais, Edna e Vanderlei, e meu irmão, Rafael, por serem inspiração e por todo apoio que me oferecem em todas as etapas da minha vida. Sou grata por ter vocês ao meu lado.

A minha família por todo cuidado e carinho, em especial a minha avó Olga e a minha tia Márcia, pessoas que sempre me apoiaram.

Ao meu namorado Jonas por ser meu melhor amigo, por me encorajar a confiar mais em mim e por não medir esforços para estar ao meu lado.

Aos meus amigos pelos momentos que passamos juntos, por me ouvirem e pelos conselhos que me oferecem.

Aos professores que me proporcionaram chegar até aqui, contribuindo com os seus conhecimentos.

Aos membros da banca que aceitaram o convite e se disponibilizaram a avaliar o meu trabalho.

A professora Elisangela, pela orientação, conhecimentos passados e paciência comigo ao longo dessa jornada.

À Universidade Federal de Ouro Preto, à FAPEMIG, à Fundação Gorceix e à CAPES minha gratidão.

“Pergunte a si mesmo o que é realmente importante. Então, tenha coragem e sabedoria para construir a sua vida dentro da sua resposta.” (Lee Jampolsky)

RESUMO

O presente trabalho visa a análise técnica, econômica e ambiental de uma planta de captura e uso de carbono dos gases de exaustão de um processo siderúrgico para sua conversão em hidrocarbonetos e álcoois de interesse. Nesse sentido, é utilizado inicialmente o fluxograma COFE do CAPE-OPEN para avaliar os parâmetros operacionais a fim de obter um ponto ótimo para a conversão do gás de síntese em metanol. Na primeira análise, são simuladas as seguintes taxas de conversão de carbono em metanol a partir do gás de síntese: 58%-23% CO-CO₂; 64%-17% CO-CO₂ e 70%-11% CO-CO₂. Na segunda análise, o número de estágios na coluna de destilação é variado de 20 a 60 estágios. Para essas condições, a conversão de 58% de monóxido de carbono e 23% de dióxido de carbono em metanol é a menos atrativa. Em relação a alteração do número de estágios da coluna de destilação, a de 20 estágios representa a melhor opção. Posteriormente, o *software* CEA é utilizado para avaliar o comportamento das frações molares do gás de síntese em um reator de deslocamento água-gás. A melhor faixa de parâmetros operacionais obtidos é de 200 a 250°C para temperatura e 4,5 MPa para pressão e relação H₂/CO₂ de 2,0. Em seguida, é realizado um estudo sobre a cinética e a influência do reator de leito fixo adiabático e do catalisador comercial Cu/ZnO/Al₂O₃ na síntese de *Fischer Tropsch* para a formação de metanol e etanol. Através desse, é observado que, para a conversão em metanol, quanto maior a razão H₂/CO₂ maior a formação desse produto e menor a fração de CO₂. Já para a formação de etanol, percebe-se que as frações desse combustível e de CO₂ diminuem com o aumento da razão H₂/CO₂. Por fim, é realizado um estudo de caso contendo as análises exergoeconômica e exergoambiental de uma turbina a gás tendo como combustível o metanol. A menor eficiência exérgica obtida no ciclo é a do compressor (27,02%) enquanto a maior é da câmara de combustão (48,63%). Em relação ao fator exergoeconômico, o menor valor é apresentado pela câmara de combustão, o que representa uma menor possibilidade de reduzir as irreversibilidades no equipamento. A turbina é o componente que apresenta a maior taxa de impacto ambiental, enquanto a câmara de combustão é o equipamento que demonstra maior facilidade de redução desse tipo de impacto, uma vez que apresentou um valor de indicador superior aos demais. Dessa forma, os resultados mostram que é possível a partir do gás de síntese produzir combustíveis que podem ser aplicados em equipamentos como a turbina a gás e além disso promover alterações que visam aumentar a eficiência com vistas a sustentabilidade.

Palavras-chave: captura e uso de dióxido de carbono (CCU), análise energética, análise exérgica, análise econômica, análise ambiental, *software*, processo siderúrgico.

ABSTRACT

The present work aims at the technical, economic and environmental analysis of a plant to capture and use carbon the exhaust gases of a steelmaking process for its conversion into hydrocarbons and alcohols of interest. In this sense, the CAPE-OPEN COFE flowchart is initially used to evaluate the operational parameters in order to obtain an optimal point for the conversion of synthesis gas into methanol. In the first analysis, the following conversion rates of carbon to methanol from the synthesis gas are simulated: 58%-23% CO-CO₂; 64%-17% CO-CO₂ and 70%-11% CO-CO₂. In the second analysis, the number of stages in the distillation column is varied from 20 to 60 stages. For these conditions, the condition of 58% carbon monoxide and 23% carbon dioxide to methanol is the least attractive. In the case of changing the number of stages of the distillation column, the 20 stage represents the best option. Subsequently, the CEA software is used to evaluate the behavior of the molar fractions of the synthesis gas in a water-gas shift reactor. The best range of operational parameters obtained is 200 to 250°C for temperature and 4.5 MPa for pressure and H₂/CO₂ ratio of 2.0. Then, a study is carried out on the kinetics and influence of the plug-flow reactor and the commercial catalyst Cu/ZnO/Al₂O₃ on the Fischer Tropsch synthesis for the formation of methanol and ethanol. Through this, it is observed that, for the conversion to methanol, the higher the H₂/CO₂ ratio, the greater the formation of this product and the lower the CO₂ fraction. As for the formation of ethanol, it can be seen that the fractions of this fuel and of CO₂ decrease with the increase of the H₂/CO₂ ratio. Finally, a case study is carried out containing the thermodynamic, exergoeconomic and exergoenvironmental analyzes of a gas turbine using metanol as fuel is analyzed. The lowest exergetic efficiency obtained in the cycle under analysis is that of the compressor (27.02%) while the highest value is presented by the combustion chamber (48.63%). Regarding the exergoeconomic factor, the lowest value is presented by the combustion chamber, which represents a possibility of reducing the exergy destruction. The turbine is the component that has the highest rate of environmental impact, while the combustion chamber is the equipment that demonstrates greater ease of reducing this type of impact, since it presented a higher indicator value than the others. In this way, the results show that it is possible from the synthesis gas to produce fuels that can be applied in equipment such as the gas turbine and in addition to promote changes that aim to increase efficiency with a view to sustainability.

Keywords: carbon dioxide capture and use (CCU), energy analysis, exergy analysis, economic analysis, environmental analysis, software, steelmaking process.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 - Os três pilares da sustentabilidade.....	2
Figura 2 - Fluxograma de uma planta de GTL.....	4
Figura 3 - Funcionamento do alto-forno.....	5
Figura 4 - Distribuição da energia elétrica por fonte.....	11
Figura 5 - Fluxo de Energia Elétrica - BEN 2018/ano base 2017.....	12
Figura 6 - Fluxo simplificado de produção do aço.....	20
Figura 7 - Esquema exemplificando a captura, utilização e armazenamento (CCUS).	23
Figura 8 - Esquemático de uma Turbina a gás.....	29
Figura 9 - Diagramas (a) T-s e (b) P-v do ciclo Brayton ideal.....	30
Figura 10 - Relação pCO_2/pCO no equilíbrio de redução de alguns óxidos e para a reação de <i>Boudouard</i> em função do inverso da temperatura.....	40
Figura 11 - Fluxograma das etapas para a realização deste estudo.....	42
Figura 12 - Simulação no <i>software</i> COFE da planta de síntese de gases.....	47
Figura 13 – Validação do fluxograma COFE a partir das frações molares de cada corrente.....	48
Figura 14 – Fluxograma elaborado no DWSIM.....	50
Figura 15 – Configuração da reação catalítica heterogênea no DWSIM.....	53
Figura 16 - Modelo de fluxograma do ciclo de turbina a gás utilizado para o estudo.	55
Figura 17 - Resultados da variação da taxa de reação de CO e CO ₂ na corrente de metanol em termos de: (a) temperatura, vazão e pressão e (b) frações molares dos componentes.....	57
Figura 18 - Resultados da variação da taxa de reação de CO e CO ₂ na corrente de água em termos de: (a) temperatura, vazão e pressão e (b) frações molares dos componentes.....	58

Figura 19 - Resultados da variação da taxa de reação de CO e CO ₂ na corrente ventilada em termos de: (a) temperatura, vazão e pressão e (b) frações molares dos componentes.	59
Figura 20 - Resultados da variação do número de estágios da coluna de destilação na corrente de metanol em termos de: (a) temperatura, vazão e pressão e (b) frações molares dos componentes.	61
Figura 21 - Resultados da variação do número de estágios da coluna de destilação na corrente de água em termos de: (a) temperatura, vazão e pressão e (b) frações molares dos componentes.	62
Figura 22 - Resultados da variação do número de estágios da coluna de destilação na corrente ventilada em termos de: (a) temperatura, vazão e pressão e (b) frações molares dos componentes.	63
Figura 23 – Fluxograma do processo de conversão do gás de alto-forno em produtos com carbono.	64
Figura 24 – Formação do gás de síntese através da reação de troca água-gás para a razão molar vapor-carbono de 1,6.	65
Figura 25 – Formação do gás de síntese através da reação de troca água-gás para a razão molar vapor-carbono de 2,0.	66
Figura 26 – Formação do gás de síntese através do equilíbrio da reação de troca água-gás, para a razão de H ₂ /CO ₂ e H ₂ /CO igual a 1,5.	68
Figura 27 - Formação do Gás de Síntese através do equilíbrio da reação de troca água-gás, para a razão de H ₂ /CO ₂ e H ₂ /CO igual a 2.	68
Figura 28 - Formação de compostos com carbono através da síntese de <i>Fischer Tropsch</i> para as razões de H ₂ /CO ₂ e H ₂ /CO iguais a 2 e 1,5 à pressão constante de 4,5 MPa e 3,5 MPa.	70
Figura 29 - Formação de compostos com carbono através da síntese de <i>Fischer Tropsch</i> para as razões de H ₂ /CO ₂ e H ₂ /CO iguais a 2 e 1,5 à pressão constante de 2,5 MPa e 2,0 MPa.	71
Figura 30 - Composição da corrente de (a) metanol e (b) etanol líquido obtida no DWSIM.	73

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Distribuição regional da produção de aço bruto.....	18
Tabela 2 - Histórico da produção da indústria siderúrgica brasileira (em milhares de toneladas) entre os anos de 2015 a 2019.....	19
Tabela 3 - Plantas comerciais da síntese de <i>Fischer Tropsch</i>	26
Tabela 4 - Fatores de normalização e pesos para a perspectiva (H, A) para as três categorias de danos.	37
Tabela 5 - Geração de dióxido de carbono no processo de fabricação de aço.	45
Tabela 6 - Composição química do gás de alto-forno usada no trabalho.....	46
Tabela 7 - Valores inseridos no DWSIM na configuração do reator.	53
Tabela 8 - Dados referente a turbina Siemens SGT-300.	54
Tabela 9 - Considerações para o desenvolvimento da análise termodinâmica.....	55
Tabela 10 - Composição do gás de síntese simulado.	67
Tabela 11 - Melhores razões H_2/CO_2 e H_2/CO e suas respectivas temperaturas.....	69
Tabela 12 - Resultados encontrados na análise termodinâmica.	76
Tabela 13 - Resultados obtidos através das análises exérgica, exergoeconômica e exergoambiental.....	77

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

ABM	Associação Brasileira de Metalurgia
ACV	Avaliação do Ciclo de Vida
AICV	Avaliação do Impacto do Ciclo de Vida
BEN	Balanco Energético Nacional
BOF	Forno de oxigênio básico (<i>Basic oxygen furnace</i>)
COP21	21ª Conferência do Clima
COPAM	Conselho Estadual de Política Ambiental
CSN	Companhia Siderúrgica Nacional
CSP	Companhia Siderúrgica do Pecém
CCU	Captura e Uso de Carbono (<i>Carbon Capture and Use</i>)
CCUS	Captura, Uso e Armazenamento de Carbono (<i>Carbon Capture, Utilization and Storage</i>)
DALY	Ano de vida ajustado por incapacidade (<i>Disability Adjusted Life Years</i>)
EAF	Forno a arco elétrico (<i>Electric Arc Furnace</i>)
ECO 1992	Conferência das Nações Unidas sobre Meio Ambiente e Desenvolvimento
EM	Exergia Mecânica
EPE	Empresa de Pesquisa Energética
FEAM	Fundação Estadual do Meio Ambiente em Minas Gerais
FT	Processo de <i>Fischer-Tropsch</i>
FWC	Consumo de água doce (<i>Fresh Water Consumption</i>)
GAF	Gás de alto-forno
GTL	Gás para líquidos (<i>Gas-to-liquids</i>)
HTFT	<i>Fischer-Tropsch</i> de alta temperatura (<i>High Temperature Fischer-Tropsch</i>)
IBAMA	Instituto Brasileiro do Meio Ambiente e dos Recursos Naturais Renováveis
IBGE	Instituto Brasileiro de Geografia e Estatística
ICV	Análise do Inventário do Ciclo de Vida
LTFT	Síntese de <i>Fischer-Tropsch</i> em baixa temperatura (<i>Low Temperature Fischer-Tropsch</i>)
MRIO	Multi-regional <i>input-output</i>
ONU	Organização das Nações Unidas
PDE	Plano Decenal de Energia

PFR	Reator de Leito Fixo (<i>Plug-Flow Reactor</i>)
SEMAD	Secretaria de Estado de Meio Ambiente e Desenvolvimento Sustentável
SISNAMA	Sistema Nacional do Meio Ambiente
ULCOS	Fabricação de aço com CO ₂ ultra baixo (<i>Ultra-Low CO₂ Steelmaking</i>)
WGSR	Reação de deslocamento de gás-água (<i>The water gas shift reaction</i>)
3R	Reutilizar, reduzir e reciclar

Elementos químicos

Al ₂ O ₃	Óxido de alumínio
C	Carbono
C ₁₂ H ₂₃	Querosene de aviação
C ₂ H ₅ OH	Etanol
C ₃ H ₇ OH	Isopropanol
C ₈ H ₁₈ OH	Octanol
CH ₃ OH	Metanol
CH ₄	Metano
CO	Monóxido de carbono
CO ₂	Dióxido de carbono
Cu	Cobre
Fe	Ferro
H ₂	Hidrogênio
H ₂ O	Água
HFCs	Hidrofluorcarbonos
N ₂	Gás nitrogênio
N ₂ O	Óxido nitroso
Ni	Níquel
NO _x	Óxidos de nitrogênio
O ₂	Oxigênio
PFCs	Compostos perfluorados
Pm	Promécio
Rh	Ródio
Ru	Rutênio
SF ₆	Hexafluoreto de enxofre
SO ₂	Dióxido de enxofre
ZnO	Óxido de zinco

LISTA DE SÍMBOLOS

b	Ecoindicador específico [mPt/kJ]
\dot{B}	Taxa de impacto ambiental [mPt/s]
E	Energia [kJ]
Ex	Exergia [kJ]
g	Aceleração da gravidade [m/s ²]
h	Entalpia específica [kJ/kg]
m	Massa [kg]
\dot{m}	Vazão mássica [kg/s]
n	Número de mols [mol]
p	Pressão [Pa]
\dot{Q}	Taxa de transferência de calor [kW]
r	Diferença relativa [adimensional]
s	Entropia específica [kJ/kgK]
\bar{s}	Entropia específica molar [kJ/kmol.K]
S	Entropia [kJ/K]
t	Tempo [s]
T	Temperatura [K ou °C]
V	Velocidade do fluido [m/s]
\dot{W}	Potência [kW]
\dot{Y}	Taxa referente ao impacto ambiental [mPt/s]
Z	Altura em relação ao referencial adotado [m]

Sobrescrito

C	Cinética
CO	Construção
DI	Descarte
F	Física
OM	Operação e manutenção
P	Gravitacional
Q	Química

Subscrito

D	Destruição de exergia
e	Entrada
f	Combustível
j	Componente j
k	Componente k
p	Produto
s	Saída
VC	Volume de controle
0	Estado termodinâmico de referência

Símbolos Gregos

μ	Potencial químico [J/mol]
$\dot{\sigma}$	Taxa de geração de entropia causada pelas irreversibilidades internas do volume de controle [W/K]
Σ	Somatório
Δ	Variação

SUMÁRIO

1.	INTRODUÇÃO.....	1
1.1	Objetivos Geral e Específicos	6
1.1.1	Geral	6
1.1.2	Específicos	6
1.2	Metodologia	7
1.3	Justificativa	7
1.4	Estrutura do trabalho.....	8
2	REFERENCIAL TEÓRICO E FUNDAMENTAÇÃO CIENTÍFICA.....	10
2.1	Energia.....	10
2.2	Sustentabilidade.....	12
2.2.1	A sustentabilidade na siderurgia.....	14
2.3	O processo siderúrgico	17
2.4	Captura e uso de CO ₂	21
2.5	Análise energética	27
2.5.1	Turbina a gás	28
2.6	Análise exergética	32
2.7	Análise econômica.....	34
2.8	Análise exergoambiental	35
2.8.1	Balanço Exergoambiental	37
2.9	Reação de <i>Boudouard</i> e os catalisadores.....	39
3	MATERIAIS E MÉTODOS	42
3.1	Caracterização da área de estudo	42
3.2	Metodologia	42
3.3	O gás de alto-forno.....	44
3.4	Conversão de gás de síntese em metanol por meio da interface COFE.....	46

3.5	Análise de um fluxograma de conversão de gás de alto-forno em hidrocarbonetos no <i>software</i> CEA.....	49
3.6	Análise de um fluxograma de conversão de dióxido de carbono e hidrogênio em metanol e etanol no DWSIM.....	50
3.7	Análise termodinâmica, exergoeconômica e exergoambiental de uma turbina a gás.....	54
4	RESULTADOS E DISCUSSÃO.....	56
4.1	Conversão do gás de síntese em metanol por meio do uso do fluxograma COFE do <i>software</i> CAPE-OPEN.....	56
4.1.1	Variação no número de estágios da coluna de destilação	60
4.2	Análise de um fluxograma de conversão de gás de alto-forno em produtos com carbono no <i>software</i> CEA.....	64
4.3	Análise de um fluxograma de conversão de dióxido de carbono e hidrogênio em metanol e etanol no DWSIM.....	72
4.4	Análise termodinâmica, exergoeconômica e exergoambiental de uma turbina a gás.....	75
5	CONCLUSÕES.....	79
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	81
	APÊNDICE A: Definição do pacote de reação e dos dados de entrada no fluxograma COFE.....	91
	APÊNDICE B: Configuração do problema a ser simulado pelo CEA.....	95
	APÊNDICE C: Configuração do problema a ser simulado no DWSIM.....	97
	APÊNDICE D: Código utilizado para a análise da Primeira Lei e da Segunda Lei da Termodinâmica no EES.....	103
	APÊNDICE E: Código utilizado para a análise exergoeconômica no EES.....	113
	APÊNDICE F: Código utilizado para a análise exergoambiental no EES.....	115
	ANEXO A: Turbina SGT-300.....	117

1. INTRODUÇÃO

A Revolução Industrial impactou diretamente o crescimento econômico e o volume de produção de bens e serviços. Nesse sentido, o uso de combustíveis fósseis foi um dos fatores essenciais nesse processo. No entanto, impactos foram gerados em decorrência desse uso como o elevado teor de gases de efeito estufa, que intensifica o nível de poluição, o aquecimento global, a química da atmosfera e também as doenças respiratórias (ALVES, 2014). Dessa forma, os processos que supriam as necessidades da população também a prejudicava. Um fato que merece destaque é que a sociedade dessa época acreditava que o capital natural era ilimitado e que o ambiente era capaz de absorver os efeitos causados pela intervenção do homem (UGAYA *et al.*, 2013).

Como dito anteriormente, com a Revolução Industrial assim como com a Segunda Guerra Mundial, a energia passou a ter um valor muito significativo uma vez que estava atrelada ao desenvolvimento dos processos de conversão térmica. No entanto, foi a partir das crises de petróleo em 1970 que a preocupação em relação ao consumo desse começou a se fazer presente, dando destaque para o controle do desperdício dos recursos energéticos e dos materiais. Nesse sentido, surgiu a ideia de que para uma empresa competitiva se tornar eficiente energeticamente é preciso que ela dê atenção ao impacto ambiental. Hoje, é cada vez mais notável os esforços dos setores industriais para conseguirem um retorno econômico a partir de investimentos no uso de tecnologia limpas, nos processos de reciclagem e aproveitamento de rejeitos.

A indústria siderúrgica representa o consumo de cerca de 18,8% de energia do setor industrial brasileiro. É importante destacar que a 50 anos atrás o consumo de energia por tonelada de produção de aço bruto era cerca de 60% superior ao que é hoje (EPE, 2018). Essa redução se deve as mudanças aplicadas nas rotas tecnológicas e processos utilizados nesse setor, ao tipo e a qualidade dos insumos energéticos e aos vastos produtos, o que trouxe como consequências positivas o aumento da produtividade, a redução da poluição e o retorno dos investimentos, que são altos, principalmente ao que se refere ao custo dos equipamentos das usinas integradas (incluem a coqueria, sinterização ou pelletização, alto-forno e aciaria).

Assim como a siderurgia é uma grande consumidora de energia ela é também responsável por um significativo impacto ambiental em razão das reações físico-químicas envolvidas em seus processos, seus insumos e rejeitos (CARVALHO *et al.*, 2015). Por esse motivo, atualmente existe uma demanda de exigências referente a legislação ambiental, o que

acarreta na reestruturação dessas empresas em razão da busca de um ponto ótimo ao que se refere a qualidade, competitividade e impacto ambiental.

Nesse mesmo contexto, é por meio da visão da sustentabilidade, cujos pilares estão representados na Figura 1, que se pensa não somente no meio ambiente, mas também nos impactos que a sociedade sofrerá e no custo-benefício de um determinado projeto.

Figura 1 - Os três pilares da sustentabilidade.



Fonte: *Website* da empresa Delboni Auriemo. Acesso: 16/04/2021.

O aumento das preocupações em decorrência das mudanças climáticas globais juntamente com a crescente consciência social em relação aos problemas ambientais e suas consequências deram origem a indispensabilidade de um desenvolvimento tecnológico com visão mais sustentável. Dessa forma, a sociedade está à frente de novos desafios como, por exemplo, a preservação do meio ambiente e o uso de energias renováveis em que o dióxido de carbono (CO_2) é um fator comum.

O carvão e o petróleo são os combustíveis que apresentam maior taxa de emissão de CO_2 de forma que as usinas de energia, a petroquímica e a química, e a indústria de cimento são as principais fontes dessa emissão (METZ *et al.*, 2005). A geração de calor e energia nessas indústrias está, em sua maioria, associadas ao alto consumo de carvão, sendo esse, variável em

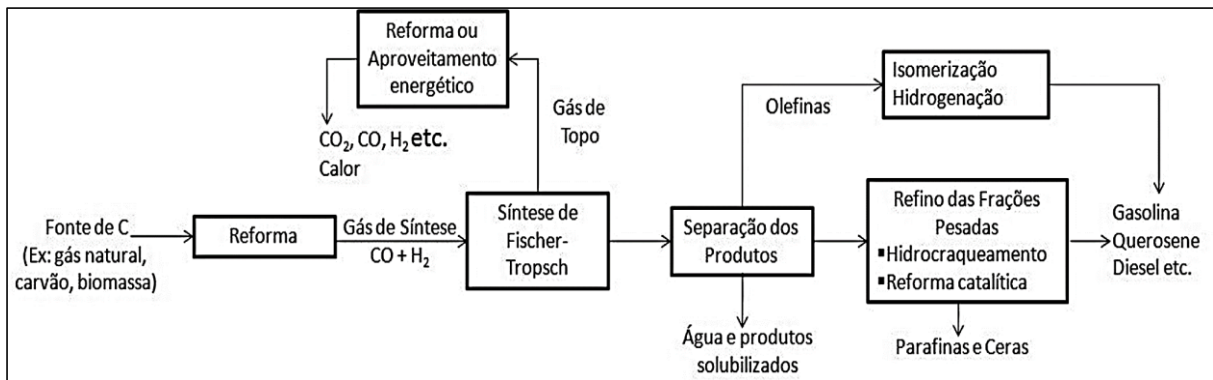
relação ao país e sua situação econômica e geopolítica. Os principais países emissores são China, Estados Unidos, Rússia, Japão, Alemanha, Coreia, Canadá, Irã e Arábia Saudita, os quais representam dois terços das emissões globais de CO₂.

O aço é um dos materiais mais utilizados nos dias de hoje. A produção de aço representa 5,5% do Valor Adicionado pela indústria na economia brasileira, sendo responsável pela geração de mais de 100000 empregos no Brasil (INSTITUTO AÇO BRASIL, 2019; MINISTÉRIO DE MINAS E ENERGIA, 2018).

Frente às alternativas que buscam conciliar o desenvolvimento sustentável ao avanço siderúrgico está a produção de combustíveis líquidos (desprovidos de metais pesados e compostos nitrogenados) por meio da síntese de *Fischer-Tropsch* (FT). Nesse sentido o processo de FT permite a produção de combustíveis menos poluentes. Para a realização dessa técnica é necessário observar e conciliar os parâmetros técnicos, econômicos e ambientais. Hoje, as empresas buscam o desenvolvimento de equipamentos menores e mais modernos, recuperação de energia e desenvolvimento de catalisadores a fim de aprimorar o processo. A maioria dessas visa a produção de metanol, dimetil éter e amônia via gás de síntese.

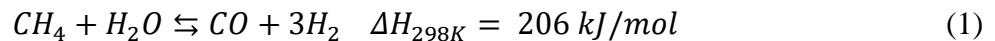
A tecnologia GTL (*gas-to-liquid*) envolve três passos como mostra a Figura 2: a produção do gás de síntese ou *syngas* por meio de reações de reforma a partir de uma fonte de carbono, a transformação desse gás em hidrocarbonetos (de maior massa molar) através da tecnologia de *Fischer-Tropsch* (através de reações exotérmicas) e por último, a etapa de *upgrading* na qual os produtos finais podem ser obtidos e posteriormente refinados para que sejam obtidos os hidrocarbonetos na faixa desejada.

Figura 2 - Fluxograma de uma planta de GTL.



Fonte: RAMOS *et al.* (2011).

A produção de gás de síntese, mistura de hidrogênio, monóxido e dióxido de carbono, requer razões adequadas de H_2/CO e pode ser realizada por meio três processos: reforma com vapor, reforma com CO_2 e reforma autotérmica (uma combinação dos dois processos anteriores com O_2). Neste estudo, será analisado a reforma com vapor:

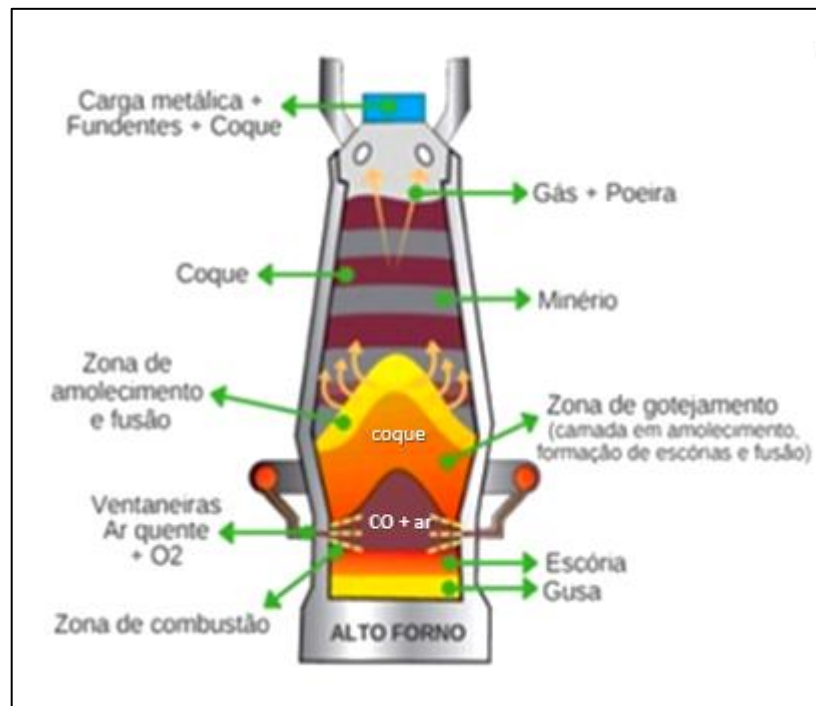


A reforma com vapor possui eficiência térmica superior a 80%, consumindo entre 10 a 12 toneladas de vapor por tonelada de H_2 . No entanto, por exigir superaquecimento do vapor a elevadas temperaturas ($650-950^\circ C$) os custos de operação são elevados. Para se obter taxas de conversão elevada, a reação deve ser fortemente endotérmica (superior a $800^\circ C$ a 15-30 bar).

Em uma indústria siderúrgica a análise energética está relacionada principalmente aos altos-fornos (Figura 3), trocadores de calor à contracorrente, presentes nessa e sua capacidade de cogeração por meio dos gases oriundos da queima nesses equipamentos. O funcionamento do alto-forno consiste no abastecimento de seu topo por materiais como minério de ferro, coque ou carvão de madeira, pelotas, sinter e calcário. Enquanto ocorre a distribuição desses materiais no equipamento, os gases aquecidos pelos regeneradores são soprados pelas ventaneiras na zona de combustão, onde o carvão pulverizado injetado entra em contato com o ar aquecido formando os gases (CO , H_2 e N_2) a altas temperaturas ($1000^\circ C$ a $1250^\circ C$). Esses gases aquecidos ao subirem pelo alto-forno, entram em contato com a carga metálica que descem e entram em reação dando origem, por meio da fusão e redução dessa, ao ferro gusa e a escória. Posteriormente esses dois elementos são despejados pelos furos presentes na base do alto-forno e separados por meio da diferença de densidade. Então, a escória é conduzida até os granuladores e o ferro gusa até a aciaria. É necessário ressaltar que, para a realização correta

desse procedimento, a combustão no alto-forno deve estar estruturada de acordo com a temperatura interna, a pressão de entrada dos gases pré-aquecidos e relacionada com os combustíveis e os oxidantes envolvidos no processo (SILVA, 2011).

Figura 3 - Funcionamento do alto-forno.



Fonte: Adaptado de *website* da empresa Convaço. Acesso: 22/06/2021.

A exergia foi introduzida em 1956 por Rant por meio de questionamento a respeito da degradação da energia utilizada em diversos sistemas e processos (SZARGUT, MORRIS e STEWARD, 1988). Essa pode ser definida como uma propriedade que determina quanto de trabalho útil pode ser obtido em um sistema (SCHMITZ, 2009), ou seja, ela é o padrão de qualidade da energia (KOTAS, 1985).

É importante destacar que a exergia pode apresentar diferentes formas e isso depende da energia que é considerada. A análise em volume de controle dessa propriedade permite analisar a perda residual de recursos energéticos em um processo (como e onde são geradas as ineficiências dos processos), permitindo o desenvolvimento de melhorias para a obtenção de uma melhor eficiência como, por exemplo, em seguimentos industriais, e na avaliação da emissão de gases de efeito estufa (LIMA *et al.*, 2003).

Nesse sentido, com a crescente preocupação com o impacto ambiental promovido por rejeitos industriais, a exergia se faz uma propriedade de grande interesse. Por meio da avaliação dessa é possível analisar a termodinâmica referente ao desempenho de processos de conversão de energia e os custos relacionados a esses.

Nesse contexto, ao analisar processos alternativos de geração de energia é fundamental ter um comprometimento socioambiental. É preciso também analisar o aproveitamento energético de forma que esse seja o máximo possível com o objetivo de que o custo do investimento do processo apresente um retorno.

Para que as condições acima sejam satisfeitas é preciso conhecer as etapas do processo siderúrgico, assim como o funcionamento dos equipamentos. Dessa forma, por meio das conclusões observadas possam ser desenvolvidas alternativas sustentáveis acompanhadas da adequação dos parâmetros para que um ponto ótimo de operação seja atingido.

1.1 Objetivos Geral e Específicos

1.1.1 Geral

Realizar a análise energética, exergética, exergoeconômica e exergoambiental de uma turbina a gás empregando um combustível proveniente de uma planta de captura e uso de carbono.

1.1.2 Específicos

- Realizar revisão bibliográfica acerca do processo siderúrgico, uso e captura de carbono, sustentabilidade, e análises energética, exergética, econômica e ambiental de uma turbina a gás.
- Analisar tecnicamente o processo de conversão de gás de síntese em metanol através da síntese de *Fischer Tropsch* por meio do fluxograma COFE do *software* CAPE OPEN.
- Analisar as melhores condições de operação (temperatura, pressão e razão H_2/CO_2 e H_2/CO) no *software* CEA para a produção do gás de síntese tendo o gás de alto-forno como insumo.

- Analisar a produção de combustíveis no *software* CEA, por meio da síntese de *Fischer Tropsch* tendo o gás de alto-forno como insumo.
- Analisar a conversão de H₂ e CO₂ em metanol a partir de um reator de leito fixo (PFR) e do catalisador comercial Cu/ZnO/Al₂O₃ no *software* DWSIM.
- Analisar termodinâmica, econômica e do ponto de vista ambiental uma turbina a gás tendo como combustível o metanol proveniente do processo de captura e uso de carbono.

1.2 Metodologia

Inicialmente é realizado um estudo bibliográfico acerca do processo siderúrgico, do equacionamento e a modelagem dos parâmetros envolvidos na captura e utilização de carbono na formação do gás de síntese e na produção de combustíveis por meio da reação de deslocamento de água (WGSR) e da síntese de *Fischer Tropsch*. Posteriormente, são realizadas simulações nos *softwares* CAPE OPEN e CEA a fim de avaliar o processo de conversão de dióxido de carbono em combustíveis em uma planta siderúrgica usando o gás de alto-forno. Por meio dessas é possível determinar os melhores pontos de operação em relação a eficiência. Posteriormente, é realizado um estudo da produção de metanol e etanol a partir de um reator de leito fixo (PFR) e do catalisador comercial Cu/ZnO/Al₂O₃ no *software* DWSIM. Por último, com o objetivo de utilizar um dos combustíveis produzidos pela síntese de *Fischer Tropsch*, é realizada a análise energética, exergética, econômica e ambiental de uma turbina a gás tendo como combustível o metanol. Por fim, são apresentados os resultados e as conclusões deste estudo.

1.3 Justificativa

Desde 1950 o aquecimento global vem ganhando destaque no cenário mundial. Esse possui como causa principal as emissões dos gases de efeito estufa provocado pelo uso intenso de combustíveis fósseis. As principais matérias-primas utilizadas para a geração de energia elétrica no âmbito industrial são o carvão mineral, o petróleo e o gás natural. No entanto, há a necessidade de alteração no modelo de suprimento energético em razão das emissões geradas e das consequências ambientais trazidas por esses. Se faz então necessária a busca e utilização de formas alternativas e sustentáveis de geração de energia.

O consumo de energia de uma aciaria em uma siderurgia é cerca de 54% da energia necessária para a produção do aço. Já as perdas energéticas são na faixa de 30% para os gases, 10% nas torres de resfriamento e 6% para as escórias. Nesse sentido, assim como os demais setores industriais, a siderurgia tem sofrido pressões a respeito do desenvolvimento de tecnologias que proporcionam uma produção mais sustentável visando à redução dos impactos ambientais.

Em conformidade com o que foi descrito anteriormente, é válido ressaltar que em um processo siderúrgico uma alta eficiência energética é sinal de um custo reduzido em relação às matérias primas, o que significa uma redução no gasto com o processo propriamente dito. Dessa forma, um estudo de viabilidade econômica se faz importante para que os investimentos sejam posteriormente compensados. O Brasil é um dos países que visa aumentar a eficiência energética do setor siderúrgico uma vez que seus concorrentes globais estão fazendo o mesmo (SHAABAN *et al.*, 2011).

Nessa perspectiva, o presente estudo possui relevância sendo o seu contexto justificado nos seguintes âmbitos: pesquisador, pesquisado e sociedade.

1.4 Estrutura do trabalho

A estrutura do trabalho é constituída por seis capítulos, procurando expor os assuntos abordados desta pesquisa da seguinte forma:

O Capítulo 1 sob o título de “Introdução” contextualiza a relevância da pesquisa, identifica o objeto de estudo, os objetivos da pesquisa, a justificativa para a realização do trabalho e apresenta uma breve descrição da metodologia do trabalho.

O Capítulo 2, “Referencial Teórico e Fundamentação Científica” reporta a literatura para abordar os conceitos e a revisão bibliográfica do objeto de pesquisa. Apresenta-se inicialmente o conceito e as formas de energia assim como aborda a relevância da sustentabilidade com ênfase na indústria siderúrgica. Posteriormente, mostra-se o processo de produção em siderurgias exibindo as suas etapas e descrevendo o uso do procedimento de captura de dióxido de carbono. Por fim, é exposta a importância das análises energética, exérgica, econômica e ambiental no decorrer de projetos.

O Capítulo 3, “Materiais e Métodos”, exhibe uma descrição da metodologia abordada para a realização das análises térmica, ambiental e econômica.

O Capítulo 4, intitulado “Resultados e Discussão”, apresenta os dados obtidos das simulações realizadas para a avaliação do processo de captura e uso de carbono, analisando os parâmetros que mais influenciam na formação do gás de síntese a partir dos gases emitidos no processo de obtenção do ferro gusa no alto-forno e posteriormente na produção de combustíveis de interesse. É apresentada também a viabilidade econômica do processo.

O Capítulo 5 “Conclusões” mostra as conclusões a respeito do processo de *Fischer Tropsch* usando os gases de um processo siderúrgico e também as sugestões para trabalhos futuros.

Por último, são apresentadas as referências utilizadas para o desenvolvimento deste estudo, os apêndices exibindo a configuração dos *softwares* utilizados e os anexos citados ao longo do texto.

2 REFERENCIAL TEÓRICO E FUNDAMENTAÇÃO CIENTÍFICA

Neste capítulo apresenta-se uma revisão bibliográfica do conceito e formas de energia, do desenvolvimento da sustentabilidade assim como da presença dessa na indústria siderúrgica, do processo de produção, do uso do procedimento de captura de dióxido de carbono e por fim da importância das análises energética, exergética, econômica e ambiental em um projeto.

2.1 Energia

A energia é um insumo indispensável para todas as atividades humanas com forte presença desde os primórdios. O carvão mineral, por exemplo, foi utilizado como o principal combustível das máquinas a vapor durante o século XVII, marcado pela Revolução Industrial. Posteriormente, esse passou a ser substituído por combustíveis mais potentes como o petróleo (DARWICHE, 2010), o qual apresentou relevância por meio do seu uso em motores de combustão interna (OSHIRO, 2015).

No entanto, a sociedade passou a ver o petróleo como a principal fonte energética, acomodando-se então com o seu uso. Em 1973 houve um aumento súbito no valor do barril dessa matéria-prima (Crise do Petróleo) passando a ser uma necessidade o desenvolvimento de fontes alternativas de energia (PINTO JÚNIOR *et al.*, 2007).

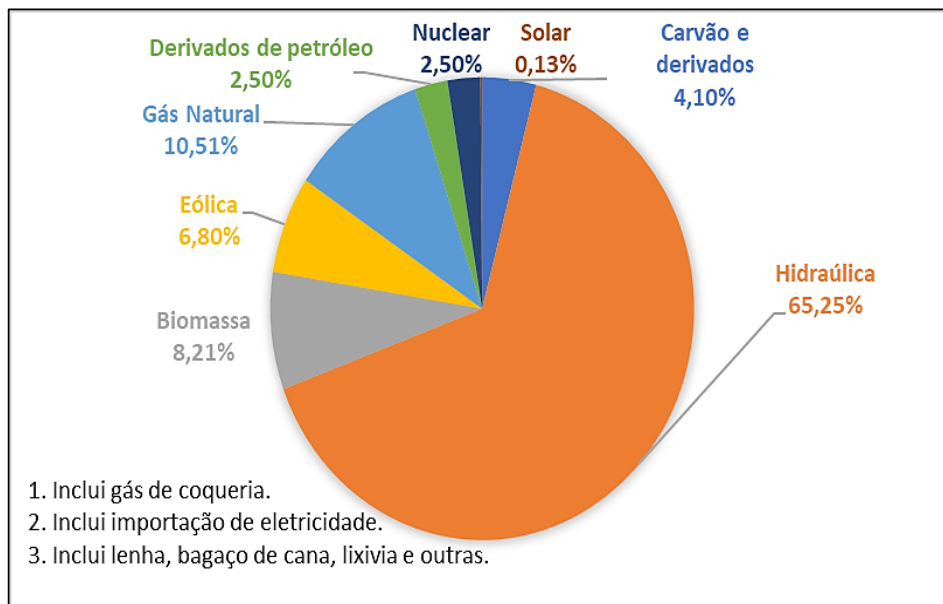
Conforme apresentado, percebe-se que a demanda por energia é proporcional ao processo de industrialização e urbanização. Nesse sentido, enfatiza-se a importância do estudo de novas tecnologias para aprimorar esses processos de forma a reduzir os impactos ao meio ambiente. É importante destacar a necessidade do conhecimento dos processos de transformação de energia assim como as consequências trazidas por esses para que esse estudo seja válido. Pinto Júnior *et al.* (2007) afirma essa ideia ao relatar que por meio do estudo e melhorias das técnicas de produção se é eficiente do ponto de vista energético, ou seja, gasta-se a mesma quantidade de energia e obtém-se maiores rendimentos proporcionando um melhor resultado final.

Atualmente a preocupação mundial com o meio ambiente é um dos motivadores para o desenvolvimento de novas tecnologias e o uso de fontes renováveis de energia. A EPE (Empresa de Pesquisa Energética) realiza anualmente o Balanço Energético Nacional (BEN) e elabora um Plano Decenal de Energia (PDE) fornecendo informações acerca das fontes de energia elétrica no Brasil. O BEN apresenta a relação entre a oferta e o consumo de energia no

Brasil enquanto o PDE oferece uma perspectiva decenal para a expansão da oferta de energia elétrica no país, a fim de garantir o abastecimento adequado, com sustentabilidade ambiental, técnica e econômica (EPE, 2018).

A Figura 4 mostra a distribuição da energia elétrica por fonte no Brasil.

Figura 4 - Distribuição da energia elétrica por fonte.

