



UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA
“JÚLIO DE MESQUITA FILHO”
CAMPUS DE GUARATINGUETÁ

FELLIPE SARTORI DA SILVA

**DETERMINAÇÃO DO CUSTO DE ENERGIA GERADA ATRAVÉS DA
UTILIZAÇÃO DE CÉLULAS A COMBUSTÍVEL DE CARBONATO FUNDIDO E
TURBINA A VAPOR EM UM CICLO COMBINADO**

Guaratinguetá - SP
2018

Fellipe Sartori da Silva

**DETERMINAÇÃO DO CUSTO DE ENERGIA GERADA ATRAVÉS DA
UTILIZAÇÃO DE CÉLULAS A COMBUSTÍVEL DE CARBONATO FUNDIDO E
TURBINA A VAPOR EM UM CICLO COMBINADO**

Trabalho de Mestrado apresentado ao
Conselho de Curso de Pós Graduação em
Engenharia Mecânica da Faculdade de
Engenharia do Campus de Guaratinguetá,
Universidade Estadual Paulista, como parte dos
requisitos para obtenção do diploma de Mestrado

Orientador (a): Prof. Dr. José Alexandre Matelli

Guaratinguetá - SP

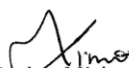
2018

Silva, Fellipe Sartori da
S586d Determinação do custo de energia gerada através da utilização de células a combustível de carbonato fundido e turbina a vapor em um ciclo combinado. / Fellipe Sartori da Silva – Guaratinguetá, 2018.
113 f : il.
Bibliografia: f. 81-89

Dissertação (Mestrado) – Universidade Estadual Paulista, Faculdade de Engenharia de Guaratinguetá, 2018.
Orientador: Prof. Dr. José Alexandre Matelli

1. Células à combustível. 2. Carbonatos. 3. Turbinas a vapor.
I. Título.

CDU 662.7(043)


Luciana Máximo
Bibliotecária/CRB-8 3595

FELLIPE SARTORI DA SILVA

ESTA DISSERTAÇÃO FOI JULGADA ADEQUADA PARA A OBTENÇÃO DO TÍTULO DE
"MESTRE EM ENGENHARIA MECÂNICA"

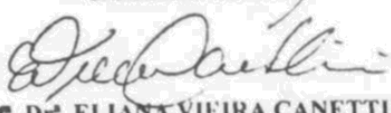
PROGRAMA: ENGENHARIA MECÂNICA
ÁREA: ENERGIA

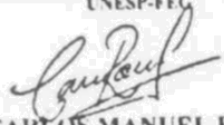
APROVADA EM SUA FORMA FINAL PELO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO


Prof. Dr. Ana Paula Rosifin/Alves Claro
Coordenadora

BANCA EXAMINADORA:


Prof. Dr. JOSÉ ALEXANDRE MATELLI
Orientador / UNESP-FEG


Prof. Dr. ELIANA VIEIRA CANETTIERI
UNESP-FEG


Prof. Dr. CARLOS MANUEL ROMERO LUNA
UNESP/ITAPEVA

Fevereiro de 2018

DADOS CURRICULARES

FELLIPE SARTORI DA SILVA

NASCIMENTO 16.10.1991 – São Paulo / SP

FILIAÇÃO Edson Pereira da Silva
Alva Valéria Sartori

2010/2015 Graduação em Engenharia Mecânica
Faculdade de Engenharia de Guaratinguetá da Universidade Estadual
Paulista “Julio de Mesquita Filho”

2016/2018 Mestrado em Engenharia Mecânica na área de Transmissão e Conversão de Energia
Faculdade de Engenharia de Guaratinguetá da Universidade Estadual Paulista “Julio de Mesquita Filho”

Dedico este trabalho à minha noiva, Maria Paula de Oliveira Campos Cintra, quem mais esteve do meu lado e suportou junto comigo todas as dificuldades que tive no decorrer do caminho.

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente à minha família, em especial aos meus pais Alva Valéria Sartori e Edson Pereira da Silva, por todo apoio, incentivo e suporte que me foi dado, não só na pós-graduação.

Ao meu orientador, Prof. Dr. José Alexandre Matelli, pela oportunidade de trabalhar ao seu lado e sempre ser solícito e dedicado ao projeto.

Ao Prof. Dr. José Antônio Perrella Balestieri, pela atenção e ajuda no desenvolvimento do trabalho.

À Prof^a. Dr^a. Eliana Vieira Canettieri, pelas orientações em diversas situações e oportunidade de estagiar em suas disciplinas, auxiliando na minha formação como professor.

Aos meus companheiros de sala, Mateus Dias Ribeiro, Caroline Mendonça Araujo Paixão e, por um período de tempo mais curto, Pedro Paulo Rossi, que tornaram os dias de trabalho mais leves e divertidos.

A todos os funcionários da Faculdade de Engenharia de Guaratinguetá, pelo suporte e pela dedicação.

A todos os moradores da República Arapuça, na qual passei 8 anos da minha vida, por terem sido minha família nesta cidade.

Ao meu irmão, Frederico Sartori da Silva, pelo apoio e companheirismo de sempre.

Aos meus sogros, Tarcísio Galvão de Campos Cintra e Maria Ângela de Oliveira Campos Cintra, e às minhas cunhadas, Maria Carolina de Oliveira Campos Cintra, Maria Júlia de Oliveira Campos Cintra e Natália Lima Fernandes por todo o apoio, conversas e conselhos.

À minha noiva e futura esposa, Maria Paula de Oliveira Campos Cintra, por ter andado ao meu lado desde o primeiro ano da graduação.

À CAPES, pelo apoio financeiro que possibilitou a realização deste mestrado.

RESUMO

Os modelos energéticos atuais são baseados majoritariamente na utilização de combustíveis fósseis, os quais, além de serem fontes finitas, ainda geram gases poluentes que contribuem para o efeito estufa e, conseqüentemente, para o aquecimento global. As células a combustível, por possuírem alta eficiência de conversão, baixa emissão, simplicidade de operação e flexibilidade em sua utilização, vêm sendo estudadas como opção mais limpa de geração. A célula a combustível de carbonato fundido, em particular, além de ter vantagens estruturais por operar a alta temperatura, possui calor residual que pode ser aproveitado para cogeração. O presente trabalho propõe uma configuração de ciclo combinado de uma célula a combustível de carbonato fundido de 10 MW, que possui reforma interna de gás natural, com um ciclo a vapor que aproveita o calor residual da célula. A reforma a vapor do gás natural, simulada pelo *software STANJAN Chemical Equilibrium Solver*, apresentou valores satisfatórios de produção de H_2 na temperatura de operação da célula. As análises energética e exérgica, simuladas através do *software Engineering Equation Solver (EES)*, apontaram aumentos nas respectivas eficiências globais de 4,8 e 4,6%, respectivamente. A análise exergoeconômica indicou custo de geração de 0,4679 USD/kWh, valor acima das tarifas nacionais. Entretanto, a análise de sensibilidade mostrou que plantas de grande porte com essa configuração podem ser economicamente competitivas em diferentes cenários.

PALAVRAS-CHAVE: Célula a Combustível. Carbonato Fundido. Reforma a Vapor. Ciclo Combinado. Ciclo a Vapor

ABSTRACT

Current researches point to a significant increase in energy demand over the next few years. Energy models are mostly based on fossil fuels, which generates greenhouse gases that contribute to global warming. Thus, it becomes necessary to develop equipment and cycles that operate with greater efficiency, as well as new technologies of energy generation with both fossil and renewable sources. Fuel cells are being widely investigated due to their high conversion efficiency, low emissions, structural simplicity and flexibility. Among several fuel cell types, molten carbonate fuel cell has advantages such as fuel flexibility and high operating temperature, which leads to high thermal energy residue. This residue can be used for cogeneration and combined cycles, in order to enhance the global efficiency. This study aimed to introduce a 10 MW internal reforming molten carbonate fuel cell and steam turbine combined cycle. Steam reforming of natural gas was simulated by STANJAN Chemical Equilibrium Solver and presented satisfactory H₂ production at MCFC operating temperature. Simulation in Engineering Equation Solver (EES) of energetic and exergetic analysis showed efficiency increases of 4,8 and 4,6%, respectively. Exergoeconomic analysis pointed to a 0,4679 USD/kWh power cost. However, sensitivity analysis showed that higher plants can achieve economic viability in different scenarios.