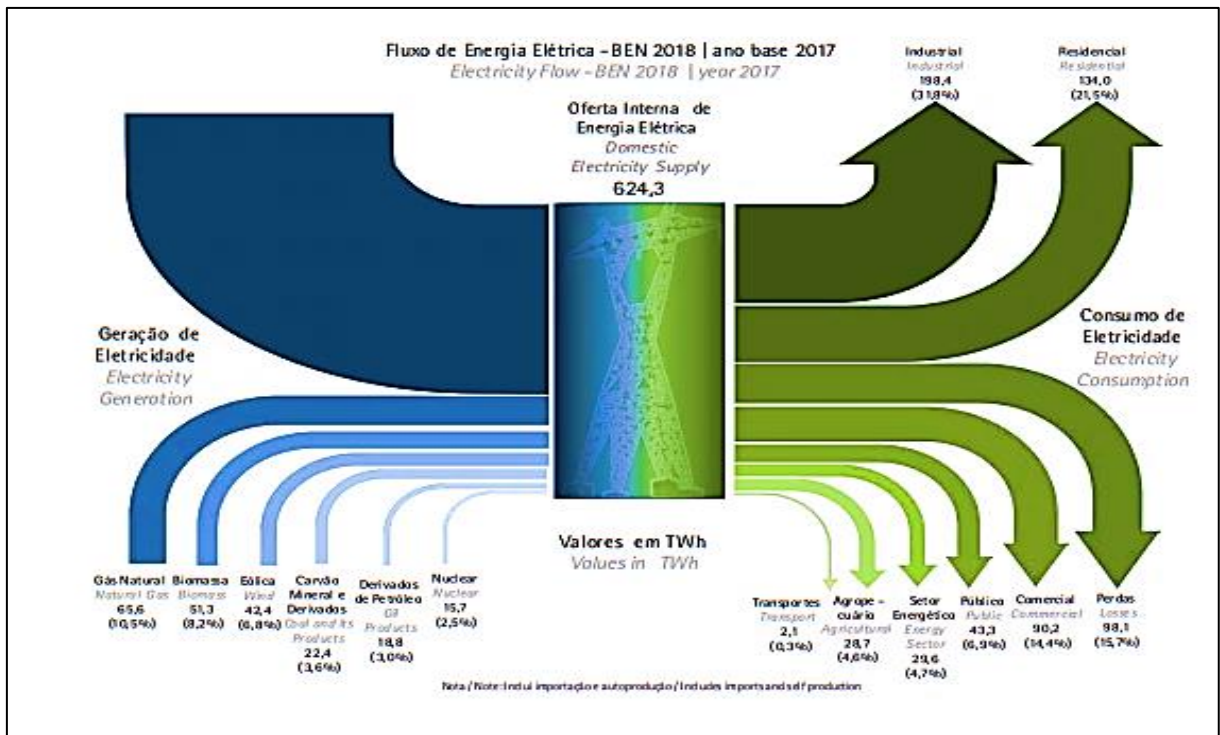


Fonte: Adaptado de EPE 2018.

Através da Figura 4 percebe-se que a fonte de energia hidráulica é a predominante no Brasil quando comparada às demais. Essa diferença pode ser justificada pelo grande potencial hidráulico do país que, apesar de possuir fatores negativos, é uma fonte renovável e competitiva, fornecendo geração de emprego e contribuindo com a renda nacional (as usinas, em praticamente sua totalidade, são construídas com serviços do próprio Brasil) (TOLMASQUIM, 2012).

A Figura 5 expõe a geração de eletricidade por fonte e o seu destino final por setor.

Figura 5 - Fluxo de Energia Elétrica - BEN 2018/ano base 2017.



Fonte: EPE 2018.

Como mostra a Figura 5, o setor industrial é o que recebe a maior parte da energia elétrica (31,8%) seguido do setor residencial (21,5%). Percebe-se também que cerca de 15,7% da energia gerada é perdida.

O uso de gás natural, derivados de petróleo, biocombustíveis entre outros, se faz presente uma vez que a quantidade de energia hidráulica, solar, nuclear e também eólica não é suficiente para suprir determinadas áreas industriais assim como o setor de transportes (NUNES, 2016). Segundo Pinto Júnior *et al.* (2007) foi a partir da década de 80 que se deu início a preocupação com o uso eficiente dos recursos energéticos.

2.2 Sustentabilidade

Como relatado na seção anterior, o processo de urbanização acarretou em um aumento na demanda global por energia. Consequentemente, o capitalismo via urbanização foi fortalecido com o aumento do consumo de combustível ao redor do mundo, o que ocasionou em fortes transformações nos moldes da urbanização (SPOSITO, 1989).

Até meados do século XX o consumismo foi estimulado pela livre exploração do meio ambiente pelo homem (BARBOSA, 2004). A reversão dessa situação teve início entre 5 a 16 de junho de 1972 durante a Conferência da ONU em Estocolmo, onde se discutiu pela primeira vez as questões ambientais de forma global. Durante esse evento, políticas de instituições oficiais do governo de vários países foram formuladas, se atentando à necessidade de um critério e de princípios comuns, tendo como finalidade a elaboração de um guia para preservar e melhorar o ambiente em que vivemos (ONU, 1972).

A Fundação Brasileira para a Conservação da Natureza (1958) foi o primeiro órgão brasileiro envolvendo a temática meio ambiente. Essa, formada por associações ambientalistas civis, se baseava em denúncias e também na conscientização popular com o objetivo de controlar a poluição urbano-industrial (VIOLA e LEIS, 1995). No entanto, durante a Conferência de Estocolmo, o Brasil apresentou resistência ao conhecimento da problemática ambiental (ALBAGLI, 1995). Dessa forma, a fim de atenuar essa visão internacional negativa do Brasil, foi fundada a Secretaria Especial do Meio Ambiente em 1973. Em 1987, o bloco parlamentar verde foi fundado por iniciativa do deputado Fábio Feldmann demonstrando uma preocupação da política nacional (SOUZA, 2010). Em 1989, foi criado o Instituto Brasileiro do Meio Ambiente e dos Recursos Naturais Renováveis (IBAMA). Todavia, foi em 1992, durante a Conferência sobre Meio Ambiente e Desenvolvimento (ECO 1992) realizada no Rio de Janeiro, que se fortaleceu a ideia de sustentabilidade no Brasil buscando exercer atividades e ações humanas para suprir as necessidades dos seres humanos, de forma a não comprometer as próximas gerações (CLARO *et al.*, 2008).

Segundo o Presidente da Câmara dos Deputados, na apresentação do documento da Política Nacional de Resíduos Sólidos Urbanos, Marco Maia (2012), a crescente preocupação com a preservação dos recursos naturais e com a questão de saúde pública indica que políticas públicas para tratar desses temas tende a ser cada vez mais demandadas pela sociedade. A FEAM (Fundação Estadual do Meio Ambiente em Minas Gerais), por exemplo, é um órgão de apoio do Conselho Estadual de Política Ambiental (COPAM) que atua vinculado à Secretaria de Estado de Meio Ambiente e Desenvolvimento Sustentável (SEMAD). No âmbito federal, esse órgão integra o Sistema Nacional do Meio Ambiente (SISNAMA).

É importante salientar que o desenvolvimento econômico sem a atenção com o meio ambiente apresenta como consequência a exaustão da biodiversidade, diversidade genética, diversidade de espécies e diversidade de ecossistemas (PAULA, 1997), influenciando nos processos produtivos. Nesse sentido, ao analisar o desenvolvimento sustentável deve-se levar

em conta além dos aspectos ambientais, os econômicos e sociais a curto, médio e longo prazo (CLARO *et al.*, 2008).

Uma empresa economicamente sustentável visa produzir, partilhar e disponibilizar os seus produtos e/ou serviços estabelecendo uma competitividade justa com relação aos seus concorrentes, de maneira a não existir um desequilíbrio do ecossistema ao redor (ANTINARELLI, 2013).

Com o intuito de implementar ações sustentáveis no processo produtivo tem sido estudadas e aplicadas práticas de reciclagem, de redução no consumo de água e de energia elétrica, de redução e tratamento de poluentes gerados em indústrias assim como desenvolvidas atividades como o fornecimento de incentivos fiscais e aplicação de multas, entre outras.

2.2.1 A sustentabilidade na siderurgia

As emissões na indústria do aço são preocupantes devido aos materiais e consumo de energia, às fontes e às substâncias emissoras multifacetadas e à alta intensidade de emissão. Essas emissões incluem material particulado, SO₂, NO_x, CO₂, CO, compostos orgânicos voláteis e dioxinas (SUN *et al.*, 2019). De acordo com a Associação Brasileira de Metalurgia (ABM), a indústria de ferro e aço é responsável por 8% das emissões globais de CO₂.

Devido à preocupação com o alto índice de emissão de gases de efeito estufa, a literatura apresenta algumas possibilidades para a redução desses gases. Uma delas é a reciclagem do gás residual, por meio da síntese *Fischer Tropsch*, e a injeção de biomassa no alto-forno (GLOBAL CO, 2016). Para reduzir em 50% as emissões de dióxido de carbono em 48 siderúrgicas, a União Europeia realizou o programa *Ultra-Low CO₂ Steelmaking* (ULCOS). Uma das propostas foi a separação do CO₂ do gás de alto-forno para reciclar o gás de alto-forno, que resultou na geração de um gás livre de nitrogênio e reduziu o consumo de energia em 20 a 25% em comparação a um alto-forno convencional (BIRAT *et al.*, 2009). O Curso 50, um projeto lançado em 2007 no Japão, introduz o uso de hidrogênio no alto-forno a fim de reduzir o ferro (NISHIOKA *et al.*, 2016).

Nesse mesmo contexto, as indústrias siderúrgicas também precisam reduzir a quantidade de água utilizada no processo siderúrgico. Segundo Yongjuan *et al.* (2018), é importante que as indústrias sigam os 3R (reutilizar, reduzir e reciclar) e tomem medidas como, por exemplo, desempoeirar o gás de topo do alto-forno ou realizar a têmpera de coque

(CONEJO *et al.*, 2020). Um dos requisitos para a máxima eficiência do sistema é analisar o maior volume possível da rede de água para reciclagem, com índices de vazão: o FWC (consumo de água doce), o TWC (consumo total de água incluindo reutilizada), o WC (consumo real de água) e o WD (descarga real de águas residuais) (TIAN *et al.*, 2008).

Um estudo de redução do consumo de água em uma usina siderúrgica italiana foi desenvolvido por meio de simulação de processo resultando em uma redução de 20% no consumo de água doce com a substituição de parte desta por água não descartável tratada (COLLA *et al.*, 2017). A ArcelorMittal também desenvolveu um procedimento para reduzir o consumo de água por meio da desmineralização do canal a fim de interromper a extração de água de poço artesiano por osmose reversa. Nesse processo, a água pré-tratada é pressurizada na membrana onde é aplicada a pressão, que é dependente do teor de sal e da temperatura da água do canal (GLOBAL CO, 2016). Por meio desse procedimento, foi interrompida a extração de 1,3 milhão de m³ de água do poço artesiano.

A pegada de carbono é uma ferramenta importante para as indústrias estimarem as emissões de gases de efeito estufa promovidas por uma atividade ou acumuladas durante as etapas de vida de um determinado produto (WIEDMANN e MINX, 2008), auxiliando assim no desenvolvimento sustentável desses produtos. Segundo Jakob e Marschinski (2013), as emissões podem ser diretas (ocorrem no sistema e são controladas por esse) ou indiretas (ocorrem fora do limite do sistema para satisfazer a demanda necessária). Para utilizar a pegada de carbono é necessário fazer uso de alguns instrumentos, como por exemplo, os modelos multirregionais de entrada e saída (MRIO), que estão sendo cada vez mais utilizados. Esses relacionam as forças motrizes para as emissões de gases de efeito estufa associadas ao consumo com foco na localização das emissões (WIEDMANN e MINX, 2008).

Desde a década de 1970 o uso de dióxido de carbono na indústria do aço tem sido estudado (HAN *et al.*, 2019). Os métodos de captura e uso de carbono (CCU) são mais consistentes com a ecologia industrial do que apenas o processo de captura, uma vez que o armazenamento geológico tem uma incerteza de longo prazo e um alto investimento como desvantagem. Um exemplo de utilização é a produção de combustíveis “limpos” como o metanol (HU *et al.*, 2013).

O estudo desenvolvido por Han *et al.* apresenta a injeção de dióxido de carbono no processo siderúrgico do forno básico de oxigênio (BOF) a qual entre os resultados obtidos está a redução da formação de poeira em 11,15%. Em uma usina conversora de aço convencional, 18 a 20 kg de pó são gerados para cada tonelada de aço produzida (SZEKELY, 1995).

Segundo Han *et al.*, a injeção de dióxido de carbono no forno ocorre através da mistura uniforme de CO₂ com O₂ no misturador durante o sopro superior por meio da lança de oxigênio (jato de oxigênio no ferro fundido que consiste em oxidar os elementos e aumentar a temperatura). O jato reduz a temperatura do ponto quente e controla a taxa de aquecimento do banho fundido. De acordo com Wei *et al.* (2018), o jato da mistura reduz a produção de poeira e a perda de ferro no processo de siderurgia com forno elétrico a arco (EAF).

O pó do processo de fabricação do aço é pós-processado resultando em maior consumo de energia, maior carga de despoejamento e contribuindo para a poluição. Este pó é obtido pela evaporação do Fe no ponto quente e pelo arrastamento do Fe e da escória pelas bolhas de CO₂ (HAN *et al.*, 2019).

A busca por rotas alternativas desempenha um papel de extrema importância na indústria do aço no sentido de reduzir a quantidade de carvão e coque utilizados. Algumas dessas alternativas são a injeção de resíduos plásticos de alta densidade, como polietileno (PE) e polipropileno, o que representa uma redução nas emissões de dióxido de carbono e uma destinação para esses resíduos (JAIMES e MAROU, 2020; ASSIS *et al.*, 1999). Kato *et al.* (2003) relataram que 72% do C estava presente nos plásticos ao usar fornos de coque para carbonizar PE, polipropileno, tereftalato de polietileno (PET), cloreto de polivinila (PVC) e resíduos plásticos de cloreto de polivinilideno para injetá-los junto com o coque na indústria do aço. Asanuma *et al.* (2000) mencionou uma eficiência superior a 80% na taxa de combustão de CO₂ ao injetar resíduos de plástico (tamanho de partícula de 3,5 mm) no forno em comparação com carvão pulverizado (~ 74 mm), o que demonstra que os resíduos de plásticos carbonizados reagem facilmente dentro do forno. Vale ressaltar que apenas plásticos que contenham um mínimo de cloro em suas cadeias poliméricas são adequados para esse procedimento.

Além disso, o uso de outras fontes alternativas de carbono em vez de plásticos foi amplamente estudado por meio do uso de pneus em fim de vida em uma série de misturas de coque / borracha (ZAHARIA *et al.*, 2009; ARAÚJO FILHO *et al.*, 2006). Essa tecnologia de injeção de polímero PIT como alternativa aos resíduos plásticos, que vem sendo utilizada desde 2008 na Austrália e nos principais países industrializados, consiste em substituir o coque e as misturas de borracha no lugar do coque em fornos elétricos a arco, resultando em maior eficiência do forno devido à melhor formação de espuma de escória.

2.3 O processo siderúrgico

O aço é um material que apresenta características únicas quando comparado a outros materiais (ARCELORMITTAL TUBARÃO, 2018). Nesse sentido, a siderurgia fornece insumos para a aplicação em outras indústrias como a de construção civil, a automotiva, a naval entre outras. As empresas, em sua maioria verticalizadas, que se fazem presentes no processo siderúrgico atuam no processo produtivo desde a redução do minério de ferro até a produção de bobinas laminadas (a quente, a frio ou ainda, galvanizadas). O vergalhão, por exemplo é um laminado longo bastante utilizado nos setores de infraestrutura e habitação (CARVALHO *et al.*, 2015).

A indústria siderúrgica apresenta forte concentração no Brasil, o país é considerado o nono maior produtor de aço no cenário mundial, em 2017 a indústria brasileira foi responsável pela produção de 34,4 milhões de toneladas de aço bruto (WORLD STEEL ASSOCIATION, 2018). As usinas integradas brasileiras correspondem a 70% da produção de ferro-gusa para consumo próprio enquanto dos 30% restantes, 60% são exportados pelos guseiros e 40% são destinados às usinas do tipo semi-integradas do mercado interno. Os grupos siderúrgicos ArcelorMittal, Gerdau, Usiminas, CSN, Ternium (ex CSA) e CSP são responsáveis por aproximadamente 94% da capacidade instalada no Brasil (FALKE INFORMATION, 2020).

A Tabela 1 apresenta a distribuição regional da produção de aço bruto no Brasil.

Tabela 1 - Distribuição regional da produção de aço bruto.

Estado	2020 (10³t)	Participação %
Minas Gerais	9.803 (10 ³ t)	31,20%
Rio de Janeiro	9189 (10 ³ t)	29,30%
Espírito Santo	5405 (10 ³ t)	17,20%
Ceará	2855 (10 ³ t)	9,10%
São Paulo	2613 (10 ³ t)	8,30%
Rio Grande do Sul	668 (10 ³ t)	2,10%
Pará	330 (10 ³ t)	1,10%
Maranhão	321 (10 ³ t)	1,00%
Pernambuco	231 (10 ³ t)	0,70%

Fonte: Adaptado de Aço Brasil (2020).

Através da Tabela 1 percebe-se que a região sudeste somou uma participação de 86,0% na produção de aço no mercado nacional em 2020, alcançando um total de 27 milhões de toneladas.

A Tabela 2 apresenta a evolução da produção da indústria siderúrgica brasileira entre os anos de 2015 e 2019 (IAB, 2020a).

Tabela 2 - Histórico da produção da indústria siderúrgica brasileira (em milhares de toneladas)
entre os anos de 2015 a 2019.

Produto	2015	2016	Δ (2015 - 2016)	2017	Δ (2016 - 2017)	2018	Δ (2017 - 2018)	2019	Δ (2018 - 2019)
Aço Bruto	33258	31642	-5,1%	34778	9,0%	35407	1,8%	32569	-8,7%
Semiacabados para venda (placas, lingotes, blocos e tarugos)	9829	10698	8,1%	11639	8,1%	11971	2,8%	10901	-9,8%
Laminados planos de aço	14680	13669	-7,4%	15165	9,9%	15767	3,8%	14708	-7,2%
Laminados longos de aço	9283	8848	-4,9%	9003	1,7%	9439	4,6%	9242	-2,1%
Total semiacabados e laminados	33792	33215	-1,7%	35807	7,2%	37177	3,7%	34851	-6,7%

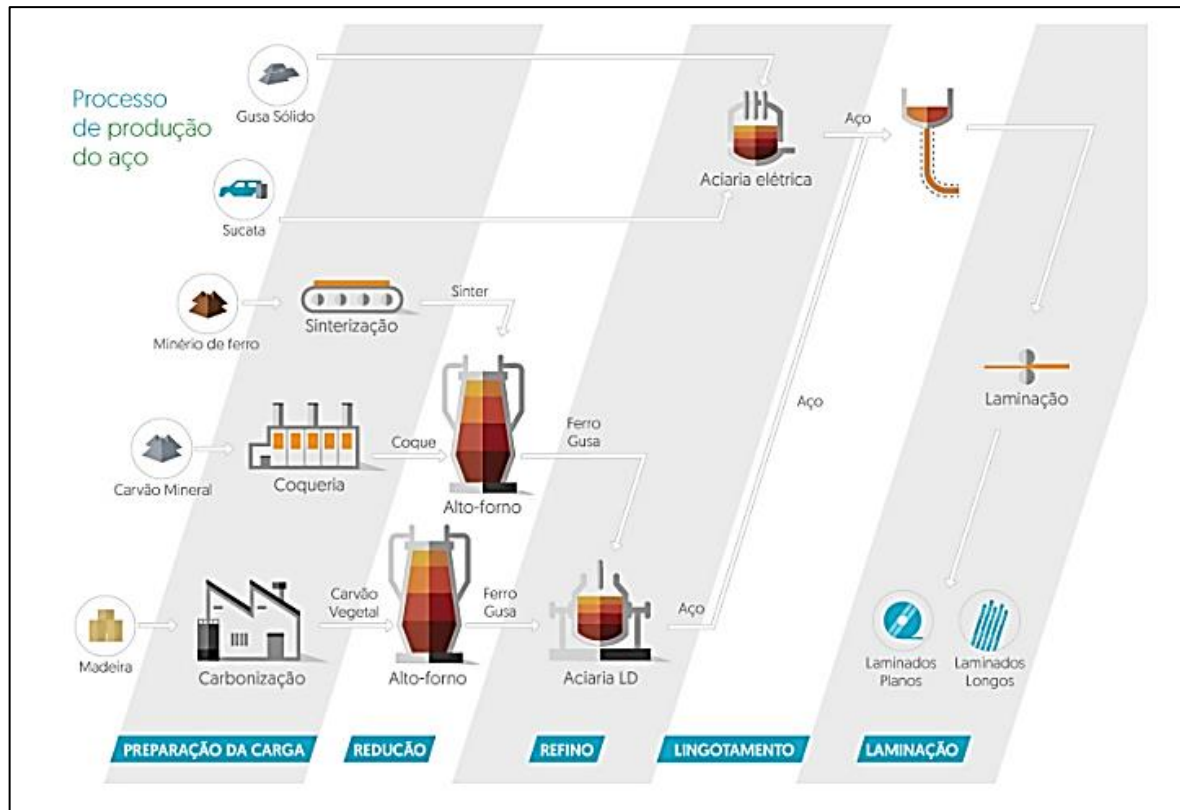
Fonte: IAB (2020). Elaboração do BNB/ETENE.

Através da Tabela 2 percebe-se que o ano de 2019 obteve uma queda para todos os produtos em relação ao ano de 2018. No entanto, a queda foi mais impactante no primeiro semestre de 2020 devido a pandemia de Covid-19 em razão da redução na produção de muitos setores demandantes da indústria siderúrgica como, por exemplo, o setor automotivo (IBGE, 2020). Em relação a produção de aço bruto houve uma queda de 13,9% em relação ao primeiro semestre de 2019 enquanto na produção de semiacabados essa foi de 9,3% e na produção de laminados de 13% em relação a esse período (IAB, 2020b).

A indústria siderúrgica tem um papel de suma relevância na economia mundial. A *World Steel Association* divulgou em 2019 um estudo desenvolvido pela *Oxford Economics* em que apresenta que a indústria siderúrgica vendeu, em 2017, US\$ 2,5 trilhões em produtos e obteve um valor adicionado de cerca de US\$ 500 bilhões. Esse mesmo estudo revelou que, mundialmente, a indústria siderúrgica é responsável por gerar aproximadamente 40 milhões de empregos.

No setor siderúrgico existem duas possibilidades de rotas tecnológicas produtivas, a integrada e a semi-integrada. Enquanto as usinas integradas utilizam o minério de ferro como matéria-prima para a produção de aço nos altos-fornos, as usinas semi-integradas fazem uso da sucata de ferro na alimentação das aciarias elétricas (INSTITUTO AÇO BRASIL, 2018; WORLD STEEL ASSOCIATION, 2013). A Figura 6 representa o fluxo dos dois processos produtivos.

Figura 6 - Fluxo simplificado de produção do aço.



Fonte: INSTITUTO AÇO BRASIL (2018).

De acordo com o *website* do INSTITUTO AÇO BRASIL, a fabricação do aço é dividida em quatro etapas, as quais atualmente não engloba o processo de lingotamento mostrado na Figura 6. Nesse sentido, as etapas da produção siderúrgica podem ser definidas da seguinte forma (INSTITUTO AÇO BRASIL, 2021):

- **Preparação da carga**

O minério de ferro em forma de pó é aglomerado via pelotização (ou sinterização) formando as pelotas e o sinter, que são utilizados posteriormente como matéria-prima dos altos fornos, juntamente com o minério de ferro, que apresenta uma granulometria maior. A fim de remover voláteis, o coque é produzido na coqueria por meio do carvão por destilação seca, apresentando assim propriedades físico-químicas elevadas quando comparadas as do carvão na redução do minério de ferro.

- **Redução**

Essa etapa ocorre nos altos-fornos, que durante a operação fica em contato com a carga e os gases, gerando reações entre esses, e refere-se à retirada do oxigênio dos óxidos do minério de ferro. O produto desse procedimento consiste no ferro gusa (liga de ferro e carbono) que apresenta determinadas impurezas, enxofre, fósforo e silício. Para que ocorra a redução dos óxidos de ferro são utilizados os agentes redutores, sendo os mais comuns o coque e o carvão pulverizado (que também atuam em parte como combustíveis). Esses formam o hidrogênio e o monóxido de carbono que são as substâncias responsáveis pela redução.

É importante destacar que em muitas usinas siderúrgicas são utilizados mais de um alto-forno a fim de aumentar a produção. Nesse caso, um soprador é instalado para controlar as trocas de calor durante o processo, por meio da vazão de ar quente que entra no componente, com o intuito de iniciar a fusão do minério de ferro por meio das reações de combustão.

- **Refino**

Consiste na redução das impurezas no ferro gusa para a obtenção das diversas categorias de aço. Dessa forma, o ferro gusa é levado até a aciaria onde o teor de carbono é reduzido através do uso do forno a arco elétrico ou dos conversores a oxigênio. A maior parte do aço líquido é solidificada em equipamentos de lingotamento contínuo para produzir semi-acabados, lingotes e blocos.

- **Laminação**

A última etapa consiste no processamento dos produtos semi-acabados, lingotes e blocos nos laminadores, visando a modelagem desses em produtos siderúrgicos utilizados pela indústria de transformação através da adequação da espessura desejada, como chapas, tubos, barras, vergalhões, bobinas, entre outros.

2.4 Captura e uso de CO₂

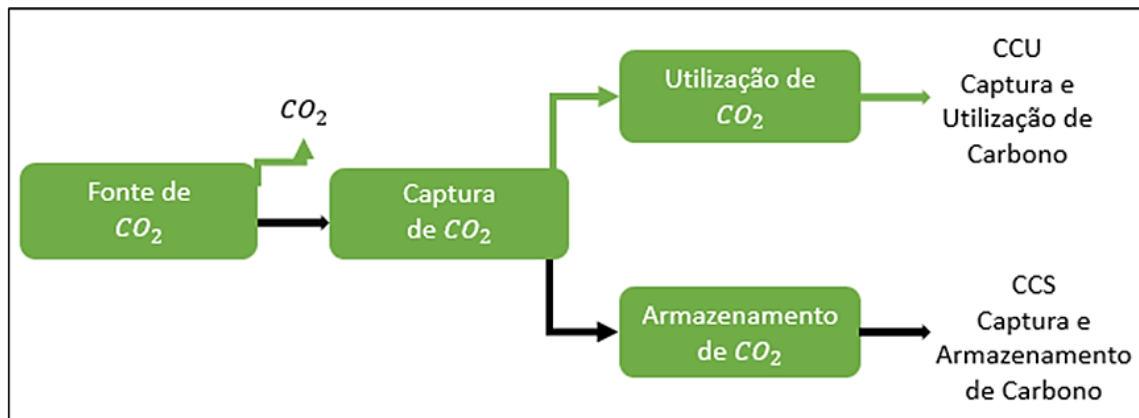
Como dito nas seções anteriores, o aumento da demanda de energia foi consequência do crescimento populacional. Dessa maneira, aumentaram também as emissões de gases de efeito estufa (CO₂, CH₄, N₂O, HFCs, PFCs, SF₆) nas últimas décadas, principalmente em países desenvolvidos, em razão especialmente de suas economias e desenvolvimento de tecnologias.

No entanto, com o decorrer dos anos políticas visando a redução dessa emissão passaram a ser desenvolvidas.

O Protocolo de Quioto foi o primeiro acordo internacional que forçou a visão da redução dos gases de efeito estufa. Vinculado à Convenção-Quadro das Nações Unidas (sendo adotado em 1997 e entrado em vigor em 2005), estabeleceu que os países industrializados, cada um com o seu nível específico devido a situação econômica e política, teriam que reduzir em 5% as emissões entre os anos de 2008 e 2012 comparado aos níveis de 1990 e em no mínimo 18% durante os anos de 2013 a 2020. No entanto, os Estados Unidos não participaram desse protocolo e nem todos os participantes o ratificaram. Nesse sentido, foi firmado em Paris (2015) um novo acordo internacional durante a Conferência das Nações Unidas sobre Mudanças Climáticas (COP21) no qual os países desenvolvidos e em desenvolvimento devem, através da redução das emissões, limitar o aumento da temperatura global a menos de 2 °C acima dos níveis industriais.

Hoje, o desenvolvimento de tecnologias que apresentam uma melhoria de eficiência, redução no consumo de tecnologia e fontes de energia alternativas como, por exemplo, a utilização de biomassa, energia solar, eólica, entre outras estão representando uma redução no consumo de carbono. Dessa maneira, uma alternativa para a redução de dióxido de carbono é a utilização de tecnologia de captura, armazenamento e uso desse como matéria-prima (CCUS) para a geração de produtos de valor agregado, como exemplifica a Figura 7. Logo, a captura de dióxido de carbono é e continuará sendo aplicada em usinas de produção de combustível fóssil, de biomassa, em indústrias de ferro, de aço, de cimento entre outras substâncias.

Figura 7 - Esquema exemplificando a captura, utilização e armazenamento (CCUS).



Fonte: Do autor.

O processo de captura de dióxido de carbono pós-combustão em usinas movidas a combustíveis fósseis consiste na passagem dos gases desses ou da biomassa por um equipamento enquanto as demais substâncias são liberadas para atmosfera. Já em um processo de captura de pré-combustão ocorre a formação do gás de síntese, H_2 e CO , por meio da reação de um combustível em oxigênio ou ar e/ou vapor, sendo que o CO resultante é reagido com vapor na WGSR (reação de deslocamento de gás-água) com o intuito de produzir CO_2 e H_2 , que posteriormente será separado, dando origem a um combustível rico em hidrogênio. Esse combustível pode ser utilizado em caldeiras, turbinas a gás, motores, células de combustível entre outras aplicações (METZ *et al.*, 2005).

Os principais tipos de conversão de dióxido de carbono são bioconversão, catalítica, eletroquímica, enzimática e plasma. A conversão catalítica é a mais estudada e pode ser obtida por meio de catálise de plasma, catálise térmica, eletro catálise e foto catálise (XING *et al.*, 2020).

A metanação de dióxido de carbono é um processo de conversão catalítica térmica que possui grande destaque. Definido como um processo de reação exotérmico de hidrogênio e dióxido de carbono, é responsável pela formação de metano e água por meio de um catalisador metálico. A faixa de temperatura dessa reação está entre 150 e 500 ° C e a pressão entre 0,1 e 10 MPa (CHANG *et al.*, 2003). O mercado de metanação de dióxido de carbono atingirá de 4 a 65 bilhões de metros cúbicos por ano até 2030 (GLOBAL CO, 2016).

Embora amplamente desenvolvida, a metanação tem algumas desvantagens, como escamação da superfície do catalisador, problemas de temperatura, deposição de carbono e

obstrução dos poros. Por essas razões, a escolha adequada do catalisador e as condições de operação devem ser bem definidas (GHAIB *et al.*, 2016).

Catalisadores metálicos, como Ru, Rh e Ni, têm alto desempenho, mas o custo deles é bastante alto e muitas vezes não podem atender à produção industrial em grande escala. Devido a essas dificuldades, metais de transição, como o Fe, ganharam destaque em vista do desenvolvimento de catalisadores de metanação de dióxido de carbono (XING *et al.*, 2020).

A metanação é realizada por compressão e resfriamento de dióxido de carbono e hidrogênio às condições de reação e, em seguida, pela síntese de metanol no reator (PAVÃO *et al.*, 2016). Esta síntese é descrita pelas seguintes reações abaixo (GRAAF e WINKELMAN, 2016).



Entre as condições operacionais do processo exotérmico estão alta temperatura e pressão, o que torna mais fácil para o catalisador desativar depósitos de carbono e substituir metais ativos (GHAIB *et al.*, 2016). Experimentos onde duas isotermas são fixadas em reatores em série, a combinação do fluxo de gás e do catalisador é suficiente para fazer um equilíbrio.

Uma reação de hidrogenação pode ocorrer por meio da disponibilidade de uma fonte externa de CO₂ transformando-o em CH₃OH (VAN DER HAM *et al.*, 2012). A saída do reator é conectada ao condensador / separador onde o metanol e a água são separados (LIU *et al.*, 1994). Essas duas substâncias possuem frações molares dos componentes do gás (CO, CO₂, H₂, CH₄ e N₂), que são calculadas a partir do balanço de nitrogênio (GRAAF e WINKELMAN, 2016).

A síntese de *Fischer Tropsch* (FT), reação catalítica heterogênea que visa a produção de combustíveis e produtos químicos a partir de um gás de síntese (CO e H₂), foi desenvolvida pelos cientistas alemães *Franz Fischer* e *Hans Tropsch* na década de 1920. Esses descreveram em sua primeira patente, a produção de hidrocarbonetos longos a partir da utilização de catalisadores a base de ferro e cobalto operando a temperaturas inferiores a 300°C e a pressão atmosférica (CHEN *et al.*, 2017). A tecnologia teve grande utilidade pelos alemães e japoneses durante a Segunda Guerra Mundial e posteriormente a esse período foi aproveitada pelos aliados (CIOBÎCĂ *et al.*, 2013). Essa perdeu força no período da guerra fria em consequência

da abundância de petróleo, sendo a única exceção a fábrica da Sasol na África do Sul, que por não possuir grandes reservas de petróleo fez uso da tecnologia a partir do carvão.

Durante a década de 90 o processo FT voltou ao centro das atenções da indústria de petróleo e gás natural no mundo. Atualmente, essa tecnologia se faz relevante devido a busca por rotas sustentáveis e a descoberta de reservas de gás natural (YAMADA, 2011). A Tabela 3 apresenta as plantas comerciais existentes da síntese de *Fischer Tropsch*.

Tabela 3 - Plantas comerciais da síntese de *Fischer Tropsch*.

Empresa	País	Capacidade (barris/dia)	Matéria- prima	Data de início das atividades
Sasol	África do Sul	2500	Carvão	1955
Sasol	África do Sul	85000	Carvão	1980
Sasol	África do Sul	85000	Carvão	1982
MossGas	África do Sul	30000	Gás Natural	1992
Shell	Malásia	125000	Gás Natural	1993
Sasol / Qatar Petroleum	Catar	34000	Gás Natural	2006
Sasol Chevron	Nigéria	34000	Gás Natural	2007
Shell	Catar	140000	Gás Natural	2009

Fonte: MARQUES (2018).

As condições de operação da síntese de FT assim como o tipo de reator e catalisador a ser utilizado estão associados a obtenção dos produtos. As reações que ocorrem durante esse processo são muito exotérmicas necessitando de um bom sistema de troca térmica a fim de evitar a redução da vida do catalisador e a formação de altas concentrações de metano. O catalisador de ferro é utilizado em processos a alta temperatura para a formação de gasolina e hidrocarbonetos de baixa massa molecular. Já o catalisador de cobalto é indicado para processo a baixa temperatura para a formação de hidrocarbonetos de alta massa molecular (DRY, 2002; STEYNBERG *et al.*, 1999).

A formação de ceras de cadeias longas é realizada em reatores de três fases (sólida, líquida e gás) à baixa temperatura, sendo o mais indicado o reator de leito de lama e o de leito fixo multitubular. De modo alternativo, a produção de gasolina e hidrocarbonetos de cadeias curtas é realizada em reatores de duas fases (gás e sólida) sendo os mais empregados o de leito fluidizado fixo e o de leito fluidizado circulante (a Sasol faz uso desses modelos de reatores) (STEYNBERG *et al.*, 1999).

Em virtude da busca por alternativas sustentáveis para a produção de combustíveis a síntese de *Fischer Tropsch* é uma boa resposta. Hoje, pesquisas nesse sentido vem ganhando destaque em razão da redução de emissão de CO₂ e do esgotamento de recursos não renováveis.

2.5 Análise energética

A termodinâmica, ciência que estuda as trocas de calor e trabalho, tem um papel fundamental nos processos industriais, principalmente no que se refere ao aperfeiçoamento de projetos contribuindo assim para a visão de processos mais sustentáveis e de uma qualidade de vida melhor (SOUZA, 2010).

As leis da termodinâmica (zero, primeira, segunda e terceira) são envolvidas nos processos por meio do sistema termodinâmico. Lembrando que esse possui quantidade de matéria fixa (massa) e permite a transferência de calor e trabalho por meio de suas fronteiras (GORDON *et al.*, 1995).

Um assunto de relevância ao se tratar de termodinâmica é a conservação de energia. A análise dessa permite que um determinado equipamento de um ciclo termodinâmico opere em sua máxima eficiência, sendo que a eficiência é a relação entre a energia gerada e a energia fornecida ao sistema em análise (SILVA, 2009).

Ainda segundo Silva (2009), os processos que envolvem a conservação de energia são regidos pela Primeira e pela Segunda Lei da termodinâmica. A primeira lei (energia não pode ser nem criada e nem destruída) em análise a um volume de controle é equacionada da seguinte forma (GORDON *et al.*, 1995):

$$\frac{dE_{VC}}{dt} = \dot{Q}_{VC} - \dot{W}_{VC} + \sum_e \dot{m}_e \left(h_e + \frac{v_e^2}{2} + gz_e \right) - \sum_s \dot{m}_s \left(h_s + \frac{v_s^2}{2} + gz_s \right) \quad (5)$$

Em que:

- E_{VC} é a energia através do volume de controle;
- t é o tempo;
- \dot{Q}_{VC} é a taxa de transferência de calor através do volume de controle;
- \dot{W}_{VC} é a taxa referente a potência;
- \dot{m} é a vazão mássica (na entrada e na saída do volume de controle);
- h é a entalpia específica (da entrada e da saída do volume de controle);

- V é a velocidade do fluido (na entrada e na saída do volume de controle);
- g é a aceleração da gravidade;
- z é a altura em relação ao referencial adotado (da entrada e da saída do volume de controle).

A segunda lei determina a eficiência máxima de um processo de conversão de energia e apresenta a propriedade extensiva, dependentes da matéria do sistema em análise, denominada entropia, que determina qual a porção de energia que não poderá ser convertida em trabalho (SILVA, 2009). A segunda lei é expressa da seguinte forma para a análise de um volume de controle (GORDON *et al.*, 1995):

$$\frac{dS_{VC}}{dt} = \sum_e \dot{m}_e s_e - \sum_s \dot{m}_s s_s + \sum_j \frac{\dot{Q}_j}{T_j} + \dot{\sigma} \quad (6)$$

Em que:

- S_{VC} é a entropia através do volume de controle.; s é a entropia específica (da entrada e da saída do volume de controle);
- $\frac{\dot{Q}_j}{T_j}$ é a taxa de geração de entropia em diversos locais da superfície do volume de controle;
- $\dot{\sigma}$ é a taxa de geração de entropia causada pelas irreversibilidades internas do volume de controle.

A capacidade de uma substância de realizar trabalho, disponibilidade, está relacionada com a segunda lei da termodinâmica de forma que é dependente da energia disponibilizada para a realização de processo de conversão. Essa disponibilidade é relacionada ao trabalho reversível (processo dependente da natureza do processo em que ao retornar ao estado inicial não deixa vestígios ao sistema), ao trabalho disponível (trabalho realizado por processos reversíveis internos ou externos; máximo trabalho possível de se realizar) e a irreversibilidade (diferença entre a potência reversível e a potência real, ou seja, é a “ineficiência” do processo real) (GORDON *et al.*, 1995).

2.5.1 Turbina a gás

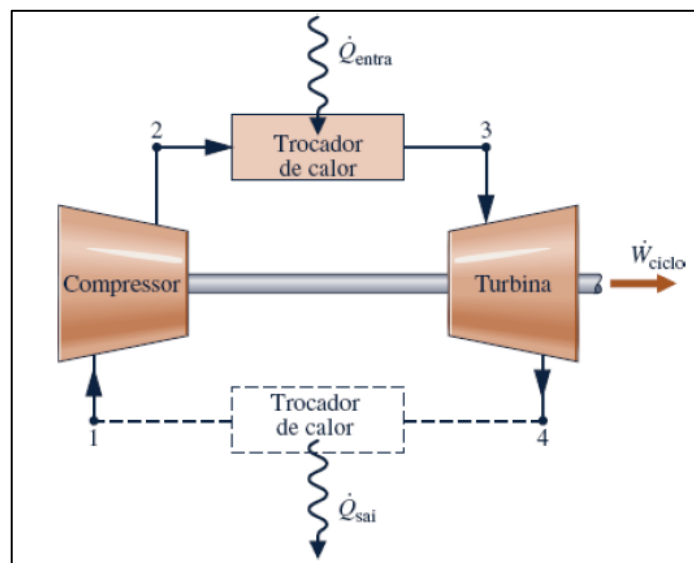
O ciclo *Brayton* foi proposto em 1870 por George Brayton com o intuito de ser

utilizado em um motor alternativo que ele mesmo desenvolveu. Porém, foi em meados da década de 1950 que a turbina a gás começou a competir com a turbina a vapor para a geração de eletricidade. A partir de então essa tem recebido diversas aplicações além dessa, como em sistemas de acionamento mecânico e propulsão a jato e no fornecimento de calor de processo e ar comprimido. (ÇENGEL; BOLES, 2006; SARAVANAMUTTOO *et al.*, 2001).

A turbina a gás é composta por compressor, câmara de combustão e turbina. Porém, essa não se limita a apenas esses componentes, de forma que pode haver mais de um compressor através do uso de *intercoolers* entre esses e mais de uma turbina por meio do reaquecimento entre a câmara de combustão entre essas (SARAVANAMUTTOO *et al.*, 2001).

Para se analisar um ciclo *Brayton* ideal deve-se considerar o escoamento em regime permanente e as variações das energias cinética e potencial desprezíveis. Os ciclos *Brayton* podem ser abertos (em sua maioria) ou fechados, como mostra a Figura 8.

Figura 8 - Esquemático de uma Turbina a gás



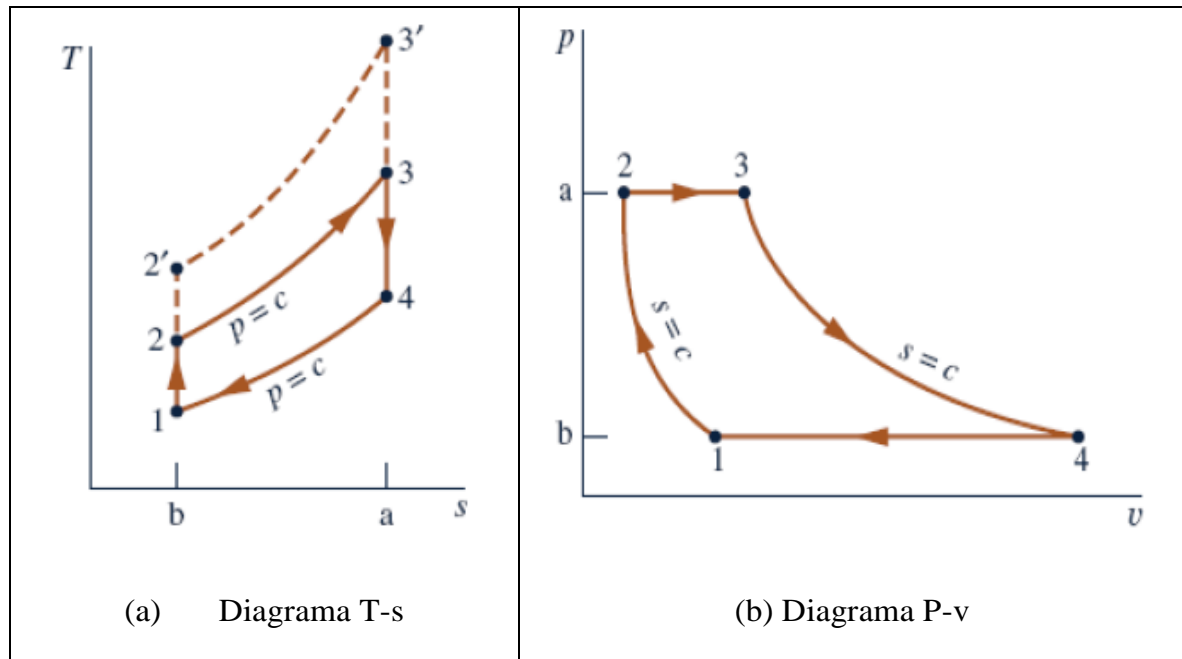
Fonte: Moran *et al.* (2018).

O ciclo apresentado na Figura 8 mostra inicialmente a admissão do ar em condições ambientes pelo compressor (1), onde temperatura e pressão são elevadas (2). Posteriormente esse ar entra na câmara de combustão onde juntamente com o combustível acontece a queima à pressão constante. Os gases resultantes à elevada temperatura (3) entram na turbina, se expandem e produzem potência. Os gases de exaustão (4) podem

recircular através, por exemplo, de um trocador de calor como mostra nessa figura, em caso de um ciclo fechado, ou não recircular, em um ciclo aberto.

A Figura 9 apresenta os diagramas T-s e P-v de um ciclo *Brayton* ideal.

Figura 9 - Diagramas (a) T-s e (b) P-v do ciclo Brayton ideal.



Fonte: Moran *et al.* (2018).

Para a análise desses os processos são considerados em regime permanente e são desprezadas as variações de energia cinética e potencial de forma que o balanço de energia é expresso como (ÇENGEL; BOLES, 2006):

$$(q_e - q_s) + (w_e - w_s) = h_s - h_e \quad (7)$$

Em que:

$$q_e = h_3 - h_2 = c_p(T_3 - T_2) \quad (8)$$

$$q_s = h_4 - h_1 = c_p(T_4 - T_1) \quad (9)$$

A eficiência térmica do ciclo ideal considerando as hipóteses do padrão a ar é definida como (MORAN *et al.*, 2018):

$$\eta_{t,Brayton} = \frac{w_{líq}}{q_e} = \frac{(h_3 - h_4) - (h_2 - h_1)}{(h_3 - h_2)} = \frac{c_p(T_3 - T_4) - c_p(T_2 - T_1)}{c_p(T_3 - T_2)} \quad (10)$$

Assumindo $P_2 = P_3$, $P_4 = P_1$ e os processos 1-2 e 3-2 como isoentrópicos, tem-se:

$$\frac{T_2}{T_1} = \left(\frac{P_2}{P_1}\right)^{(k-1)/k} = \left(\frac{P_3}{P_4}\right)^{(k-1)/k} = \frac{T_3}{T_4} \quad (11)$$

Dessa forma, a eficiência do ciclo também pode ser expressa como:

$$\eta_{t,Brayton} = 1 - \frac{1}{r_p^{(k-1)/k}} \quad (12)$$

Em que:

$$r_p = \frac{P_2}{P_1} \quad (13)$$

Sendo: r_p a razão de pressão e k a razão dos calores específicos. Na maioria dos projetos, a razão de pressão das turbinas a gás varia de 11 até 16.

Como pode ser visto também na Figura 9, diferentemente do ciclo Brayton ideal, o ciclo de uma turbina a gás real apresenta queda de pressão durante os processos de adição e rejeição de calor. Além desse fator, o trabalho de um ciclo de compressão real é maior e o trabalho produzido pela turbina é inferior ao produzido no ciclo ideal devido as irreversibilidades dos sistemas. Essas diferenças são consideradas por meio da consideração das eficiências isoentrópicas desses dois componentes (ÇENGEL; BOLES, 2006):

$$\eta_c = \frac{w_s}{w_a} \simeq \frac{h_{2s} - h_1}{h_{2a} - h_1} \quad (14)$$

$$\eta_T = \frac{w_a}{w_s} \simeq \frac{h_3 - h_{4a}}{h_3 - h_{4s}} \quad (15)$$

Os estados 2a e 4a são os estados de saída reais do compressor e da turbina enquanto os estados 2s e 4s são os estados correspondentes ao caso isoentrópico.

O ar atua como oxidante para a combustão do combustível nas turbinas a gás e também como fluido de resfriamento. A diferença da vazão em massa através da turbina e do compressor se aproxima da vazão em massa de combustível. A razão entre o trabalho do compressor e da turbina, denominada razão de consumo de trabalho, possui um valor bem alto nas usinas de turbina a gás uma vez que normalmente, mais da metade do trabalho produzido na turbina é utilizada para acionar o compressor. Nesse sentido, as turbinas dessas usinas possuem um tamanho superior do que as utilizadas em usinas a vapor para

uma mesma produção de potência líquida (ÇENGEL; BOLES, 2006).

2.6 Análise exergetica

Diferente da energia que durante um processo se transforma, a exergia é destruída em processos irreversíveis por meio do aumento de entropia. A exergia quantifica o trabalho útil de um sistema, quantificando as causas das imperfeições termodinâmicas (LIMA, 2003). Dessa forma, ela é uma copropriedade de um sistema e de um estado de referência, não sendo assim uma propriedade termodinâmica real e nem um potencial do sistema em análise (SCHMITZ e AXT, 2009).

Em um volume de controle, a análise de exergia promove o estudo da perda residual de recursos energéticos do processo em análise, o que é uma alternativa de aumento de eficiência de muitos processos como, por exemplo, os industriais, em que a avaliação da emissão de gases de efeito estufa é de grande relevância (LIMA, 2003; SCHMITZ e AXT, 2009).

Para Szargut, Morris e Steward (1988) a exergia é uma quantidade de trabalho resultante de uma situação em que determinada massa é levada a um equilíbrio termodinâmico, por meio de processos reversíveis, com os componentes do meio ambiente. Já para Kotas (1985) e Tsatsaronis (1993) exergia é o máximo trabalho útil que é obtido por meio de uma forma de energia em que se utiliza os parâmetros do meio ambiente em um processo reversível. Em geral, a exergia pode ser definida como a energia útil de interesse em um processo de conversão energético, enquanto a parte perdida é conhecida como “anergia”.

No cálculo do trabalho máximo que pode ser obtido em um trabalho (exergia) o estado morto é um fator crucial. Quanto mais distante o estado de um sistema estiver do estado no qual o “estado morto” está localizado, maior é o trabalho que pode ser obtido em um processo de conversão reversível. Quando o estado em análise se iguala ao estado morto atinge-se o equilíbrio restrito (térmico e mecânico) ou irrestrito (térmico, mecânico e químico).

Enquanto a 1ª Lei da Termodinâmica se preocupa com a conservação da energia em processos de conversão, a 2ª Lei da Termodinâmica identifica as perdas e a destruição de uma parcela da energia desses processos. Dessa forma, percebe-se que a preocupação com

a qualidade da energia passou a ser importante com o passar dos anos.

Em um ciclo termodinâmico a análise exergética permite destacar as limitações energéticas do processo por meio da identificação e do cálculo da irreversibilidade (ineficiência do processo) por meio da análise dos insumos (exergia de entrada) e dos produtos e rejeitos (exergia de saída). Nesse sentido, o conceito de exergia tem grande importância quando se trata de impactos ambientais gerados por rejeitos de processos industriais.

De acordo com Sotomonte (2009) a criação de um modelo idealizado (ambiente de referência) é fundamental uma vez que o ambiente físico real é muito complexo. Dessa maneira, o estado intensivo é determinado pela temperatura (T_0), pressão atmosférica (p_0) e potenciais químicos ($\mu_{i,0}$).

As parcelas da exergia podem ser descritas como:

$$Ex = Ex^F + Ex^Q + Ex^C + Ex^P \quad (16)$$

Sendo: Ex^F é a exergia física; Ex^Q é a exergia química; Ex^C é a exergia cinética; Ex^P é a exergia gravitacional.

Quando uma substância em um determinado estado é levada até o estado morto em equilíbrio restrito (temperatura e pressão) fala-se em exergia física. Essa pode ser representada pela equação (17).

$$Ex^F = m \cdot e^F \quad (17)$$

Sendo:

$$e^F = (h - h_0) - T_0(s - s_0) \quad (18)$$

Esse tipo de exergia pode ser calculado também em função da exergia térmica (Ex^T) e da exergia mecânica (Ex^M). A Ex^T é função das diferenças de temperatura do meio ambiente com a substância, já a Ex^M se baseia nas diferenças de pressão.

$$Ex^F = Ex^T + Ex^M \quad (19)$$

Segundo Kotas (1985), a fim de evitar que um potencial de trabalho seja realizado, ou seja, um trabalho resultante quando o sistema atinge as condições ambientes em processos que se referem tanto a transferência de calor (sistemas reativos) como a troca de substâncias com o meio ambiente (sistemas não reativos), o equilíbrio irrestrito também deve ser atingido. Quando um sistema alcança esse equilíbrio a exergia química é calculada como:

$$Ex^Q = \sum n_i(\mu_i - \mu_{i,0}) \quad (20)$$

Em ciclos a vapor a exergia total dos fluxos despreza a exergia química, uma vez que no fluxo de trabalho a composição química permanece a mesma. A exergia química está presente em situações em que há liberação de energia por meio de reações químicas em processos que envolvem turbina a gás e em processos de combustão em geral.

A exergia cinética corresponde à energia cinética, logo:

$$Ex^C = \frac{mV^2}{2} \quad (21)$$

A exergia potencial equivale à energia potencial, dessa forma:

$$Ex^P = mgh \quad (22)$$

É importante destacar que as parcelas referentes a exergia cinética e a gravitacional são desprezadas em análises de sistemas térmicos (ALCONCHEL, 1988).

2.7 Análise econômica

Conforme relata Barbosa *et al.* (2012), o projeto tem início por meio de uma definição clara de seu alinhamento com as estratégias da empresa e também a partir de sua viabilidade econômico-financeira.

Quando se fala em projetos é comum o termo “ciclo de vida”. De acordo com Barbosa *et al.* (2012), esse termo refere-se as fases do projeto dependentes do tipo, da estrutura e do tamanho da empresa e do próprio projeto. Segundo ele, esse ciclo é usualmente composto por quatro fases: início, organização, execução e encerramento do projeto.

A análise de viabilidade econômica da síntese de hidrocarbonetos líquidos por meio da tecnologia GTL é determinada pelo preço do barril de petróleo, seu principal concorrente (BAO; EL-HALWAGI; ELBASHIR, 2010), uma vez que independente dos preços das matérias-primas o processo via GTL acompanha os valores do petróleo no mercado internacional. É válido ressaltar que se por exemplo, os preços do petróleo (a longo prazo) forem superiores ao custo do processo do GTL, as empresas serão mais atraídas para a exploração de reservas remotas de gás com o uso de tecnologias de transporte tradicionais, podendo serem mais valorizadas através do seu produto (ZAMALLOA, 2004).

As variáveis da análise econômica de uma planta GTL são os custos da construção e o tempo necessário para realizar essa (até 4 anos) e os custos dos equipamentos. A produção do gás de síntese corresponde em média (varia de acordo com os aspectos tecnológicos da planta) a 33% do custo da planta, a conversão desse gás a 18%, os custos de operação como também da manutenção a 23% e por último a aquisição da matéria prima a 21% (ALMEIDA; BONTEMPO; BICALHO, 2006).

2.8 Análise exergoambiental

A análise exergoambiental permite identificar a contribuição de um componente do sistema de conversão de energia para o impacto ambiental (SILVA, 2021). Nesse sentido, essa análise é composta por uma análise exergética e pela avaliação do ciclo de vida desse componente a fim de que se localize esse impacto, suas causas e magnitude (ALVES, 2020). De acordo com Meyer *et al.* (2009), a análise exergoambiental consiste inicialmente em um estudo da exergia do sistema, seguido pela aplicação de um método que quantifique o impacto ambiental e, por último, a associação dos impactos ambientais às taxas de exergia do sistema para o cálculo dos parâmetros e variáveis exergoambientais com o objetivo de analisar os componentes do sistema.

Através da análise exergética obtém-se os valores de exergia para os fluxos existentes em um determinado sistema, assim como da destruição da exergia de cada componente desse e da eficiência exergética desse (ALVES, 2020).

A avaliação do ciclo de vida (ACV) é uma análise ambiental que quantifica os impactos ambientais (relativos ao uso de recursos, saúde humana e áreas ecológicas) dos componentes, por meio de um balanço de insumos e de produtos de um sistema, ou seja, através do inventário do ciclo (GUINÉE, 2001). Segundo Meyer *et al.* (2009), a ACV tem sido utilizada em processos de conversão de energia que abrange o consumo de combustível, a construção, a manutenção e o descarte dos componentes.

A ACV é prevista em Normas Brasileiras ABNT NBR ISO 14040 e 14044 (2009) e sua estrutura consiste em (ALVES, 2020):

- Definição de objetivo e escopo: descreve o que se pretende, qual o público alvo, o sistema a ser avaliado e sua fronteira, os fluxos de referência, entre outros.

- Análise do Inventário do Ciclo de Vida (ICV): estabelece as entradas de energia e de matéria-prima assim como a saída dos produtos e das emissões.
- Avaliação do Impacto do Ciclo de Vida (AICV): por meio dos resultados fornecidos pela ICV, concretiza a avaliação dos impactos ambientais potenciais.

A ACV é quantificada através de um indicador ecológico (ecoindicador) de forma que quanto maior o valor desse indicador, maior é o impacto ambiental. São exemplos de indicadores o Eco-indicador 95, o Eco-indicador 99 e o Eco-fator 2006. Segundo Goedkoop, Effting e Collignon (2000), para se obter um indicador é preciso realizar:

- O inventário: consiste no levantamento das emissões relevantes, extração de recursos e uso da terra nos processos do ciclo de vida de um produto;
- O cálculo dos danos causados à saúde humana, à qualidade dos ecossistemas e aos recursos naturais;
- A normalização e ponderação das categorias citadas.

É importante ressaltar as unidades das categorias. Os danos causados à saúde humana possuem como unidade o DALY (*Disability Adjusted Life Years*) que representa a perda de anos de vida ou de incapacitação devido aos impactos ambientais. As unidades PDF (*Potentially Disappeared Fraction*) e PAF (*Potentially Affected Fraction*) correspondem aos danos causados a qualidade do ecossistema através da medida de espécies desaparecidas e afetadas. Por último, os danos aos recursos naturais possuem como unidade MJ *surplus* (*Surplus Energy*), representando a quantidade de energia excedente que deve ser extraída pelas gerações futuras. Com o objetivo de que as categorias possuam a mesma unidade (em pontos – Pt) essas são normalizadas e ponderadas.

Como uma evolução do Eco-indicador 95, o Eco-indicador 99 foi proposto, sob a coordenação do *Dutch Ministry of Housing, Spatial Planning and the Enviromental*, com o intuito de oferecer suporte as tomadas de decisão em projetos ambientais. O impacto ambiental é medido por esse indicador através da unidade point (Pt) ou milipoint (mPt), que indica uma carga ambiental anual (1 Pt indica um milésimo da carga ambiental anual de um habitante europeu). Seu valor absoluto não é significativo uma vez que o seu objetivo é comparar diferenças de valor (ALVES, 2020).

Ao analisar o impacto ambiental relacionado ao componente, leva-se em conta o custo de construção, operação, manutenção e descarte desse. É necessário estimar o peso e impacto ambiental por unidade de massa ao analisar o ciclo de vida de um equipamento (SILVA, 2021).

O Eco-indicador 99 apresenta valores padrões para materiais (levando em conta 1kg desse), processos de produção, transporte, processos geradores de energia (unidades são por eletricidade ou calor produzidos) e descarte (por kg de material depositado) (ALVES, 2020).

Um dos métodos para a normalização e ponderação do Eco-indicador 99 é o peso médio (H, A), o qual os valores desses estão exibidos na Tabela 4.

Tabela 4 - Fatores de normalização e pesos para a perspectiva (H, A) para as três categorias de danos.

Categoria	Normalização	Ponderação – pesos
Saúde humana	$1,54 \cdot 10^{-2}$	400
Qualidade do Ecossistema	$5,13 \cdot 10^3$	400
Recursos Naturais	$8,41 \cdot 10^3$	200

Fonte: SILVA (2021).

2.8.1 Balanço Exergoambiental

Segundo Meyer *et al.* (2009), a taxa de impacto ambiental \dot{B}_j (Pt/s ou mPt/s) é calculada por meio da relação entre a exergia do fluxo \dot{E}_j (Pt/ GJ exergia ou mPt/GJ exergia) e o ecoindicador 99 específico b_j .

$$\dot{B}_j = b_j \cdot \dot{E}_j \quad (23)$$

O balanço exergoambiental é expresso da seguinte forma (MEYER *et al.*, 2009):

$$\sum_{j=1}^e (\dot{B}_{j,k} + \dot{Y}_k + \dot{B}_k) = \sum_{j=1}^s \dot{B}_{j,k} \quad (24)$$

A equação 24 demonstra que a soma dos impactos ambientais dos fluxos de entrada ($\sum_{j=1}^e \dot{B}_{j,k}$), dos impactos dos componentes (\dot{Y}_k) e do índice de impacto ambiental (\dot{B}_k) é igual à soma dos impactos ambientais dos fluxos de saída (CAVALCANTI, 2016).

A taxa de impacto dos componentes (\dot{Y}_k) é calculada ao considerar o ciclo de vida completo desses (PETRAKOPOULOU, 2012), da seguinte forma:

$$\dot{Y}_k = \dot{Y}_k^{CO} + \dot{Y}_k^{OM} + \dot{Y}_k^{DI} \quad (25)$$

Sendo: \dot{Y}_k^{CO} a taxa referente ao impacto ambiental de construção; \dot{Y}_k^{OM} a taxa referente ao impacto ambiental de operação e manutenção; \dot{Y}_k^{DI} a taxa referente ao impacto ambiental de descarte.

O ecoindicador $r_{b,k}$ é utilizado para avaliar o potencial de redução do impacto ambiental referente a um componente. Esse ecoindicador é calculado por meio dos impactos ambientais específicos associados ao combustível ($b_{F,k}$) e ao produto ($b_{P,k}$). Valores altos desse indicador demonstra que o impacto ambiental do componente em análise pode ser reduzido de modo mais fácil quando comparado a um outro componente que apresenta um valor inferior para esse mesmo indicador (MEYER *et al.*, 2009).

$$r_{b,k} = \frac{b_{F,k} - b_{P,k}}{b_{F,k}} \quad (26)$$

$$b_{F,k} = \frac{\dot{B}_{F,k}}{\dot{E}_{F,k}} \quad (27)$$

$$b_{P,k} = \frac{\dot{B}_{P,k}}{\dot{E}_{P,k}} \quad (28)$$

A fim de se investigar a causa do impacto ambiental e identificar qual componente do sistema é o maior responsável por esse, o fator exergoambiental ($f_{b,k}$) é utilizado. Esse parâmetro expressa a contribuição relativa ambiental relacionado ao componente k e a soma dos impactos ambientais associados a esse.

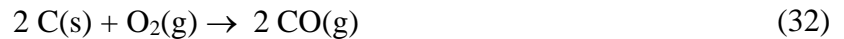
$$f_{b,k} = \frac{\dot{Y}_k}{\dot{Y}_k + \dot{B}_{D,k}} \quad (29)$$

$$\dot{B}_{D,k} = b_{F,k} \cdot \dot{E}_{D,k} \quad (30)$$

A diferença entre os fatores $r_{b,k}$ e $f_{b,k}$ permite avaliar o desempenho exergoambiental de cada componente. É importante destacar ainda que, o fator exergoambiental ($f_{b,k}$) permite comparar o impacto provado pelo componente e o impacto ocasionado pela exergia destruída. Quando esse fator apresenta valor superior a 0,7, a fonte dominante pelo impacto ambiental é o componente, já quando este apresenta valor inferior a 0,3, a fonte é a destruição da exergia (MEYER *et al.*, 2009).

2.9 Reação de *Boudouard* e os catalisadores

O oxigênio reage formando os gases CO e CO₂ na presença de carbono sólido por meio das seguintes reações (HECK, 1981):



A diferença entre as reações 31 e 32 é conhecida como reação de *Boudouard* (ou *Baur-Glaessner*) (HECK, 1981):



Essa diferença elimina o elemento O₂ do sistema fornecendo o equilíbrio do carbono com a razão CO/CO₂ entre as fases reagentes. A relação entre as pressões parciais desses dois gases é expressa por meio de uma constante de equilíbrio (K) (HECK, 1981):

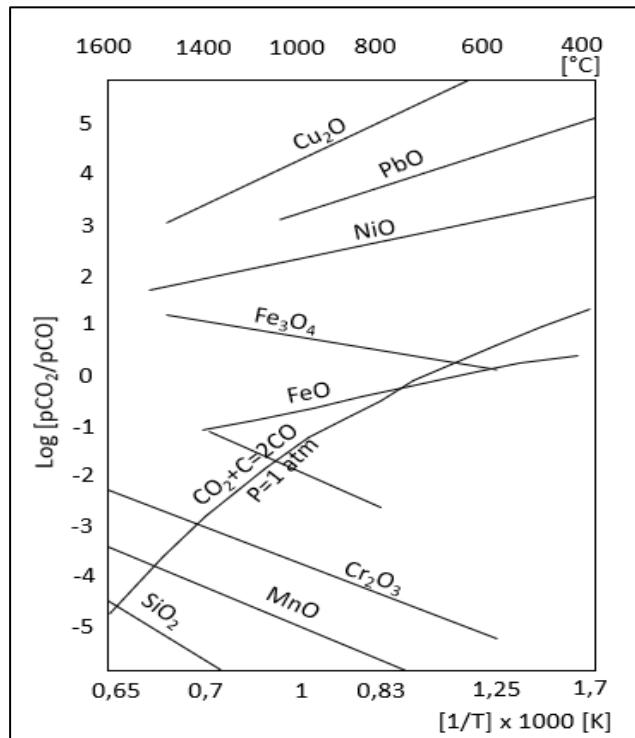
$$\frac{p_{\text{CO}_2}}{p_{\text{CO}}} = \frac{p_{\text{CO}}}{K} \quad (34)$$

Dessa forma, a pressão total (P) é descrita como (HECK, 1981):

$$P = p_{\text{CO}} + p_{\text{CO}_2} \quad (35)$$

A Figura 10 apresenta a curva de *Boudouard* através da relação entre os valores da razão $p_{\text{CO}_2}/p_{\text{CO}}$ e da temperatura para uma atmosfera como pressão total. Nesse sentido, essa razão pode ser ajustada de acordo com o que se deseja desde que uma temperatura adequada esteja adequada. Para valores acima de uma atmosfera há uma translação da curva.

Figura 10 - Relação p_{CO_2}/p_{CO} no equilíbrio de redução de alguns óxidos e para a reação de *Boudouard* em função do inverso da temperatura.



Fonte: ROSENQVIST (1972).

A faixa de temperatura define o tipo de controle da reação de Boudouard. Para baixas temperaturas a reação é reversa (há decomposição de CO em carbono e CO_2) e é controlada pela velocidade da reação química. Já para temperaturas médias e mais altas há a reação de CO_2 com o carbono e a produção de CO estável de forma difusional, ou seja, há a difusão através dos poros das partículas de carbono e a transferência de CO_2 para a superfície externa das partículas. Para temperaturas acima de 1000°C a reação de Boudouard é completa (100% de CO).

Além da temperatura, a cinética da reação de Boudouard é influenciada pela composição da atmosfera gasosa, tipo de carvão e estrutura de poros desse, composição dos aglomerados, reatividade e condutividade térmica das matérias primas, condições de pré-aquecimento e condições experimentais.

É válido destacar que caso haja uma intercessão entre a curva de *Boudouard* e a linha de composições de equilíbrio da reação de redução de um óxido de um metal particular, esse ponto expressa o valor mínimo de temperatura para a formação do metal. No entanto, a temperatura

real também considera os pontos de fusão do metal e da escória, de forma que a maior temperatura é a utilizada.

Fornari *et al.* realizaram um estudo sobre a influência da composição de catalisadores CuO-ZnO-Al₂O₃ na reforma a vapor de metanol, os mais comuns para esse tipo de reação. O CuO apresenta a função de sítio ativo, o ZnO reduz o Cu e melhora sua dispersão e, a alumina, age como estabilizador e fornece uma elevada área específica para a reação (MRAD *et al.*, 2011; YONG *et al.*, 2013).

Neste estudo, Fornari *et al.* sintetizaram quatro catalisadores com teores distintos de Cu (25 e 35%) e Zn (10, 20 e 30%). Esses, foram classificados por área BET e Met. Os testes catalíticos foram realizados a 300°C e demonstraram que os quatro catalisadores sofreram desativação inicial (de forma mais acentuada nas duas primeiras horas de reação) e, que através de aumento do teor metálico total superior a 35% a atividade desses diminui em razão da diminuição da área BET. Concluíram então que a composição de Cu e Zn do catalisador deve se situar abaixo desse valor.

3 MATERIAIS E MÉTODOS

Este capítulo tem como objetivo apresentar a metodologia de pesquisa utilizada. Além disso, determinar a natureza e classificação da pesquisa, assim como os materiais e métodos adotados.

3.1 Caracterização da área de estudo

O presente estudo é justificado pelo potencial de contribuição relacionado ao aproveitamento das fontes energéticas utilizadas na siderurgia e ao controle de emissões de gases das etapas de produção do aço. Dessa maneira, a implementação de uma planta de reuso do gás de alto-forno é analisada.

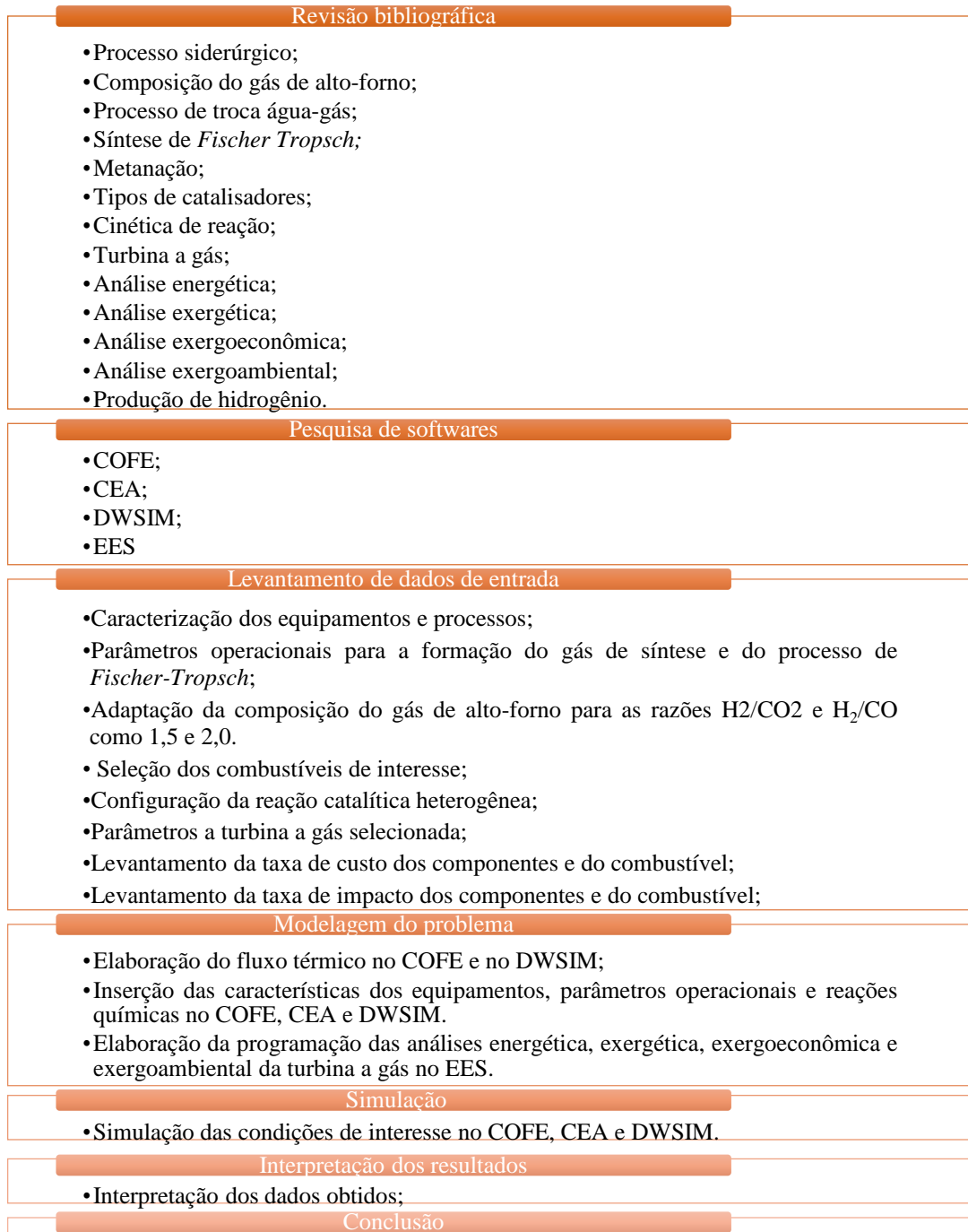
O processo de captura e uso de CO₂ emitido por alto-forno na indústria siderúrgica é investigado com o intuito de produzir uma faixa de hidrocarbonetos. Para isso, inicialmente é buscada a composição desse gás.

Para a análise da conversão do gás de alto-forno em hidrocarbonetos é preciso avaliar dois processos, o de troca água-gás e a síntese de *Fischer Tropsch*. Nesse sentido, são utilizados o fluxograma COFE do CAPE-OPEN e os *softwares Chemical Equilibrium with Applications* (CEA) e DWSIM. É necessário ressaltar que antes da aplicação esses são validados.

São avaliadas inicialmente a influência da variação de conversão de monóxido e dióxido de carbono em metanol assim como a alteração do número de estágios da coluna de destilação na produção. Posteriormente, é analisado no CEA a produção dos hidrocarbonetos de interesse. Em seguida, é analisado a influência do uso de catalisador no processo de conversão no DWSIM. Por último, no EES são realizadas as análises energética, exergética, exergoeconômica e exergoambiental de uma turbina a gás.

3.2 Metodologia

Para a realização deste trabalho, segue-se a metodologia apresentada na Figura 11.



Fonte: Do autor.

Inicialmente realiza-se um estudo bibliográfico acerca da composição do gás de alto-forno, das reações químicas e dos parâmetros envolvidos nos processos de troca água-gás e da síntese de *Fischer Tropsch*. Para a realização desse estudo são utilizados artigos, revistas, trabalhos acadêmicos e anais referentes a esses assuntos.

Assim, busca-se *softwares* de licença livre que permitem modelar a síntese de *Fischer Tropsch*. A partir da pesquisa, opta-se pela utilização do fluxograma COFE do *software* CAPE-OPEN, CEA e DWSIM. Após a instalação desses, os *softwares* são validados usando os tutoriais (Apêndices A, B e C) para posterior aplicação neste trabalho.

Ao que se refere ao levantamento de dados de entrada, são caracterizados os componentes, os parâmetros envolvidos no ciclo térmico dos processos de troca água-gás e da síntese de *Fischer Tropsch*, e determinada a composição do gás de entrada nos processos usando a composição do gás de alto-forno misturado a hidrogênio obtido por meio de eletrólise. As misturas são simuladas para as razões 1,5 e 2,0 de H_2/CO_2 e H_2/CO .

A modelagem do problema é dividida em duas partes. Em um primeiro momento, a formação de metanol a partir do gás de síntese é investigada através de um fluxo térmico no COFE. Posteriormente, estuda-se a conversão do gás de alto-forno em hidrocarbonetos de interesse através da síntese de *Fischer Tropsch* no CEA. Para essas duas situações são inseridos valores para os parâmetros: composição molar, temperatura, pressão e vazão da corrente de entrada.

A simulação das etapas descritas acima é realizada. Dessa forma, no *software* COFE foi investigada a variação da porcentagem de conversão de monóxido e dióxido de carbono em metanol e a influência do número de estágios da coluna de destilação do ciclo térmico de conversão do gás de síntese. Já no *software* CEA avalia-se a formação dos hidrocarbonetos a partir do gás de alto-forno para as razões de 1,5 e 2,0 de H_2/CO_2 e H_2/CO com o intuito de obter as melhores condições para a produção de hidrocarbonetos.

Após a realização das simulações, os resultados são discutidos. Em um segundo momento é realizado o estudo da conversão de hidrogênio e dióxido de carbono em metanol em um reator tubular de leito fixo. A análise energética, exergética, econômica e ambiental referente ao estudo da Turbina Siemens SGT-300 é realizada posteriormente no *software* EES, utilizando como combustível o metanol. Por último, é apresentada a conclusão.

3.3 O gás de alto-forno

Segundo Steelonthenet (2021), as emissões diretas de plantas BOF integradas normalmente chegam a 1,8-3,0 toneladas de CO_2 por tonelada de aço produzida. As plantas EAF baseadas em redução direta de ferro emitem cerca de 2,0-3,0 toneladas de CO_2 por

tonelada de aço se forem à base de carvão ou 0,7-1,2 se forem à base de gás. Já para um EAF típico as emissões diretas estão geralmente em torno de 0,06-0,1 e as emissões indiretas podem adicionar mais 0,4 toneladas de CO₂ por tonelada de aço. A Tabela 5 mostra os volumes típicos de produção de dióxido de carbono por tonelada para cada processo de fabricação de aço.

Tabela 5 - Geração de dióxido de carbono no processo de fabricação de aço.

Processo	Emissão direta de dióxido de carbono (tonelada de CO ₂ / tonelada de ferro gusa)
Coqueria	0,794
Planta de sinterização	0,200
Planta de pelotização	0,057
Alto-forno	1,219
Aciaria	0,181
Forno elétrico a arco	0,240
Laminação de placas e tarugos	0,088
Laminador de tiras a quente	0,082
Prato Moinho	0,098
Moinho de Seção	0,084
Linha de decapagem	0,004
Moinho a frio	0,008
anelamento	0,049
Revestimento de metal por imersão a quente	0,059
Revestimento de metal eletrolítico	0,046
Revestimento orgânico	0,003

Fonte: *Website Steelonthenet*. Acesso: 12/10/2021.

Os principais processos de geração de dióxido de carbono na siderurgia são na coqueria e no processo de produção de ferro gusa no alto-forno. Nesse sentido, foi escolhida a corrente de gás do alto-forno do processo de fabricação de aço para a análise nessa pesquisa por possuir a maior emissão direta de dióxido de carbono.

Como pode ser visto na Tabela 5, o processo de alto-forno libera em média 1,219 toneladas de dióxido de carbono por tonelada de ferro gusa produzido. Este trabalho assume 1

ton/h de ferro gusa produzido e 1,219 ton/h de dióxido de carbono capturado. A Tabela 6 mostra a composição química do gás de alto-forno (%) utilizada neste trabalho.

Tabela 6 - Composição química do gás de alto-forno usada no trabalho.

Espécie	Percentual (%)
Monóxido de carbono	22,15
Dióxido de carbono	14,76
Hidrogênio	5,46
Nitrogênio	46,73
Água	9,88
Metano	1,02

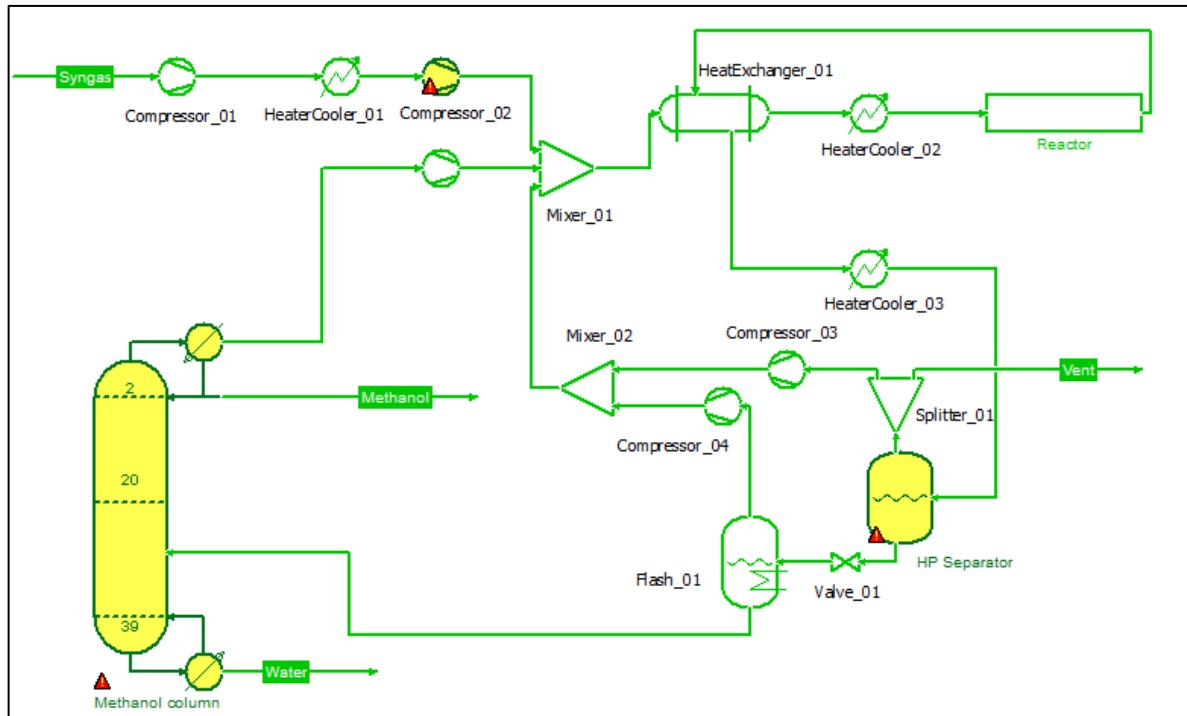
Fonte: De Sousa (2010).

3.4 Conversão de gás de síntese em metanol por meio da interface COFE

O CAPE-OPEN é um *software* gratuito que define um ambiente para a simulação de processos. Este é implementado em *freeware* como o simulador COCO, mantido pela AmsterCHEM, que possui como um de seus componentes a interface COFE, uma interface gráfica de fluxogramas químicos que exibe propriedades de fluxo, permite a conversão de unidades e proporciona recursos de plotagem.

Inicialmente a validação do fluxograma COFE é realizada a partir da reprodução de uma planta de conversão de gás de síntese em metanol desenvolvida por Luyben (2010). A planta estudada está exposta na Figura 12. Essa é composta por compressores, trocadores de calor, reator, separadores *flash*, válvula de expansão, misturadores e coluna de destilação. Luyben (2010) fixou em seu estudo os valores de conversão do reator como 64% para monóxido de carbono e 17% para dióxido de carbono e a coluna de destilação com 40 estágios e uma razão de refluxo de 1,5.

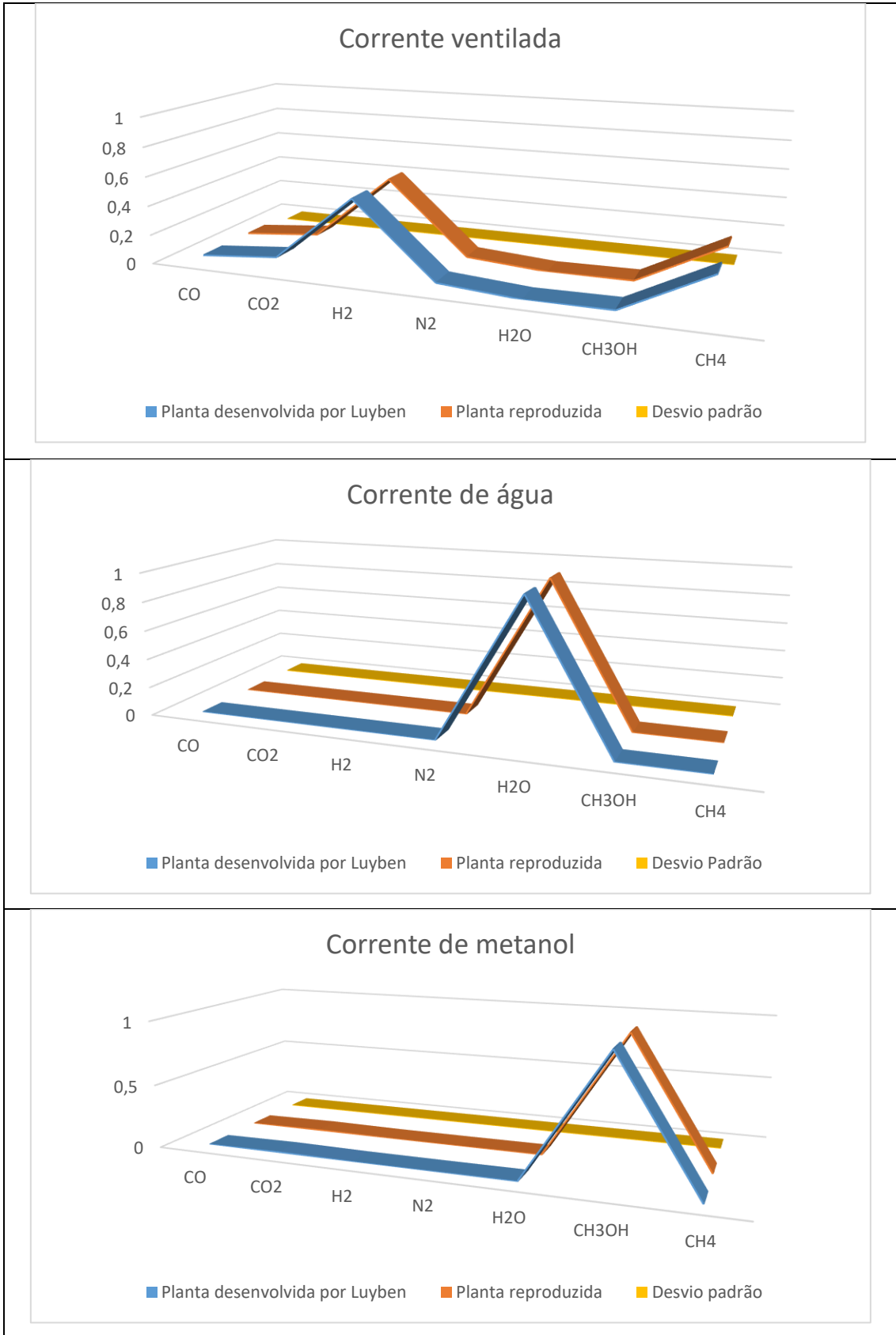
Figura 12 - Simulação no *software* COFE da planta de síntese de gases.



Fonte: Do autor.

A Figura 13 apresenta a comparação entre as frações molares das correntes ventilada, de água e de metanol apresentadas pela planta desenvolvida por Luyben (2010) e os valores obtidos pela planta reproduzida.

Figura 13 – Validação do fluxograma COFE a partir das frações molares de cada corrente.



Fonte: Do autor.

A partir da análise da Figura 13 percebe-se que os valores obtidos pela planta reproduzida se aproximam dos valores de fração molar resultantes da planta originalmente desenvolvida, sendo o valor máximo de desvio padrão igual a $1,43 \times 10^{-6}$. Dessa forma, o fluxograma COFE é apto a ser utilizado nessa pesquisa.

O primeiro estudo realizado neste trabalho é a conversão do gás de síntese em metanol. Para isso, o pacote de reação do sistema é definido de acordo com a composição, a temperatura, a pressão, entre outras variáveis, para o fluxo de entrada. O Apêndice A mostra como é realizada essa configuração.

A primeira etapa tem como objetivo analisar a variação na porcentagem de conversão de monóxido e dióxido de carbono do reator e o número de estágios da coluna de destilação. Para isso, são simuladas as seguintes taxas de reação para conversão de monóxido de carbono e dióxido de carbono em metanol no fluxograma COFE:

- 58% de monóxido de carbono e 23% de dióxido de carbono.
- 64% de monóxido de carbono e 17% de dióxido de carbono (LUYBEN, 2010).
- 70% de monóxido de carbono e 11% de dióxido de carbono.

A faixa de variação do número de estágios da coluna de destilação simulada é de 20, 40 e 60 estágios.