KEYWORDS: Molten Carbonate Fuel Cell. Combined Cycle. Steam Reforming. Rankine Cycle.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 – Aumento da demanda nacional de energia até 2050	14
Figura 2 – Fontes de geração elétrica no Brasil em 2015	15
Figura 3 – Crescimento no consumo nacional de gás natural até 2050	15
Figura 4 – Sistema de geração energética	19
Figura 5 – Geração global de energia elétrica com perdas	20
Figura 6 – Ciclos a vapor e a gás	21
Figura 7 – Princípio da cogeração.....	22
Figura 8 – Consumo global de energia ao longo do tempo.....	23
Figura 9 – Taxa de carbono por hidrogênio de diferentes combustíveis	24
Figura 10 – Quantidade de publicações sobre célula a combustível.....	29
Figura 11 – Esquema de uma célula a combustível	31
Figura 12 – Diagrama energético para uma reação exotérmica simples.....	32
Figura 13 – Curva de polarização de uma célula a combustível.....	33
Figura 14 – Esquema de um stack com células a combustível ligadas em série	34
Figura 15 – Configuração do ciclo proposto.....	39
Figura 16 – Célula a combustível de carbonato fundido.....	45
Figura 17 – Processo de troca de calor na caldeira de recuperação	52
Figura 18 – Simulação da reforma a vapor para diferentes temperaturas.....	67
Figura 19 – Curva de polarização da MCFC deste trabalho	69
Figura 20 – Influência da potência da MCFC no custo da energia gerada	77
Figura 21 – Influência do custo do gás natural no custo da energia gerada.....	77

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Poder calorífico inferior e estado de combustíveis usuais	25
Tabela 2 – Características de modelos consolidados de células a combustível.....	35
Tabela 3 – Descrição dos pontos do ciclo.....	40
Tabela 4 – Exergia química padrão de diversas substâncias.....	44
Tabela 5 – Composição do gás natural comercial na região sudeste	60
Tabela 6 – Condições do ar ambiente	62
Tabela 7 – Parâmetros de operação fixados para a MCFC	62
Tabela 8 – Relações auxiliares para a análise exergoeconômica.....	63
Tabela 9 – Dados assumidos para a análise exergoeconômica	64
Tabela 10 – Dados assumidos para a planta.....	65
Tabela 11 – Condições de operação do ciclo a vapor	66
Tabela 12 – Coeficientes estequiométricos para os produtos da reforma.....	68
Tabela 13 – Resultados da simulação do ciclo combinado.....	69
Tabela 14 – Parâmetros dos pontos do ciclo.....	70
Tabela 15 – Frações molares de cada substância do ciclo	72
Tabela 16 – Parâmetros exergéticos dos componentes	73
Tabela 17 – Custo de aquisição e taxas de custo dos componentes.....	74
Tabela 18 – Resultados econômicos do ciclo combinado.....	74
Tabela 19 – Resultados da análise de sensibilidade.....	76

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

AFC	Célula a Combustível Alcalina
CNTP	Condições Normais de Temperatura e Pressão
COP21	Conferência das Nações Unidas Sobre Mudança Climática
EPE	Empresa de Pesquisa Energética
FRC	Fator de recuperação de capital
MCFC	Célula a Combustível de Carbonato Fundido
PAFC	Célula a Combustível de Ácido Fosfórico
PCI	Poder Calorífico Inferior
PEMFC	Célula a Combustível de Membrana Polimérica
REN21	Rede de Políticas de Energias Renováveis para o Século 21
SOFC	Célula a Combustível de Óxido Sólido

LISTA DE SÍMBOLOS

A	área da célula (m^2)
c	custo exergético (USD/kJ)
$\dot{C}$	taxa de custo (USD/s)
$\bar{e}$	exergia específica (kJ/kmol)
E	potencial da célula (V)
E^0	potencial padrão da célula (V)
E_n	energia (kJ)
$\dot{E}_x$	taxa de transferência de exergia (kW)
F	constante de faraday (C/mol)
$\bar{g}$	energia específica livre de gibbs (kJ/kmol)
H	tempo de operação da planta (h)
$\bar{h}$	entalpia específica (kJ/kmol)
i	taxa de juros ao ano
$\dot{I}$	taxa de transferência de irreversibilidade (kW)
j	densidade de corrente da célula (A/m^2)
$\dot{m}$	vazão mássica (kg/s)
MM	massa molar (kg/kmol)
n	tempo de operação da planta (anos)
N	número de células formadoras do stack
$\dot{n}_i$	vazão molar do ponto i (kmol/s)
n_e	número de elétrons liberados na reação eletroquímica da célula
$\overline{PCI}$	poder calorífico inferior (kJ/kmol)
pp	pressão parcial
$\dot{Q}$	taxa de transferência de calor (kW)
$\bar{R}$	constante universal dos gases perfeitos (kJ/kmol K)
$\bar{s}$	entropia específica (kJ/kmol K)
T	temperatura (K)
U	sobrepotencial (V)
$\dot{W}$	potência (kW)
X_j	fração molar de uma substância j
y	coeficiente estequiométrico dos produtos da reforma a vapor
Z_k	custo de aquisição do componente k (USD)
$\dot{Z}_k$	taxa de custo do componente k (USD)
η	rendimento
λ	razão vapor/carbono
ξ	exergia química padrão (kJ/kmol)
ϕ	fator de utilização
Φ	fator de manutenção
Ψ	eficiência racional

LISTA DE SUBSCRITOS

0	condições de referência
an	ânodo
ap	<i>approach point</i>
atv	ativação
b	bomba
c	fluido frio
ca	circuito aberto
cat	cátodo
cel	célula
e	entrada
el	elétrica
f	física
fo	formação
gn	gás natural
h	fluido quente
i	ponto do ciclo
I	primeira lei da termodinâmica
II	segunda lei da termodinâmica
j	substância
k	componente
líq	líquida
pp	<i>pinch point</i>
q	química
s	saída
t	turbina

SUMÁRIO

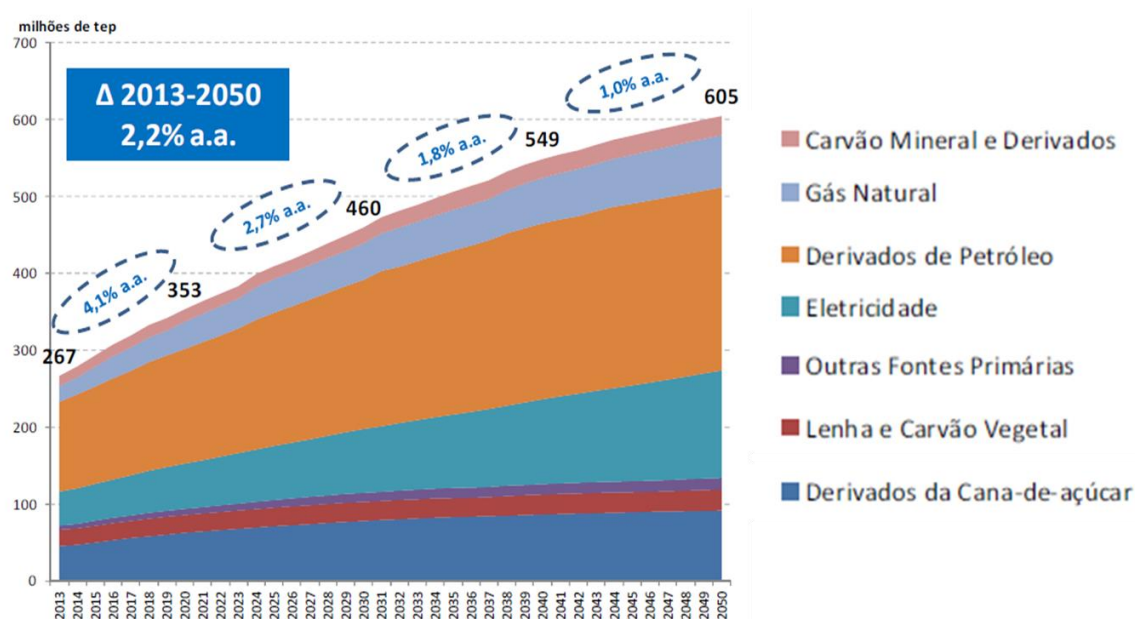
1. INTRODUÇÃO	14
1.1. OBJETIVOS.....	17
2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	19
2.1 SISTEMAS DE GERAÇÃO ENERGÉTICA	19
2.1.1 Cogeração	21
2.2 FONTES DE ENERGIA	23
2.2.1 Hidrogênio.....	24
2.2.1.1 Reforma a vapor	26
2.3 CÉLULAS A COMBUSTÍVEL	27
2.3.1 Breve histórico	27
2.3.2 Princípio de operação.....	29
2.3.3 Desempenho de operação.....	31
2.3.4 Modelos de célula a combustível	34
2.3.5 Ciclos cogeneradores com células a combustível	37
3 MATERIAIS E MÉTODOS.....	39
3.1 CICLO PROPOSTO	39
3.1.1 Análise técnica.....	42
3.1.1.1 MCFC	45
3.1.1.2 Trocadores de calor	50
3.1.1.3 Splitter	50
3.1.1.4 Misturador de ar.....	51
3.1.1.5 Câmara de combustão.....	51
3.1.1.6 Caldeira de recuperação.....	51
3.1.1.7 Turbina a vapor.....	54
3.1.1.8 Condensador	55
3.1.1.9 Bomba.....	55
3.1.2 Análise exergoeconômica	56
3.1.2.1 Funções de custo.....	57
3.1.2.1.1 Trocadores de calor	57
3.1.2.1.2 MCFC.....	58
3.1.2.1.3 Câmara de combustão	59
3.1.2.1.4 Caldeira de recuperação.....	59