3.5 Análise de um fluxograma de conversão de gás de alto-forno em hidrocarbonetos no software CEA

O *software Chemical Equilibrium with Applications* (CEA) foi desenvolvido pelo Dr. S. Gordon, Dr. BJ McBride e seus colegas de trabalho do NASA *Glenn Research Center*. O programa possui uma biblioteca termodinâmica que permite calcular as concentrações do produto de equilíbrio químico de qualquer conjunto de reagentes. Através desse, é possível também determinar as propriedades termodinâmicas e de transporte para a mistura do produto.

O CEA pode ser utilizado de dois modos: por meio de um *prompt* de comando ou através de sua versão online. Os aplicativos integrados a esse definem o desempenho teórico do foguete, os parâmetros de detonação do *Chapman-Jouguet*, do tubo de choque e as propriedades de combustão.

Neste estudo, o CEA é utilizado com o intuito de analisar o processo de formação de combustíveis a partir da reação de deslocamento de água (*Water-Gas Shift Reaction* - WGSR)

e da síntese de *Fischer Tropsch* sendo o gás de alto-forno um insumo. Para isso, são definidas as faixas de temperatura e pressão de operação dos reatores, os combustíveis e oxidantes envolvidos nas reações assim com suas respectivas frações molares e, por último, os gases que se deseja avaliar a formação. Essa configuração pode ser observada no Apêndice B.

Inicialmente é avaliado o estudo da produção do gás de síntese por meio da equação da reação de deslocamento de água ($CO_2 + H_2 \rightleftharpoons CO + H_2O$). Dessa forma, as razões de 1,6 e 2,0 para a razão molar vapor-carbono são simuladas, sendo a temperatura inicial de formação estipulada como 450K (~177°C).

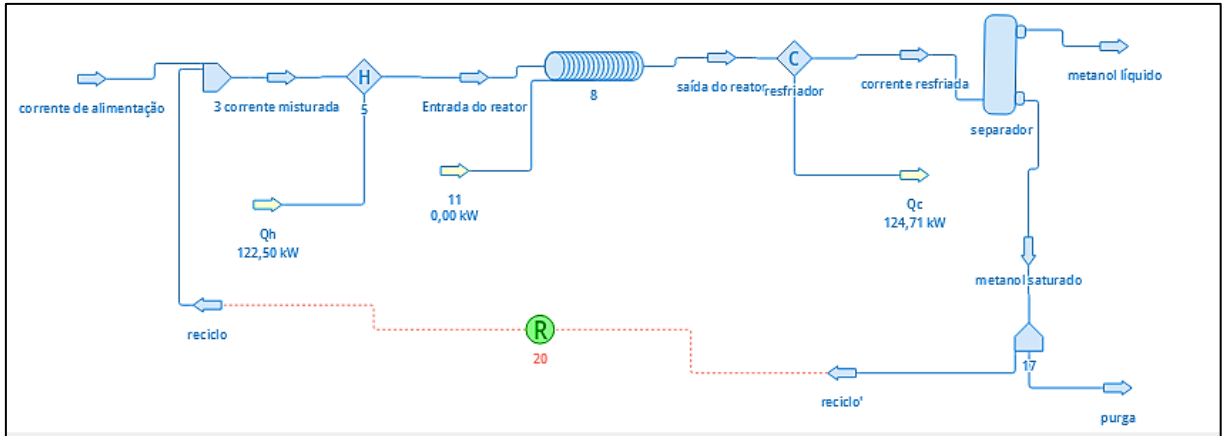
Posteriormente, é avaliada a produção do gás de síntese pela análise de equilíbrio químico adicionando-se hidrogênio no reator de troca água-gás, sendo a composição molar desse gás adaptada para as razões H_2/CO_2 e H_2/CO de 1,5 e 2,0. Nesse sentido, é observado o melhor intervalo de temperatura para a formação do gás de síntese. As frações molares obtidas nesse intervalo são utilizadas no estudo da formação dos produtos com carbono por meio da síntese de *Fischer Tropsch*, de forma que as faixas de temperatura e pressão que são simuladas nessa etapa seguem os dois modos de operação apresentados pela literatura (MARK E. DRY, 2002): a *Low Temperature Fischer-Tropsch (LTFT)* que opera com faixa de temperatura de 200 a 240°C e pressão de 2,0 a 4,5 MPa; e a *High Temperature Fischer-Tropsch (HTFT)* que opera com faixa de temperatura de 300 a 350°C e pressão de 2,0 a 4,5 MPa.

3.6 Análise de um fluxograma de conversão de dióxido de carbono e hidrogênio em metanol e etanol no DWSIM

O *software* DWSIM é um simulador de processo químico, compatível com o CAPE-OPEN, desenvolvido em 2004 a partir de macros Excel VBA por Daniel Wagner Oliveira de Medeiros. O DWSIM apresenta uma interface gráfica com recursos anteriormente disponíveis apenas em simuladores comerciais.

Neste trabalho, o DWSIM será utilizado para avaliar a síntese de *Fischer Tropsch* através da conversão de hidrogênio e dióxido de carbono em metanol e em etanol como mostra a Figura 14.

Figura 14 – Fluxograma elaborado no DWSIM.



Fonte: Do autor.

No fluxograma apresentado na Figura 14, o pacote termodinâmico selecionado é a equação de estado de Peng-Robinson. Inicialmente, dióxido de carbono e hidrogênio (razão 1:3) compõem a corrente de alimentação a uma vazão de 2,2 m³/h, temperatura de 25°C e pressão de 60 bar. Posteriormente, há uma passagem desses por um aquecedor saindo a 250°C. Em seguida, em um reator de leito fixo adiabático, há a reação de conversão desses dois componentes em metanol e água ($CO_2 + 3H_2 \rightarrow CH_3OH + H_2O$). Logo após, a mistura passa por um resfriador a 0°C e então a corrente resfriada é separada por um tanque separador em duas frações: uma de metanol líquido e outra com uma mistura saturada. Uma pequena fração da mistura saturado (1%) constitui a corrente de purga enquanto o restante é devolvido ao ciclo inicial através de uma corrente de reciclo a 0°C. O mesmo procedimento foi realizado para a simulação da síntese de etanol ($2CO_2 + 6H_2 \rightarrow C_2H_5OH + 3H_2O$).

Para a cinética de reação, a formulação de Klier *et al.* (1982) é usada:

$$r_{metanol} = k \left(p_{CO_2} - \frac{1}{K^{eq}} \frac{p_{CH_3OH} p_{H_2O}}{p_{H_2}^3} \right) \quad (36)$$

$$r_{etanol} = k \left(p_{CO_2} - \frac{1}{K^{eq}} \frac{p_{CH_3CH_2OH} p_{H_2O}}{p_{H_2}^3} \right) \quad (37)$$

Ou ainda:

$$r_{metanol} = k(p_{CO_2} p_{H_2}^3 K^{eq} - p_{CH_3OH} p_{H_2O}) / (p_{H_2}^3 k_{eq}) \quad (38)$$

$$r_{etanol} = k(p_{CO_2} p_{H_2}^3 K^{eq} - p_{CH_3CH_2OH} p_{H_2O}) / (p_{H_2}^3 k_{eq}) \quad (39)$$

Os parâmetros k e K^{eq} são definidos através da relação a seguir:

$$k = K^{eq} = A \times \exp\left(\frac{B}{RT}\right) \quad (40)$$

Em que:

	A	B
k	$7,21 \times 10^{17}$	-215130
K^{eq}	$1,068 \times 10^2$	-39683

Dessa forma, tem-se k e K^{eq} expressos como:

$$k = 7,21 \cdot 10^{17} \exp(-215130/8,314 \times T) = 7,21 \cdot 10^{17} \exp(-25875,63/T) \quad (41)$$

$$K^{eq} = 1,068 \cdot 10^2 \exp(-39683/8,314 \times T) = 1,068 \cdot 10^2 \exp(-4773,03/T) \quad (42)$$

Nesse sentido, r é inserido no DWSIM por meio da equação heterogênea catalítica, pelo seu numerador e denominador, de forma que R são os reagentes e P os produtos. Para a síntese de metanol o R₁ é CO₂ e o R₂ é H₂ enquanto o P₁ é H₂O e o P₂ é CH₃OH. Já para a síntese de etanol o P₁ é C₂H₅OH e o P₂ é H₂O. Essa configuração para a produção de metanol está apresentada na Figura 15, o mesmo procedimento foi realizado para a formação de etanol.

Figura 15 – Configuração da reação catalítica heterogênea no DWSIM.

Heterogeneous Catalytic Reaction

Identification
Name:
Description:

Components and Stoichiometry

Name	Molar Weight	ΔH_f (kJ/kg)	Include	BC	SC
Carbon dioxide	44,0095	-8941,48	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	-1
Water	18,0153	-13422,7	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	1
Hydrogen	2,01588	0	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	-3
Methanol	32,0419	-6271,17	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	1

Stoichiometry Heat of Reaction (kJ/kmol_BC)

Equation Base Component

Heterogeneous Kinetic Reaction Parameters

Basis: Phase: Tmin (K) Tmax (K)

Kinetics Specification Simple Advanced Python Script

Reaction Rate (Base Component) = Numerator / Denominator

Numerator:

Denominator:

Expression Variables: Temperature (T) in K, reactant amounts (R1, R2, ..., Rn) and product amounts (P1, P2, ..., Pn) in the selected amount unit, reaction rate (r) in the selected velocity unit.

Amount Units Rate Units

Use '.' as the decimal separator on math expressions.

Fonte: Adaptado do software DWSIM.

Na configuração do reator é preciso inserir os dados do catalisador e do reator. Para esse estudo são selecionados o reator de leito fixo (PFR) e o catalisador comercial Cu/ZnO/Al₂O₃, sendo as propriedades exibidas na Tabela 7.

Tabela 7 - Valores inseridos no DWSIM na configuração do reator.

Propriedade	Valor
Volume do reator (m ³)	8,0
Comprimento do reator (m)	1,0
Densidade do catalisador (kg/m ³)	0,6
Diâmetro médio da partícula (mm)	0,3
Fração de vazio no catalisador	0,3

Fonte: Bussche e Froment (1996).

Posteriormente, é realizada a comparação das frações molares dos componentes da corrente de metanol e etanol líquido formados de acordo com a variação da razão H_2/CO_2 (2, 2,5, 3 e 3,5). A configuração no DWSIM está apresentada no Apêndice C.

3.7 Análise termodinâmica, exergoeconômica e exergoambiental de uma turbina a gás

O *software Engineering Equation Solver* (EES), desenvolvido pela *F-Chart Software*, permite a resolução de equações algébricas e diferenciais não lineares simultâneas sendo muito útil para problemas de termodinâmica e transferência de calor. O EES possui armazenamento de propriedades termodinâmicas e de transporte para uma ampla quantidade de substâncias, o que permite realizar uma resolução iterativa. O *software* permite ao usuário selecionar o sistema de unidades desejada, especificar os critérios de paradas, gerar gráficos, entre outros.

Neste trabalho, são realizadas as análises da primeira e segunda lei da termodinâmica, e as análises exergoeconômica e exergoambiental da turbina Siemens SGT-300. Essa turbina possui um arranjo compacto, com facilidade de manutenção e confiabilidade inerente, é projetada para operar com uma ampla gama de combustíveis líquidos e gasosos. A turbina SGT-300 é aplicada em ciclos simples, ciclos combinados, cogeração para plantas industriais com alta carga de calor e geração de energia para indústria de óleo e gás. Nesse estudo, o combustível considerado para a operação dessa turbina é o metanol. As propriedades apresentadas pelo fabricante dessa turbina podem ser observadas na Tabela 8 e em mais detalhes no Anexo A.

Tabela 8 - Dados referente a turbina Siemens SGT-300.

Fabricante	Siemens AG
Modelo	SGT-300
Combustível	Líquido ou Gás
Potência contínua nas condições ISO (kW)	7900
<i>Heat Rate</i> (kJ/kWh)	11704
<i>Eficiência Térmica</i>	30,76%
Razão de Pressão	13,7
Vazão Mássica (kg/s)	30,2
Temperatura de saída (°C)	543
Temperatura de saída (K)	816,15
Rotação no eixo de saída (r/min) Min	14045
Calor fornecido pelo combustível (kJ/kg)	850,46

Fonte: Website da Siemens Energy. Acesso: 26/10/2021.

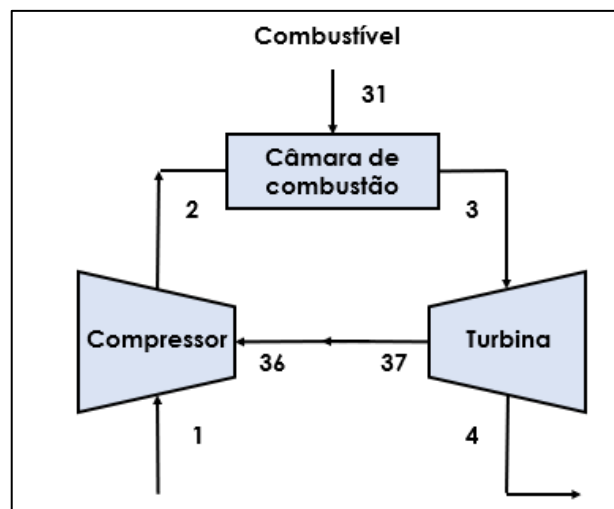
Além dessas informações contidas na Tabela 8, foram realizadas também as considerações apresentadas na Tabela 9. A configuração utilizada para a análise da turbina a gás está representada na Figura 16.

Tabela 9 - Considerações para o desenvolvimento da análise termodinâmica.

Propriedade	Valor
Constante R do ar (kJ/kg.K)	0,287
R universal dos gases (kJ/kmol.K)	8,314
Pressão ambiente (kPa)	101,325
Temperatura ambiente (K)	288,150
Poder calorífico do combustível (kJ/kg)	42600
Eficiência do compressor e da turbina (%)	85,000

Fonte: Do autor.

Figura 16 - Modelo de fluxograma do ciclo de turbina a gás utilizado para o estudo.



Fonte: Do autor.

Os códigos utilizados para todas as análises encontram-se nos Apêndices D, E, F e G. Esses podem ser de interesse para trabalhos futuros que buscam aplicar essas análises em outros cenários.

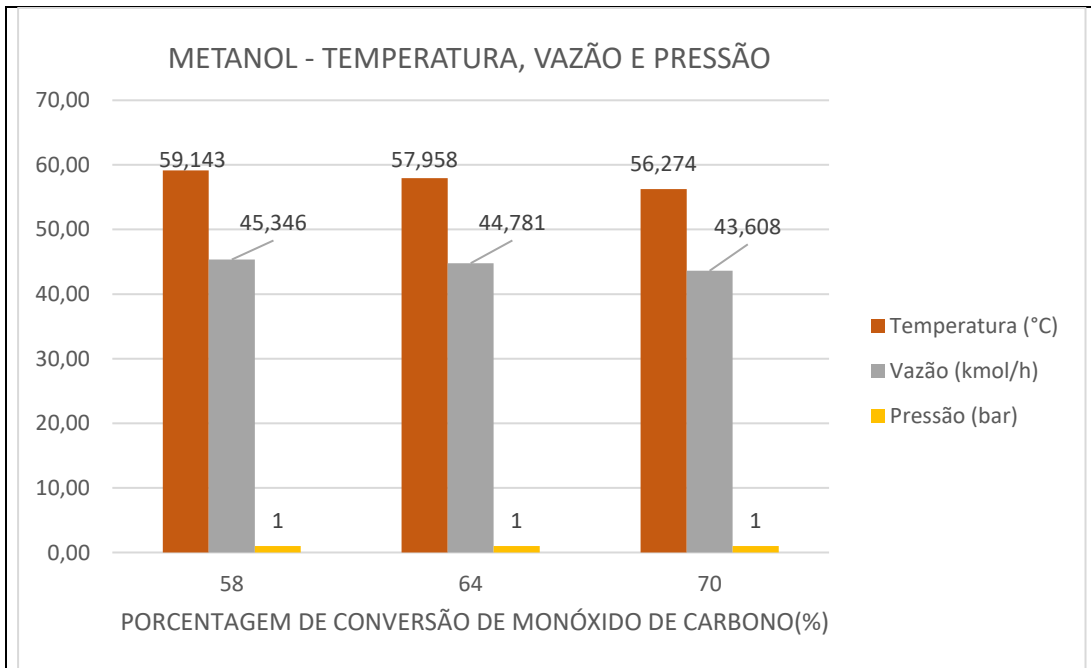
4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Este capítulo apresenta os resultados e também a discussão acerca do tema.

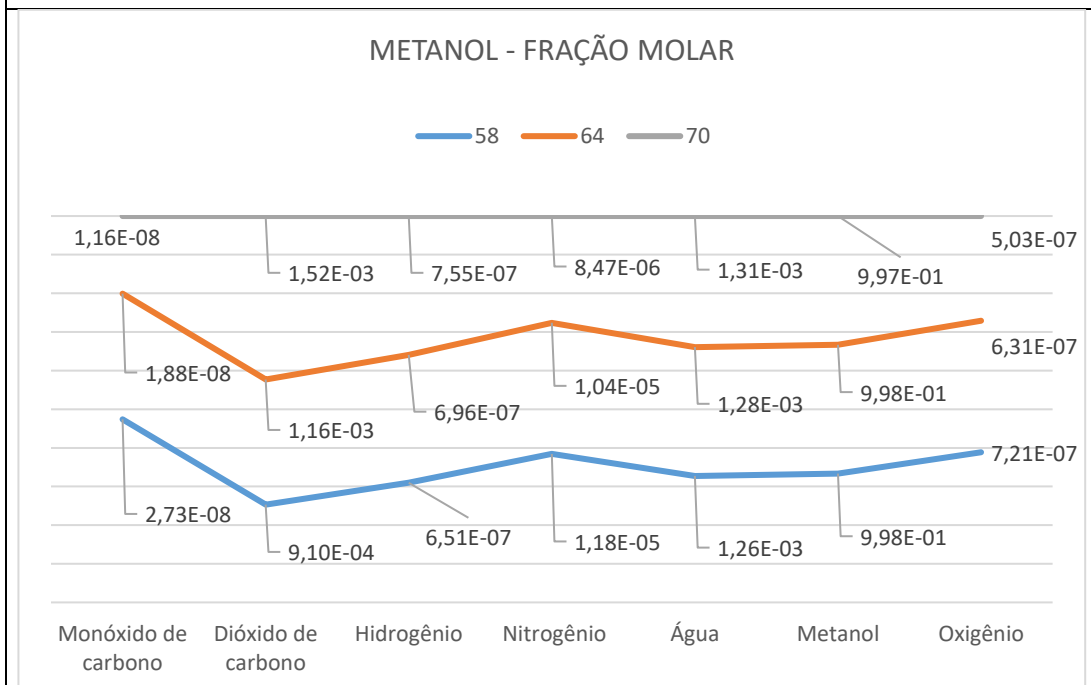
4.1 Conversão do gás de síntese em metanol por meio do uso do fluxograma COFE do software CAPE-OPEN

De acordo com o que está exposto na seção 3.1, são simuladas três faixas de porcentagem de conversão de monóxido de carbono e dióxido de carbono em metanol no fluxograma COFE. A Figura 17 representa o comportamento da corrente de metanol com essas faixas de conversão. Já a Figura 18 mostra a corrente de água e a Figura 19 mostra a corrente ventilada, onde os componentes inertes (metano e nitrogênio) são removidos do sistema.

Figura 17 - Resultados da variação da taxa de reação de CO e CO₂ na corrente de metanol em termos de: (a) temperatura, vazão e pressão e (b) frações molares dos componentes.



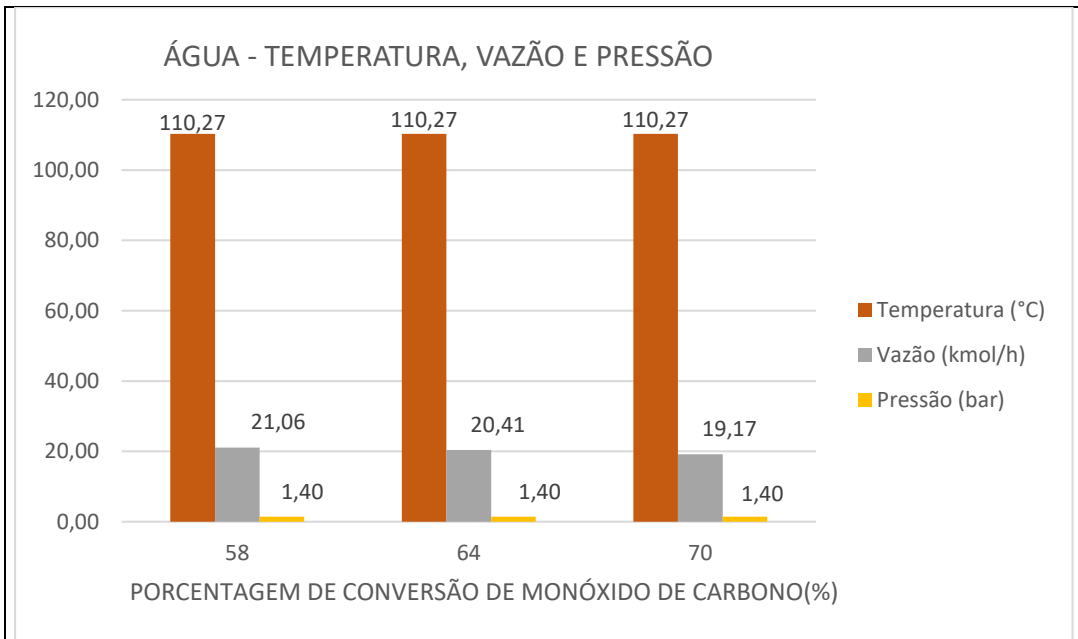
(a) Variação na temperatura, taxa de fluxo e pressão da corrente de metanol com a variação de conversão.



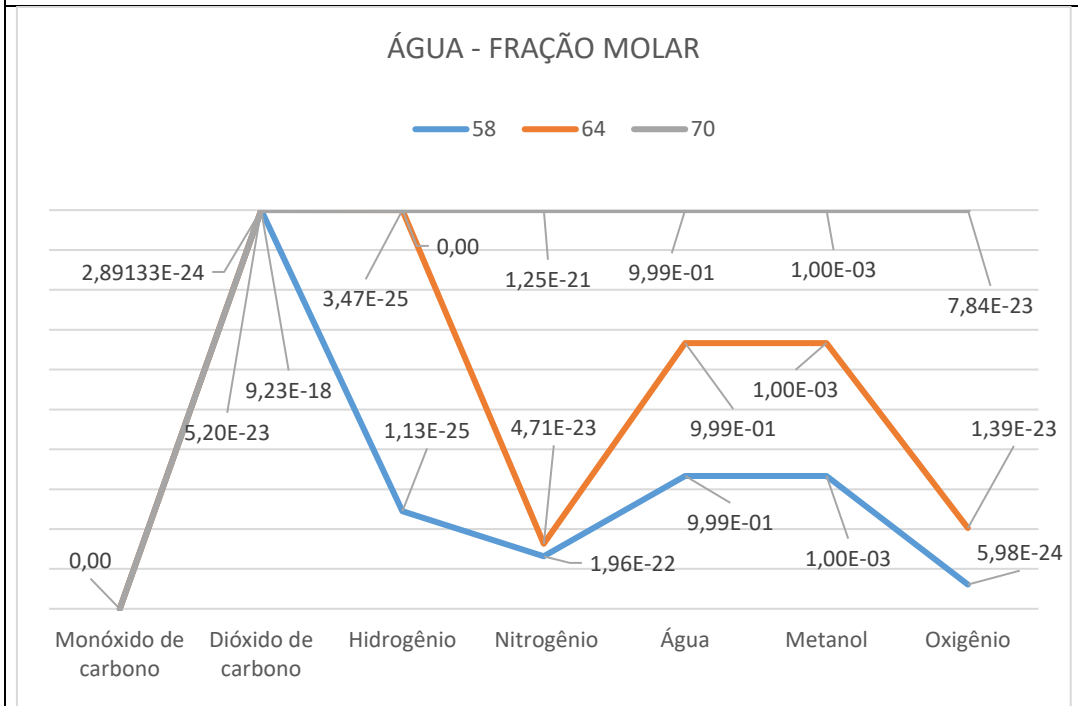
(b) Variação das frações molares na corrente de metanol com a variação da conversão.

Fonte: Do autor.

Figura 18 - Resultados da variação da taxa de reação de CO e CO₂ na corrente de água em termos de: (a) temperatura, vazão e pressão e (b) frações molares dos componentes.



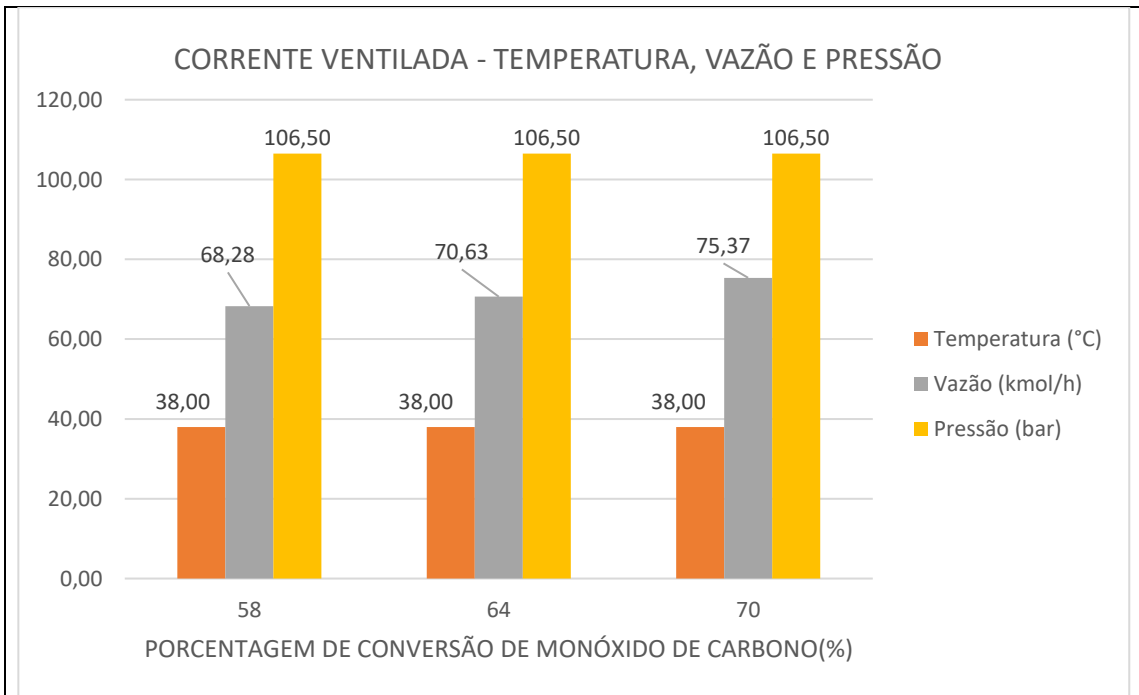
(a) Variação na temperatura, taxa de fluxo e pressão do fluxo de água com a variação de conversão.



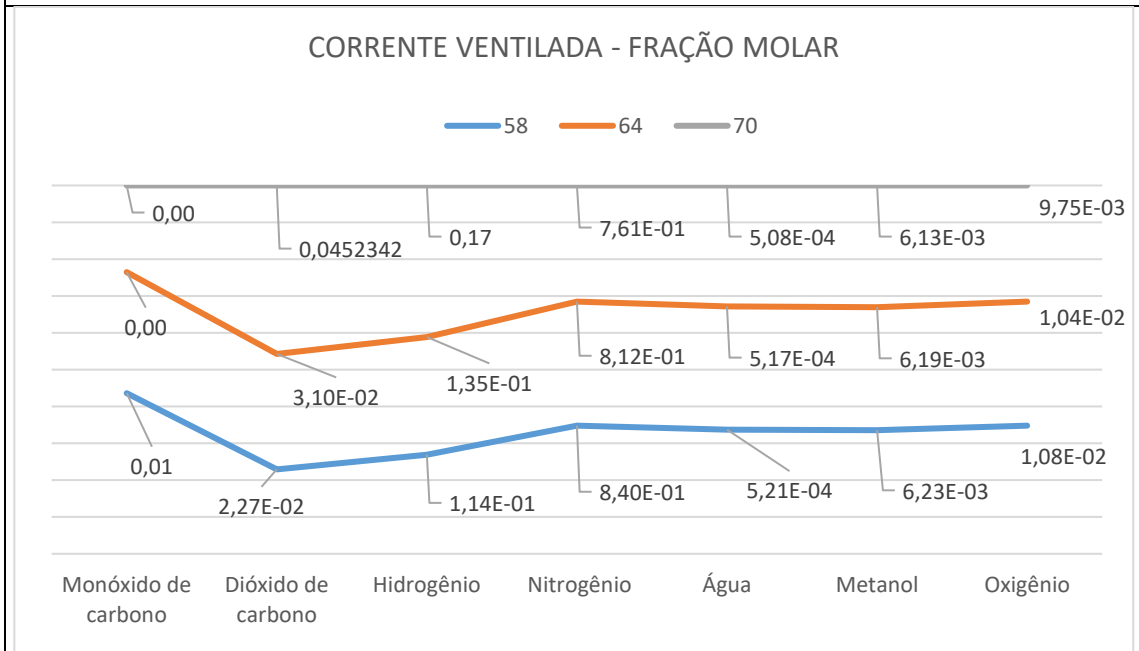
(b) Variação das frações molares na corrente de água com a variação da conversão.

Fonte: Do autor.

Figura 19 - Resultados da variação da taxa de reação de CO e CO₂ na corrente ventilada em termos de: (a) temperatura, vazão e pressão e (b) frações molares dos componentes.



(a) Variação na temperatura, taxa de fluxo e pressão na corrente de ventilação com a variação de conversão.



(b) Variação das frações molares da corrente de água com a variação da conversão.

Fonte: Do autor.

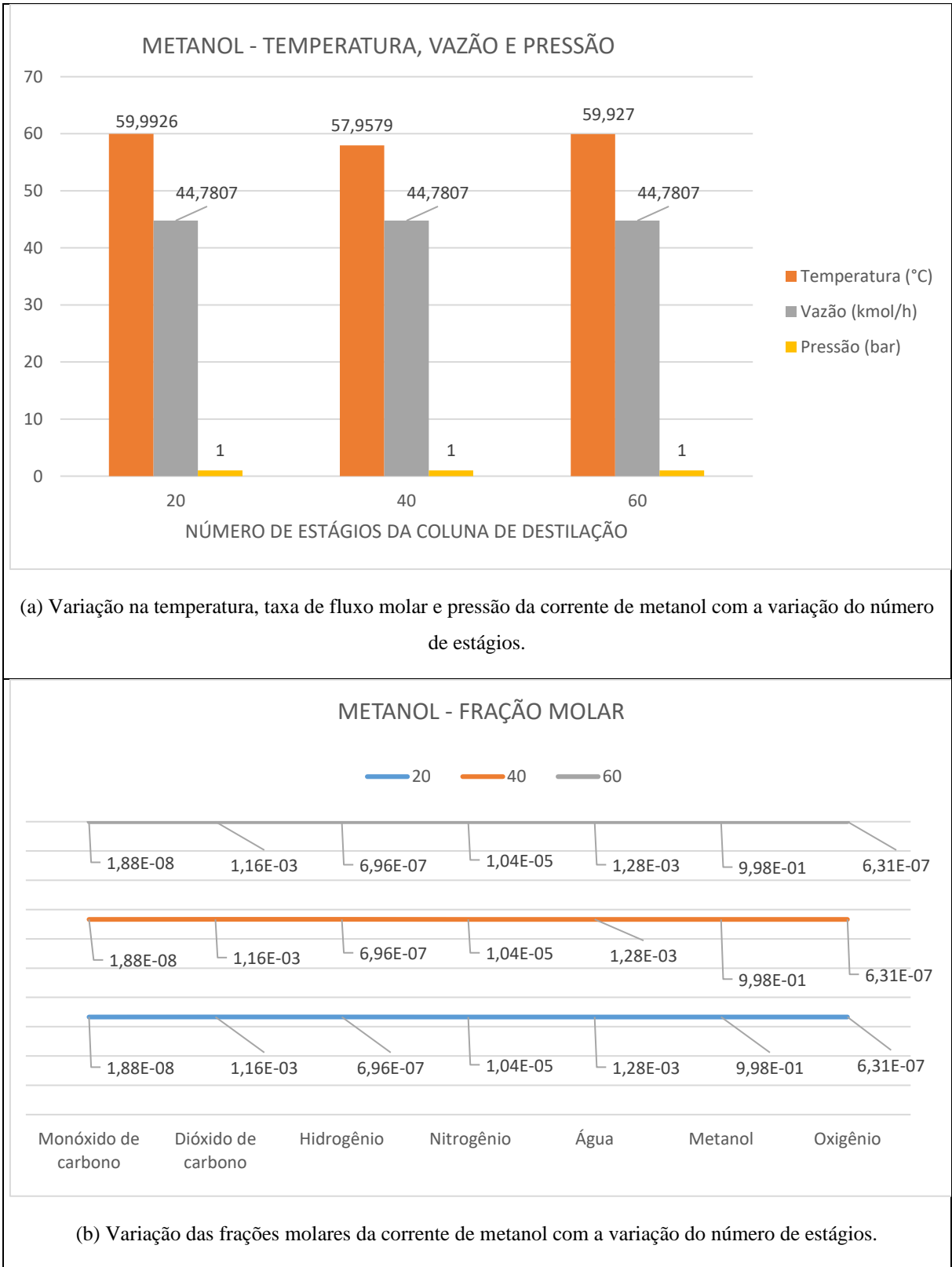
Através da análise das variações nas porcentagens de conversão no reator, as seguintes observações podem ser feitas conforme a porcentagem de conversão de monóxido de carbono diminui e a porcentagem de dióxido de carbono em metanol aumenta:

- O fluxo de metanol aumenta, assim como a temperatura de saída. O metanol produzido apresenta, de acordo com essa relação, maior fração molar de monóxido de carbono, nitrogênio e oxigênio, enquanto ocorre a redução da fração molar de dióxido de carbono, hidrogênio e água.
- O fluxo de água e a fração molar de dióxido de carbono aumentam com essa proporção e as frações molares de oxigênio e nitrogênio diminuem.
- O fluxo da corrente ventilada diminui com essa proporção, assim como a fração molar de dióxido de carbono e hidrogênio nela presente. As frações molares de monóxido de carbono, nitrogênio, água e metanol aumentam neste fluxo.

4.1.1 Variação no número de estágios da coluna de destilação

Como descrito na seção 3.1, também foram realizadas simulações variando o número de estágios da coluna de destilação (20, 40 e 60 estágios). A Figura 20 representa o comportamento da corrente de metanol, a Figura 21 mostra a corrente de água e a Figura 22 mostra a corrente ventilada com essa variação.

Figura 20 - Resultados da variação do número de estágios da coluna de destilação na corrente de metanol em termos de: (a) temperatura, vazão e pressão e (b) frações molares dos componentes.



Fonte: Do autor.

Figura 21 - Resultados da variação do número de estágios da coluna de destilação na corrente de água em termos de: (a) temperatura, vazão e pressão e (b) frações molares dos componentes.

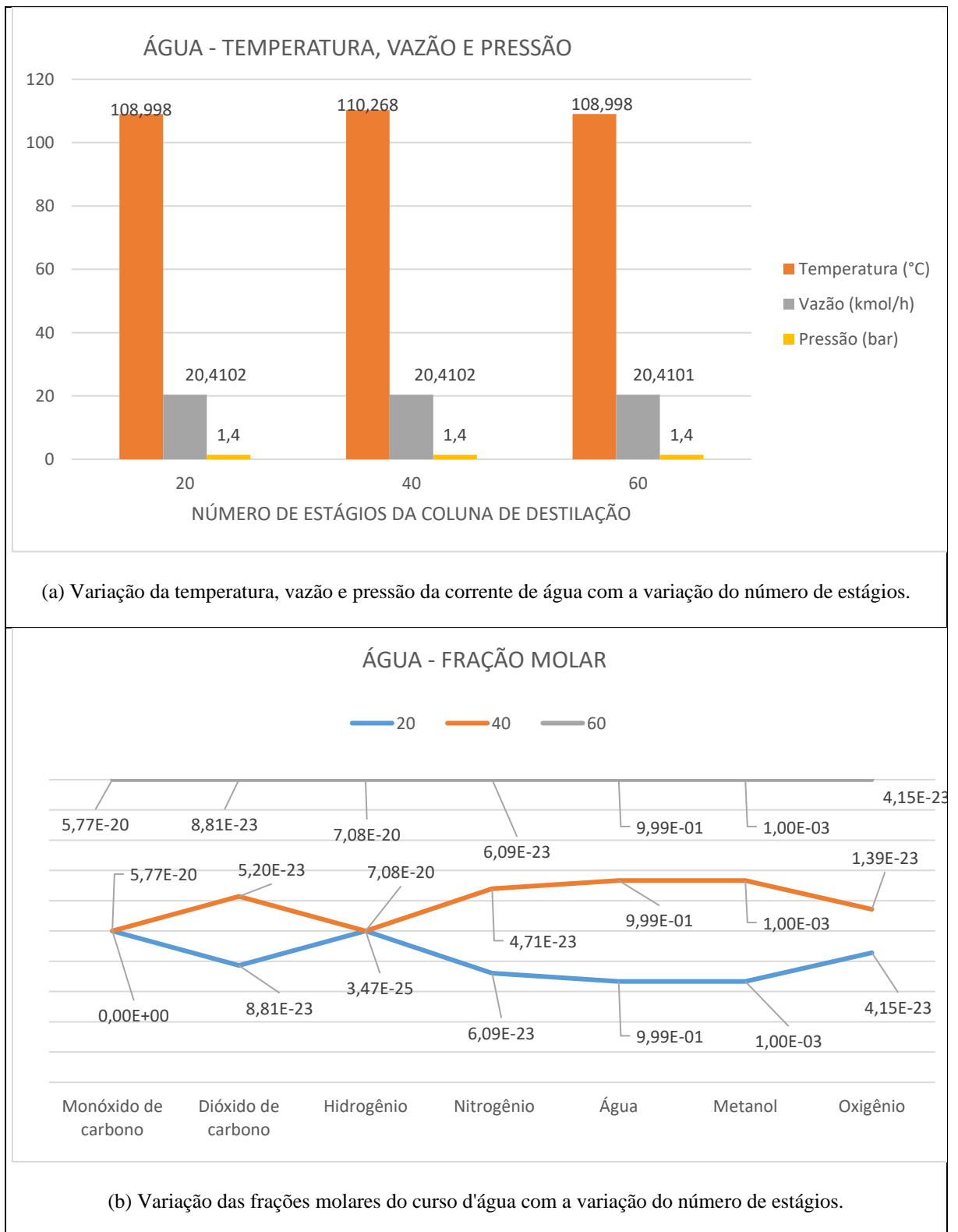
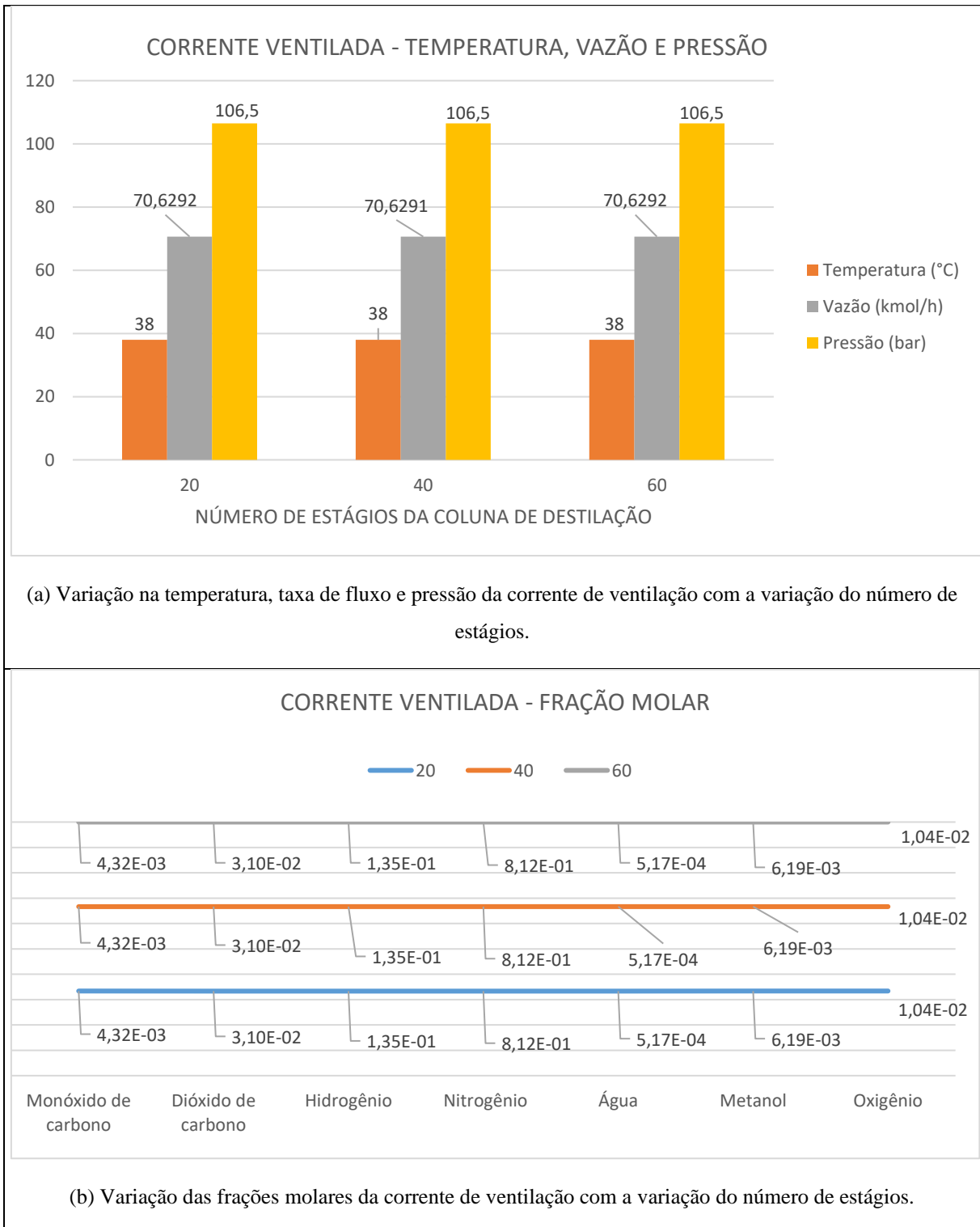


Figura 22 - Resultados da variação do número de estágios da coluna de destilação na corrente ventilada em termos de: (a) temperatura, vazão e pressão e (b) frações molares dos componentes.