3.1.2.1.5 Bomba	59
3.1.2.1.6 Condensador	59
3.1.2.1.7 Turbina a vapor	60
3.2 REFORMA A VAPOR	60
3.3 PREMISSAS ADOTADAS	62
3.3.1 Ar ambiente.....	62
3.3.2 MCFC	62
3.3.3 Fatores econômicos.....	63
3.3.4 Reforma a vapor	65
3.3.5 Ciclo combinado	65
4 RESULTADOS E DISCUSSÕES.....	67
4.1 REFORMA A VAPOR	67
4.2 CICLO COMBINADO.....	68
4.2.1 Análise técnica.....	68
4.2.2 Análise exergoeconômica	74
4.2.3 Análise de sensibilidade.....	75
5 CONCLUSÕES.....	79
REFERÊNCIAS.....	81
APÊNDICE A – Equacionamento utilizado na simulação técnica do ciclo	90
APÊNDICE B – Equacionamento utilizado na simulação econômica do ciclo.....	111

1. INTRODUÇÃO

O consumo de energia vem crescendo ao longo dos anos, muito em razão do desenvolvimento tecnológico global. A oferta, entretanto, pode não ser capaz de atender essa crescente demanda futuramente, visto que a maior parte da energia distribuída é provida de fontes não renováveis. Atualmente e nas próximas décadas, segundo estimativas, o petróleo é a maior fonte energética global (GARCÍA-DÍEZ et al., 2017). No Brasil, segundo estudos da demanda de energia da Empresa de Pesquisa Energética (EPE, 2014), a estimativa é de aumento de mais de 100% da demanda energética nacional até o ano de 2050, como mostra a Figura 1.

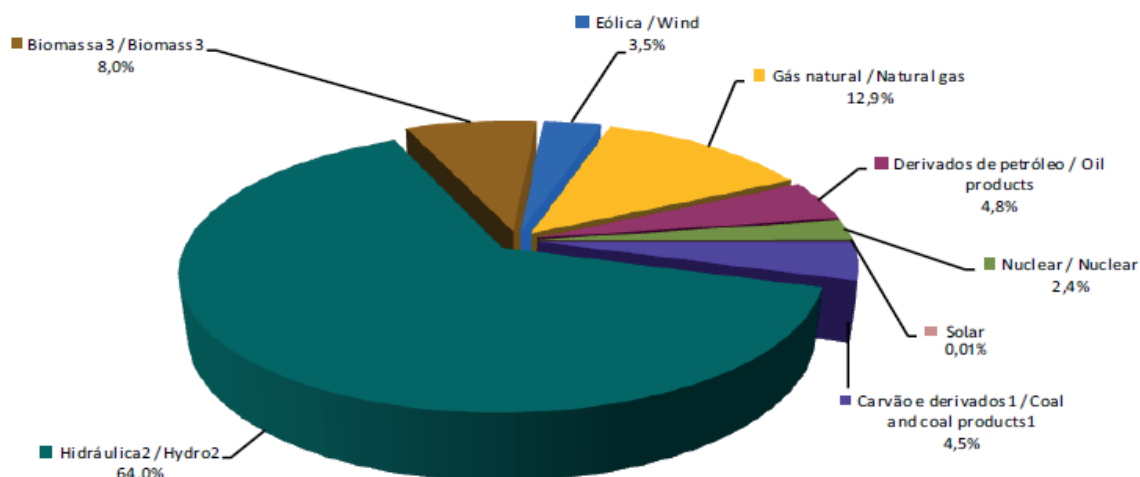
Figura 1. Aumento da demanda nacional de energia até 2050.



Fonte: EPE (2014).

Segundo o Balanço Energético Nacional de 2016 (EPE, 2016), a demanda energética de 2015 foi de 299,6 milhões de toneladas equivalentes de petróleo (tep), confirmando a estimativa. Por meio da Figura 1, nota-se a dependência de fontes não renováveis de energia, como derivados do petróleo e carvão mineral, e o crescimento percentual da utilização da energia elétrica. Parte desta, por sua vez, é também gerada a partir de fontes não renováveis, segundo o Balanço Energético Nacional de 2016, com base no ano de 2015, representado pela Figura 2.

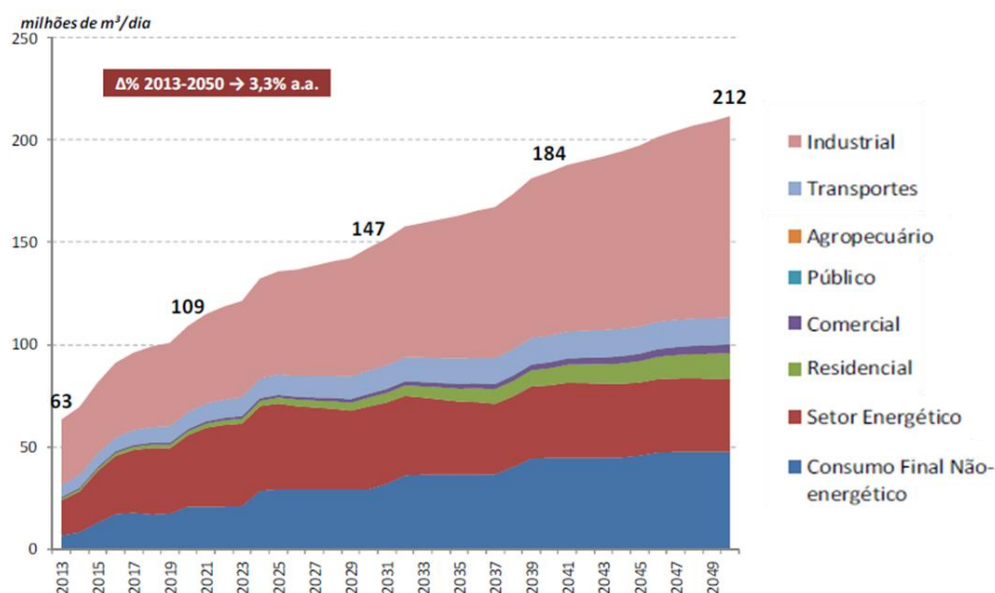
Figura 2. Fontes de geração elétrica no Brasil em 2015.



Fonte: EPE (2016).

A Figura 2 ilustra que a energia elétrica nacional em 2015 foi provida também por fontes não renováveis, como o gás natural, que representa 12,9% de toda a produção do Brasil naquele ano. Como representado na Figura 3, o consumo total desse combustível tem previsão de aumento de 63 milhões de m³ por dia em 2013 para 212 milhões de m³ por dia em 2050, um crescimento de 236%.

Figura 3. Crescimento no consumo nacional de gás natural até 2050.



Fonte: EPE (2014)

Mediante Figura 3, nota-se a utilização do gás natural pelo setor energético, principalmente por meio de usinas termelétricas, que utilizam os gases de exaustão da queima

do combustível para acionar turbinas a gás. Em casos de usinas que trabalham com ciclos combinados, ou seja, com turbinas a gás e a vapor em operação, a eficiência de geração da planta pode atingir 50%, dificilmente ultrapassando 60% (D'ARAÚJO, 2009). A energia gerada desse modo, porém, tem um custo geral maior do que aquela gerada por hidrelétricas, setor predominante no Brasil (TOLMASQUIM, 2016).

Além de possíveis instabilidades que as fontes não renováveis de energia podem acarretar futuramente, uma vez que sua utilização ocorre em grande quantidade e sua quantidade é limitada, há também uma preocupação ambiental que estimula a busca por novas formas de geração de energia (WILBERFORCE et al., 2016). A Conferência das Nações Unidas sobre Mudança Climática (COP21), que ocorreu em 2015 e reuniu 195 países na cidade de Paris, levantou discussão sobre as causas e efeitos do aquecimento global e estabeleceu a concentração de esforços para diminuição das emissões de CO₂, a fim de evitar ao máximo o aumento da temperatura global, limitando esse parâmetro a 2 °C (ANDERSON et al., 2016). Portanto, cabe aos governos dos respectivos países o investimento em tecnologia de geração, visando tanto o aumento da eficiência dos equipamentos já usados quanto o desenvolvimento de novos, que aproveitem fontes renováveis.

A possível crise energética tem levado pesquisadores a estudarem possibilidades de geração mais eficientes e menos poluentes. Dentro desse contexto, as células a combustível se destacam pela geração de eletricidade a alta eficiência através da conversão direta de energia química em elétrica (YEUNG; HAN, 2014). De acordo com Wilberforce et al. (2016), as células a combustível estão se tornando uma tecnologia cada vez mais introduzida no mercado e começam a competir com motores de combustão interna e baterias. As aplicações economicamente viáveis são unidades portáteis e sistemas de cogeração de grandes plantas ou domésticos (STAFFELL; GREEN, 2013). Em 2014, o Japão investiu em 41 estações de abastecimento de hidrogênio, enquanto a Coreia do Sul construiu o Gyeonggi Green Energy, atualmente o maior parque de geração por células a combustível, com capacidade de 59 MW (WILBERFORCE et al., 2016). Em 2016, as vendas desse equipamento aumentaram para 65 mil unidades, um acréscimo de 10% em comparação ao ano anterior (E4TECH, 2016). Segundo a E4tech (2016), América do Norte, Europa e Ásia são os continentes que mais introduzem células a combustível na geração elétrica em seus mercados, sendo o ramo de transporte o que mostrou maior evolução de investimento entre 2015 e 2016, enquanto a geração estacionária ainda é a maior em utilização.

Outra opção amplamente estudada por pesquisadores dessa área são os sistemas de cogeração baseados no calor residual das reações eletroquímicas da célula, o qual pode ser

utilizado para geração de energias térmica e/ou elétrica úteis, aumentando a eficiência geral da planta para até 95%, em alguns casos (STAFFELL, 2015; PIRKANDI; MAHMOODI; OMMIAN., 2017). Dentre os modelos pertinentes para sistemas de cogeração, destacam-se, para geração em grande escala, as células a combustível de alta temperatura (DE ARESPACOCCHAGA et al., 2015).

As células a combustível que operam a alta temperatura possuem vantagens estruturais e operacionais, como a operação silenciosa, não utilizar metais nobres como catalisadores, possibilidade de utilização do CO como combustível e a possibilidade de recirculação do CO₂ na alimentação (MINUTILLO et al., 2014). Dentre esses equipamentos, destacam-se os modelos de óxido sólido (SOFC) e de carbonato fundido (MCFC). O primeiro trabalha a temperaturas acima de 800 °C, o que pode deteriorar os materiais utilizados em sua fabricação e aumentar os custos de manutenção (WANG et al., 2016). O segundo possui temperatura de trabalho de aproximadamente 650 °C, o suficiente para iniciar a reação de conversão eletroquímica e diminuir o uso de materiais cerâmicos em sua produção, importantes características de manutenção do equipamento (SUNDMACHER et al., 2007). Uma vez que o modelo SOFC é o mais utilizado nos estudos de sistemas de cogeração e já é comercialmente viável, se torna interessante elucidar configurações pouco estudadas, como uma célula MCFC em um ciclo combinado com uma turbina a vapor.

1.1. OBJETIVOS

O objetivo geral do presente trabalho é propor a configuração de uma planta de geração elétrica que utiliza célula a combustível de carbonato fundido (MCFC) e turbina a vapor em um ciclo combinado, bem como avaliar o custo de sua geração. São ainda objetivos específicos:

- Aplicar os balanços energético e exergético nos componentes do ciclo, analisando-se, assim, a viabilidade técnica da configuração proposta;
- Desenvolver um modelo matemático geral para plantas que usam esse modelo de célula a combustível, de modo a verificar as modificações causadas pelas variações dos dados de entrada através de análise de sensibilidade;
- Avaliar economicamente a configuração proposta, verificando se o ciclo possui características comercialmente viáveis;
- Comparar os resultados simulados com aqueles publicados em trabalhos recentes na área de célula a combustível de carbonato fundido e na reforma a vapor do gás natural;

- Informar sobre a produção de hidrogênio através da reforma a vapor do gás natural com composição comum à região sudeste, contribuindo para sua maior obtenção e utilização.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

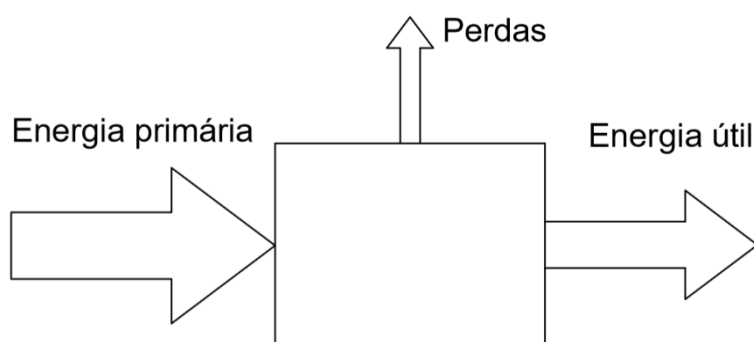
Nessa seção é feita uma contextualização do projeto com base na literatura atual. São abordados aspectos de sistemas de geração de energia, cogeração, fontes energéticas e células a combustível.

2.1 SISTEMAS DE GERAÇÃO ENERGÉTICA

Sistemas de geração energética são definidos como aqueles que convertem formas diversas de energia em térmica e/ou elétrica. Existem diversos tipos de processos que abrangem essa conversão, desde a utilização de energia mecânica até reações de oxirredução, que definem a conversão eletroquímica. Inicialmente, esses sistemas serviam locais pequenos com produção autônoma, sendo sua utilização feita no próprio local de geração, sem a necessidade de grandes distribuições. Com o passar dos anos, a demanda energética aumentou consideravelmente e, juntamente, desenvolveram-se as estruturas desses sistemas, bem como suas capacidades de geração (CATALÃO, 2012). A geração elétrica atual é baseada principalmente em hidrelétricas, máquinas síncronas e termelétricas, enquanto os sistemas baseados em energias eólica, solar e células a combustível são utilizados em menor escala (GRIGSBY, 2012).

Basicamente, um sistema de geração é alimentado por uma fonte de energia primária, a qual é convertida em energia útil, como esquematiza a Figura 4. Entretanto, a fonte primária nunca é inteiramente convertida devido à presença de perdas no processo. Assim, se torna necessário definir-se eficiência de geração envolvida na conversão.