Através da análise dos resultados apresentados é possível perceber que a vazão de água é a que mais muda de acordo com a variação do número de estágios da coluna de destilação. A

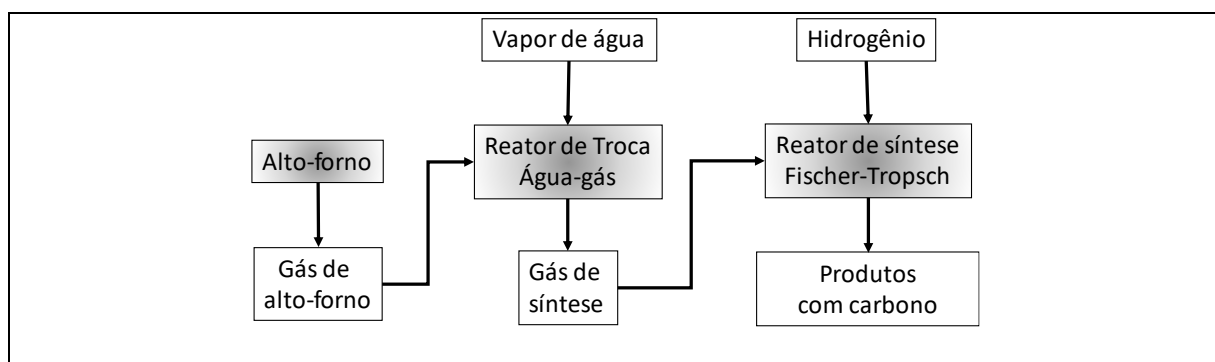
temperatura e as frações molares do monóxido e do dióxido de carbono, bem como as do hidrogênio e do nitrogênio flutuam com o aumento dos estágios, mas é necessário enfatizar que não são mudanças significativas.

De acordo com Luyben (2010) os custos de energia e os custos de capital do trocador de calor diminuem à medida que o número de estágios da coluna de destilação aumenta, no entanto, o custo de capital do revestimento aumenta de forma que o custo total aumenta com estágios crescente. Dessa forma, ao comparar os resultados obtidos neste trabalho com os obtidos por Luyben (2010) percebe-se que a redução do número de estágios é interessante uma vez que o custo total da coluna de destilação será menor e não haverá mudanças significativas ao que se refere aos parâmetros de cada corrente.

4.2 Análise de um fluxograma de conversão de gás de alto-forno em produtos com carbono no *software* CEA

O gás de alto-forno é usado como insumo para a formação de produtos com carbono na síntese de Fischer-Tropsch. Para isso, o gás de alto-forno, após sair do processo siderúrgico, é misturado ao hidrogênio e essa mistura passa pelo reator de troca água-gás, conforme mostra a Figura 23.

Figura 23 – Fluxograma do processo de conversão do gás de alto-forno em produtos com carbono.

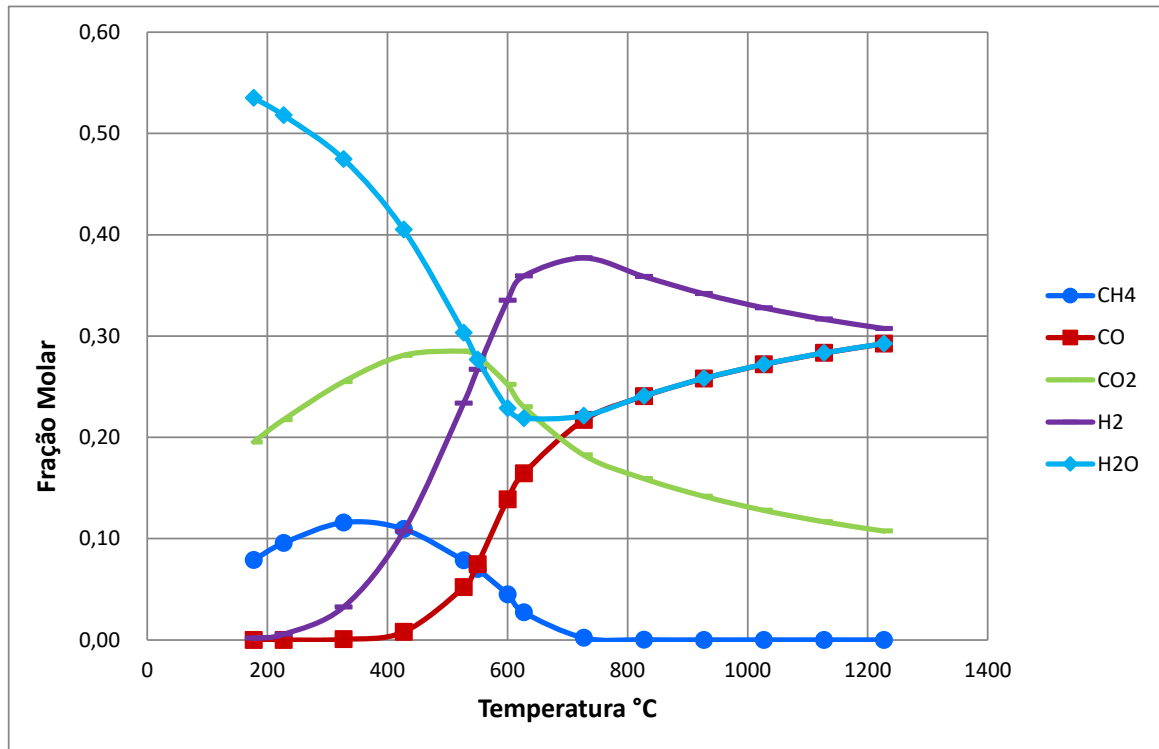


Fonte: do autor

Ainda, de acordo com a Figura 23, logo após o reator de água-gás, o gás de síntese produzido passa pelo reator de Fischer-Tropsch.

As Figuras 24 e 25 demonstram a composição do gás de síntese formado, a partir da reação de gás-água reversa, sendo a temperatura inicial de formação estipulada em 450 K ($\sim 177^{\circ}\text{C}$), para as razões molares vapor-carbono de 1,6 e 2,0.

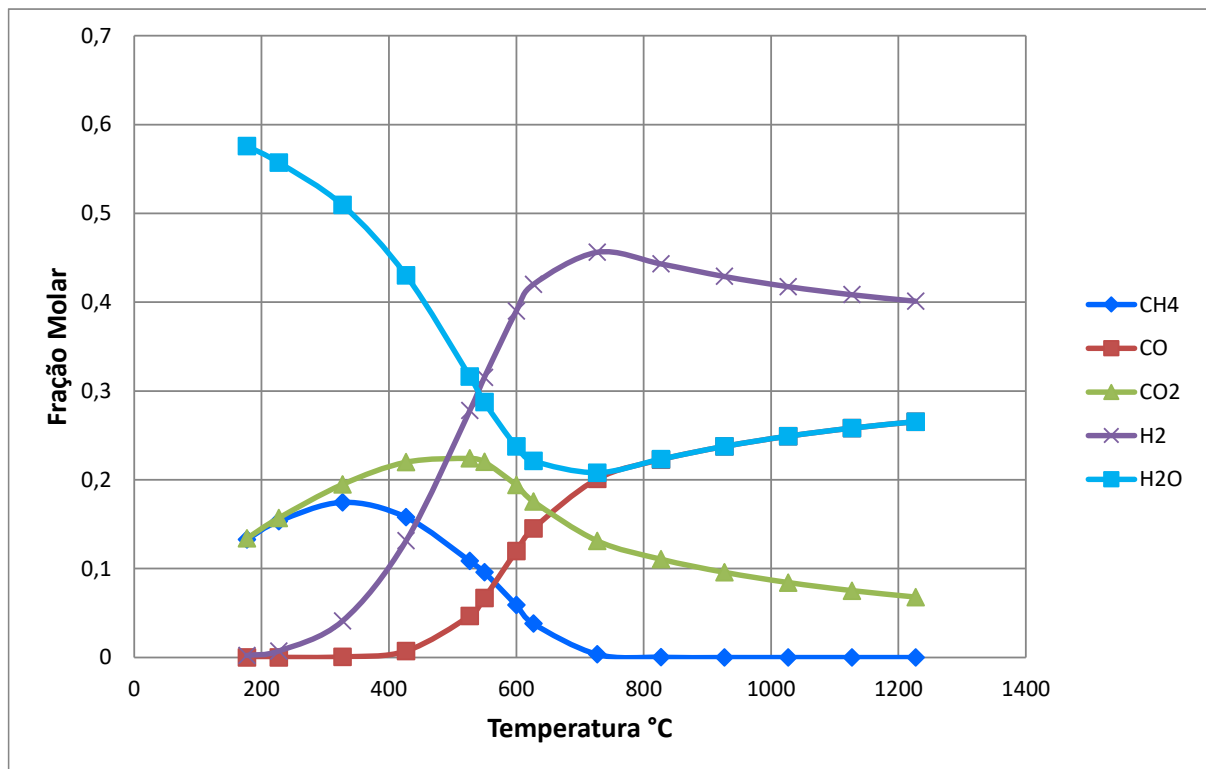
Figura 24 – Formação do gás de síntese através da reação de troca água-gás para a razão molar vapor-carbono de 1,6.



Fonte: Do autor.

Pela Figura 24 percebe-se que a fração molar de água tende a diminuir com o aumento da temperatura de 177°C (0,535) até 627°C (0,219), mas para temperaturas superiores à essa, a fração volta a aumentar chegando a 0,292 em 1227°C . A corrente de dióxido de carbono apresenta um pico de fração molar (0,285) em 527°C , para temperaturas superiores a essa a fração diminui. A fração molar de monóxido de carbono tende a aumentar com a elevação da temperatura chegando a um valor máximo de 0,292 em 1227°C . A fração molar de hidrogênio aumenta até a temperatura de 727°C , a qual apresenta um valor máximo de 0,378, para temperaturas superiores a fração começa a diminuir. Por último, a fração molar de metano aumenta até 327°C atingindo um valor de 0,116, acima dessa temperatura a fração diminui.

Figura 25 – Formação do gás de síntese através da reação de troca água-gás para a razão molar vapor-carbono de 2,0.



Fonte: Do autor.

Conforme mostra a Figura 25, a fração molar de água para a razão vapor-carbono de 2,0 apresenta o mesmo comportamento da razão igual a 1,6, porém agora a fração molar atinge um valor mínimo (0,208) em uma temperatura superior ao caso anterior, 727°C. Assim como para a razão de 1,6, a corrente de dióxido de carbono apresenta um pico de fração molar (0,224) em 527°C. A fração molar de monóxido de carbono tende a aumentar com a elevação da temperatura, sendo que a partir de 727°C as frações molares próximas dessa corrente apresentam valores próximos da corrente de água. A fração molar de metano apresenta frações próximas a de dióxido de carbono no intervalo de 177 a 227°C, já para temperaturas superiores a essas, a fração tende a diminuir. A fração molar de hidrogênio aumenta até a temperatura de 727°C, a qual apresenta um valor máximo de 0,456, a partir dessa temperatura a fração tende a apresentar valores mais baixos.

Por meio da análise dos gráficos das Figuras 24 e 25, percebe-se que para a razão 1,6 o melhor intervalo de temperatura é de 527 a 727 °C enquanto para a razão 2,0 é de 627 a 827 °C. Essas faixas apresentam um pico de produção de hidrogênio, o que também revela as composições molares próximas das consideradas ótimas para a síntese de *Fischer-Tropsch*.

Após a etapa descrita anteriormente, simulou-se a produção do gás de síntese pela análise de equilíbrio químico adicionando-se hidrogênio no reator de troca. A Tabela 10 mostra a composição molar desse gás adaptada para a razão H_2/CO e H_2/CO_2 de 1,5 e 2,0.

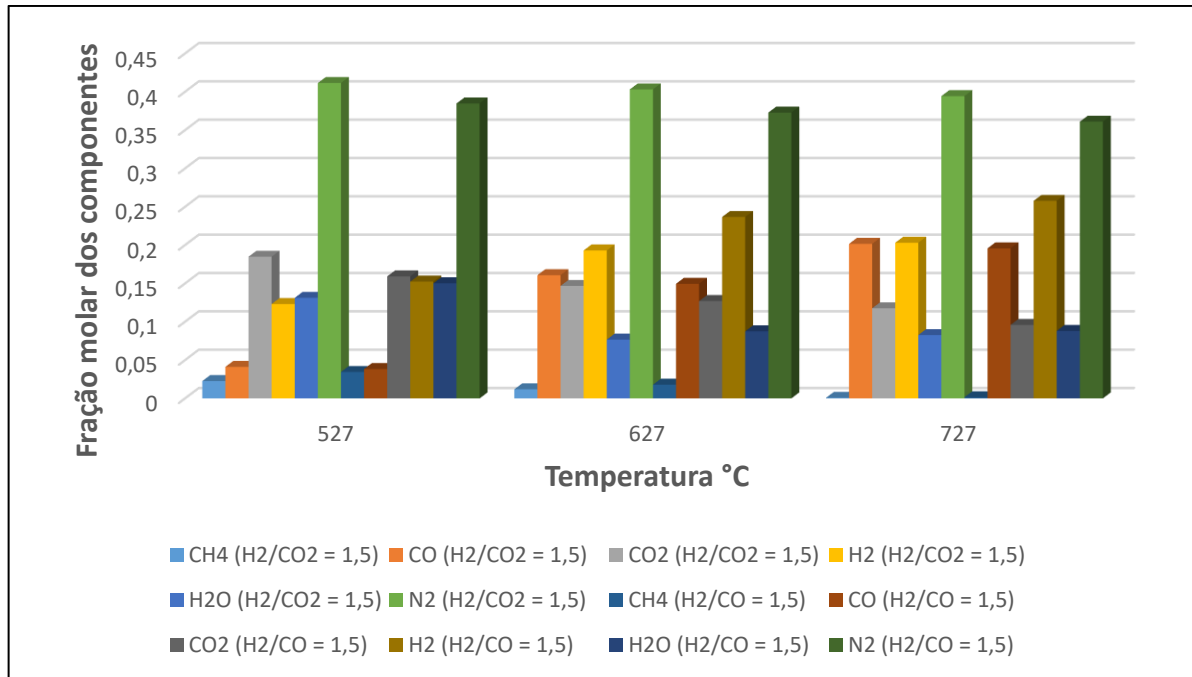
Tabela 10 - Composição do gás de síntese simulado.

Componente	Razão H_2/CO_2 igual a 1,5	Razão H_2/CO igual a 1,5	Razão H_2/CO_2 igual a 2,0	Razão H_2/CO igual a 2,0
CO	18,98%	17,34%	17,85%	15,95%
CO ₂	12,65%	11,55%	11,90%	10,63%
N ₂	40,05%	36,57%	37,67%	33,66%
H ₂ O	8,47%	7,73%	7,96%	7,12%
CH ₄	0,87%	0,80%	0,82%	0,73%
H ₂	18,97%	26,00%	23,79%	31,91%

Fonte: Do autor.

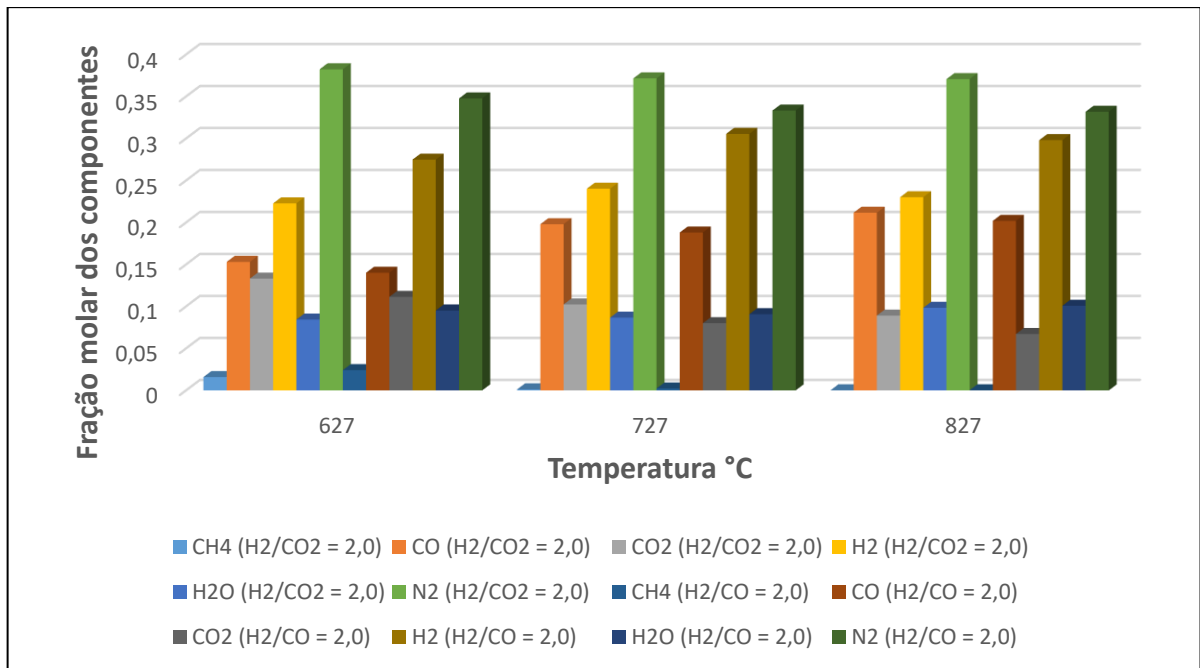
Da mesma forma que na primeira análise foram inseridas as variáveis no CEA sendo as composições descritas pela Tabela 10 e as faixas de temperatura e pressão obtidas a partir da primeira simulação (intervalo de temperatura de 527 a 727 °C para a razão 1,5 e de 627 e 827 °C para a razão 2). Dessa maneira, as Figuras 26 e 27 mostram os resultados.

Figura 26 – Formação do gás de síntese através do equilíbrio da reação de troca água-gás, para a razão de H_2/CO_2 e H_2/CO igual a 1,5.



Fonte: Do autor.

Figura 27 - Formação do Gás de Síntese através do equilíbrio da reação de troca água-gás, para a razão de H_2/CO_2 e H_2/CO igual a 2.



Fonte: Do autor.

A fim de comparar as Figuras 26 e 27, foram determinadas as razões H_2/CO_2 e H_2/CO obtidas no gás de síntese mostradas pelo equilíbrio químico no reator de troca água-gás. Sendo assim, foi possível determinar a temperatura de operação em que essas razões mais se aproximaram das desejadas (1,5 e 2) para a reação de troca água-gás, utilizando as frações molares adaptadas (conforme Tabela 10). A Tabela 11 mostra esses resultados.

Tabela 11 - Melhores razões H_2/CO_2 e H_2/CO e suas respectivas temperaturas.

Razão dos compostos desejada	Temperatura °C	Melhor Razão Formada
$H_2/CO_2 = 1,5$	627	1,3156
$H_2/CO_2 = 2,0$	727	2,3461
$H_2/CO = 1,5$	627	1,5831
$H_2/CO = 2,0$	627	1,9613

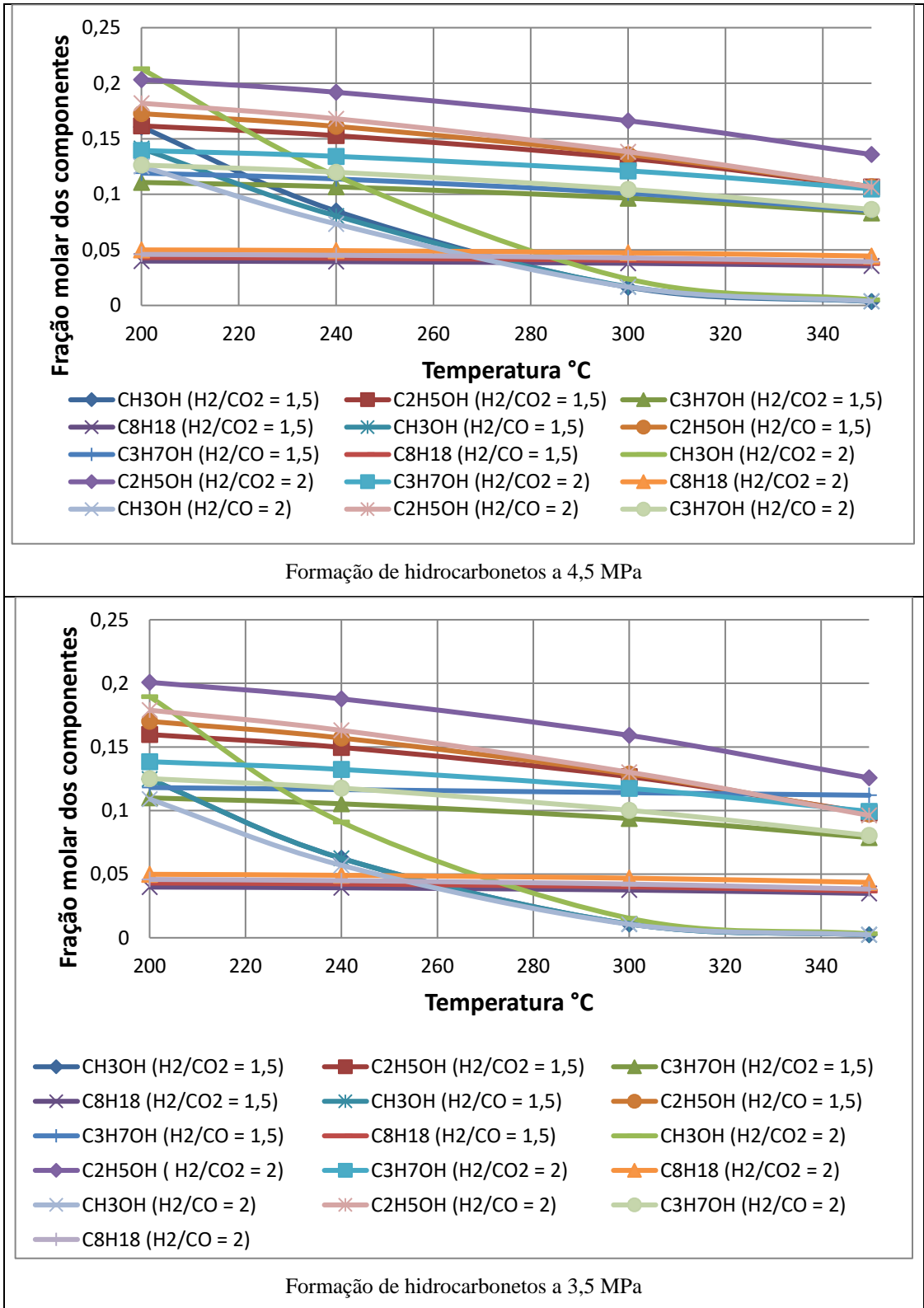
Fonte: Do autor.

Com o objetivo de investigar a formação de produtos com carbono a partir da síntese de *Fischer Tropsch*, foram utilizadas as frações molares do gás de síntese gerado nas temperaturas apresentadas pela Tabela 11. É necessário destacar que para essa simulação foram separados da corrente de alimentação os componentes N_2 e CH_4 , uma vez que, as frações molares de ambos (Figuras 26 e 27) contribuíam negativamente para o equilíbrio químico da reação, impossibilitando a formação dos produtos desejados.

As faixas de temperatura e pressão utilizadas para a simulação da produção dos produtos com carbono seguiram os dois modos de operação apresentados pela literatura (MARK E. DRY, 2002), a *Low Temperature Fischer-Tropsch (LTFT)* e a *High Temperature Fischer-Tropsch (HTFT)*, descritas na seção 3.2.

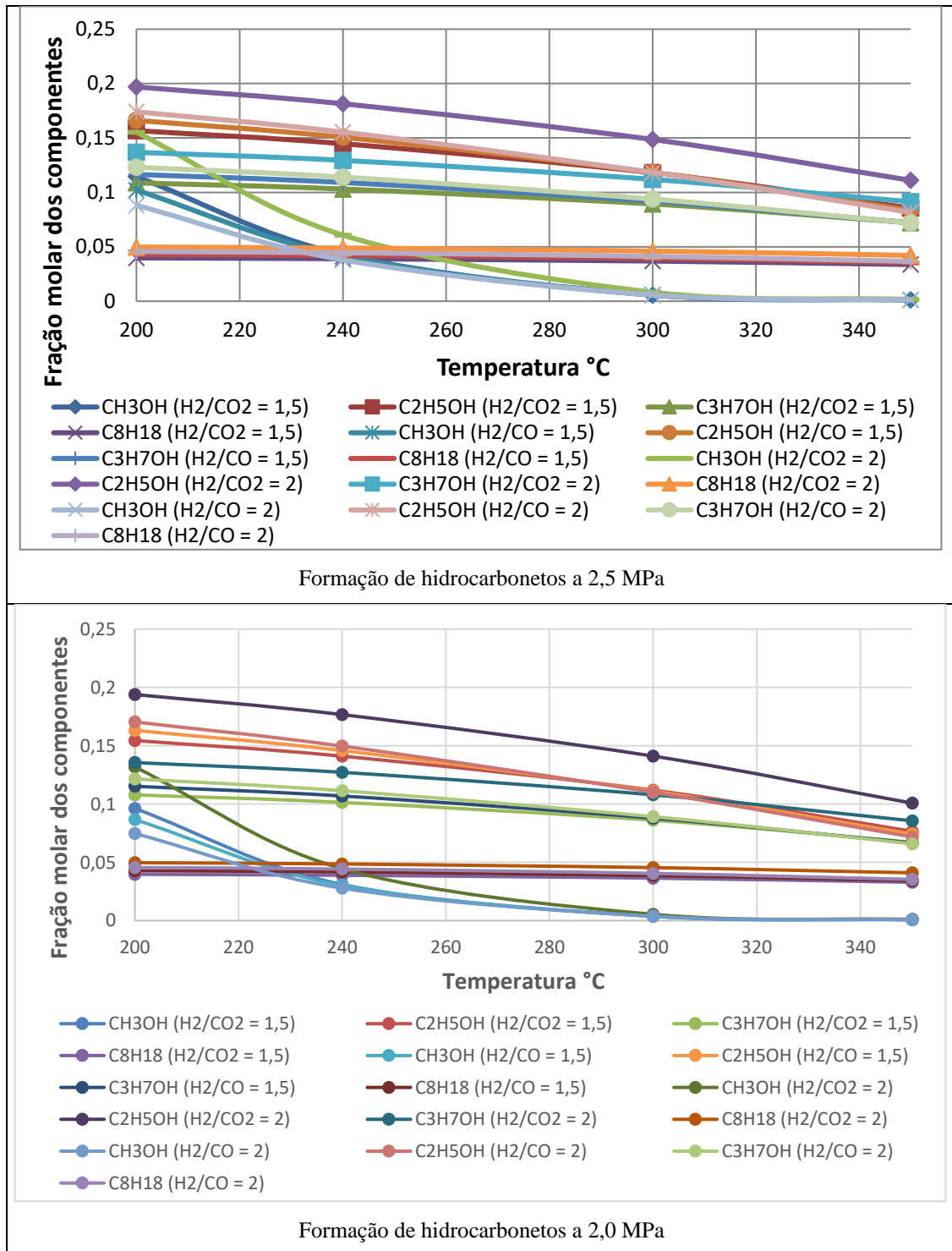
As Figuras 28 e 29 apresentam os resultados referentes a composição molar de cada produto de interesse (CH_3OH , C_2H_5OH , C_3H_7OH e $C_8H_{18}OH$) para as razões de 1,5 e 2,0 de H_2/CO_2 e H_2/CO .

Figura 28 - Formação de compostos com carbono através da síntese de *Fischer Tropsch* para as razões de H_2/CO_2 e H_2/CO iguais a 2 e 1,5 à pressão constante de 4,5 MPa e 3,5 MPa.



Fonte: Do autor.

Figura 29 - Formação de compostos com carbono através da síntese de *Fischer Tropsch* para as razões de H_2/CO_2 e H_2/CO iguais a 2 e 1,5 à pressão constante de 2,5 MPa e 2,0 MPa.



Fonte: Do autor.

A partir das Figuras 28 e 29 é possível perceber que o etanol e o metanol são os compostos de maior proporção nas faixas de temperatura e pressão analisadas. Para as condições de

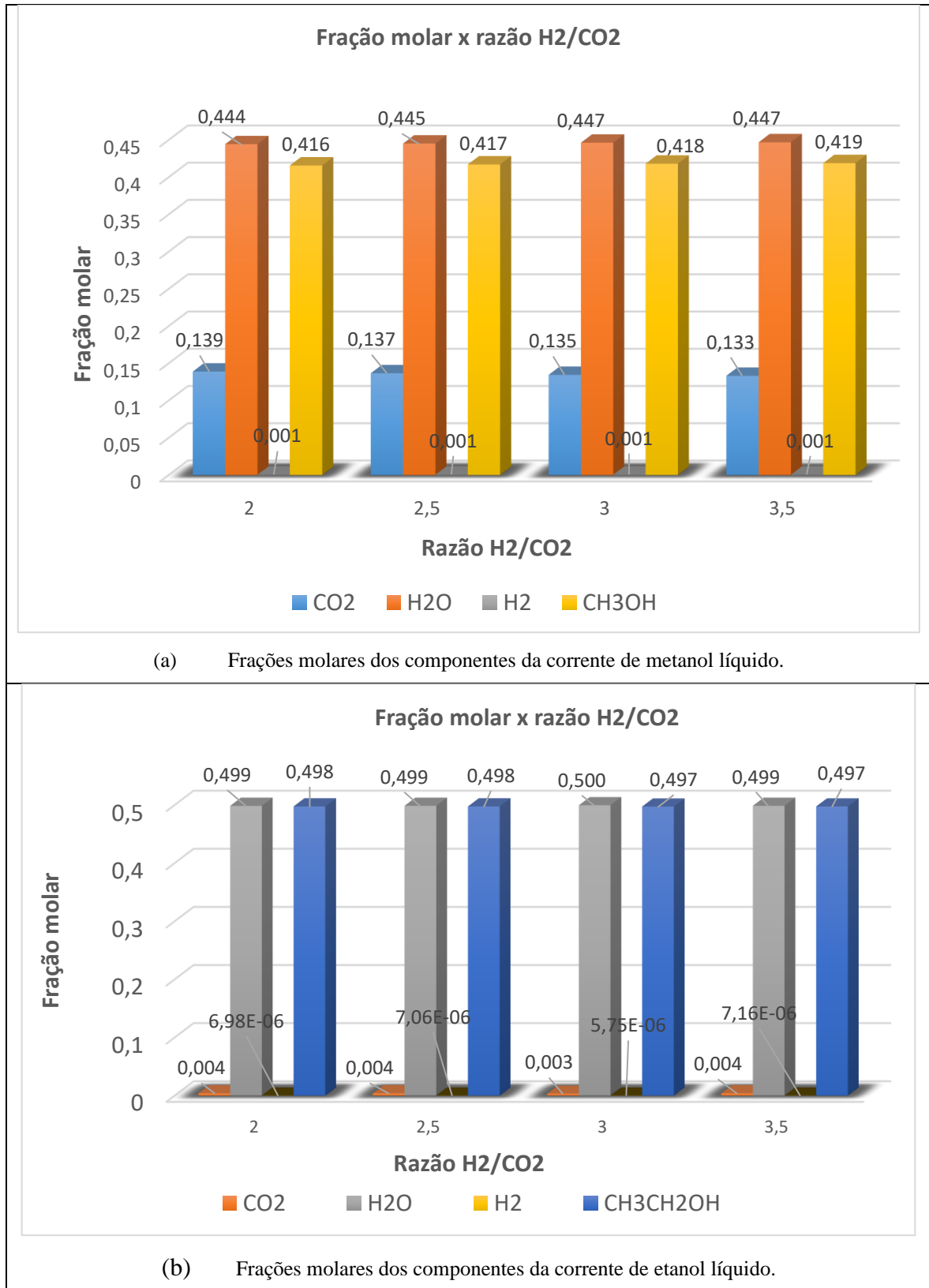
operação da síntese de FT em baixa temperatura (LTFT – 200 a 250°C), há a predominância de compostos de álcoois tanto na razão de 1,5 quanto na razão de 2,0. Para as condições operacionais de síntese de FT em alta temperatura (HTFT – 300 a 350°C), predominam os álcoois com maior cadeia de carbono. É válido ressaltar que para a variação de pressão, o melhor resultado de produção dos produtos ocorre em baixas temperaturas (200 a 250°C).

Em relação aos efeitos da redução da pressão de 4,5 MPa para 2,0 MPa essa pode ser comparada ao trabalho desenvolvido por Luyben (2010). Ele percebeu em seu estudo que a produção de metanol é favorecida pela alta pressão no reator devido ao aumento das pressões parciais dos reagentes, uma vez que de acordo com o princípio de Le Chatelier a alta pressão direciona as reações para a direita. No presente trabalho também se percebe a influência da redução da pressão na produção de hidrocarbonetos e combustíveis uma vez que essa alteração impactou negativamente na produção desses. Ainda de acordo com Luyben (2010) quanto maior a pressão, menor pode ser o reator, o que reduz o investimento de capital desse equipamento e do catalisador, apesar do aumento no custo da energia e no custo de capital.

4.3 Análise de um fluxograma de conversão de dióxido de carbono e hidrogênio em metanol e etanol no DWSIM

Os gráficos apresentados na Figura 30 representam a comparação das frações molares dos componentes da corrente de metanol (a) e etanol (b) líquido formados de acordo com a variação da razão H_2/CO_2 .

Figura 30 - Composição da corrente de (a) metanol e (b) etanol líquido obtida no DWSIM.



Fonte: Do autor.

Através da análise da Figura 30(a) observa-se que em comparação a razão H_2/CO_2 igual a 3, considerada inicialmente, apenas a razão 3,5 apresenta uma formação superior de CH_3OH (0,07% maior); as duas outras razões avaliadas indicam valores menores do que a razão 3 (0,2% menor) e iguais entre si. Em relação a CO_2 observa-se que quanto maior a razão menor a composição dessa substância (para a razão 3,5 por exemplo, indica um valor 0,13% menor do que o indicado pela razão 3). A fração molar de H_2O aumenta de acordo com o aumento da razão H_2/CO_2 , chegando para a razão 3,5 a um valor 0,055% superior do atingido pela razão 3. A concentração de H_2 diminui de acordo com o aumento da razão, no entanto, são valores muito baixos.

Por meio da Figura 30(b) nota-se que a formação de C_2H_5OH diminui com o aumento da razão H_2/CO_2 ; o mesmo acontece para a fração de CO_2 . Assim como para a síntese de metanol a fração molar de H_2O aumenta de acordo com o aumento da razão H_2/CO_2 , sendo esse aumento cerca de 0,1% para cada razão. Diferente do caso anterior, para a síntese de etanol a concentração de H_2 aumenta de acordo com o aumento da razão, sendo ainda valores muito baixos.

As reações de síntese de metanol e etanol são do tipo exotérmicas, ou seja, ocorrem com a liberação de calor e são favorecidas pela redução de temperatura. Nesse sentido, os produtos formados (CH_3OH , C_2H_5OH e H_2O) apresentam menor energia do que os reagentes (CO_2 e H_2).

Para a síntese de metanol o aquecedor demanda uma energia (Q_h) de 122,50 kW enquanto que o resfriador libera uma energia (Q_c) de 124,71 kW. Já na síntese de etanol esses valores são bastante superiores, de forma que Q_h é 1064,91 e Q_c é 1148,93 kW.

Para a razão H_2/CO_2 igual a 3 a corrente de alimentação tanto da simulação da conversão de metanol quanto da conversão de etanol possui como fração molar 0,25 de CO_2 e 0,75 H_2 . Para a conversão de metanol a corrente de metanol líquido apresenta como fração molar de CO_2 o valor de 0,1347 (redução de 46,12%) e 0,0005 para H_2 (redução de 99,93%). Já para a simulação da conversão de etanol a corrente líquida desse apresenta uma fração molar de 0,0003 para CO_2 (redução de 99,88%) e 5,7474E-06 para H_2 (redução de aproximadamente 100%).

Em relação a geração de hidrogênio, essa pode ser dada pela combinação de dois processos, a energia solar e a eletrólise (SULEMAN *et al.*, 2015). O hidrogênio obtido por meio de fontes renováveis de energia é denominado hidrogênio verde (ZENG; ZHANG, 2010).

No processo de eletrólise da água, oxigênio e hidrogênio são separados por meio de uma corrente elétrica contínua em meio a um eletrólito, na qual o primeiro se desenvolve no anodo

e o outro no catodo. Os gases, gerados nos eletrodos são separados por meio de um diafragma, ou separador. Este, juntamente com o eletrólito e os eletrodos constituem uma célula eletrolítica (URSÚA *et al.*, 2012).

Ainda de acordo com Ursúa *et al.* (2012), os eletrolisadores podem ser do tipo alcalinos, que normalmente utilizam hidróxido de potássio como eletrólito, eletrolisadores de membrana polimérica (*Proton Exchange Membrane*) e eletrolisadores cerâmicos (*Solid Oxide Electrolyzers*).

4.4 Análise termodinâmica, exergoeconômica e exergoambiental de uma turbina a gás

A Tabela 12 apresenta os resultados obtidos na análise termodinâmica da turbina Siemens SGT-300 tendo como combustível o metanol.

Tabela 12 - Resultados encontrados na análise termodinâmica.

Ponto	P (kPa)	T (K)	h (kJ/kg)	s (kJ/kg.K)	\dot{B} (kW)
0-1	101,325	288,15	280,4	6,803	9177
2 32	1388	626,9	638,3	7,622	2480 27956
3	1388	1273	1484	9,241	14801
4	101,325	808,4	861,5	8,614	4208
\dot{m}_{ar} (kg/s)					28,93
$\dot{m}_{combustível}$ (kg/s)					1,275
\dot{m}_{gases} (kg/s)					30,20
Número de estágios do compressor					10,00
Taxa de compressão por estágio					1,30
Excesso (AC real/AC estequiométrica)					1,924
Trabalho específico do compressor (kJ/kg)					-357,2
Trabalho específico da turbina (kJ/kg)					623,8
Trabalho específico líquido (kJ/kg)					266,7
Consumo de auxiliares (kJ/kg)					43,30
Razão de consumo (%)					42,78
Eficiência térmica do ciclo (%)					57,25
Potência (kW)					8053
PCI (MJ/kg)					20,15

Fonte: Do autor.

A Tabela 13 apresenta os dados obtidos pelas análises exérgica, exergoeconômica e exergoambiental.

Tabela 13 - Resultados obtidos através das análises exergética, exergoeconômica e exergoambiental.

Variável	Compressor de ar	Câmara de combustão	Turbina
\dot{I} (kW)	6801	11068	13354
ε (%)	43,52	68,32	44,05
c_f (\$/GJ)	21,89	17,17	30,84
c_p (\$/GJ)	33,25	27,38	21,89
\dot{C}_D (\$/h)	814,2	684,3	1483
\dot{Z} (\$/h)	$1,78 \times 10^{-3}$	$3,21 \times 10^{-3}$	1,56
r_k (%)	51,92	59,42	29,04
f_k (%)	$33,31 \times 10^{-5}$	$46,87 \times 10^{-5}$	$10,53 \times 10^{-2}$
b_f (mPt/MJ)	9154	6569	12437
b_p (mPt/MJ)	13909	10856	9154
\dot{B}_D (mPt/s)	224118	261743	597889,35
\dot{Y} (mPt/s)	65,1	337,6	624,7
$r_{b,k}$ (%)	51,95	65,26	26,4
$f_{b,k}$ (%)	$29,04 \times 10^{-3}$	13,15	10,44

Fonte: Do autor.

O compressor de ar apresenta uma menor eficiência exergética. A turbina apresenta o maior fator exergoeconômico e a maior irreversibilidade (13354 kJ/kg). A câmara de combustão possui a maior eficiência exergética (68,32%) e o menor custo exergético unitário (684,3 \$/h). O baixo fator exergoeconômico da câmara de combustão ($46,87 \times 10^{-5}$ %) representa uma possibilidade de diminuir a destruição de exergia. Logo, ao melhorar o desempenho da câmara de combustão, a exergia destruída e o consumo de exergia diminuem. Nesse sentido, através da análise exergética é possível avaliar o desempenho de cada componente do sistema em análise e propor melhorias desse.

Em relação a análise exergoambiental, a turbina é o equipamento que possui a maior taxa de impacto ambiental associada à formação de poluentes (597889,35 mPt/s). O valor do

indicador rb,k mais alto (65,26%) refere-se a câmara de combustão, o que demonstra que o impacto ambiental desse pode ser reduzido com menor esforço quando comparado aos outros componentes. Ao que se refere o fator exergoambiental, o maior valor é apresentado pela câmara de combustão enquanto o equipamento que apresenta o valor mais baixo desse índice é o compressor de ar.

5 CONCLUSÕES

Neste estudo, a síntese do gás de forno em compostos contendo carbono é uma ótima alternativa para reduzir a emissão de dióxido de carbono liberado para o meio ambiente. É uma possibilidade que pode ser estudada e implementada em plantas industriais que causam grandes emissões durante suas atividades, como o processo siderúrgico.

É notável que a redução do percentual, proposta por estudos anteriores, de conversão de monóxido de carbono e o aumento do percentual de dióxido de carbono em metanol no reator não é interessante, pois as frações molares dos demais componentes estarão presentes no fluxo de metanol. Portanto, a condição de 58% de monóxido de carbono e 23% de dióxido de carbono é a menos atrativa.

A mudança no número de estágios da coluna de destilação é atrativa, pois a mudança nas frações molares estará presente apenas na vazão de água e o custo do reator diminuirá com a redução do número de estágios, pois a área do equipamento será menor. Assim, de acordo com a análise, o reator de 20 estágios é a melhor opção.

Na análise da reação de deslocamento água-gás, o *software* CEA mostra que a faixa de temperatura considerando a razão molar vapor-carbono de 1,6 está entre 527 e 727°C e para a razão de 2,0 está entre 627 e 827°C. Essa reação é endotérmica e para que os produtos se formem, uma certa quantidade de energia do meio externo teve que ser absorvida.

Na análise de *Fischer Tropsch* os resultados mostram que a melhor faixa de parâmetros operacionais para a formação dos produtos com carbono é de 200 a 250°C para temperatura e 4,5 MPa para pressão. O etanol e o metanol são os compostos com maior proporção na razão H_2/CO e H_2/CO_2 de 1,5 a 2,0. Além disso, a redução de pressão de cerca de 55% teve um impacto negativo na produção de compostos com carbono.

O estudo realizado no DWSIM sobre a cinética e a influência do reator de leito fixo adiabático e do catalisador comercial $Cu/ZnO/Al_2O_3$ na síntese de *Fischer Tropsch* para a formação de metanol e etanol demonstram que o ajuste sobre a razão H_2/CO_2 é importante e que para hidrocarbonetos distintos essa razão causar comportamentos diferentes, como é observado para os dois combustíveis em análise. Como as reações de conversão de H_2 e CO_2 em hidrocarbonetos é do tipo exotérmica conclui-se que os produtos possuem energia inferior à dos reagentes. Nas simulações realizadas os valores de energia demandados do aquecedor e

do resfriador são superiores para a síntese de etanol quando comparada a formação de metanol. Para a síntese de metanol, a demanda de energia de aquecimento (Q_h) é de 122,50 kW enquanto que a demanda da energia liberada (Q_c) é de 124,71 kW. Já na síntese de etanol, a demanda de energia de aquecimento (Q_h) é de 1064,91 kW e a demanda da energia liberada (Q_c) é de 1148,93 kW.

As análises realizadas na turbina a gás demonstram em quais componentes podem ser realizadas modificações para uma melhoria nas eficiências e para que haja uma redução do impacto ambiental causado pelo processo de combustão. Logo, a realização das análises energética, exergética, exergoeconômica e exergoambiental é relevante.

Em relação a geração de hidrogênio, como afirmado ao longo deste trabalho, pode ser dada pela combinação da energia solar e da eletrólise. Logo, uma sugestão para trabalhos futuros é a investigação dessa e de outras rotas alternativas que possam contribuir ainda mais com uma visão sustentável.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ALBAGLI, S. (1995). **Informação e desenvolvimento sustentável: novas questões para o século XXI**. *Ciência Da Informação*, 24(1). doi: 10.18225/ci.inf.v24i1.617.