Figura 4. Sistema de geração energética



Fonte: Autoria própria

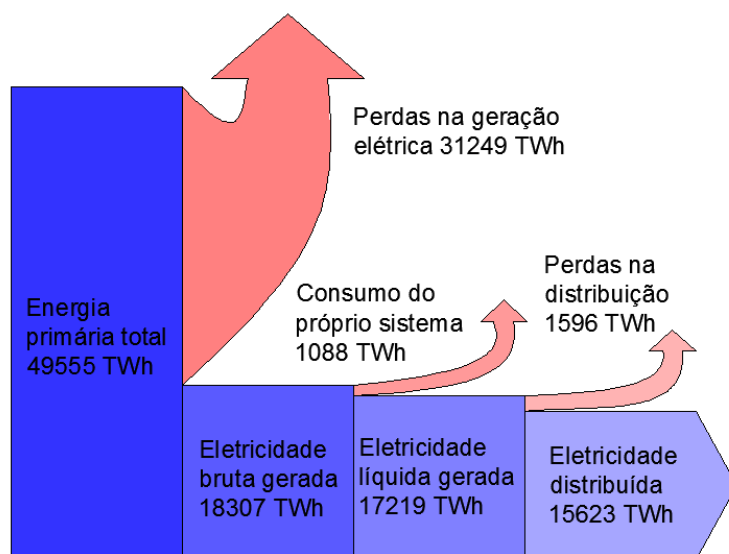
As equações (1) e (2) expressam, respectivamente, a quantificação da eficiência na conversão e a conservação de energia do sistema representado pela Figura 4.

$$\eta_{\text{sistema}} = \frac{En_{\text{útil}}}{En_{\text{primária}}} \quad (1)$$

$$E_{\text{primária}} = En_{\text{útil}} + En_{\text{perdas}} \quad (2)$$

De acordo com a Agência Internacional de Energia (International Energy Agency, 2011), mais de 68% da energia primária utilizada mundialmente em 2008 foi perdida durante o processo de conversão e transmissão de eletricidade, como ilustra a Figura 5.

Figura 5. Geração global de energia elétrica com perdas



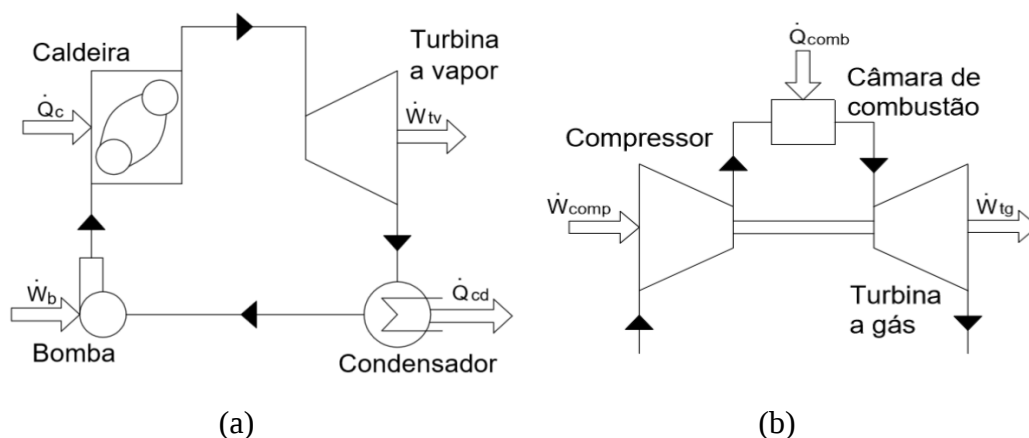
Fonte: adaptado de International Energy Agency (2011)

Atualmente, as usinas hidrelétricas possuem valores de eficiência em torno de 90% (GIANFRANCESCO, 2017). Para usinas termelétricas, limitações tecnológicas, relacionadas às máximas temperatura e pressão que podem ser utilizadas, e termodinâmicas, relativas à eficiência do ciclo de Carnot, reduzem seus rendimentos de geração. Plantas que utilizam ciclos a vapor ou a gás possuem eficiência entre 30 e 40%, podendo chegar a 60% em sistemas que utilizam os dois ciclos em conjunto, chamados de ciclos combinados (GIANFRANCESCO, 2017).

Nos ciclos a vapor e a gás, o conceito é o mesmo: uma turbina converte a energia do fluido de trabalho em energia mecânica ao expandi-lo e, ao acionar um gerador, gera

eletricidade. A turbina a vapor opera com vapor aquecido e pressurizado por uma caldeira e uma bomba, respectivamente. Já a turbina a gás trabalha usualmente gases de escape, frutos da queima de um combustível em atmosfera de ar pressurizado por um compressor. A Figura 6 ilustra configurações simples dos ciclos a vapor, também chamado de Rankine (a) e a gás, também chamado de Brayton (b), homenageando os cientistas responsáveis por suas idealizações: William John Macquorn Rankine e George Brayton.

Figura 6. Ciclos (a) a vapor (b) a gás



Fonte: Autoria própria

Na Figura 6a, os parâmetros do ciclo são: o calor adicionado pela caldeira ao fluido, $\dot{Q}_c$; a potência gerada pela turbina a vapor, $\dot{W}_{tv}$; o calor rejeitado pelo condensador, $\dot{Q}_{cd}$; e a potência requerida pela bomba, $\dot{W}_b$. Na Figura 6b, os parâmetros são: a potência requerida pelo compressor, $\dot{W}_{comp}$; o calor transferido pelo combustível para o fluido de trabalho, $\dot{Q}_{comb}$; e a potência gerada pela turbina a gás, $\dot{W}_{tg}$.

Nota-se, pela Figura 5 e pela descrição dos ciclos (Figura 6), a necessidade de diminuição das perdas dos sistemas atuais e consequente aumento na eficiência dos ciclos. Neste contexto, a cogeração é uma forma de aproveitamento técnica e economicamente viável que reduz a demanda de energia primária e diminui as perdas (BIANCHI; PASCALE, 2012).

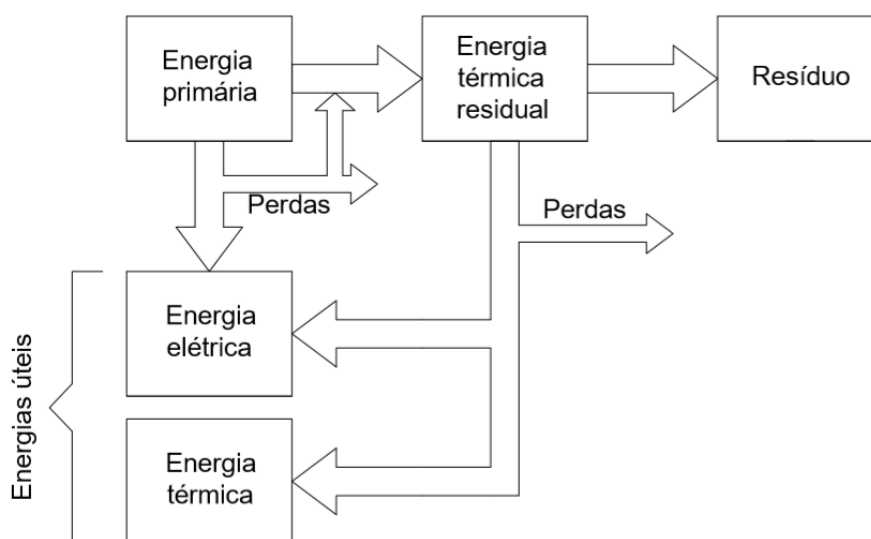
2.1.1 Cogeração

A cogeração é definida como a geração simultânea de energias térmica e elétrica úteis através de uma única fonte primária. Um sistema cogador pode ser classificado como

bottoming, se seu projeto for feito para suprir primeiramente a demanda térmica de um determinado local, aproveitando seu calor residual para geração de eletricidade; ou *topping*, caso seu projeto vise prioritariamente o suprimento da energia elétrica, sendo a geração de energia elétrica feita de forma secundária (SAGHAFIFAR; GADALLA, 2015; ALKLAIBI et al., 2016).

O sistema *topping* é o mais usual. A energia térmica, que normalmente é resíduo da fonte primária, pode ser usada tanto para a geração de mais energia elétrica, como em ciclos combinados, como para aquecimento ou resfriamento de outros fluidos, como água e ar. Em ambos os casos, diminui-se o consumo de combustíveis fósseis e as emissões de gases estufa (BIANCHI; PASCALE, 2012). A Figura 7 representa o princípio de um ciclo cogrador *topping*.

Figura 7. Princípio da cogeração



Fonte: Autoria própria

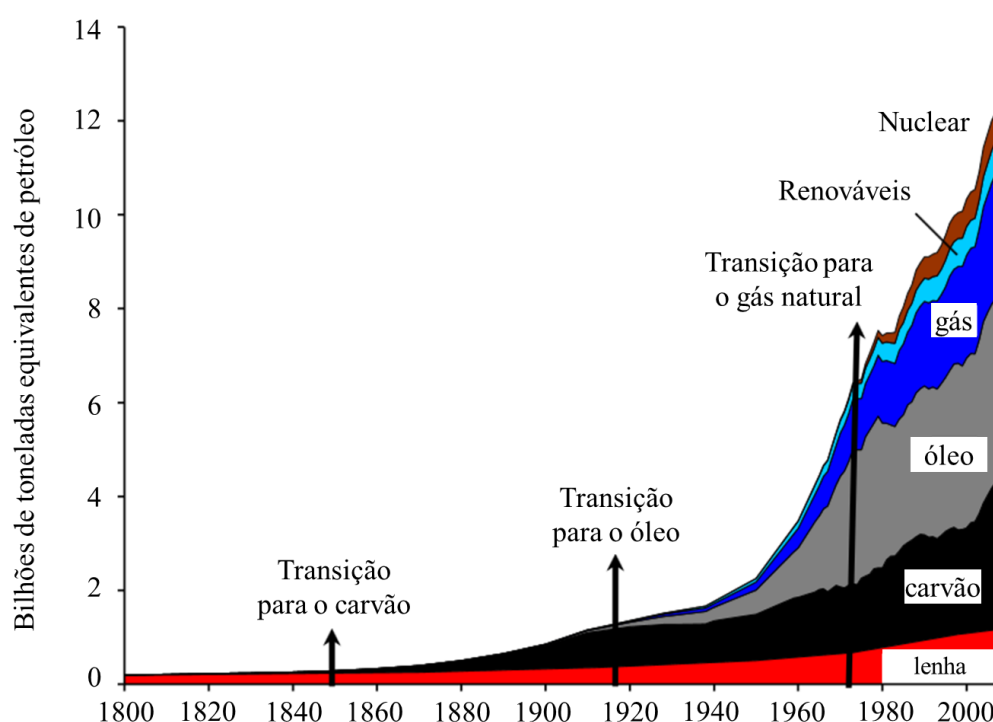
Em ciclos a vapor, o calor residual de outro sistema pode produzir o vapor necessário para o acionamento da turbina. Além de rejeitar calor através do condensador, que pode ser usado como fonte de energia térmica útil, esse sistema pode suprir uma demanda de vapor de um local que consuma esse fluido para um determinado processo. Para isso, deve-se extrair-lo da turbina em uma determinada pressão, fato que diminui a eletricidade produzida por sua expansão, mas supre a demanda térmica. Em ciclos a gás, os gases de exaustão da turbina possuem alta energia, já que são liberados com temperaturas em torno de 450 °C, e podem ser aproveitados (ALOBALD et al., 2016). Ciclos cogradores com gases de escape de motores de

combustão interna também são estudados na literatura (PÉREZ et al., 2015). Sistemas com células a combustível são apresentados na seção 2.3.5 deste trabalho.

2.2 FONTES DE ENERGIA

A geração mundial de energia, desde a revolução industrial, foi baseada majoritariamente em fontes não renováveis, como carvão e derivados do petróleo. Entretanto, o seu consumo é caracterizado por apresentar diversas transições, que acompanham o seu constante crescimento. A Figura 8 ilustra as diferentes fontes de energia ao redor do mundo ao longo do tempo.

Figura 8. Consumo global de energia ao longo do tempo

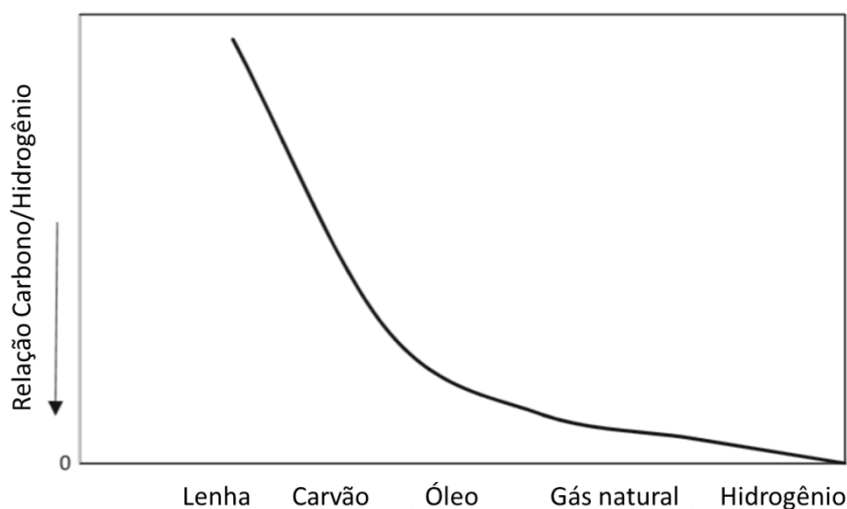


Fonte: Adaptado de Fouquet; Pearson (2012).

É possível notar, através da Figura 8, que, em cada período de transição, enquanto uma nova fonte de energia surgia e tinha seu consumo aumentado rapidamente, as outras continuavam a ter crescimentos de uso, porém menos intensos. A partir da década de 1980, os produtos derivados do petróleo (óleo e gás natural) tiveram seus consumos aumentados substancialmente. Em 2012, 78,3% da oferta global de energia foi oriunda da queima de combustíveis fósseis, os quais foram responsáveis por 99,5% do total de emissões de gases de efeito estufa (DINCER; ACAR, 2015a).

Uma análise da composição química das fontes de energia presentes na Figura 8 indica a utilização cada vez mais frequente de combustíveis com menores quantidades de carbono em relação à quantidade de hidrogênio (ACAR; DINCER, 2015). A Figura 9 relaciona esses dois elementos com os respectivos combustíveis.

Figura 9. Taxa de carbono por hidrogênio de diferentes combustíveis



Fonte: Acar; Dincer (2015)

Por serem finitas e causarem sérios problemas ao meio ambiente, fontes não renováveis, além de sofrerem descarbonização relativa ao longo dos anos (Figura 9), têm sido o foco de pesquisas que visam sua substituição por fontes alternativas de energia ou a diminuição da emissão de gases de efeito estufa resultantes de sua utilização. Segundo o *Global Status Report* (REN21, 2017), em 2016, pelo quinto ano consecutivo, o investimento em geração de energia por meio de fontes renováveis foi o dobro daquele em geração através de combustíveis fósseis.

2.2.1 Hidrogênio

Dentro do contexto de fontes alternativas de energia, o hidrogênio surge como uma opção amplamente estudada por pesquisadores da área energética. A utilização de H_2 como combustível é vantajosa do ponto de vista químico e ambiental, uma vez que, além de possuir alto poder calorífico, ainda vem sendo estudado nos últimos anos devido à possibilidade de sua utilização em sistemas com baixos níveis de emissão de gases estufa – chegando à zero, em alguns casos (BALAT, 2008; DINCER; ACAR, 2015b). A Tabela 1 compara valores de poder calorífico inferior de combustíveis usuais com o hidrogênio.

Tabela 1. Poder calorífico inferior e estado de combustíveis usuais

Combustível	Estado na CNT	PCI (MJ/kg)
Hidrogênio	Gás	119,9
Metano	Gás	50,0
Etano	Gás	47,8
Gasolina	Líquido	44,5
Diesel	Líquido	42,5
Etanol	Líquido	26,9
Metanol	Líquido	18,1

Fonte: Nikolaidis; Poullikkas (2017); Zhuang; Qian; Hong (2017)

Através da Tabela 1, nota-se que o hidrogênio possui mais que o dobro do poder calorífico inferior do metano, sendo este o principal influenciador do valor do poder calorífico de combustíveis hidrocarbonetos (SUNDMACHER et al., 2007). Por apresentar desejáveis características, sua utilização vem sendo estudada total ou parcialmente em diferentes sistemas.

Além de ser destinado para uso automotivo, uma vez que a comercialização de veículos que utilizam a tecnologia de célula a combustível já acontece desde 2014 (NODA et al., 2017), diversos outros sistemas estão sendo estudados para se verificar a viabilidade do uso do hidrogênio, como transportes aéreo e marítimo (LEO; DURANGO; NAVARRO, 2010; VERSTRAETE, 2015) e sistemas de cogeração de diferentes escalas baseados em motores de combustão interna (SANTOLI; BASSO; BRUSCHI, 2013), motores diesel (HERRERA; ARRIETA; SODRÉ, 2014) e células a combustível de diferentes modelos (DODDS et al., 2015). Sendo assim, o consumo de H_2 está convenientemente sendo avaliado em diversos equipamentos e, deste modo, sua demanda tende a aumentar significativamente nos próximos anos (BALAT, 2008).