ALCONCHEL, J. A. *Modelización exergética de ciclo de vapor en plantas termoelectricas. Tesis Doctoral: Escuela Técnica Superior de Ingenieros Industriales, Universidad de Zaragoza, Zaragoza, 1988.*

ALMEIDA, E. L. F.; BONTEMPO, J. V.; BICALHO, R. G.; *Comision de Integración Energetica Regional* 2006, 15, 53.

ALVES, A.F.M. **Análise exergoeconomica e exergoambienal de um sistema de trigerção usando gás natural e extensão para o uso do biogás de aterro sanitário**. (Tese de Doutorado). [s.l.] Universidade Federal da Paraíba, 2020.

ALVES, José Eustáquio Diniz. Sustentabilidade, Aquecimento Global e o Decrescimento Demo-econômico. *Revista Espinhaço | UFVJM*, [S.l.], p. 4-16, jun. 2014. ISSN 2317-0611. Disponível em: <<http://www.revistaespinhaco.com/index.php/journal/article/view/44>>. Acesso: 16 Jun 2021. doi: 10.5281/zenodo.3966040.

ANTINARELLI A. **Construindo a gestão estratégica sustentável: um estudo sobre a empresa Mercur S/A**. Dissertação de mestrado. Universidade de Santa Cruz do Sul – UNISC. 2013.

ARAÚJO FILHO, GERSON; SALIERNO, GIOVANNI FELICE; ASSIS, PAULO SANTOS. *Technical and environmental considerations of the injection of tire into blast furnace tuyeres. Sohn International Conference*, 2006. San Diego, CA, USA.

ARCELORMITTAL TUBARÃO. **ArcelorMittal Tubarão no Espírito Santo**. Serra, 2018.

ASANUMA, M., ARIYAMA, T., SATO, M., MURAI, R., NONAKA, T., OKOCHI, I., TSUKIJ, H. AND NEMOTO, K. (2000). *Development of Waste Plastics Injection Process in Blast Furnace. ISIJ International*, 40(3), 244–251. doi:10.2355/isijinternational.40.244.

ASSIS, PS ; NOLASCO SOBRINHO, P. ; VIEIRA, CB; TENÓRIO, JORGE ALBERTO SOARES. *Some thoughts about injection of plastics into the blast furnace*. ICARISM-99 CONFERÊNCIA INTERNACIONAL SOBRE ROTAS ALTERNATIVAS DE FERRO E INDÚSTRIA, 1999, Perth. p. 241-242.

- BAO, B.; EL-HALWAGI, M. M.; ELBASHIR, N. O.; Fuel Process. Technol. 2010, 91, 703.
- BARBOSA, C. *et al.* **Gerenciamento de custos em projetos**. 4. ed. Rio de Janeiro: Ed. FGV, 2012.
- BARBOSA L. **Sociedade de consumo**. Editora Zahar, 3ª edição. Rio de Janeiro, 2004.
- BIRAT, J.-P., LORRAIN, J.-P., DE LASSAT Y. 2009. *The CO₂ tool: CO₂ emissions and energy consumption of existing and breakthrough steelmaking routes*. *La Revue de Métallurgie*, 106 (9), 325–336. DOI:10.1051/metal/2009060.
- CARVALHO, P.S.L., MESQUITA, P.P.D., ARAÚJO, E.D.G. 2015. **Sustentabilidade da siderurgia brasileira: eficiência energética, emissões e competitividade**. BNDES Setorial, n. 41, Rio de Janeiro, p. 181-236.
- CAVALCANTI, E. J. C. **Análise Exergoeconômica e Exergoambiental**. [s.l.: s.n.].
- ÇENGEL, Y. A.; BOLES, M. A. **Termodinâmica**. 5ª ed. Porto Alegre: AMGH, 2006.
- CHANG, F., KUO, M., TSAY, M. E HSIEH, M. 2003. *Hydrogenation of CO₂ over nickel catalysts on rice husk ash-alumina prepared by incipient wetness impregnation*. *Appl. Catal. A Gen.*, 247, 309–320.
- CHEN, W., LIN, T., DAI, Y., AN, Y., YU, F., ZHONG, L., LI, S., SUN, Y. *Recent advances in the investigation of nanoeffects of Fischer-Tropsch catalysts*. *Catalysis Today; Manuscript*, 2017.
- CIOBÎCĂ, I. M., WESTSTRATE, C. J., FERREIRA, A. C., NIEMANTSVERDRIET, H. *Fischer-Tropsch Synthesis: Catalysts and Chemistry*. *Comprehensive Inorganic Chemistry II*, v.7. Oxford: Elsevier, pp. 525-557, 2013.
- CLARO, P. B. O.; CLARO D. P.; AMÂNCIO R. **Entendendo o conceito de sustentabilidade nas organizações**. Revista de administração da USP. São Paulo, 2008.
- COLLA, V., MATINO, I., BRANCA, T., FORNAI, B., ROMANIELLO, L., & ROSITO, F. 2017. *Efficient Use of Water Resources in the Steel Industry*. *Water*, 9(11), 874. DOI:10.3390/w9110874.
- CONEJO AN, BIRAT JP, DUTTA A. 2020. *A review of the current environmental challenges of the steel industry and its value chain*. *Journal of Environmental Management*. 259, 109782. DOI:10.1016/j.jenvman.2019.109782.

CONVAÇO. **Reforma alto forno 1 e regeneradores 1, 2 e 3 – Usiminas Ipatinga**. Disponível em <https://convaco.com.br/reforma-alto-forno-1-e-regeneradores-1-2-e-3-usiminas-ipatinga/>. Acesso: 22 Jun 2021.

DARWICHE, T. J. **A matriz energética brasileira: evolução da estrutura de oferta e demanda**. Universidade Estadual de Campinas. Campinas, 2010.

DE SOUSA, Claudio Silva. **Análise Exergética do Processo de Produção de Ferro Gusa em Altos-fornos: Identificação de Oportunidades em Redução de Emissões de Gases de Efeito Estufa**. Faculdade de Aracruz, Mestrado Profissional em Tecnologia Ambiental. Aracruz, 2010.

DELBONI A. **Sustentabilidade**. Disponível em: <http://www.delboniauriemo.com.br/paginas/institucional/sustentabilidade-delboni>. Acesso: 16 Abr 2021.

DRY, ME. *The Fischer-Tropsch process: 1950-2000*. *Catalysis Today*, 227-241, 2002.

EPE. Empresa de Pesquisa Energética. **Balço Nacional de Energia - Ano base 2017**, 2018. Disponível em: https://www.epe.gov.br/sites-pt/publicacoes-dados-abertos/publicacoes/PublicacoesArquivos/publicacao-303/topico-419/BEN2018__Int.pdf. Acesso: 3 Maio 2021.

FALKE INFORMATION. **Evolução do setor brasileiro de siderurgia e metalurgia**. Relatório Setorial, março 2020. Disponível em: <https://www.emis.com/php/industries/reports?indu=3311>. Acesso: 08 de julho de 2020.

FORNARI AC, OLIVEIRA JH, PIMENTA JLCW, SANTOS OAA e JORGE LMM. **Influência da composição de catalisadores CuO-ZnO-Al₂O₃ na reforma a vapor de metanol**. XXII Congresso Brasileiro de Engenharia Química. XVII Encontro Brasileiro sobre o Ensino de Engenharia Química. São Paulo, 2018.

GHAIB, KARIM; NITZ, KORBINIAN; BEN-FARES, FATIMA-ZAHRAE (2016). *Katalytische Methanisierung von Kohlenstoffdioxid*. *Chemie Ingenieur Technik*, 88(10), 1435–1443. doi:10.1002/cite.201600066

GLOBAL CO. 2016. *Initiative Global Roadmap for Implementing CO₂ Utilization*. University of Michigan. Ann Arbor, MI, USA.

GLOBAL EFFICIENCY INTELLIGENCE. *Infographic: the iron and steel industry's energy use and emissions*. HASANBEIGI, A. 2017. Disponível em:

<<https://www.globalefficiencyintel.com/newblog/2017/nfographic-steel-industry-energy-emissions>>. Acesso: 08/04/2021.

GOEDKOOP, M.; EFFTING, S.; COLLIGNON, M. **The eco-indicator 99: a damage oriented method for life-cycle impact assessment: manual for designers**. [s.l.] *PRé Consultants*, 2000. Disponível em: <http://www.pre-sustainability.com/download/manuals/EI99_Manual.pdf>.

GORDON, J. *et al.* **Fundamentos da Termodinâmica Clássica**, Editora EDGARD. BLUCHER LTDA 4ª EDIÇÃO 1995.

GRAAF, G. E WINKELMAN, J. 2016. *Chemical Equilibria in Methanol Synthesis Including the Water–Gas Shift Reaction: A Critical Reassessment. Industrial & Engineering Chemistry Research*. Groningen, The Netherlands.

GUINÉE, J.B. **Life cycle assessment: an operational guide to the ISO standards**. The International Journal of Life Cycle Assessment, vol. 7, p. 311-313, 2001.

HAN BC, WEI GS, ZHU R, WU WH, JIANG JJ, FENG C, DONG JF, HU SY, LIU RZ. 2019. *Utilization of carbon dioxide injection in BOF–RH steelmaking process. Journal CO₂ Util.*, 34: 53-62. Han, B., Wei, G., Zhu, R., Wu, W., Jiang, J. J., Feng, C. Liu, R. Z. (2019). doi:10.1016/j.jcou.2019.05.038.

HECK, NESTOR CEZAR. - **Metalurgia Extrativa dos Metais Não-Ferrosos II-A DEMET / UFRGS**. Disponível em: <<http://www.ct.ufrgs.br/ntcm/graduacao/ENG06632/Redcarb.pdf>>. Acesso em: 07 abr. 2022.

HU B, GUILD C, SUIB SL. 2013. *Thermal, electrochemical, and photochemical conversion of CO₂ to fuels and value-added products. Journal CO₂ Util.* 1: 18–27. DOI:10.1016/j.jcou.2013.03.004.

INSTITUTO AÇO BRASIL- IAB. **Relatório de Sustentabilidade**, 2018.

INSTITUTO AÇO BRASIL- IAB. **Relatório de Sustentabilidade**, 2020.

INSTITUTO AÇO BRASIL. **Etapas de produção de aço**. Disponível em: <<http://www.acobrasil.org.br/site2015/processo.html>>. Acesso: 6 Jul 2020.

INSTITUTO AÇO BRASIL. **Processo Siderúrgico**. Disponível em: <<https://acobrasil.org.br/site/processo-siderurgico/>>. Acesso: 11 Out 2021.

INSTITUTO AÇO BRASIL - IAB. **Anuário Estatístico 2020**. Rio de Janeiro: IAB, 2020a.

INSTITUTO AÇO BRASIL - IAB. **Estatística Preliminar**, n. 64, agosto 2020b.

INSTITUTO BRASILEIRO DE GEOGRAFIA E ESTATÍSTICA – IBGE. **Pesquisa industrial mensal Pessoa Física – PIM-PF.** Disponível em: <<https://sidra.ibge.gov.br/tabela/3650>>. Acesso: 10 Jul 2020.

JAIMES W, MAROU S. 2020. *Sustainability in steelmaking. Current Opinion in Green and Sustainable Chemistry.* 24:42-47. doi:10.1016/j.cogsc.2020.01.002.

JAKOB M, MARSCHINSKI R. 2013. *Interpreting trade-related CO₂ emission transfers. Nature Climate Change.* 3: 19–23. doi:10.1038/nclimate1630.

KATO K, NOMURA S, UEMATSU H. 2003. *Waste plastics recycling process using coke ovens. J Mater Cycles Waste Manag.* 5: 98–101 (2003). doi:10.1007/s10163-003-0089-3.

KLIER K., CHATIKAVANIJ V., HERMAN R.G. and SIMMONS G.W. (1982) *Catalytic synthesis of methanol from CO/H₂: IV. The effects of carbon dioxide. Journal of Catalysis.* vol. 74, issue 2 p. 343-360.

K.M.VANDEN BUSSCHE, G.F. FROMENT. *A Steady State Kinetic Model for Methanol Synthesis and the Water Gas Shift Reaction on a Commercial Cu/ZnO/Al₂O₃ Catalys.* *Journal of Catalysis, Volume 161, Issue 1, 1996, Pages 1-10,ISSN 0021-9517.* doi:10.1006/jcat.1996.0156.

KOTAS, T. J. *The Exergy Method of Thermal Plant Analysis.* London: Edit. Butterworths,1985. 295 p.

LIMA, R.N.O. *Apostila de Máquinas Térmicas-MATI, DSc. Planejamento de Sistemas energéticos.* DCTEF-UFSJ. 2003.

LIU, H., LUO, Z. E ZHU, B. 1994. *Study of chemical equilibria in methanol synthesis. II. Calculation of equilibrium constant K_p.* *Fuel Science and Technology International*, 12:6, 829-843.

LUYBEN, L. W, 2010. *Design and Control of a Methanol Reactor/Column Process.* *Ind. Eng. Chem. Res.* v. 49, 6150–6163.

MARK E. DRY (2002). *The Fischer–Tropsch process: 1950–2000.*, 71(3-4), 227–241. doi:10.1016/s0920-5861(01)00453-9.

MARQUES F H. 2018. **Análise Termodinâmica da Síntese de Fischer-Tropsch Utilizando Métodos de Otimização Global.** Dissertação de mestrado. Universidade Estadual de Campinas – UNICAMP. 2018. 139 páginas.

- METZ, B, DAVIDSON, O, DE CONINCK, H, LOOS, M E MEYER, L. *Carbon Dioxide Capture and Storage*. Resumo para formuladores de políticas. Suíça: N. p., 2005.
- METZ, B., DAVIDSON, O., DE CONINCK, H., LOOS, M., & MEYER, L. 2005. IPCC, 2005: *IPCC Special Report on Carbon Dioxide Capture and Storage. Prepared by Working Group III of the Intergovernmental Panel on Climate Change*. Cambridge, United Kingdom and New York, NY, USA, 442.
- MEYER, L.; TSATSARONIS, G.; BUCKGEISTER, J.; SCHEBEK, L. *Exergoenvironmental Analysis for Evaluation of the Environmental Impact of Energy Conversion Systems*. *Energy*, vol. 34, p. 75 – 89, 2009.
- MINISTÉRIO DA ECONOMIA – ME. **Relação anual de informações sociais**. Disponível em:< <http://bi.mte.gov.br/bgcaged/rais.php>>. Acesso: 3 Set 2020.
- MINISTÉRIO DE MINAS E ENERGIA. **Anuário estatístico do setor metalúrgico 2017**. [s.l: s.n.].
- MORAN, M.J., SHAPIRO, H. N., BOETTNER, D. D., BAILEY, M. B. **Princípios de termodinâmica para engenharia**, 8ªEd. LTC, Rio de Janeiro, 2005.
- MRAD M, GENNEQUIN C, ABOUKAÏS A, ABI-AAD E. *Cu/Zn-based catalysts for H₂ production via steam reforming of methanol*. *Catal. Today*, v. 176, p. 88-92, 2011.
- NISHIOKA K, UJISAWA Y, TONOMURA S, ISHIWATA N, SIKSTROM P. 2016. *Sustainable aspects of CO₂ ultimate reduction in the steelmaking process (COURSE50 Project), Part 1: hydrogen reduction in the blast furnace*. *J. Sustain. Metall.* 2, 200–208. doi:10.1007/s40831-016-0061-9.
- NUNES, A. F. **O choque do petróleo de 1973: Estados Unidos, OPAEP e a segurança energética**. Universidade Federal do Rio de Janeiro. Rio de Janeiro, p. 126. 2016.
- ONU. 1972. **Declaração de Estocolmo sobre o Ambiente Humano**. A Conferência das Nações Unidas sobre o Meio Ambiente. Estocolmo: ONU.
- OSHIRO, A. H. F. **Análise de intensidade energética: um estudo de caso para o Estado de São Paulo**. Universidade de São Paulo. São Paulo, p. 96. 2015.
- PAULA, J. A (Org.). **Biodiversidade, População e Economia**. Belo Horizonte, MG: UFMG, 1997.

PAVÃO, L., ROCHA, L.B., MIRANDA, C. B., HERRERA, C. I. L., BATISTA, M. O. e RAVAGNANI, M. 2016. **Simulação e análise econômica da produção de metanol a partir do CO₂ capturado de processos envolvendo combustão de combustíveis fósseis**. XXI Congresso Brasileiro de Engenharia Química e XVI Encontro Brasileiro sobre o Ensino de Engenharia Química. Fortaleza, Brasil.

PETRAKOPOULOU, F.; TSATSARONIS, G.; MOROSUK, T.; PAITAZOGLU, C. *Environmental evaluation of a power plant using conventional and advanced exergy-based methods*. *Energy*, vol. 45, p. 23 – 30, 2012.

PINTO JÚNIOR, H. Q. *et al.* **Economia da Energia: Fundamentos econômicos, evolução histórica e organização industrial**. 1ª. ed. Rio de Janeiro: Elsevier, 2007.

RAMOS, André Luis Dantas; MARQUES, José Jailton; SANTOS, Vagner dos; FREITAS, Lisiane dos Santos; SANTOS, Rosanne Grazielle Vieira de Melo; SOUZA, Mariana de Mattos Vieira Mello (2011). **Atual estágio de desenvolvimento da tecnologia GTL e perspectivas para o Brasil**. *Química Nova*, (), -. doi:10.1590/S0100-40422011001000004.

ROSENQVIST, T. *Princ. of Extr. Metall. McGraw-Hill*, 1972, Figura 9-1, p. 266.

SARAVANAMUTTOO, H.I.H; ROGERS, G.F.C; COHEN, H. *Gas Turbine Theory*. 5. ed. Inglaterra: *Pearson Education*, 2001.

SCHMITZ, F; AXT, K.C. **Exergia e Ciclos Termodinâmicos**, Joinville. Sociedade Educacional de Santa Catarina-SOCIESC, Instituto Superior TUPY- IST. 2009.

SILVA, D.R.S. **Ciclo de cogeração com bagaço de cana – análise exergoeconômica e exergoambiental**. (Dissertação de Mestrado). [s.l.] Universidade Federal do Rio Grande do Norte, 2021.

SILVA, J.N.S.,(2011), **Siderurgia** - Escola Técnica Aberta do Brasil - Belém : IFPA : Santa Maria : UFSM.

SILVA, REGINALDO FERREIRA. **Análise energética e exérgica de uma microcentral de cogeração inserida em uma planta de carbonização de madeira reflorestada**. 181 páginas. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica) - PUC/MG. 2009.

SIEMENS ENERGY. **Turbina SGT-300**. Disponível em: <<https://www.siemens-energy.com/global/en/offerings/power-generation/gas-turbines/sgt-300.html>>. Acesso: 26 Out 2021.

- SHAABAN, M.; NOR, K. M.; MEMBER, S. *Prospects of Cogeneration for the Iron and Steel Industry in Malaysia. The 5th International Power Engineering and Optimization Conference*, p. 6–7, 2011.
- SOTOMONTE, C. A. R. **Análise exergetica, termoeconomica e ambiental de uma usina termoelétrica supercrítica a carvão mineral**. Dissertação de Mestrado: Universidade Federal de Itajubá, Itajubá, MG, 2009.
- SOUZA A. C. A. **A evolução da política ambiental no Brasil do século XX**. Historiadora e Mestre em Ciência Política pelo PPGCP/IFCS/UFRJ, 2010.
- SOUZA, CLAUDIO SILVA. **Análise exergetica do processo de produção de ferro gusa em Altos- fornos: Identificação de oportunidades em redução de emissões de gases de efeito estufa**. 124 páginas. Dissertação (Mestrado em Tecnologia Ambiental) – Faculdade Aracruz. 2010.
- SPOSITO, M. E. B. **Capitalismo e Urbanização**. São Paulo, 1989.
- STEELONTHENET. *Steel industry emissions of CO₂*. Disponível em <<https://www.steelonthenet.com/kb/CO2-emissions.html>>. Acesso: 12 Out 2021.
- STEYNBERG, A.P; ESPINOZA, R.L; JAGER, B; VOSLOO, A.C. *High temperature Fischer-Tropsch synthesis in comercial practice. Applied Catalysis A: General*, 186, 41-54, 1999.
- SULEMAN, F. DINCER, I. AGELIN-CHAAB, M. *Environmental impact assessment and comparison of some hydrogen production options. International Journal of Hydrogen Energy*, v. 40, n. 21, p. 6976-6987, 2015. doi:10.1016/j.ijhydene.2015.03.123
- SUN, W., ZHOU, Y., LV, J., & WU, J. 2019. *Assessment of Multi-Air Emissions: Case of Particulate Matter (Dust), SO₂, NO and CO₂ from Iron and Steel Industry of China. Journal of Cleaner Production*. doi:10.1016/j.jclepro.2019.05.400.
- SZARGUT, J.; MORRIS, D. R.; STEWARD, F. R. *Exergy Analysis of Thermal, Chemical and Metallurgical Process*. New York: Hemisphere Publishing Co, 1988. 330 p.
- SZEKELY, J. *A research program for the minimization and effective utilization of steel plant wastes. Iron and Steelmaker*, v. 22, n. 1, p. 25-29, 1995.

TIAN JR, ZHOU PJ, LV B. *A process integration approach to industrial water conservation: a case study for a Chinese steel plant*. *Journal of Environmental Management*. 2008 Mar; 86(4):682-687. doi: 10.1016/j.jenvman.2006.12.014.

TOLMASQUIM, M. T. **Perspectivas e planejamento do setor energético no Brasil**. Universidade Federal do Rio de Janeiro. Rio de Janeiro. 2012.

TSATSARONIS, G. *Thermoeconomic Analysis and Optimization of Energy System*. *Progress in Energy and Combustion Science*, v. 115, n. 1, p. 227-257, 1993.

UGAYA, Cássia Maria Lie; LORA, Electo Eduardo Silva; SILVA, Elmo Rodrigues da; FREIRES, Francisco Gaudêncio Mendonça; LIMA, Gilson Brito Alves; NETO, José Adolfo de Almeida; NETO, Julio Vieira; XAVIER, Lúcia Helena; JUNIOR, Luiz Carlos de Martini; OLIVEIRA, Luziléa Brito de; MEIRIÑO, Marcelo Jasmim; LEME, Márcio Montagnara Vicente; QUELHAS, Osvaldo Luiz Gonçalves; GOUVINHAS, Reidson Pereira; CÂMARA, Renata Paes de Barros; SILVA, Ricardo Moreira da; BRAGA, Rita de Cássia Silva; MOTTA, Ronaldo Seroa da; MATOS, Rosa Maria Barbosa; CURI, Rosires Catão; FRANÇA, Sergio Luiz Braga; ALMEIDA, Thiago Alexandre das Neves; MATTOS, Ubirajara Aluizio de Oliveira; CURI, Wilson Fadlo. **Gestão Ambiental de Unidades Produtivas**. Rio de Janeiro: Elsevier, 2013. 451 p.

URSÚA, A.; GANDÍA, L. M.; SANCHIS, P. *Hydrogen production from water electrolysis: current status and future trends*. *Proceedings of the IEEE*, v. 100, n. 2, 410-426 p., 2012. doi: 10.1109/JPROC.2011.2156750

VAN DER HAM, L. G. J., VAN DEN BERG, H., BENNEKER, A.; SIMMELINK, G.; TIMMER, J. e VAN WEERDEN, S. 2012. *Hydrogenation of carbon dioxide for methanol production*. *Chemical Engineering Transactions*, v. 29, 181-186.

VIOLA, E. J.; LEIS, H. R. **A evolução das políticas ambientais no Brasil, 1971-1991: do bissetorialismo preservacionista para o multissetorialismo orientado para o desenvolvimento sustentável**. 2ª edição. Editora da UNICAMP. Campinas, 1995.

WEI, G., ZHU, R., WU, X., DONG, K., YANG, L. e LIU.RUNZAO. *Technological Innovations of Carbon Dioxide Injection in EAF-LF Steelmaking*. *JOM* 70, 969–976 (2018). doi:10.1007/s11837-018-2814-3.

WIEDMANN TO, MINX J. 2008. *A definition of “carbon footprint”*. *Pertsova CC (ed.) Ecological economics research trends*. Hauppauge, NY: Nova Science.

WORLD STEEL ASSOCIATION. *Overview of the steelmaking process*, 2013.

WORLD STEEL ASSOCIATION. *World Steel in Figures 2018*, 2018.

WORLD STEEL ASSOCIATION. *World Steel in Figures 2019*. Disponível em: <<https://www.worldsteel.org/en/dam/jcr:96d7a585-e6b2-4d63-b943-4cd9ab621a91/World%20Steel%20in%20Figures%202019.pdf>>. Acesso: 10 Jun 2020.

XING, Y.; MA, Z.; SU, W.; WANG, Q.; WANG, X.; ZHANG, H. 2020. **Analysis of Research Status of CO₂ Conversion Technology Based on Bibliometrics**. *Catalysts* 2020, 10, 370.

YAMADA, T. S. **Modelagem e Simulação de um Reator Multitubular em Leito Fixo com Cinética Fischer-Tropsch e Catalisador de Cobalto**. Tese de Doutorado, Universidade Estadual de Campinas, Campinas-SP, 2011.

YONG ST, OOI CW, CHAI SP, WU XS. *Review of methanol reforming-Cu-based catalysts, surface reaction mechanisms, and reaction schemes*. *Int. J. Hydrogen Energy*, v. 38, p. 9541-9552, 2013.

YONGJUAN TONG, QI ZHANG, JIUJU CAI, CHENGKANG GAO, LIANYONG WANG e PENG LI. 2018. *Water consumption and wastewater discharge in China's steel industry*. *Ironmaking & Steelmaking*, 45:10, 868-877. doi:10.1080/03019233.2018.1538180.

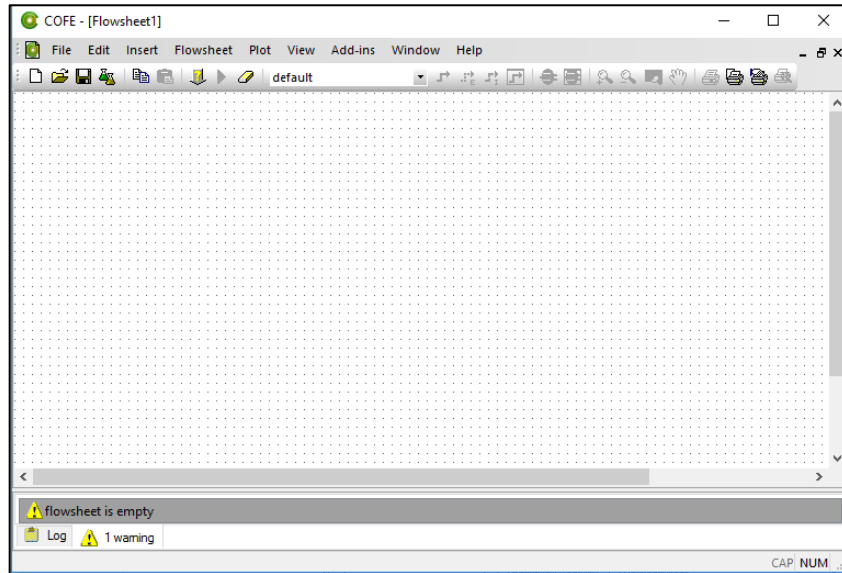
ZAHARIA M, SAHAJWALLA V, KHANNA R, KOSHY P. *Carbon/slag interactions between coke/rubber blends and EAF slag at 1 550 C*. *ISIJ Int* 2009, 49:1513–1521. doi:10.2355/isijinternational.49.1513.

ZAMALLOA, G. A. C. **Tese de Doutorado**, Universidade de São Paulo, Brasil, 2004.

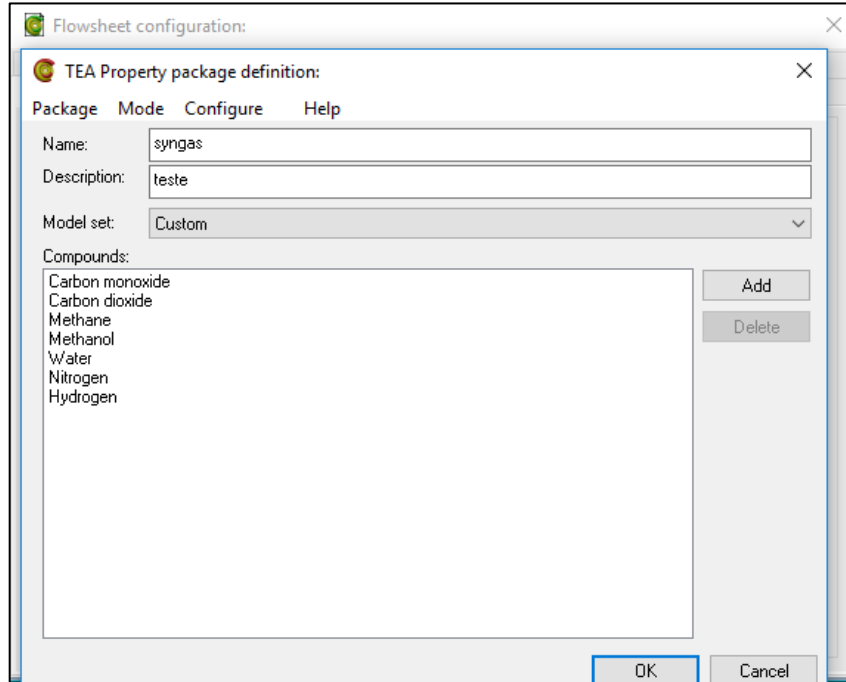
ZENG, K.; ZHANG, D. *Recent progress in alkaline water electrolysis for hydrogen production and applications*. *Progress in Energy and Combustion Science*, v. 36, n. 3,3, 307-326 p. 307326, 2010. doi: 10.1016/j.pecs.2009.11.002

APÊNDICE A: Definição do pacote de reação e dos dados de entrada no fluxograma COFE.

- Tela inicial do COFE.



- Escolha dos componentes do pacote de propriedades.



- Configuração da corrente de alimentação.

Syngas:2 [SYNGAS]		
name	SYNGAS	unit
▶ Stream		
▶ Connections		
▼ Overall		
pressure	51.2	bar
temperature	50	°C
mole fraction [Carbon monoxide]	0.18261	
mole fraction [Carbon dioxide]	0.15778	
mole fraction [Methane]	0.1224	
mole fraction [Methanol]	0	
mole fraction [Water]	0.06087	
mole fraction [Nitrogen]	0.003	
mole fraction [Hydrogen]	0.47334	
flow	11450	kmol / h
MW	0.016157167	kg / mol
▶ Compound flows		
▶ Phase Fractions		
▶ Vapor composition		
▶ Liquid composition		
▶ Overall properties		
▶ Vapor properties		

- Definição das reações químicas envolvidas no processo.

Flowsheet configuration:

Edit:

General | Compounds | Reactions

Reaction: CO₂→MeOH

Reaction properties: CO₂→MeOH

Stoichiometry	Compound
-1	Carbon monoxide
0	Carbon dioxide
0	Methane
1	Methanol
0	Water
0	Nitrogen

Equilibrium Reaction Heterogeneous

Rate: mol/s/m²

Equilibrium constant: m⁶/mol⁶

Equilibrium basis: Molarity

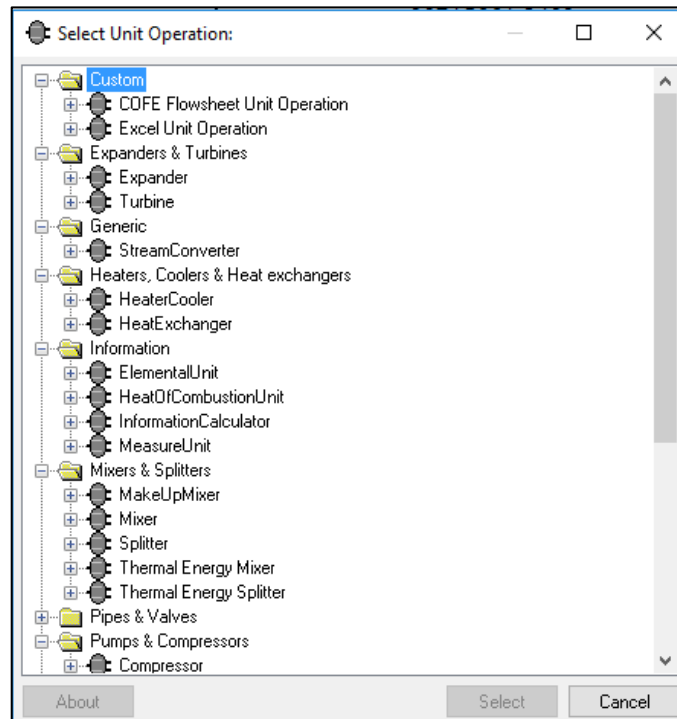
Heat of reaction: J / mol

Phase: Vapor

Create Rename Delete

Help Load Store OK Cancel

- Seleção dos componentes de interesse no fluxograma.



- Configuração de um compressor.

Parameter	Value	Unit
Pressure spec.	Pressure	
Energy spec.	Efficiency	
Pressure increase	2380000	Pa
Pressure	75	bar
Energy demand	4631085.88297	W
Isentropic efficiency	0.75	
Thermo Version	1.1	
Pressure ratio	1.46484375	
Volume ratio	1.26085084812	
Ideal (isentropic) energy demand	3473314.41222	W

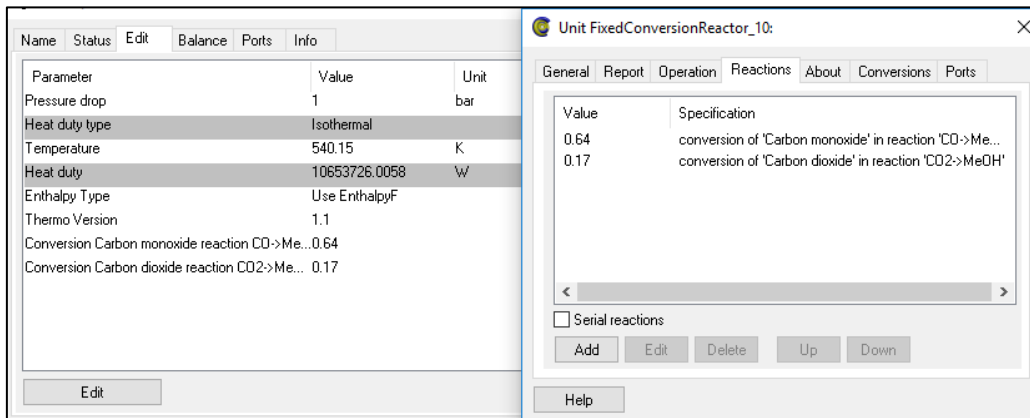
Parameter	Value	Unit
Pressure increase	2380000	Pa
Outlet pressure	7500000	Pa
Pressure ratio (out/in)	1.46484375	
Volume ratio (in/out)	1.26085084812	
Energy demand	4631085.88297	J/s
Isentropic Efficiency	0.75	
Energy defined by energy stream		

- Configuração de um trocador de calor.

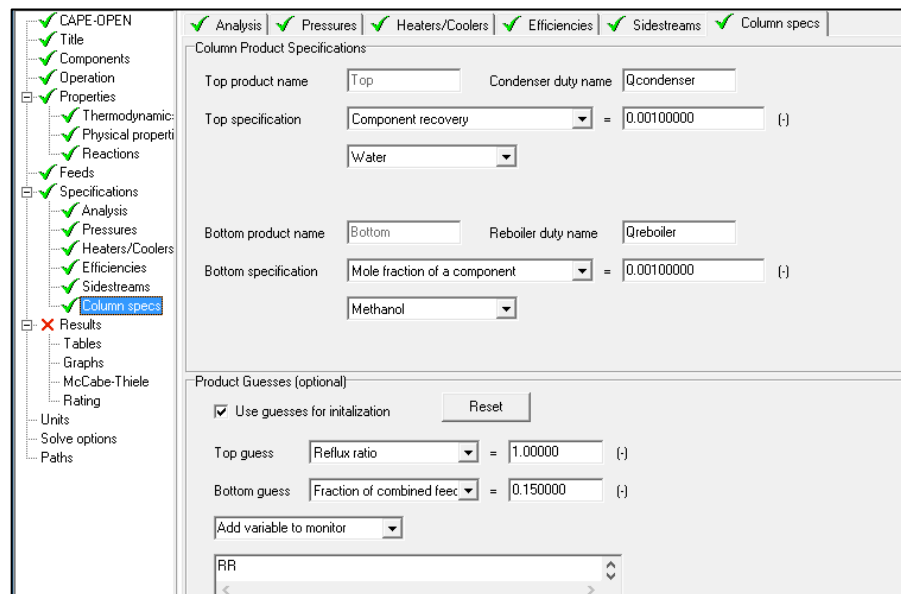
Parameter	Value	Unit
Type	Temperature	
Temperature	145	°C
Heat exchange	652330257.067	W
Heat transfer	0	W / K
Mode	counter-current	
Pressure drop stream 1	1	bar
Pressure drop stream 2	0.5	bar
Adapt outlet temperatures	Yes	
Thermo Version	1.1	
Tolerance	0.0001	
Maximum iterations	100	

Parameter	Value	Unit
Type	Temperature	
Temperature	418.15	K
co-current (parallel flow)		
counter-current		
continue calculations with max/min outlet temperatures		
Pressure drop: stream 1	100000	Pa
stream 2	50000	Pa

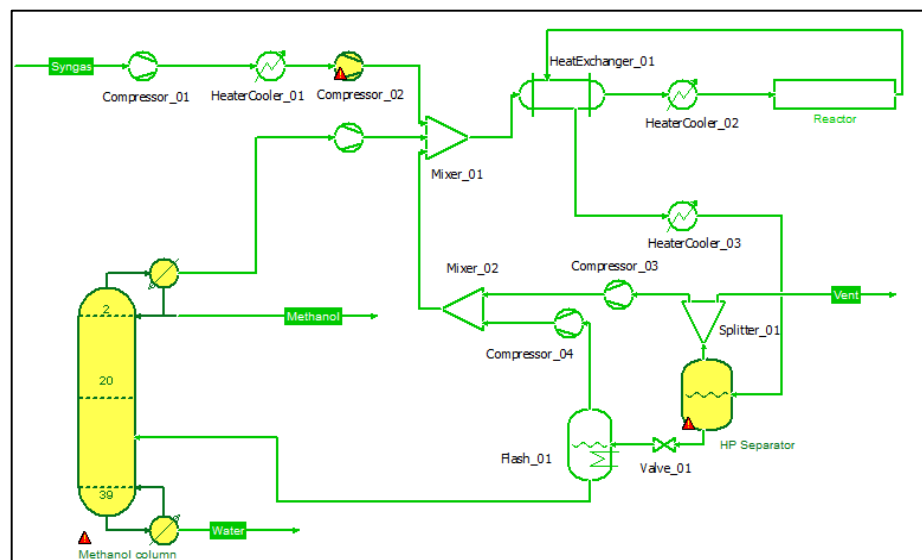
- Configuração de um reator de conversão.



- Configuração de uma coluna de destilação.

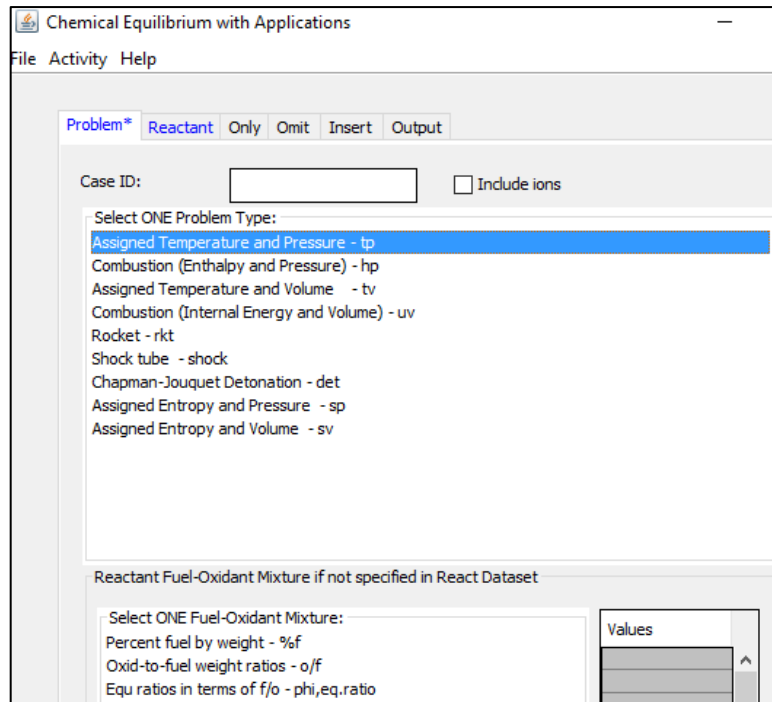


- Fluxograma pronto.

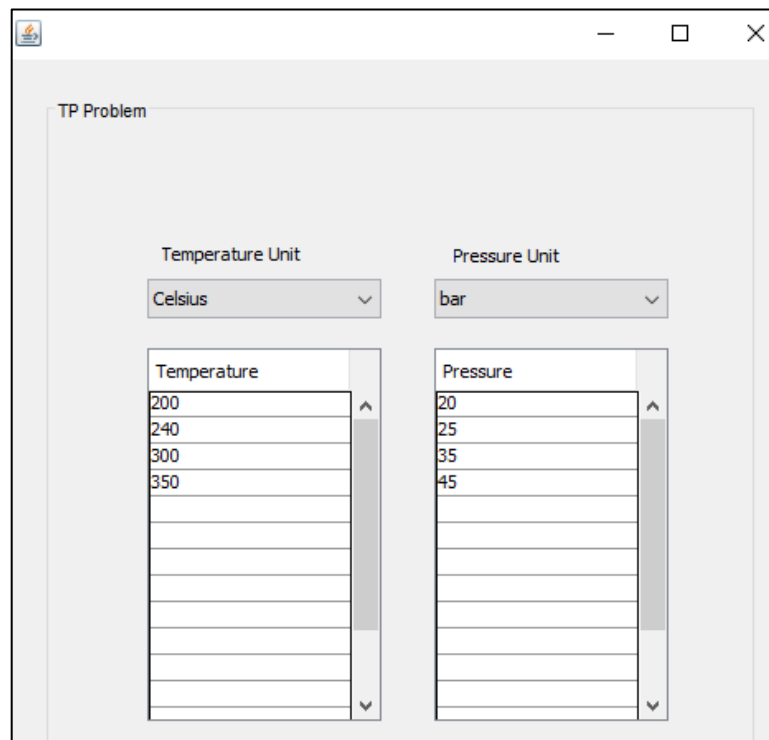


APÊNDICE B: Configuração do problema a ser simulado pelo CEA.