A crescente demanda de hidrogênio e os estudos avaliando sua utilização incentivam novas formas para sua obtenção. Ao contrário dos combustíveis fósseis, o hidrogênio não se encontra presente na natureza em sua forma molecular em quantidade suficiente e, portanto, precisa ser obtido através de fontes primárias (NIKOLAIDIS; POULLIKKAS, 2017; SIMON et al., 2003). Embora tecnologias que utilizam energias renováveis, tais como solar, eólica e biomassa, estejam sendo estudadas para a sua produção limpa através da eletrólise da água, 95% do H_2 atual é produzido por meio da reforma de combustíveis fósseis, já que é um processo consolidado tecnologicamente e comercialmente (AHMED et al., 2016; MOMIRLAN; VEZIROGLU, 2005).

2.2.1.1 Reforma a vapor

Denomina-se reforma o processo de separação do hidrogênio de um hidrocarboneto através da adição de calor (MOMIRLAN; VEZIROGLU, 2005). Apesar de haver diversos processos de reforma diferentes, aquele que utiliza o vapor é o mais utilizado, uma vez que produz gases com maior quantidade de hidrogênio e tem o melhor custo-benefício (HEINZEL; VOGEL; HUBNER, 2002; DINCER; ACAR, 2017). A reforma a vapor é uma reação endotérmica que utiliza o calor presente em um fluxo de vapor que, ao reagir com o hidrocarboneto na presença de um catalizador, produz H_2 e óxidos de carbono (NIKOLAIDIS; POULLIKKAS, 2017). As principais reações da reforma a vapor são representadas pelas equações (3) e (4).



A equação (3) representa a reação química geral da reforma a vapor de um hidrocarboneto. O combustível mais utilizado atualmente é o gás natural, uma vez que possui vantagens quanto sua disponibilidade, facilidade de transporte e alto teor de metano (MOMIRLAN; VEZIROGLU, 2005). A reforma a vapor do metano, representada pela equação (3) com $n = 1$ e $m = 4$, é a mais comum em sistemas de produção de grande escala, já que atinge eficiências de conversão de até 85% (NIKOLAIDIS; POULLIKKAS, 2017). O etano (C_2H_6), usualmente presente na composição do gás natural, também é reagente da equação (3), onde $n = 2$ e $m = 6$.

A reação de troca água-gás é representada equação (4). Nessa etapa da reforma, o monóxido de carbono, um subproduto da equação (3), reage com o vapor e produz hidrogênio e dióxido de carbono. Como essa reação é limitada pelo equilíbrio, a conversão de CO é incompleta, tornando-se necessária sua futura remoção.

Um fator que influencia diretamente a eficiência da reforma é a razão vapor/carbono, definida como a relação das vazões de vapor e carbono presente no combustível hidrocarboneto. Segundo Ersöz (2008), esse parâmetro deve variar entre 3 e 4 para que a reação atinja os maiores valores de eficiência, além de prevenir deposição de carbono na superfície do catalisador.

Em ciclos baseados em células a combustível, a reforma pode ser feita internamente ou externamente à célula. A reforma interna é feita dentro da estrutura da célula, na entrada do

ânodo, uma vez que o hidrogênio produzido alimenta diretamente esse eletrodo. Este método aumenta a eficiência de conversão do equipamento, já que o combustível é consumido dentro dele, além de aproveitar o calor da reação eletroquímica da célula, fato que elimina a necessidade de fontes externas de calor para a reforma e de resfriamento do equipamento (CHATRATTANAWET et al., 2017). Por demandar grande quantidade de calor, a reforma interna é feita em células a combustível de altas temperaturas. Estes equipamentos, uma vez que possuem essa estrutura operacional, são capazes de trabalhar com diversos tipos de hidrocarbonetos, o que flexibiliza suas aplicações (CORIGLIANO; FRAGIACOMO, 2017).

Por ser feita diretamente no eletrodo, a reforma interna pode causar deposição de carbono na superfície do ânodo e, assim, interferir na eficiência da célula. Para evitar essa situação e possibilitar o aproveitamento do calor residual dos gases de exaustão da reforma, esse processo pode ser feito externamente à célula (CHATRATTANAWET et al., 2017; FARO et al., 2013). A reforma externa é mais utilizada em equipamentos que trabalham a baixas temperaturas, visto que estes não possuem calor suficiente para alimentar a reação endotérmica, além de evitar desvantagens do processo, como envenenamento¹ do ânodo por monóxido de carbono.

Em uma comparação dos dois tipos de reforma em uma célula a combustível de alta temperatura, Chatrattanawet et al. (2017) observaram uma eficiência elétrica maior no equipamento que operava com reforma interna (97% contra 86%). Entretanto, as emissões de CO e CO₂ dessa célula também foram maiores. Kim e Lee (2017) focaram na distribuição de temperatura no sistema e no estresse térmico dos materiais utilizados, e chegaram à conclusão que a reforma interna é mais estável mecanicamente. Em ambos os trabalhos, os autores citaram vantagens e desvantagens dos dois métodos de reforma, dependendo de suas aplicações.

2.3 CÉLULAS A COMBUSTÍVEL

2.3.1 Breve histórico

Não é consensual o inventor da primeira pesquisa que originou o conceito de célula a combustível, mas a comunidade acadêmica trata de dois nomes importantes: Christian F. Schoenbein e Sir William R. Grove.

Schoenbein era um químico alemão que, em 1839, publicou seu trabalho realizado no ano anterior, referente ao princípio de operação de uma célula a combustível. O trabalho de

¹ Deposição de carbono na superfície do ânodo

Shoenbein consistia em provar que a corrente elétrica poderia ser produto de uma ação química (HOOGERS, 2003). O processo era o inverso daquele estudado em 1800 pelos cientistas ingleses Sir Anthony Carlisle e William Nicholson, no qual a quebra das ligações dos átomos de hidrogênio e oxigênio da água era estimulada com o uso de eletricidade (ANDÚJAR; SEGURA, 2009). O Departamento de Energia dos Estados Unidos da América trata Schoenbein como o descobridor do método (ANDÚJAR; SEGURA, 2009). Aparentemente, no ano de sua publicação, seu trabalho serviu como base para os estudos do cientista e advogado Grove, que introduziu o conceito de células a combustível de hidrogênio e produziu o primeiro modelo do equipamento que gerava corrente elétrica (LARMINIE; DICKS, 2000; ANDÚJAR; SEGURA, 2009; BARBIR, 2013).

Até a década de 1930, apenas algumas tentativas de reprodução do experimento de Grove foram feitas. Durante esse período, Friedrich W. Ostwald, químico alemão, detalhou a teoria na qual o princípio de operação de uma célula a combustível se baseava. A partir daí, mais modelos foram sendo explorados (BARBIR, 2013).

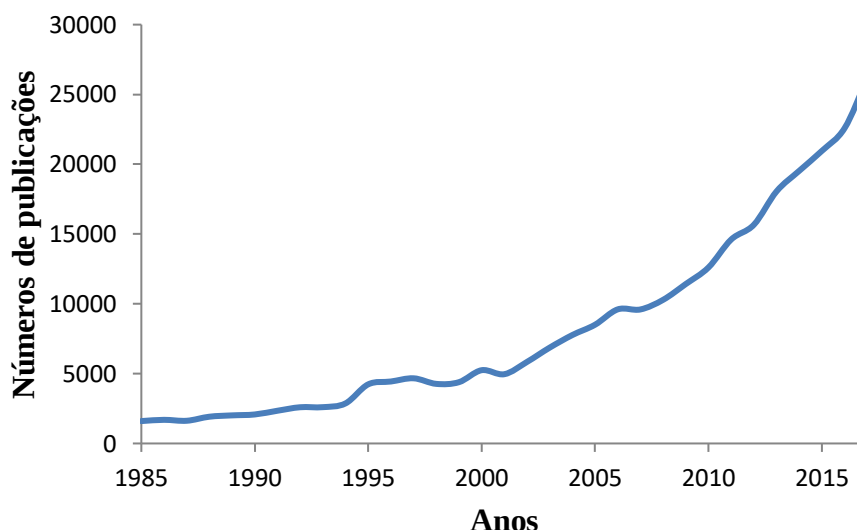
Francis T. Bacon, um engenheiro inglês, construiu um modelo de célula a combustível de 5 kW em 1952, e 5 anos mais tarde produziu um trabalho demonstrando todo o princípio operacional do equipamento, o qual foi licenciado e adotado pela NASA em seus programas (BARBIR, 2013; SHARAF; ORHAN, 2014).