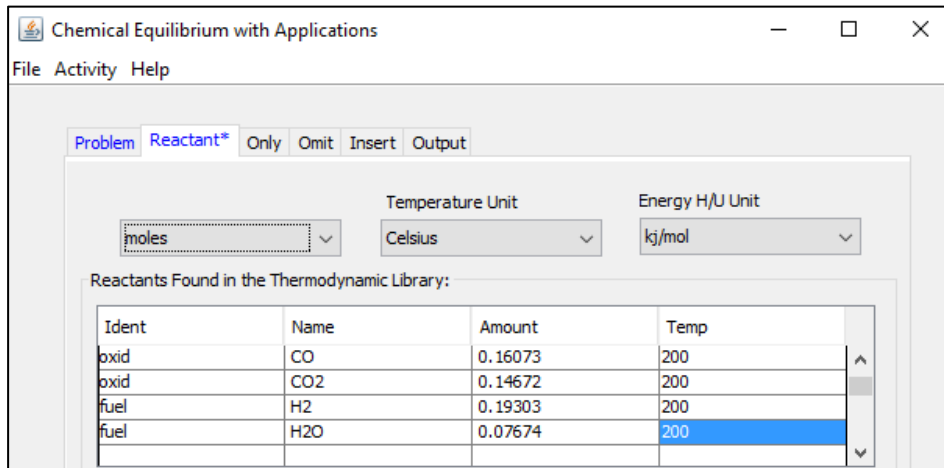
- Tela inicial do CEA: seleção do tipo de problema a ser analisado.



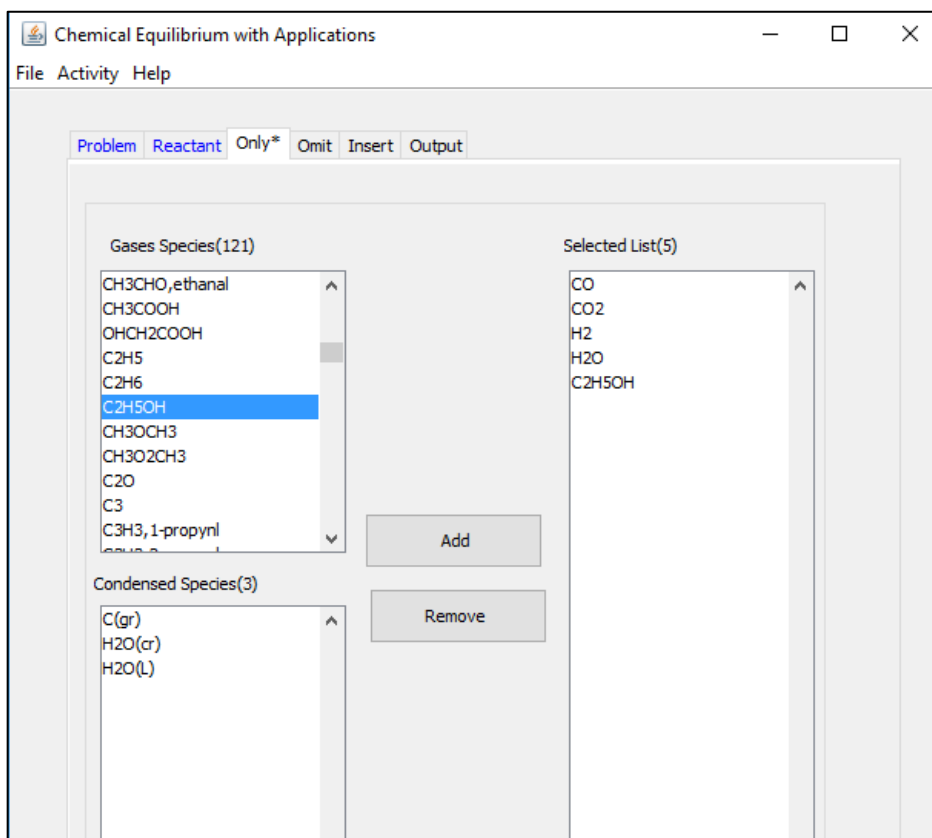
- Definição da unidade do tipo de problema e do intervalo de interesse. No caso, faixa para temperatura e pressão.



- Configuração da reação química que será analisada: unidade, reagentes, oxidantes, fração molar e temperatura.

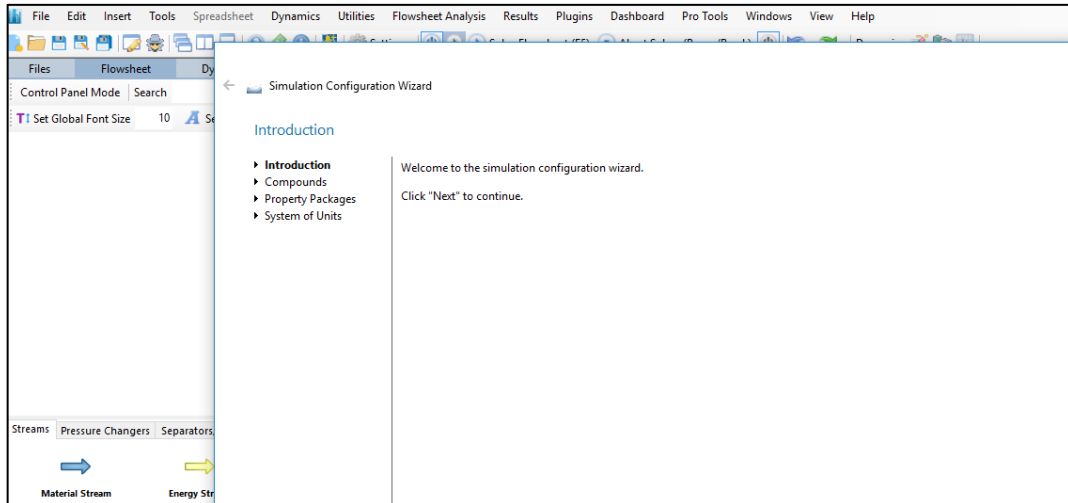


- Seleção dos componentes que se pretende observar a formação.

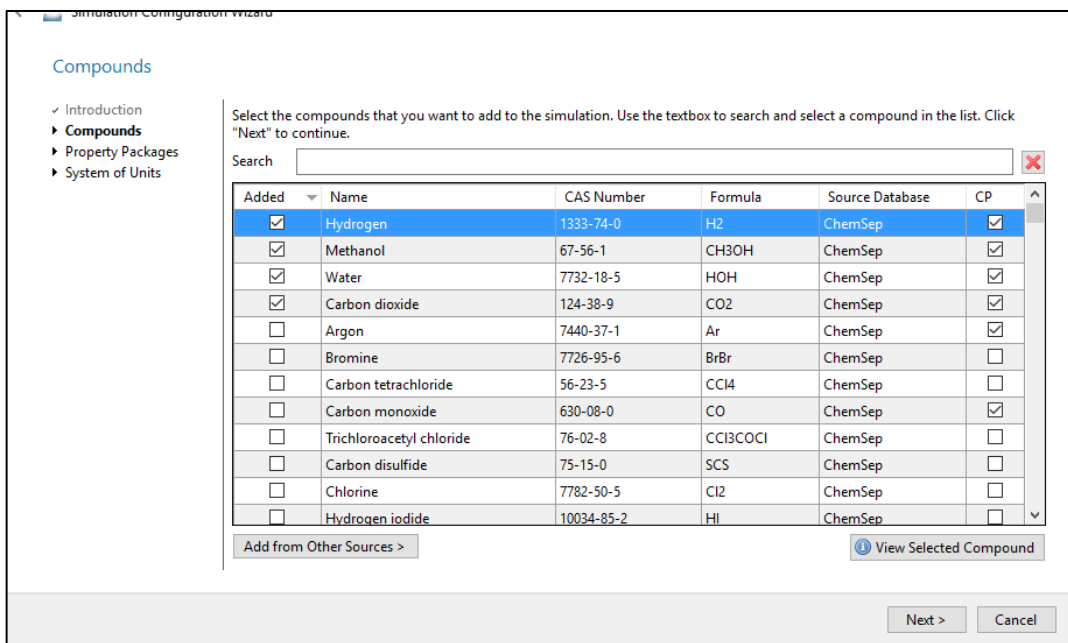


APÊNDICE C: Configuração do problema a ser simulado no DWSIM.

- Tela inicial do DWSIM.



- Seleção dos componentes envolvidos na simulação.



- Definição do pacote de propriedades.

← Simulation Configuration Wizard

Property Packages

- ✓ Introduction
- ✓ Compounds
- ▶ **Property Packages**
- ▶ System of Units

Select and Add the Property Packages that you want to use in your simulation. The first on the list will be used by default by all flowsheet objects. Click "Next" to continue.

Available Property Packages

Type
Modified UNIFAC (Dortmund) (Pro)
Modified UNIFAC (NIST)
Modified UNIFAC (NIST) (Pro)
NRTL
NRTL (Pro)
PC-SAFT (with Association Support) (.NET Code)
Peng-Robinson (PR)
Peng-Robinson / Lee-Kesler (PR/LK)
Peng-Robinson 1078 (DR78)

Add

Added Property Packages

Name	Type
Peng-Robinson (P...	Peng-Robinson (PR)

Does this simulation deal with solids? Yes No Don't know

[Click here to get help on selecting the best Thermodynamic Model/Property Package for your system.](#)

[Click here to learn which methods and correlations are being used by the packages to calculate fluid properties.](#)

Next > Cancel

- Definição do sistema de unidades.

← Simulation Configuration Wizard

System of Units

- ✓ Introduction
- ✓ Compounds
- ✓ Property Packages
- ▶ **System of Units**

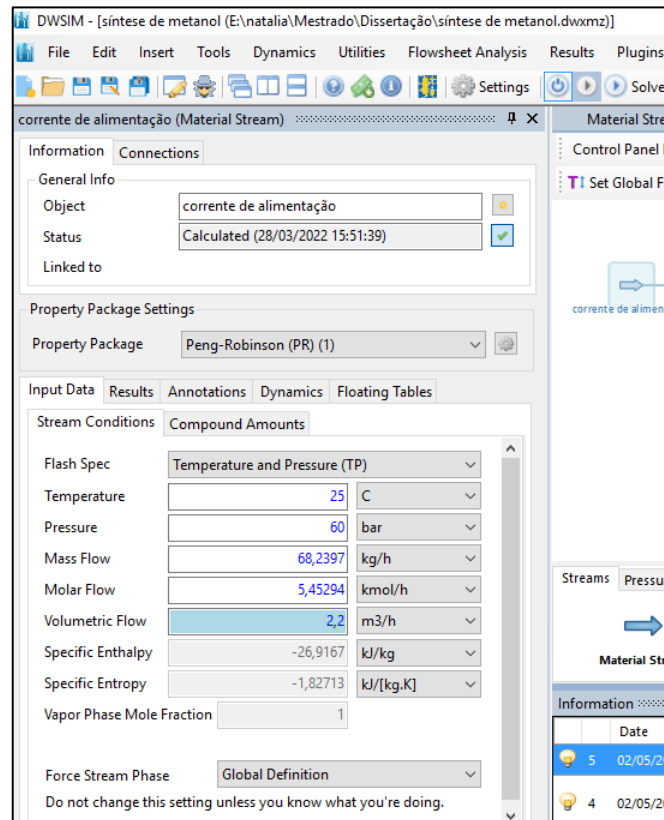
Select the desired System of Units for your simulation. You can change individual units by selecting a custom system (other than SI, CGS or ENG). Click "Finish" to exit the wizard and start designing the simulation model.

System of Units: C5 Clone Create

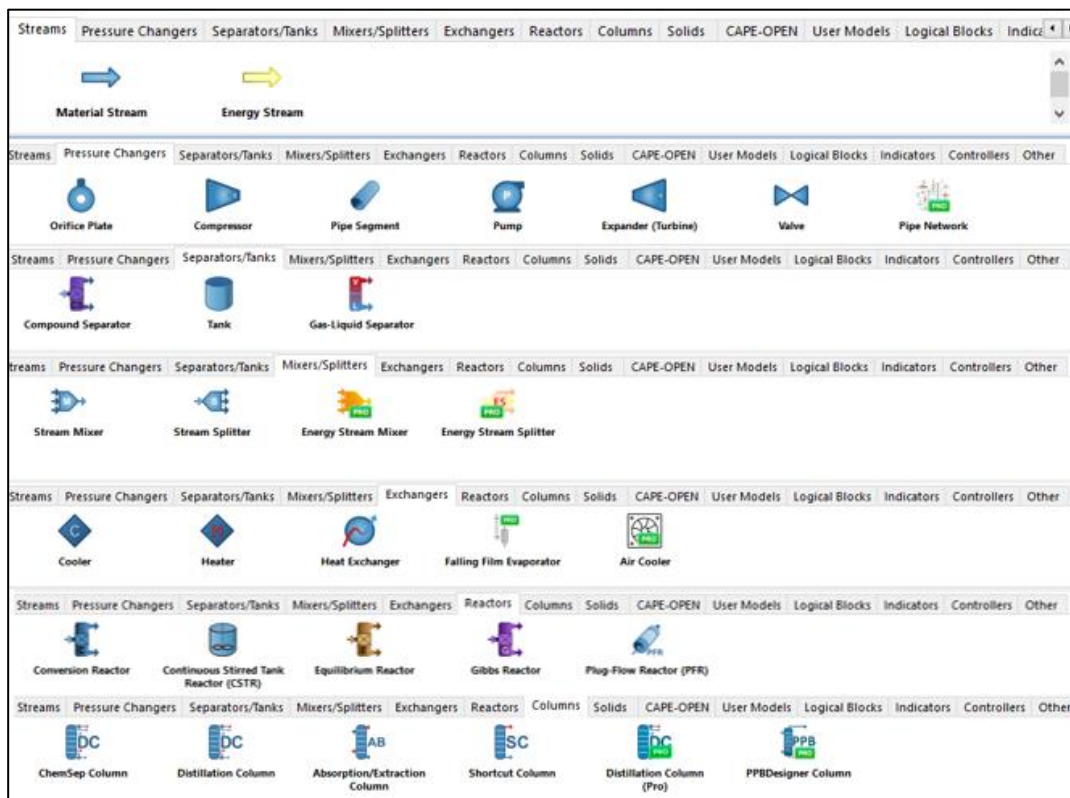
Property	Unit	Property	Unit
Temperature	C	Pressure	bar
Mass Flow Rate	kg/h	Molar Flow Rate	kmol/h
Volumetric flow rate	m3/h	Specific Enthalpy	kJ/kg
Specific Entropy	kJ/[kg.K]	Molecular Weight	kg/kmol
Density	kg/m3	Surface Tension	N/m
Heat Capacity	kJ/[kg.K]	Thermal Conductivity	W/[m.K]
Kinematic Viscosity	m2/s	Dynamic Viscosity	Pa.s
Temperature Difference	C.	Pressure Difference	bar
Length/Head	m	Energy Flow	kW
Time	h	Volume	m3
Molar Volume	m3/kmol	Area	m2
Diameter/Thickness	mm	Force	N

Finish Cancel

- Configuração da corrente de alimentação.



- Componentes que podem ser inseridos na simulação.



- Configuração do aquecedor.

DWSIM - [síntese de metanol (E:\natalia\Mestrado\Dissertação\síntese de metanol.dwxm2)]

File Edit Insert Tools Dynamics Utilities Flowsheet Analysis Results Plugins Dashboard Pro Tools Spre

Settings Solve Flowsheet (F5) Abort Solver (F5)

5 (Heater)

General Info

Object: 5

Status: Calculated (28/03/2022 15:51:39)

Linked to:

Connections

Inlet Stream: corrente misturada

Outlet Stream: Entrada do reator

Energy Stream (Primary): Qh

Energy Stream (Secondary):

Calculation Parameters

Calculation Type: Outlet Temperature

Pressure Drop: 0 bar

Efficiency (0-100%): 100

Outlet Temperature: 250 C

Temperature Change: 247,779 C

Outlet Vapor Fraction: 1

Heating/Cooling: 122,498 kW

Property Package Settings

Property Package: Peng-Robinson (PR) (1)

Notes

Material Streams

Control Panel Mode Search

Set Global Font Size 10 Set Font Sty

corrente de alimentação

3 corrente misturada

Qh 122,50 kW

reciclo

Streams Pressure Changers Separators/Tanks M

Material Stream Energy Stream

Information

Date	Type	Message
02/05/2022 13:01:33	Tip	If some v
02/05/2022 13:01:33	Tip	To view d console r DWSIM f
02/05/2022 13:01:33	Tip	Use the d objects b the first

- Configuração de um reator tubular de leito fixo.

8 (Plug-Flow Reactor (PFR))

General Info

Object: 8

Status: Calculated (28/03/2022 17:58:40)

Linked to:

Connections

Inlet Stream: Entrada do reator

Outlet Stream: saída do reator

Energy Stream: 11

Calculation Parameters

General Dimensions Catalyst Info Annotations

Reactor Volume: 8 m³

Sizing Information: Length Diameter

Reactor Length: 1 m

Reactor Diameter: 3191,54 mm

Property Package Settings

Property Package: Peng-Robinson (PR) (1)

External Solver:

Results

General Reactions Conversions Concentration Profile

5 (Heater) 8 (Plug-Flow Reactor (PFR))

8 (Plug-Flow Reactor (PFR))

General Info

Object: 8

Status: Calculated (28/03/2022 17:58:40)

Linked to:

Connections

Inlet Stream: Entrada do reator

Outlet Stream: saída do reator

Energy Stream: 11

Calculation Parameters

General Dimensions Catalyst Info Annotations

Catalyst Loading information are required when dealing with Heterogeneous Catalytic Reactions.

Catalyst Loading: 0,6 kg/m³

Catalyst Particle Diameter: 0,3 mm

Catalyst Void Fraction: 0,3

Property Package Settings

Property Package: Peng-Robinson (PR) (1)

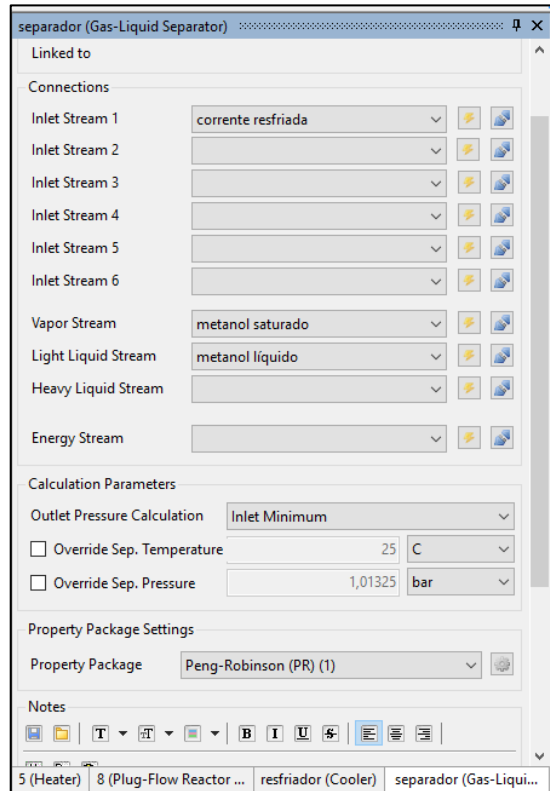
External Solver:

Results

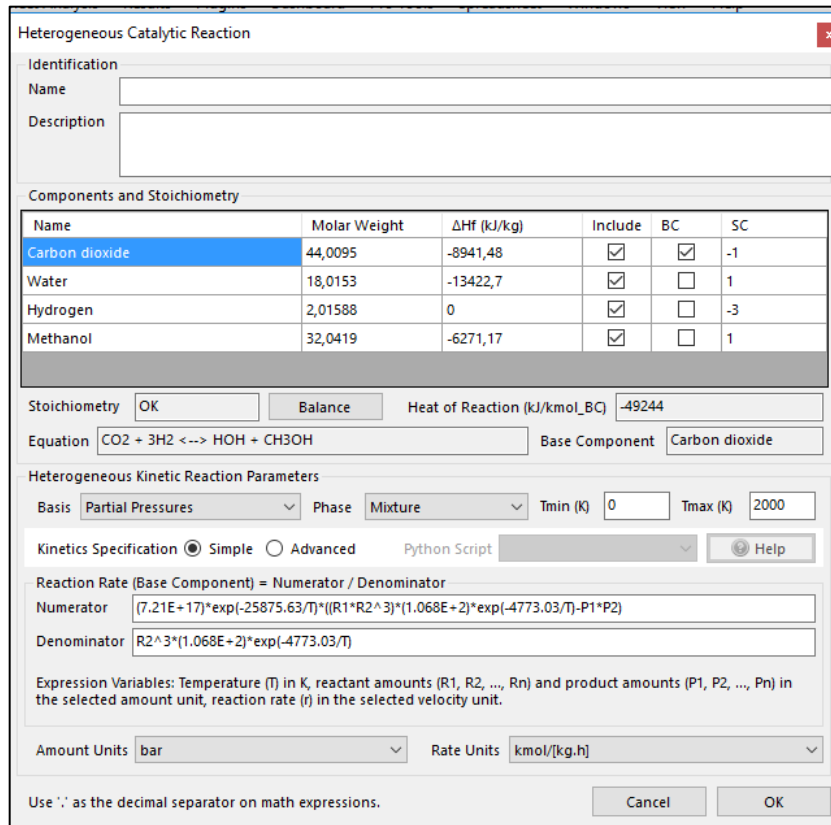
General Reactions Conversions Concentration Profile

5 (Heater) 8 (Plug-Flow Reactor (PFR))

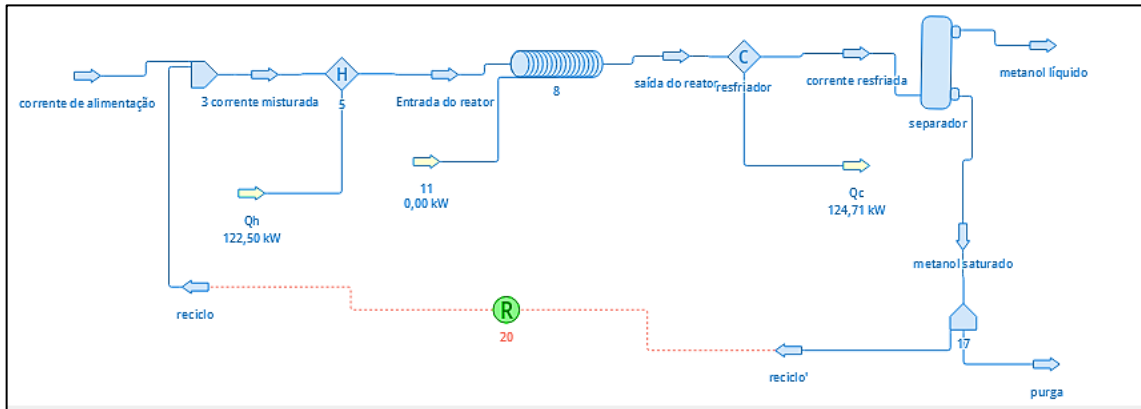
- Configuração de um separador líquido-gás.



- Configuração da reação heterogênea catalítica.



- Fluxograma pronto.



APÊNDICE D: Código utilizado para a análise da Primeira Lei e da Segunda Lei da Termodinâmica no EES.

"Dados:"

$Q=850,46 \text{ {kJ/kg}}$
 $R_{ar}=8,31451 \text{ {kJ/kg.K}}$
 $R_{gases}=8,31451 \text{ {kJ/kmol.K}}$
 $P_0=101,325 \text{ {kPa}}$
 $T_0=288,15 \text{ {K}}$
 $P_1=101,325 \text{ {kPa}}$
 $T_1=288,15 \text{ {K}}$
 $Razão_p=13,7$
 $m_{dot_{gases}}=30,2 \text{ {kg/s}}$ {informada pelo fabricante}
 $HR=11704 \text{ {kJ/kWh}}$ "informada pelo fabricante"
 $W_{dot_{turbina}}=7900 \text{ {kW}}$ "informada pelo fabricante"
 $LHV=20149 \text{ {kJ/kg}}$

{PRIMEIRA LEI}

"Compressor"

"Fração mássica do ar"

$xi_{N2}=0,7567$
 $xi_{O2}=0,2035$
 $xi_{CO2}=0,0003$
 $xi_{H2O}=0,0303$
 $xi_{Arg}=0,0092$

$xi_{ar}=(xi_{N2}*28)+(xi_{O2}*32)+(xi_{CO2}*44)+(xi_{H2O}*18)+(xi_{Arg}*40)$

{coeficientes para 288,15 K}

$a_{N2_{100-500}}=28,98641$
 $b_{N2_{100-500}}=1,853978$
 $c_{N2_{100-500}}=-9,647459$
 $d_{N2_{100-500}}=16,63537$
 $e_{N2_{100-500}}=0,000117$
 $f_{N2_{100-500}}=-8,671914$
 $g_{N2_{100-500}}=226,4168$
 $h_{N2_{100-500}}=0$

$a_{O2_{100-700}}=31,32234$
 $b_{O2_{100-700}}=-20,23531$
 $c_{O2_{100-700}}=57,86644$
 $d_{O2_{100-700}}=-36,50624$
 $e_{O2_{100-700}}=-0,007374$
 $f_{O2_{100-700}}=-8,903471$
 $g_{O2_{100-700}}=246,7945$
 $h_{O2_{100-700}}=0$

$a_{CO2_{298-1200}}=24,99735$
 $b_{CO2_{298-1200}}=55,18696$
 $c_{CO2_{298-1200}}=-33,69137$
 $d_{CO2_{298-1200}}=7,948387$
 $e_{CO2_{298-1200}}=-0,136638$

f_CO2_298-1200=-403,6075
 g_CO2_298-1200=228,2431
 h_CO2_298-1200=-393,5224

a_H2O_500-1700=30,092
 b_H2O_500-1700=6,832514
 c_H2O_500-1700=6,793435
 d_H2O_500-1700=-2,53448
 e_H2O_500-1700=0,082139
 f_H2O_500-1700=-250,881
 g_H2O_500-1700=223,3967
 h_H2O_500-1700=-241,8264

a_Arg_298-6000=20,786
 b_Arg_298-6000=2,825911*(10⁻⁷)
 c_Arg_298-6000=-1,464191*(10⁻⁷)
 d_Arg_298-6000=1,092131*(10⁻⁸)
 e_Arg_298-6000=-3,661371*(10⁻⁸)
 f_Arg_298-6000=-6,19735
 g_Arg_298-6000=179,999
 h_Arg_298-6000=0

P_2=P_1*Razão_p
 T2s_adm=595
 T12_média=(T_1+T2s_adm)/2

cp_12s=(xi_N2*((a_N2_100-500)+((b_N2_100-500)*(T12_média/1000)))+(c_N2_100-500)*((T12_média/1000)²))+((d_N2_100-500)*((T12_média/1000)³))+((e_N2_100-500)/((T12_média/1000)²))/28+(xi_O2*((a_O2_100-700)+((b_O2_100-700)*(T12_média/1000)))+(c_O2_100-700)*((T12_média/1000)²))+((d_O2_100-700)*((T12_média/1000)³))+((e_O2_100-700)/((T12_média/1000)²))/32+(xi_CO2*((a_CO2_298-1200)+((b_CO2_298-1200)*(T12_média/1000)))+(c_CO2_298-1200)*((T12_média/1000)²))+((d_CO2_298-1200)*((T12_média/1000)³))+((e_CO2_298-1200)/((T12_média/1000)²))/44+(xi_H2O*((a_H2O_500-1700)+((b_H2O_500-1700)*(T12_média/1000)))+(c_H2O_500-1700)*((T12_média/1000)²))+((d_H2O_500-1700)*((T12_média/1000)³))+((e_H2O_500-1700)/((T12_média/1000)²))/18+(xi_Arg*((a_Arg_298-6000))/40) {kJ/kg.K}

k=cp_12s/(cp_12s-(R_ar/xi_ar))

T2s=T_1*Razão_p^{1/k}

eta_comp=0,9 {admitida}
 T2_adm=623

T_12=(T_1+ T2_adm)/2

a_N2_500-2000=19,50583
 b_N2_500-2000=19,88705
 c_N2_500-2000=-8,598535
 d_N2_500-2000=1,369784
 e_N2_500-2000=0,527601
 f_N2_500-2000=-4,935202
 g_N2_500-2000=212,39
 h_N2_500-2000=0

cp_12=(xi_N2*((a_N2_500-2000)+((b_N2_500-2000)*(T_12/1000)))+(c_N2_500-2000)*((T_12/1000)²))+((d_N2_500-2000)*((T_12/1000)³))+((e_N2_500-2000)/((T_12/1000)²))/28 + (xi_O2*((a_O2_100-700)+((b_O2_100-700)*(T_12/1000)))+(c_O2_100-700)*((T_12/1000)²))+((d_O2_100-700)*((T_12/1000)³))+((e_O2_100-700)/((T_12/1000)²))/32 + (xi_CO2*((a_CO2_298-1200)+((b_CO2_298-1200)*(T_12/1000)))+(c_CO2_298-

$$1200)*((T_{12}/1000)^2))+((d_{CO2_298}-1200)*((T_{12}/1000)^3))+((e_{CO2_298}-1200)/((T_{12}/1000)^2)))/44)+(xi_{H2O}*((a_{H2O_500}-1700)+((b_{H2O_500}-1700)*(T_{12}/1000)))+(c_{H2O_500}-1700)*((T_{12}/1000)^2))+((d_{H2O_500}-1700)*((T_{12}/1000)^3))+((e_{H2O_500}-1700)/((T_{12}/1000)^2)))/18)+(xi_{Arg}*((a_{Arg_298}-6000))/40) \{kJ/kg.K\}$$

$$k_{ar}=cp_{12}/(cp_{12}-(R_{ar}/xi_{ar}))$$

$$T_2=((cp_{12}s*(T2s - T_1))/(eta_{comp}*cp_{12}))+T_1$$

$$w_{comp}=-cp_{12}*(T_2-T_1)$$

$$n_{estágios}=10$$

$$Tx_{comp_estágio}=(P_2/P_1)^{(1/n_{estágios})}$$

$$Pf1=P_1*Tx_{comp_estágio}$$

$$Pf2=P_1*(Tx_{comp_estágio}^2)$$

$$Pf3=P_1*(Tx_{comp_estágio}^3)$$

$$Pf4=P_1*(Tx_{comp_estágio}^4)$$

$$Pf5=P_1*(Tx_{comp_estágio}^5)$$

$$Pf6=P_1*(Tx_{comp_estágio}^6)$$

$$Pf7=P_1*(Tx_{comp_estágio}^7)$$

$$Pf8=P_1*(Tx_{comp_estágio}^8)$$

$$Pf9=P_1*(Tx_{comp_estágio}^9)$$

$$Pf10=P_1*(Tx_{comp_estágio}^{10})$$

$$P_{intermediária}=(Pf1*Pf10)^{(1/2)}$$

"Câmara de combustão"

"reação estequiométrica do óleo diesel $CH_3OH+1,5(O_2+3,76N_2) \rightarrow CO_2+2H_2O+5,64N_2$ "

$$MM_{CH_3OH}=12+4+16 \{g/mol\}$$

$$MM_{O_2}=32$$

$$MM_{N_2}=28$$

$$MM_{CO_2}=12+(2*16)$$

$$MM_{H_2O}=(2*1)+16$$

$$MM_{Arg}=40$$

$$Eta_{térmica_turb}=1/(HR/3600)$$

$$W_{dot_térmica_t}=W_{dot_turbina}/Eta_{térmica_turb}$$

$$m_{dot_combustível}=W_{dot_térmica_t}/LHV$$

$$m_{dot_O_2}=(m_{dot_combustível}/MM_{CH_3OH})*(1,5/1)*MM_{O_2}$$

$$CO_2_{O_2}=(xi_{CO_2}/xi_{O_2})*1,5$$

$$H_2O_{O_2}=(xi_{H_2O}/xi_{O_2})*1,5$$

$$Arg_{O_2}=(xi_{Arg}/xi_{O_2})*1,5$$

$$total_{O_2}=(CO_2_{O_2}*MM_{CO_2})+(H_2O_{O_2}*MM_{H_2O})+(Arg_{O_2}*MM_{Arg})$$

$$m_{dot_N_2}=(m_{dot_O_2}/MM_{O_2})*3,76*MM_{N_2}$$

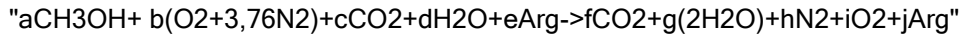
$$m_{dot_ar_est}=m_{dot_O_2}+total_{O_2}+m_{dot_N_2}$$

$$AC_{estequiométrica}=m_{dot_ar_est}/m_{dot_combustível}$$

$$m_{dot_ar_real}=m_{dot_gases}-m_{dot_combustível}$$

$$AC_{real}=m_{dot_ar_real}/m_{dot_combustível}$$

$$\text{excesso} = (\text{AC_real}) / (\text{AC_estequiométrica})$$



$$\text{b} = ((2+2-1)/2) * \text{excesso}$$

$$\text{c} = (\text{xi_CO}_2 / \text{xi_O}_2) * \text{b}$$

$$\text{d} = (\text{xi_H}_2\text{O} / \text{xi_O}_2) * \text{b}$$

$$\text{e} = (\text{xi_Arg} / \text{xi_O}_2) * \text{b}$$

"resolvendo o balanceamento"

$$\text{f} = 1 + \text{c}$$

$$\text{g} = 2 + \text{d}$$

$$\text{h} = \text{b} * 3,76$$

$$\text{i} = \text{b} - 1,5$$

$$\text{j} = \text{e}$$

$$\text{volume_gases} = \text{f} + \text{g} + \text{h} + \text{i} + \text{j}$$

$$\text{CO}_2 = \text{f} / \text{volume_gases}$$

$$\text{H}_2\text{O} = \text{g} / \text{volume_gases}$$

$$\text{N}_2 = \text{h} / \text{volume_gases}$$

$$\text{O}_2 = \text{i} / \text{volume_gases}$$

$$\text{Arg} = \text{j} / \text{volume_gases}$$

$$\text{P}_3 = \text{P}_2$$

$$\text{T}_{3_adm} = 1270 \text{ \{K\}}$$

$$\text{T}_{23_média} = (\text{T}_{3_adm} + \text{T}_2) / 2$$

$$\text{a_O}_2_{700-2000} = 30,03235$$

$$\text{b_O}_2_{700-2000} = 8,772972$$

$$\text{c_O}_2_{700-2000} = -3,988133$$

$$\text{d_O}_2_{700-2000} = 0,788313$$

$$\text{e_O}_2_{700-2000} = -0,741599$$

$$\text{f_O}_2_{700-2000} = -11,3247$$

$$\text{g_O}_2_{700-2000} = 236,1663$$

$$\text{h_O}_2_{700-2000} = 0$$

$$\text{a_CO}_2_{1200-6000} = 58,16639$$

$$\text{b_CO}_2_{1200-6000} = 2,720074$$

$$\text{c_CO}_2_{1200-6000} = -0,492289$$

$$\text{d_CO}_2_{1200-6000} = 0,038844$$

$$\text{e_CO}_2_{1200-6000} = -6,447293$$

$$\text{f_CO}_2_{1200-6000} = -425,919$$

$$\text{g_CO}_2_{1200-6000} = 263,6125$$

$$\text{h_CO}_2_{1200-6000} = -393,5224$$

$$\begin{aligned} \text{cp_gases} = & (\text{N}_2 * ((\text{a_N}_2_{500-2000}) + ((\text{b_N}_2_{500-2000}) * (\text{T}_{23_média} / 1000)) + ((\text{c_N}_2_{500-2000}) * ((\text{T}_{23_média} / 1000)^2)) + ((\text{d_N}_2_{500-2000}) * ((\text{T}_{23_média} / 1000)^3)) + ((\text{e_N}_2_{500-2000}) / ((\text{T}_{23_média} / 1000)^2))) / 28) + \\ & (\text{O}_2 * ((\text{a_O}_2_{700-2000}) + ((\text{b_O}_2_{700-2000}) * (\text{T}_{23_média} / 1000)) + ((\text{c_O}_2_{700-2000}) * ((\text{T}_{23_média} / 1000)^2)) + ((\text{d_O}_2_{700-2000}) * ((\text{T}_{23_média} / 1000)^3)) + ((\text{e_O}_2_{700-2000}) / ((\text{T}_{23_média} / 1000)^2))) / 32) + \\ & (\text{CO}_2 * ((\text{a_CO}_2_{1200-6000}) + ((\text{b_CO}_2_{1200-6000}) * (\text{T}_{23_média} / 1000)) + ((\text{c_CO}_2_{1200-6000}) * ((\text{T}_{23_média} / 1000)^2)) + ((\text{d_CO}_2_{1200-6000}) * ((\text{T}_{23_média} / 1000)^3)) + ((\text{e_CO}_2_{1200-6000}) / ((\text{T}_{23_média} / 1000)^2))) / 44) + \\ & (\text{H}_2\text{O} * ((\text{a_H}_2\text{O}_{500-1700}) + ((\text{b_H}_2\text{O}_{500-1700}) * (\text{T}_{23_média} / 1000)) + ((\text{c_H}_2\text{O}_{500-1700}) * ((\text{T}_{23_média} / 1000)^2)) + ((\text{d_H}_2\text{O}_{500-1700}) * ((\text{T}_{23_média} / 1000)^3)) + ((\text{e_H}_2\text{O}_{500-1700}) / ((\text{T}_{23_média} / 1000)^2))) / 18) + \\ & (\text{Arg} * ((\text{a_Arg}_{298-6000}) / 40)) \text{ \{kJ/kg.K\}} \end{aligned}$$

$$\text{T}_3 = (\text{Q} / \text{cp_gases}) + \text{T}_2$$

"Turbina"

$$\text{P}_4 = \text{P}_1$$

$\eta_t=0,82$

$T_{4s}=700$

$T_{34}=(T_3+T_{4s})/2$

$$cp_{turb_s}=(N_2*((a_{N_2_{500-2000}})+(b_{N_2_{500-2000}}*(T_{34}/1000)))+(c_{N_2_{500-2000}}*((T_{34}/1000)^2))+((d_{N_2_{500-2000}}*(T_{34}/1000)^3))+((e_{N_2_{500-2000}})/((T_{34}/1000)^2)))/28 + (O_2*((a_{O_2_{700-2000}})+(b_{O_2_{700-2000}}*(T_{34}/1000)))+(c_{O_2_{700-2000}}*((T_{34}/1000)^2))+((d_{O_2_{700-2000}}*(T_{34}/1000)^3))+((e_{O_2_{700-2000}})/((T_{34}/1000)^2)))/32) + (CO_2*((a_{CO_2_{298-1200}})+(b_{CO_2_{298-1200}}*(T_{34}/1000)))+(c_{CO_2_{298-1200}}*((T_{34}/1000)^2))+((d_{CO_2_{298-1200}}*(T_{34}/1000)^3))+((e_{CO_2_{298-1200}})/((T_{34}/1000)^2)))/44) + (H_2O*((a_{H_2O_{500-1700}})+(b_{H_2O_{500-1700}}*(T_{34}/1000)))+(c_{H_2O_{500-1700}}*((T_{34}/1000)^2))+((d_{H_2O_{500-1700}}*(T_{34}/1000)^3))+((e_{H_2O_{500-1700}})/((T_{34}/1000)^2)))/18)+(Arg*((a_{Arg_{298-6000}})/40) \{kJ/kg.K\}$$

$$k_{gases}=(cp_{turb_s}/(cp_{turb_s}-(R_{gases}/((CO_2*MM_{CO_2})+(H_2O*MM_{H_2O})+(N_2*MM_{N_2})+(O_2*MM_{O_2})+(Arg*MM_{Arg}))))))$$

$T_{4adm}=810$

$T_{34m}=(T_3+T_{4adm})/2$

$$cp_{turb}=(N_2*((a_{N_2_{500-2000}})+(b_{N_2_{500-2000}}*(T_{34m}/1000)))+(c_{N_2_{500-2000}}*((T_{34m}/1000)^2))+((d_{N_2_{500-2000}}*(T_{34m}/1000)^3))+((e_{N_2_{500-2000}})/((T_{34m}/1000)^2)))/28 + (O_2*((a_{O_2_{700-2000}})+(b_{O_2_{700-2000}}*(T_{34m}/1000)))+(c_{O_2_{700-2000}}*((T_{34m}/1000)^2))+((d_{O_2_{700-2000}}*(T_{34m}/1000)^3))+((e_{O_2_{700-2000}})/((T_{34m}/1000)^2)))/32) + (CO_2*((a_{CO_2_{298-1200}})+(b_{CO_2_{298-1200}}*(T_{34m}/1000)))+(c_{CO_2_{298-1200}}*((T_{34m}/1000)^2))+((d_{CO_2_{298-1200}}*(T_{34m}/1000)^3))+((e_{CO_2_{298-1200}})/((T_{34m}/1000)^2)))/44) + (H_2O*((a_{H_2O_{500-1700}})+(b_{H_2O_{500-1700}}*(T_{34m}/1000)))+(c_{H_2O_{500-1700}}*((T_{34m}/1000)^2))+((d_{H_2O_{500-1700}}*(T_{34m}/1000)^3))+((e_{H_2O_{500-1700}})/((T_{34m}/1000)^2)))/18)+(Arg*((a_{Arg_{298-6000}})/40) \{kJ/kg.K\}$$

$$k_g=(cp_{turb}/(cp_{turb}-(R_{gases}/((CO_2*MM_{CO_2})+(H_2O*MM_{H_2O})+(N_2*MM_{N_2})+(O_2*MM_{O_2})+(Arg*MM_{Arg}))))))$$

$T_4=T_3-((cp_{turb_s}*(T_3-T_{4s})*(eta_t/cp_{turb}))$

$w_{turbina}=(cp_{turb}*(T_3-T_4)) \{kJ/kg\}$

$w_{liquido}=w_{turbina}-(-w_{comp}) \{kJ/kg\}$

$razão_{consumo}=-w_{comp}/w_{turbina}$

$\eta_{ciclo}=w_{liquido}/Q$

$W_{dot}=m_{dot_{gases}}*w_{liquido} \{kW\}$

{SEGUNDA LEI}

"Cálculo de entalpia e entropia de cada estado"

"Estado 1"

$$h_1=(xi_{N_2}*(((a_{N_2_{100-500}}*(T_1/1000)) + ((b_{N_2_{100-500}})/2)*((T_1/1000)^2)) + (((c_{N_2_{100-500}})/3)*((T_1/1000)^3)) + (((d_{N_2_{100-500}})/4)*((T_1/1000)^4)) - ((e_{N_2_{100-500}})/(T_1/1000)) + (f_{N_2_{100-500}} - (h_{N_2_{100-500}})*1000) + 8663,6)/28)+(xi_{O_2}*(((a_{O_2_{100-700}}*(T_1/1000)) + ((b_{O_2_{100-700}})/2)*((T_1/1000)^2)) + (((c_{O_2_{100-700}})/3)*((T_1/1000)^3)) + (((d_{O_2_{100-700}})/4)*((T_1/1000)^4)) - ((e_{O_2_{100-700}})/(T_1/1000)) + (f_{O_2_{100-700}} - (h_{O_2_{100-700}})*1000) + 8377,9)/32)+(xi_{CO_2}*(((a_{CO_2_{298-1200}}*(T_1/1000)) + ((b_{CO_2_{298-1200}})/2)*((T_1/1000)^2)) + (((c_{CO_2_{298-1200}})/3)*((T_1/1000)^3)) + (((d_{CO_2_{298-1200}})/4)*((T_1/1000)^4)) - ((e_{CO_2_{298-1200}})/(T_1/1000)) + (f_{CO_2_{298-1200}} - (h_{CO_2_{298-1200}})*1000) + 2189)/44)+(xi_{H_2O}*(((a_{H_2O_{500-1700}}*(T_1/1000)) + ((b_{H_2O_{500-1700}})/2)*((T_1/1000)^2)) +$$

$$c_{H_2O_{500-1700}}/3 * (T_0/1000)^3 + ((d_{H_2O_{500-1700}}/4) * (T_0/1000)^4) - ((e_{H_2O_{500-1700}})/(T_0/1000) + (f_{H_2O_{500-1700}}) - (h_{H_2O_{500-1700}}) * 1000 + 1136,3/18) + (Arg * (((a_{Arg_{298-6000}}) * (T_0/1000)) + ((b_{Arg_{298-6000}}/2) * (T_0/1000)^2) + ((c_{Arg_{298-6000}}/3) * (T_0/1000)^3) + ((d_{Arg_{298-6000}}/4) * (T_0/1000)^4) - ((e_{Arg_{298-6000}})/(T_0/1000) + (f_{Arg_{298-6000}}) - (h_{Arg_{298-6000}}) * 1000 + 5980,9/40)) \{kJ/kg\}$$

$$s_{0g} = (N_2 * ((a_{N_2_{100-500}} * LN(T_0/1000)) + (b_{N_2_{100-500}} * (T_0/1000)) + ((c_{N_2_{100-500}}/2) * (T_0/1000)^2) + ((d_{N_2_{100-500}}/3) * (T_0/1000)^3) - ((e_{N_2_{100-500}})/(2 * (T_0/1000)^2))) + (g_{N_2_{100-500}})/28) + (O_2 * ((a_{O_2_{100-700}} * LN(T_0/1000)) + (b_{O_2_{100-700}} * (T_0/1000)) + ((c_{O_2_{100-700}}/2) * (T_0/1000)^2) + ((d_{O_2_{100-700}}/3) * (T_0/1000)^3) - ((e_{O_2_{100-700}})/(2 * (T_0/1000)^2))) + (g_{O_2_{100-700}})/32) + (CO_2 * ((a_{CO_2_{298-1200}} * LN(T_0/1000)) + (b_{CO_2_{298-1200}} * (T_0/1000)) + ((c_{CO_2_{298-1200}}/2) * (T_0/1000)^2) + ((d_{CO_2_{298-1200}}/3) * (T_0/1000)^3) - ((e_{CO_2_{298-1200}})/(2 * (T_0/1000)^2))) + (g_{CO_2_{298-1200}})/28) + (H_2O * ((a_{H_2O_{500-1700}} * LN(T_0/1000)) + (b_{H_2O_{500-1700}} * (T_0/1000)) + ((c_{H_2O_{500-1700}}/2) * (T_0/1000)^2) + ((d_{H_2O_{500-1700}}/3) * (T_0/1000)^3) - ((e_{H_2O_{500-1700}})/(2 * (T_0/1000)^2))) + (g_{H_2O_{500-1700}})/18) + (Arg * ((a_{Arg_{298-6000}} * LN(T_0/1000)) + (b_{Arg_{298-6000}} * (T_0/1000)) + ((c_{Arg_{298-6000}}/2) * (T_0/1000)^2) + ((d_{Arg_{298-6000}}/3) * (T_0/1000)^3) - ((e_{Arg_{298-6000}})/(2 * (T_0/1000)^2))) + (g_{Arg_{298-6000}})/40)$$

"Estado 3"

$$h_3 = (N_2 * (((a_{N_2_{500-2000}} * (T_3/1000)) + ((b_{N_2_{500-2000}}/2) * (T_3/1000)^2) + ((c_{N_2_{500-2000}}/3) * (T_3/1000)^3) + ((d_{N_2_{500-2000}}/4) * (T_3/1000)^4) - ((e_{N_2_{500-2000}})/(T_3/1000)) + (f_{N_2_{500-2000}} - (h_{N_2_{500-2000}}) * 1000) + 8663,6/28) + (O_2 * (((a_{O_2_{700-2000}} * (T_3/1000)) + ((b_{O_2_{700-2000}}/2) * (T_3/1000)^2) + ((c_{O_2_{700-2000}}/3) * (T_3/1000)^3) + ((d_{O_2_{700-2000}}/4) * (T_3/1000)^4) - ((e_{O_2_{700-2000}})/(T_3/1000)) + (f_{O_2_{700-2000}} - (h_{O_2_{700-2000}}) * 1000) + 8377,9/32) + (CO_2 * (((a_{CO_2_{1200-6000}} * (T_3/1000)) + ((b_{CO_2_{1200-6000}}/2) * (T_3/1000)^2) + ((c_{CO_2_{1200-6000}}/3) * (T_3/1000)^3) + ((d_{CO_2_{1200-6000}}/4) * (T_3/1000)^4) - ((e_{CO_2_{1200-6000}})/(T_3/1000)) + (f_{CO_2_{1200-6000}} - (h_{CO_2_{1200-6000}}) * 1000) + 2189/44) + (H_2O * (((a_{H_2O_{500-1700}} * (T_3/1000)) + ((b_{H_2O_{500-1700}}/2) * (T_3/1000)^2) + ((c_{H_2O_{500-1700}}/3) * (T_3/1000)^3) + ((d_{H_2O_{500-1700}}/4) * (T_3/1000)^4) - ((e_{H_2O_{500-1700}})/(T_3/1000)) + (f_{H_2O_{500-1700}} - (h_{H_2O_{500-1700}}) * 1000) + 1136,3/18) + (Arg * (((a_{Arg_{298-6000}} * (T_3/1000)) + ((b_{Arg_{298-6000}}/2) * (T_3/1000)^2) + ((c_{Arg_{298-6000}}/3) * (T_3/1000)^3) + ((d_{Arg_{298-6000}}/4) * (T_3/1000)^4) - ((e_{Arg_{298-6000}})/(T_3/1000)) + (f_{Arg_{298-6000}} - (h_{Arg_{298-6000}}) * 1000) + 5980,9/40)) \{kJ/kg\}$$

$$s_3 = (N_2 * ((a_{N_2_{500-2000}} * LN(T_3/1000)) + (b_{N_2_{500-2000}} * (T_3/1000)) + ((c_{N_2_{500-2000}}/2) * (T_3/1000)^2) + ((d_{N_2_{500-2000}}/3) * (T_3/1000)^3) - ((e_{N_2_{500-2000}})/(2 * (T_3/1000)^2))) + (g_{N_2_{500-2000}})/28) + (O_2 * ((a_{O_2_{700-2000}} * LN(T_3/1000)) + (b_{O_2_{700-2000}} * (T_3/1000)) + ((c_{O_2_{700-2000}}/2) * (T_3/1000)^2) + ((d_{O_2_{700-2000}}/3) * (T_3/1000)^3) - ((e_{O_2_{700-2000}})/(2 * (T_3/1000)^2))) + (g_{O_2_{700-2000}})/32) + (CO_2 * ((a_{CO_2_{1200-6000}} * LN(T_3/1000)) + (b_{CO_2_{1200-6000}} * (T_3/1000)) + ((c_{CO_2_{1200-6000}}/2) * (T_3/1000)^2) + ((d_{CO_2_{1200-6000}}/3) * (T_3/1000)^3) - ((e_{CO_2_{1200-6000}})/(2 * (T_3/1000)^2))) + (g_{CO_2_{1200-6000}})/28) + (H_2O * ((a_{H_2O_{500-1700}} * LN(T_3/1000)) + (b_{H_2O_{500-1700}} * (T_3/1000)) + ((c_{H_2O_{500-1700}}/2) * (T_3/1000)^2) + ((d_{H_2O_{500-1700}}/3) * (T_3/1000)^3) - ((e_{H_2O_{500-1700}})/(2 * (T_3/1000)^2))) + (g_{H_2O_{500-1700}})/18) + (Arg * ((a_{Arg_{298-6000}} * LN(T_3/1000)) + (b_{Arg_{298-6000}} * (T_3/1000)) + ((c_{Arg_{298-6000}}/2) * (T_3/1000)^2) + ((d_{Arg_{298-6000}}/3) * (T_3/1000)^3) - ((e_{Arg_{298-6000}})/(2 * (T_3/1000)^2))) + (g_{Arg_{298-6000}})/40)$$

"Estado 4"

$$h_4 = (N_2 * (((a_{N_2_{500-2000}} * (T_4/1000)) + ((b_{N_2_{500-2000}}/2) * (T_4/1000)^2) + ((c_{N_2_{500-2000}}/3) * (T_4/1000)^3) + ((d_{N_2_{500-2000}}/4) * (T_4/1000)^4) - ((e_{N_2_{500-2000}})/(T_4/1000)) + (f_{N_2_{500-2000}} - (h_{N_2_{500-2000}}) * 1000) + 8663,6/28) + (O_2 * (((a_{O_2_{700-2000}} * (T_4/1000)) + ((b_{O_2_{700-2000}}/2) * (T_4/1000)^2) + ((c_{O_2_{700-2000}}/3) * (T_4/1000)^3) + ((d_{O_2_{700-2000}}/4) * (T_4/1000)^4) - ((e_{O_2_{700-2000}})/(T_4/1000)) + (f_{O_2_{700-2000}} - (h_{O_2_{700-2000}}) * 1000) + 8377,9/32) + (CO_2 * (((a_{CO_2_{298-1200}} * (T_4/1000)) + ((b_{CO_2_{298-1200}}/2) * (T_4/1000)^2) + ((c_{CO_2_{298-1200}}/3) * (T_4/1000)^3) + ((d_{CO_2_{298-1200}}/4) * (T_4/1000)^4) - ((e_{CO_2_{298-1200}})/(T_4/1000)) + (f_{CO_2_{298-1200}} - (h_{CO_2_{298-1200}}) * 1000) + 2189/44) + (H_2O * (((a_{H_2O_{500-1700}} * (T_4/1000)) + ((b_{H_2O_{500-1700}}/2) * (T_4/1000)^2) + ((c_{H_2O_{500-1700}}/3) * (T_4/1000)^3) + ((d_{H_2O_{500-1700}}/4) * (T_4/1000)^4) - ((e_{H_2O_{500-1700}})/(T_4/1000)) + (f_{H_2O_{500-1700}} - (h_{H_2O_{500-1700}}) * 1000) + 1136,3/18) + (Arg * ((a_{Arg_{298-6000}} * LN(T_4/1000)) + (b_{Arg_{298-6000}} * (T_4/1000)) + ((c_{Arg_{298-6000}}/2) * (T_4/1000)^2) + ((d_{Arg_{298-6000}}/3) * (T_4/1000)^3) - ((e_{Arg_{298-6000}})/(2 * (T_4/1000)^2))) + (g_{Arg_{298-6000}})/40)$$

$$1200)/4)*((T_4/1000)^4)) - ((e_{CO2_298-1200})/(T_4/1000)) + (f_{CO2_298-1200}) - (h_{CO2_298-1200}) * 1000) + 2189/44) + (H_2O * (((((a_{H_2O_500-1700}) * (T_4/1000)) + (((b_{H_2O_500-1700})/2) * ((T_4/1000)^2)) + (((c_{H_2O_500-1700})/3) * ((T_4/1000)^3)) + (((d_{H_2O_500-1700})/4) * ((T_4/1000)^4)) - ((e_{H_2O_500-1700})/(T_4/1000)) + (f_{H_2O_500-1700}) - (h_{H_2O_500-1700}) * 1000) + 1136,3/18)) + (Arg * (((((a_{Arg_298-6000}) * (T_4/1000)) + (((b_{Arg_298-6000})/2) * ((T_4/1000)^2)) + (((c_{Arg_298-6000})/3) * ((T_4/1000)^3)) + (((d_{Arg_298-6000})/4) * ((T_4/1000)^4)) - ((e_{Arg_298-6000})/(T_4/1000)) + (f_{Arg_298-6000}) - (h_{Arg_298-6000}) * 1000) + 5980,9/40)) \{kJ/kg\}$$

$$s_4 = (N_2 * (((a_{N_2_500-2000}) * LN(T_4/1000)) + ((b_{N_2_500-2000}) * (T_4/1000)) + (((c_{N_2_500-2000})/2) * ((T_4/1000)^2)) + (((d_{N_2_500-2000})/3) * ((T_4/1000)^3)) - ((e_{N_2_500-2000})/(2 * ((T_4/1000)^2))) + (g_{N_2_500-2000})/28) + (O_2 * (((a_{O_2_700-2000}) * LN(T_4/1000)) + ((b_{O_2_700-2000}) * (T_4/1000)) + (((c_{O_2_700-2000})/2) * ((T_4/1000)^2)) + (((d_{O_2_700-2000})/3) * ((T_4/1000)^3)) - ((e_{O_2_700-2000})/(2 * ((T_4/1000)^2))) + (g_{O_2_700-2000})/32) + (CO_2 * (((a_{CO_2_298-1200}) * LN(T_4/1000)) + ((b_{CO_2_298-1200}) * (T_4/1000)) + (((c_{CO_2_298-1200})/2) * ((T_4/1000)^2)) + (((d_{CO_2_298-1200})/3) * ((T_4/1000)^3)) - ((e_{CO_2_298-1200})/(2 * ((T_4/1000)^2))) + (g_{CO_2_298-1200})/28) + (H_2O * (((a_{H_2O_500-1700}) * LN(T_4/1000)) + ((b_{H_2O_500-1700}) * (T_4/1000)) + (((c_{H_2O_500-1700})/2) * ((T_4/1000)^2)) + (((d_{H_2O_500-1700})/3) * ((T_4/1000)^3)) - ((e_{H_2O_500-1700})/(2 * ((T_4/1000)^2))) + (g_{H_2O_500-1700})/18) + (Arg * (((a_{Arg_298-6000}) * LN(T_4/1000)) + ((b_{Arg_298-6000}) * (T_4/1000)) + (((c_{Arg_298-6000})/2) * ((T_4/1000)^2)) + (((d_{Arg_298-6000})/3) * ((T_4/1000)^3)) - ((e_{Arg_298-6000})/(2 * ((T_4/1000)^2))) + (g_{Arg_298-6000})/40))$$

"Balanço exergetico de cada componente"

"Compressor"

$$E_{f1c} = 0$$

$$E_{f2c} = (h_2 - h_1) - T_0 * (s_2 - s_1)$$

$$E_{qc} = ((-R_{ar}/28) * T_0 * xi_{N_2} * LN(xi_{N_2})) + ((-R_{ar}/32) * T_0 * xi_{O_2} * LN(xi_{O_2})) + ((-R_{ar}/44) * T_0 * xi_{CO_2} * LN(xi_{CO_2})) + ((-R_{ar}/18) * T_0 * xi_{H_2O} * LN(xi_{H_2O})) + ((-R_{ar}/40) * T_0 * xi_{Arg} * LN(xi_{Arg}))$$

$$E_{1_comp} = (-w_{comp} + E_{qc}) * m_{dot_ar_real}$$

$$E_{2_comp} = (E_{f2c} + E_{qc}) * m_{dot_ar_real}$$

$$Irreversibilidade_{comp} = E_{1_comp} - E_{2_comp}$$

$$\eta_{ex_comp} = (E_{2_comp} / E_{1_comp}) * 100$$

"Câmara de combustão"

$$E_{fgases} = (h_3 - h_{0g}) - T_0 * (s_3 - s_{0g})$$

$$E_{qcc} = ((-R_{gases}/28) * T_0 * N_2 * LN(N_2)) + ((-R_{gases}/32) * T_0 * O_2 * LN(O_2)) + ((-R_{gases}/44) * T_0 * CO_2 * LN(CO_2)) + ((-R_{gases}/18) * T_0 * H_2O * LN(H_2O)) + ((-R_{gases}/40) * T_0 * Arg * LN(Arg))$$

$$E_{2_cc} = (E_{fgases} + E_{qcc}) * m_{dot_gases}$$

{combustível}

$$\text{Carbono} = 0,375$$

$$\text{Hidrogênio} = 0,125$$

$$\text{Oxigênio} = 0,5$$

$$S = 0$$

$$\text{fator} = 1,041 + 0,1728 * (\text{Hidrogênio}/\text{Carbono}) + 0,0432 * (\text{Oxigênio}/\text{Carbono}) + (0,2169 * (S/\text{Carbono}) * (1 - (2,0628 * (\text{Hidrogênio}/\text{Carbono}))))$$

$$E_{qcombustível} = (LHV * \text{fator}) * m_{dot_combustível}$$

$$E_{1_cc} = E_{2_comp} + E_{qcombustível}$$

$$Irreversibilidade_{cc} = E_{1_cc} - E_{2_cc}$$

$$\eta_{ex_cc} = (E_{2_cc} / E_{1_cc}) * 100$$

"Turbina"

$$E_{ft} = (h_4 - h_{0g}) - T_0 * (s_4 - s_{0g})$$

$$E_{qt} = E_{qcc}$$

$$E_{2_turb} = (E_{ft} + E_{qt}) * m_{dot_gases}$$

$$E1_{\text{turb}} = E2_{\text{cc}}$$

$$\text{Irreversibilidade}_{\text{turb}} = E1_{\text{turb}} - E2_{\text{turb}}$$

$$\text{eta}_{\text{ex}_{\text{turb}}} = (E2_{\text{turb}} / E1_{\text{turb}}) * 100$$

Resultado

Unit Settings: [kJ]/[C]/[kPa]/[kg]/[degrees]

$AC_{\text{estequiométrica}} = 11,79$
 $Arg_{O_2} = 0,06781$
 $a_{CO_2,298} = 1225$
 $a_{N_2,500} = 2020$
 $b = 2,886$
 $b_{CO_2,298} = 1255$
 $b_{N_2,500} = 2020$
 $c = 0,004255$
 $CO_2_{O_2} = 0,002211$
 $cp_{\text{gases}} = 1,317$
 $c_{Arg,298} = 6000$
 $c_{H_2O,500} = 1707$
 $c_{O_2,100} = 757,9$
 $d_{Arg,298} = 6000$
 $d_{H_2O,500} = 1697$
 $d_{O_2,100} = 663,5$
 $E1_{\text{cc}} = 34936$
 $E2_{\text{cc}} = 23868$
 $Ef1c = 0$
 $Eft = 259,9$
 $Eq_{\text{combustível}} = 29696$
 $\eta_{\text{comp}} = 0,9$
 $\eta_{\text{ex,turb}} = 44,05$
 $\text{excesso} = 1,924$
 $e_{CO_2,298} = 1200$
 $e_{N_2,500} = 2001$
 $f = 1,004$
 $f_{CO_2,1200} = 5574$
 $f_{N_2,100} = 491,3$

$AC_{\text{real}} = 22,69$
 $a_{Arg,298} = 6021$
 $a_{H_2O,500} = 1730$
 $a_{O_2,100} = 731,3$
 $b_{Arg,298} = 6000$
 $b_{H_2O,500} = 1707$
 $b_{O_2,100} = 679,8$
 $\text{Carbono} = 0,375$
 $cp_{12} = 1,054$
 $cp_{\text{turb}} = 1,344$
 $c_{CO_2,1200} = 6000$
 $c_{N_2,100} = 490,4$
 $c_{O_2,700} = 1996$
 $d_{CO_2,1200} = 6000$
 $d_{N_2,100} = 516,6$
 $d_{O_2,700} = 2001$
 $E1_{\text{comp}} = 12042$
 $E2_{\text{comp}} = 5240$
 $Ef2c = 122$
 $Eqc = 59,13$
 $Eq_{\text{t}} = 88,29$
 $\eta_{\text{ex,cc}} = 68,32$
 $\eta_{\text{t}} = 0,82$
 $e_{Arg,298} = 6000$
 $e_{H_2O,500} = 1700$
 $e_{O_2,100} = 700$
 $\text{fator} = 1,156$
 $f_{CO_2,298} = 796,4$
 $f_{N_2,500} = 1995$

$Arg = 0,008257$
 $a_{CO_2,1200} = 6058$
 $a_{N_2,100} = 529$
 $a_{O_2,700} = 2030$
 $b_{CO_2,1200} = 6003$
 $b_{N_2,100} = 501,9$
 $b_{O_2,700} = 2009$
 $CO_2 = 0,06355$
 $cp_{12s} = 1,051$
 $cp_{\text{turb,s}} = 1,329$
 $c_{CO_2,298} = 1166$
 $c_{N_2,500} = 1991$
 $d = 0,4297$
 $d_{CO_2,298} = 1208$
 $d_{N_2,500} = 2001$
 $e = 0,1305$
 $E1_{\text{turb}} = 23868$
 $E2_{\text{turb}} = 10514$
 $Efg_{\text{gases}} = 702$
 $Eq_{\text{cc}} = 88,29$
 $\eta_{\text{ciclo}} = 0,3136$
 $\eta_{\text{ex,comp}} = 43,52$
 $\eta_{\text{térmica,turb}} = 0,3076$
 $e_{CO_2,1200} = 5994$
 $e_{N_2,100} = 500$
 $e_{O_2,700} = 1999$
 $f_{Arg,298} = 5994$
 $f_{H_2O,500} = 1449$
 $f_{O_2,100} = 691,1$

$f_{O_2,700} = 1989$
 $g_{CO_2,1200} = 6264$
 $g_{N_2,100} = 726,4$
 $g_{O_2,700} = 2236$
 $H_2O_{O_2} = 0,2233$
 $h_{O_2} = 238,2$
 $h_3 = 1484$
 $h_{CO_2,1200} = 5606$
 $h_{N_2,100} = 500$
 $h_{O_2,700} = 2000$
 $Irreversibilidade_{comp} = 6801$
 $k = 1,382$
 $k_{gases} = 1,289$
 $MM_{CH_3OH} = 32$
 $MM_{N_2} = 28$
 $\dot{m}_{ar,real} = 28,93$
 $\dot{m}_{N_2} = 6,291$
 $n_{estágios} = 10$
 $Pf1 = 131,6$
 $Pf3 = 222,2$
 $Pf6 = 487,2$
 $Pf9 = 1068$
 $P_1 = 101,3$
 $P_4 = 101,3$
 $Razão_p = 13,7$
 $S = 0$
 $s_2 = 7,622$
 $T_{12,média} = 441,6$
 $T_{2s,adm} = 595$
 $T_{4s} = 700$

$T_{X,comp,estágio} = 1,299$
 $T_{12} = 455,6$
 $T_{34} = 986,3$
 $volume_{gases} = 15,8$
 $\dot{W}_{turbina} = 7900$
 $w_{turbina} = 623,8$
 $\xi_{CO_2} = 0,0003$
 $\xi_{O_2} = 0,2035$

$g = 2,43$
 $g_{CO_2,298} = 1428$
 $g_{N_2,500} = 2212$
 $h = 10,85$
 $Hidrogênio = 0,125$
 $h_1 = 280,4$
 $h_4 = 861,5$
 $h_{CO_2,298} = 806,5$
 $h_{N_2,500} = 2000$
 $i = 1,386$
 $Irreversibilidade_{turb} = 13354$
 $k_{ar} = 1,38$
 $LHV = 20149$
 $MM_{CO_2} = 44$
 $MM_{O_2} = 32$
 $\dot{m}_{combustível} = 1,275$
 $\dot{m}_{O_2} = 1,912$
 $O_2 = 0,08772$
 $Pf10 = 1388$
 $Pf4 = 288,7$
 $Pf7 = 633$
 $Pintermediária = 427,5$
 $P_2 = 1388$
 $Q = 850,5$
 $R_{ar} = 8,315$
 $s_{O_2} = 7,352$
 $s_3 = 9,241$
 $T_{23,média} = 948,5$
 $T_{2,adm} = 623$
 $T_{4,adm} = 810$

$T_0 = 288,2$
 $T_2 = 626,9$
 $T_{34m} = 1041$
 $w_{comp} = -357,2$
 $\dot{W}_{térmica,t} = 25684$
 $\xi_{ar} = 28,63$
 $\xi_{H_2O} = 0,0303$

$g_{Arg,298} = 6180$
 $g_{H_2O,500} = 1923$
 $g_{O_2,100} = 946,8$
 $H_2O = 0,1538$
 $HR = 11704$
 $h_2 = 638,3$
 $h_{Arg,298} = 6000$
 $h_{H_2O,500} = 1458$
 $h_{O_2,100} = 700$
 $Irreversibilidade_{cc} = 11068$
 $j = 0,1305$
 $k_g = 1,285$
 $MM_{Arg} = 40$
 $MM_{H_2O} = 18$
 $\dot{m}_{ar,est} = 15,03$
 $\dot{m}_{gases} = 30,2$
 $N_2 = 0,6867$
 $Oxigênio = 0,5$
 $Pf2 = 171$
 $Pf5 = 375$
 $Pf8 = 822,4$
 $P_0 = 101,3$
 $P_3 = 1388$
 $razão_{consumo} = 0,5725$
 $R_{gases} = 8,315$
 $s_1 = 6,803$
 $s_4 = 8,614$
 $T_{2s} = 594,1$
 $T_{3,adm} = 1270$
 $total_{O_2} = 6,83$

$T_1 = 288,2$
 $T_3 = 1273$
 $T_4 = 808,4$
 $\dot{W} = 8053$
 $w_{líquido} = 266,7$
 $\xi_{Arg} = 0,0092$
 $\xi_{N_2} = 0,7567$

APÊNDICE E: Código utilizado para a análise exergoeconômica no EES.

```

B_dot_entrada_compressor =12042 {kW}
m_dot_ar =28,93 {kg/s}
B_dot_saída_compressor=5240 {kW}
w_comp=357,2 {kJ/kg}
Z_dot_comp=0,001784839 {$/h}
B_dot_saída_cc=23868 {kW}
B_dot_saída_turb=10514{kW}
m_dot_gases =30,2 {kg/s}
B_dot_comb=29696 {kW}
m_dot_comb=1,275 {kg/s}
custo_kg=0,4 {$/kg}
Z_dot_cc=0,003207197 {$/h}
w_turb=623,8 {kJ/kg}
Z_dot_tg=1,563231927 {$/h}

```

```

I_comp=6801 [kW]
I_cc=11068 [kW]
I_turb=13354 [kW]

```

```

B_dot_entrada_compressor =12042 {kW}
m_dot_ar =28,93 {kg/s}
B_dot_saída_compressor=5240 {kW}
w_comp=357,2 {kJ/kg}
Z_dot_comp=0,001784839 {$/h}
B_dot_saída_cc=23868 {kW}
B_dot_saída_turb=10514{kW}
m_dot_gases =30,2 {kg/s}
B_dot_comb=29696 {kW}
m_dot_comb=1,275 {kg/s}
custo_kg=0,4 {$/kg}
Z_dot_cc=0,003207197 {$/h}
w_turb=623,8 {kJ/kg}
Z_dot_tg=1,563231927 {$/h}

```

```
{produto=comb+z}
```

```

{Compressor}
(c2* B_dot_saída_compressor)-(c1* B_dot_entrada_compressor)=(m_dot_ar *c36*
w_comp)+(Z_dot_comp/3600)
c1=0
c36=c37 {$/kJ}

```

```

{Câmara de combustão}
(c3* B_dot_saída_cc)-(c2* B_dot_saída_compressor)=(c31* B_dot_comb)+(Z_dot_cc/3600)
c31=(m_dot_comb*custo_kg)/B_dot_comb

```

```

{Turbina à gás}
m_dot_gases *c37*w_turb =(c3* B_dot_saída_cc)-(c4* B_dot_saída_turb)+(Z_dot_tg/3600)
c3=c4

```

```

C_dot_entrada_compressor= B_dot_entrada_compressor*c1*3600 {$/h}
C_dot_saída_compressor= B_dot_saída_compressor*c2*3600
C_dot_36= w_comp *(c36)*3600* m_dot_ar
C_dot_saída_cc= B_dot_saída_cc*c3*3600
C_dot_comb= B_dot_comb*c31*3600

```

$$C_{\text{dot}_37} = w_{\text{turb}} * (c_{37}) * 3600 * m_{\text{dot}_\text{gases}}$$

$$C_{\text{dot_saída_turb}} = B_{\text{dot_saída_turb}} * c_3 * 3600$$

$$c_{\text{p_compressor}} = 10^6 * (C_{\text{dot_saída_compressor}} / ((B_{\text{dot_saída_compressor}} * 3600))) \{ \text{U\$/GJ} \}$$

$$c_{\text{f_compressor}} = 10^6 * (C_{\text{dot}_36} / (w_{\text{comp}} * m_{\text{dot_ar}} * 3600)) \{ \text{U\$/GJ} \}$$

$$c_{\text{p_cc}} = 10^6 * ((C_{\text{dot_saída_cc}} - C_{\text{dot_saída_compressor}}) / ((B_{\text{dot_saída_cc}} - B_{\text{dot_saída_compressor}}) * 3600)) \{ \text{U\$/GJ} \}$$

$$c_{\text{f_cc}} = 10^6 * (C_{\text{dot_comb}} / (B_{\text{dot_comb}} * 3600)) \{ \text{U\$/GJ} \}$$

$$c_{\text{p_turb}} = 10^6 * (C_{\text{dot}_37} / (w_{\text{turb}} * m_{\text{dot}_\text{gases}} * 3600)) \{ \text{U\$/GJ} \}$$

$$c_{\text{f_turb}} = 10^6 * ((C_{\text{dot_saída_cc}} - C_{\text{dot_saída_turb}}) / ((B_{\text{dot_saída_cc}} - B_{\text{dot_saída_turb}}) * 3600)) \{ \text{U\$/GJ} \}$$

$$r_{\text{k_compressor}} = (c_{\text{p_compressor}} - c_{\text{f_compressor}}) / c_{\text{f_compressor}} \{ \%$$

$$r_{\text{k_cc}} = (c_{\text{p_cc}} - c_{\text{f_cc}}) / c_{\text{f_cc}}$$

$$r_{\text{k_turb}} = (c_{\text{p_turb}} - c_{\text{f_turb}}) / c_{\text{f_turb}}$$

{valores da exergia destruída obtida na análise exergetica}

$$I_{\text{comp}} = 6801 \text{ [kW]}$$

$$I_{\text{cc}} = 11068 \text{ [kW]}$$

$$I_{\text{turb}} = 13354 \text{ [kW]}$$

$$f_{\text{k_compressor}} = Z_{\text{dot_comp}} / (((c_{\text{f_compressor}} / 10^6) * I_{\text{comp}} * 3600) + Z_{\text{dot_comp}}) \{ \%$$

$$f_{\text{k_cc}} = Z_{\text{dot_cc}} / (((c_{\text{f_cc}} / 10^6) * I_{\text{cc}} * 3600) + Z_{\text{dot_cc}})$$

$$f_{\text{k_turb}} = Z_{\text{dot_tg}} / (((c_{\text{f_turb}} / 10^6) * I_{\text{turb}} * 3600) + Z_{\text{dot_tg}})$$

$$c_{\text{d_comp}} = (I_{\text{comp}} * 3600) * (c_{\text{f_compressor}} / 10^6) \{ \text{U\$/h} \}$$

$$c_{\text{d_cc}} = (I_{\text{cc}} * 3600) * (c_{\text{f_cc}} / 10^6)$$

$$c_{\text{d_turb}} = (I_{\text{turb}} * 3600) * (c_{\text{f_turb}} / 10^6)$$

$\dot{B}_{\text{comb}} = 29696$	$\dot{B}_{\text{entrada,compressor}} = 12042$	$\dot{B}_{\text{saída,cc}} = 23868$
$\dot{B}_{\text{saída,compressor}} = 5240$	$\dot{B}_{\text{saída,turb}} = 10514$	$c_1 = 0$
$c_2 = 0,00004316$	$c_3 = 0,00003084$	$c_{31} = 0,00001717$
$c_{36} = 0,00002189$	$c_{37} = 0,00002189$	$c_4 = 0,00003084$
$\text{custo}_{\text{kg}} = 0,4$	$\dot{C}_{36} = 814,2$	$\dot{C}_{37} = 1484$
$\dot{C}_{\text{comb}} = 1836$	$\dot{C}_{\text{entrada,compressor}} = 0$	$\dot{C}_{\text{saída,cc}} = 2650$
$\dot{C}_{\text{saída,compressor}} = 814,2$	$\dot{C}_{\text{saída,turb}} = 1167$	$c_{\text{d,cc}} = 684,3$
$c_{\text{d,comp}} = 535,9$	$c_{\text{d,turb}} = 1483$	$c_{\text{f,cc}} = 17,17$
$c_{\text{f,compressor}} = 21,89$	$c_{\text{f,turb}} = 30,84$	$c_{\text{p,cc}} = 27,38$
$c_{\text{p,compressor}} = 33,25$	$c_{\text{p,turb}} = 21,89$	$f_{\text{k,cc}} = 0,000004687$
$f_{\text{k,compressor}} = 0,000003331$	$f_{\text{k,turb}} = 0,001053$	$I_{\text{cc}} = 11068 \text{ [kW]}$
$I_{\text{comp}} = 6801 \text{ [kW]}$	$I_{\text{turb}} = 13354 \text{ [kW]}$	$m_{\text{ar}} = 28,93$
$m_{\text{comb}} = 1,275$	$m_{\text{gases}} = 30,2$	$r_{\text{k,cc}} = 0,5942$
$r_{\text{k,compressor}} = 0,5192$	$r_{\text{k,turb}} = -0,2904$	$w_{\text{comp}} = 357,2$
$w_{\text{turb}} = 623,8$	$Z_{\text{cc}} = 0,003207$	$Z_{\text{comp}} = 0,001785$
$Z_{\text{tg}} = 1,563$		

APÊNDICE F: Código utilizado para a análise exergoambiental no EES.

$B_{\text{dot_entrada_compressor}} = 12042 \text{ {kW}}$
 $m_{\text{dot_ar}} = 28,93 \text{ {kg/s}}$
 $B_{\text{dot_saída_compressor}} = 5240 \text{ {kW}}$
 $w_{\text{comp}} = 357,2 \text{ {kJ/kg}}$
 $Y_{\text{dot_comp}} = 65,1 \text{ {mPts/h}}$
 $B_{\text{dot_saída_cc}} = 23868 \text{ {kW}}$
 $B_{\text{dot_saída_turb}} = 10514 \text{ {kW}}$
 $m_{\text{dot_gases}} = 30,2 \text{ {kg/s}}$
 $B_{\text{dot_comb}} = 29696 \text{ {kW}}$
 $m_{\text{dot_comb}} = 1,275 \text{ {kg/s}}$
 $b_{\text{kg}} = 153 \text{ {mPt/kg}}$
 $Y_{\text{dot_cc}} = 337,6 \text{ {mPts/h}}$
 $w_{\text{turb}} = 601,4 \text{ {kJ/kg}}$
 $Y_{\text{dot_tg}} = 624,7 \text{ {mPts/h}}$
 $B_{\text{pf}} = 7,06 \text{ {mPts/h}}$

{produto=comb+Y}

{Compressor}

$(b2 * B_{\text{dot_saída_compressor}}) - (b1 * B_{\text{dot_entrada_compressor}}) = (m_{\text{dot_ar}} * b36 * w_{\text{comp}}) + (Y_{\text{dot_comp}} / 3600)$
 $b1 = 0$
 $b36 = b37$

{Câmara de combustão}

$(b3 * B_{\text{dot_saída_cc}}) - (b2 * B_{\text{dot_saída_compressor}}) = (b31 * B_{\text{dot_comb}}) + (Y_{\text{dot_cc}} / 3600) + B_{\text{pf}}$
 $b31 = (m_{\text{dot_comb}} * b_{\text{kg}}) / B_{\text{dot_comb}}$

{Turbina à gás}

$m_{\text{dot_gases}} * b37 * w_{\text{turb}} = (b3 * B_{\text{dot_saída_cc}}) - (b4 * B_{\text{dot_saída_turb}}) + (Y_{\text{dot_tg}} / 3600)$
 $b3 = b4$

$B_{\text{dot_1}} = B_{\text{dot_entrada_compressor}} * b1 * 3600$

$B_{\text{dot_2}} = B_{\text{dot_saída_compressor}} * b2 * 3600$

$B_{\text{dot_36}} = w_{\text{comp}} * (b36) * 3600 * m_{\text{dot_ar}}$

$B_{\text{dot_3}} = B_{\text{dot_saída_cc}} * b3 * 3600$

$B_{\text{dot_31}} = B_{\text{dot_comb}} * b31 * 3600$

$B_{\text{dot_37}} = w_{\text{turb}} * (b37) * 3600 * m_{\text{dot_gases}}$

$B_{\text{dot_4}} = B_{\text{dot_saída_turb}} * b3 * 3600$

$b_{\text{p_compressor}} = 10^6 * ((B_{\text{dot_2}} - B_{\text{dot_1}}) / ((B_{\text{dot_entrada_compressor}} - B_{\text{dot_saída_compressor}}) * 3600))$

$b_{\text{f_compressor}} = 10^6 * (B_{\text{dot_36}} / (w_{\text{comp}} * m_{\text{dot_ar}} * 3600)) \text{ {U$/GJ}}$

$b_{\text{p_cc}} = 10^6 * (B_{\text{dot_3}} - B_{\text{dot_2}}) / (((B_{\text{dot_saída_cc}} - B_{\text{dot_saída_compressor}}) * 3600))$

$b_{\text{f_cc}} = 10^6 * (B_{\text{dot_31}} / (B_{\text{dot_comb}} * 3600)) \text{ {U$/GJ}}$

$b_{\text{p_turb}} = 10^6 * (B_{\text{dot_37}} / (w_{\text{turb}} * m_{\text{dot_gases}} * 3600)) \text{ {U$/GJ}}$

$b_{\text{f_turb}} = 10^6 * ((B_{\text{dot_3}} - B_{\text{dot_4}}) / (((B_{\text{dot_saída_cc}} - B_{\text{dot_saída_turb}}) * 3600)))$

$r_{\text{bk_compressor}} = (b_{\text{p_compressor}} - b_{\text{f_compressor}}) / b_{\text{f_compressor}} \text{ {%}}$

$r_{\text{bk_cc}} = (b_{\text{p_cc}} - b_{\text{f_cc}}) / b_{\text{f_cc}}$

$r_{\text{bk_turb}} = (b_{\text{p_turb}} - b_{\text{f_turb}}) / b_{\text{f_turb}}$

{valores da exergia destruída obtida na análise exergética}

$I_{\text{comp}} = 6801 \text{ [kW]}$

$I_{cc}=11068$ [kW]
 $I_{turb}=13354$ [kW]

$f_{bk_compressor}=Y_dot_comp/(((b_f_compressor/10^6)*I_comp *3600)+Y_dot_comp)\{\%\}$
 $f_{bk_cc}=(Y_dot_cc+B_pf)/(((b_f_cc/10^6)*I_cc*3600)+Y_dot_cc+B_pf)$
 $f_{bk_turb}=Y_dot_tg/(((b_f_turb/10^6)*I_turb*3600)+Y_dot_tg)$

$B_d_comp=(I_comp*3600)*(b_f_compressor/10^6)$
 $B_d_cc=(I_cc*3600)*(b_f_cc/10^6)$
 $B_d_turb=(I_turb *3600)*(b_f_turb/10^6)$

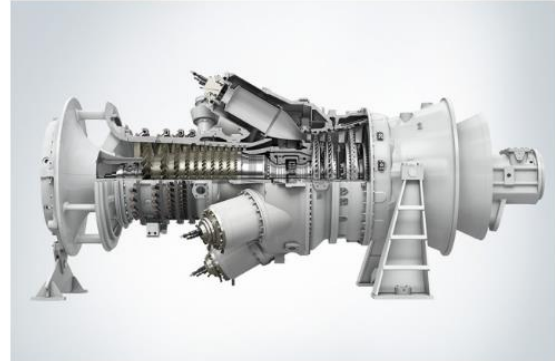
Unit Settings: [kJ]/[C]/[kPa]/[kg]/[degrees]

$b1 = 0$	$b2 = 0,01806$	$b3 = 0,01244$
$b31 = 0,006569$	$b36 = 0,009154$	$b37 = 0,009154$
$b4 = 0,01244$	$\dot{E}_1 = 0$	$\dot{E}_2 = 340602$
$\dot{E}_3 = 1,069E+06$	$\dot{E}_{31} = 702270$	$\dot{E}_{36} = 340537$
$\dot{E}_{37} = 598514$	$\dot{E}_4 = 470736$	$\dot{E}_{comb} = 29696$
$\dot{E}_{entrada,compressor} = 12042$	$\dot{E}_{saída,cc} = 23868$	$\dot{E}_{saída,compressor} = 5240$
$\dot{E}_{saída,turb} = 10514$	$B_{d,cc} = 261743$	$B_{d,comp} = 224118$
$B_{d,turb} = 597889,350$	$b_{f,cc} = 6569$	$b_{f,compressor} = 9154$
$b_{f,turb} = 12437$	$b_{kg} = 153$	$B_{pf} = 7,06$
$b_{p,cc} = 10856$	$b_{p,compressor} = 13909$	$b_{p,turb} = 9154$
$f_{bk,cc} = 0,001315$	$f_{bk,compressor} = 0,0002904$	$f_{bk,turb} = 0,001044$
$I_{cc} = 11068$ [kW]	$I_{comp} = 6801$ [kW]	$I_{turb} = 13354$ [kW]
$m_{ar} = 28,93$	$m_{comb} = 1,275$	$\dot{m}_{gases} = 30,2$
$r_{bk,cc} = 0,6526$	$r_{bk,compressor} = 0,5195$	$r_{bk,turb} = -0,264$
$w_{comp} = 357,2$	$w_{turb} = 601,4$	$\dot{Y}_{cc} = 337,6$
$\dot{Y}_{comp} = 65,1$	$\dot{Y}_{tg} = 624,7$	

ANEXO A: Turbina SGT-300.



SGT-300 core engine: single-shaft version



SGT-300 core engine: twin-shaft version

Technical data

SIMPLE CYCLE POWER GENERATION

MECHANICAL DRIVE

PHYSICAL DIMENSIONS

Performance data for simple cycle power generation

Gross power output	7.9 MW(e)
Fuel*	Natural gas, liquid fuel, dual fuel
Frequency	50/60 Hz
Gross efficiency	30.8%
Gross heat rate	11,704 kJ/kWh
Turbine speed	14,045 rpm
Pressure ratio	13.7 : 1
Exhaust mass flow	30.2 kg/s
Exhaust temperature	543 °C (993 °F)
NO _x emissions**	≤ 15 ppmvd

*Other fuels on request; automatic changeover from primary to secondary fuel at any load

**NO_x emissions at 15% O₂ on fuel gas (with DLE)

Technical data

SIMPLE CYCLE POWER GENERATION

MECHANICAL DRIVE

PHYSICAL DIMENSIONS

Performance data for mechanical drive

	8 MW version	9 MW version
Gross power output	8.4 MW	9.1 MW
Fuel*	Natural gas, liquid fuel, dual fuel	Natural gas, liquid fuel, dual fuel
Gross efficiency	35.3%	36.0%
Gross heat rate	10,204 kJ/kWh	10,003 kJ/kWh
Turbine speed	5,750 – 11,500 – 12,075 rpm	5,750 – 11,500 – 12,075 rpm
Pressure ratio	13.5 : 1	14.1 : 1
Exhaust mass flow	29.5 kg/s	30.4 kg/s
Exhaust temperature	490 °C (914 °F)	504 °C (939 °F)
NO _x emissions**	≤ 15 ppmvd	≤ 15 ppmvd

*Other fuels on request; automatic changeover from primary to secondary fuel at any load

**NO_x emissions at 15% O₂ on fuel gas (with DLE)

Technical data

SIMPLE CYCLE POWER GENERATION

MECHANICAL DRIVE

PHYSICAL DIMENSIONS

Physical dimensions and weight

	Classic package*	Single lift package**
Approx. weight	285,000 kg (628,300 lb)	305,000 kg (672,400 lb)
Length	20.8 m (68 ft)	22.0 m (72 ft)
Width	7.3 m (24 ft)	4.7 m (16 ft)
Height	6.6 m (22 ft)	5.3 m (17 ft)

Dimensions exclude inlet filter housing and exhaust stack. For power generation, the AC generator is included. For mechanical drive, the driven equipment is excluded.