A partir da década de 1960, com a utilização da célula a combustível pelos programas espaciais já em avanço, outras opções foram estudadas. A empresa automobilística *General Motors* testou o equipamento em um de seus automóveis ainda na década de 1960. Em 1989, a empresa *Perry Energy Systems* construiu um submarino movido a célula a combustível de membrana polimérica; e em 1993, a empresa *Ballard Power Systems* estudou ônibus movidos à célula a combustível (BARBIR, 2013).

Com a promessa de uma revolução na área energética, a quantidade de empresas que trabalhavam com essa fonte de energia teve um aumento significativo nos Estados Unidos da América no começo dos anos 2000 (BARBIR, 2013). Hoje em dia, as células a combustível são usadas nas áreas de transporte e aplicações portáteis, e são cada vez mais adotadas pelos setores públicos e privados na geração de energia auxiliar e aplicações em ciclos de cogeração (SHARAF; ORHAN, 2014; SUNDMACHER et al., 2007). Seus parâmetros operacionais estão sendo melhorados, juntamente com os materiais utilizados em sua fabricação e, por esse motivo, muitos setores da indústria começam a estudar o uso das células a combustível em suas operações (ANDÚJAR; SEGURA, 2009; SHARAF; ORHAN, 2014).

Uma maneira de relacionar um determinado período com um assunto é verificar a quantidade de trabalhos publicados sobre esse tema. O número de publicações de trabalhos sobre célula a combustível no banco de dados da Elsevier com o passar dos anos está ilustrado na Figura 10.

Figura 10. Quantidade de publicações sobre célula a combustível



Fonte: Science Direct.

É notável, através da Figura 10, que no começo dos anos 2000, quando as empresas começaram a investir em geração por meio de células a combustível, o número de pesquisas na área aumentou em grande quantidade. Esse número continua a crescer até os dias de hoje, uma vez que até junho de 2017 já foram publicados mais de 80% do total de artigos do ano anterior. Como a viabilidade comercial de células a combustível só está presente em alguns modelos, a tendência é a continuidade do aumento de pesquisas sobre esse tema, visando suas viabilidades técnica e econômica.

2.3.2 Princípio de operação

Células a combustível são equipamentos fundamentados no conceito de células galvânicas, as quais permitem a conversão de energia química (oriunda de combustível, no caso de células a combustível) diretamente em energia elétrica, através de reações de oxidação e redução que ocorrem em seus eletrodos (REXED et al., 2015). Seu princípio operacional não obedece àquele do ciclo de Carnot e, por não ter suas limitações, possui eficiências de geração

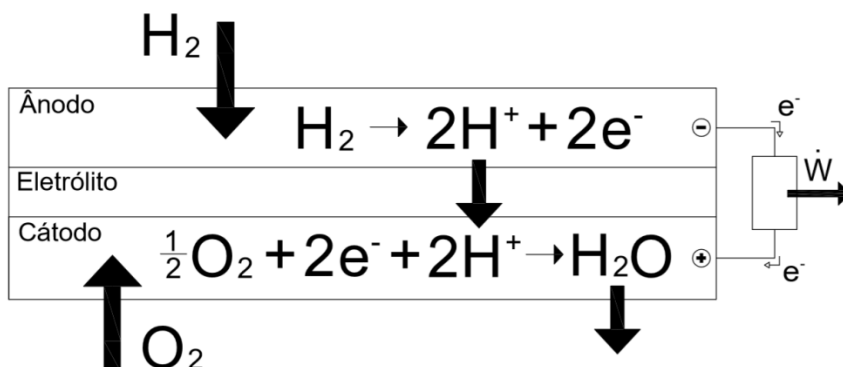
maiores e emissões menores que as encontradas em outros métodos de conversão (SUNDMACHER et al., 2007; ARESPACOCCHAGA et al., 2015).

Como em qualquer dispositivo eletroquímico, as células a combustível possuem dois eletrodos, responsáveis por catalisar suas reações. Entretanto, o equipamento se difere de uma pilha convencional. A pilha, embora seja baseada no mesmo princípio de operação, é um dispositivo de armazenamento e, portanto, possui uma quantidade limitada de energia útil, determinada pelo montante de reagentes químicos armazenado dentro de si. Por outro lado, as células a combustível possuem a capacidade de gerar energia enquanto forem alimentadas por um combustível e um agente oxidante, sem a necessidade de recarga (HOOGERS, 2003). O ânodo, eletrodo negativo, recebe o combustível; o cátodo, eletrodo positivo, recebe o agente oxidante. Ao serem alimentados constantemente, os eletrodos permitem que as semi-reações de oxidação do combustível e redução do oxigênio ocorram. As equações (5) e (6) representam as semi-reações do ânodo e do cátodo de uma célula a combustível de ácido fosfórico, o modelo mais parecido com a primeira célula construída, o qual recebe hidrogênio como combustível e oxigênio como agente oxidante (APPLEBY, 1990).



As semi-reações são responsáveis pela liberação de elétrons, íons e água. Os elétrons são conduzidos para uma carga externa, enquanto os íons são transportados através de uma camada que permite sua passagem, chamada de eletrólito. Embora exista o fluxo de íons pelo eletrólito, em alguns modelos esse componente não permite a passagem de elétrons e moléculas de H_2 e O_2 . O esquema de funcionamento de uma célula a combustível que transporta íons H^{+} está representado na Figura 11.

Figura 11. Esquema de uma célula a combustível.



Fonte: Autoria própria.

Por meio da Figura 11, é possível observar as semi-reações que acontecem nos eletrodos. Os íons H^+ são transportados através do eletrólito, sendo parte dos reagentes da semi-reação no cátodo, enquanto os elétrons produzidos são forçados a passar por um circuito externo e geram uma corrente elétrica e, conseqüentemente, uma tensão associada ao equipamento. O combustível (H_2) e o agente oxidante (O_2) são, usualmente, provenientes da reforma de um combustível fóssil e do ar, respectivamente. No fim do processo, o cátodo libera água por meio de uma reação exotérmica. A reação global está representada pela equação (7).



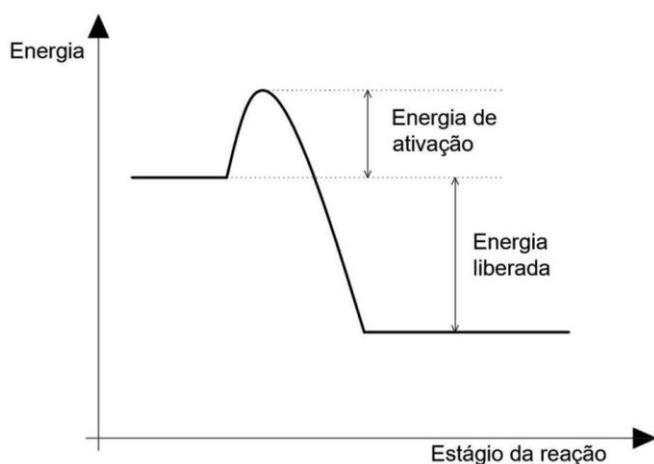
2.3.3 Desempenho de operação

O desempenho de operação da célula a combustível é a capacidade do equipamento em alcançar a máxima potência gerada possível. Este parâmetro, por sua vez, é proporcional à corrente elétrica e à tensão da célula. Tanto as semi-reações nos eletrodos quanto os componentes usados na fabricação da célula interferem diretamente em seu desempenho podendo, portanto, ser estudados, a fim de otimizar o processo de geração (O'HAYRE et al., 2006; HAJI, 2011).

O bom funcionamento da célula, portanto, depende diretamente das reações eletroquímicas nos eletrodos. Para que as semi-reações das equações (5) e (6) aconteçam, é necessário um fornecimento inicial de energia que quebra as ligações intramoleculares dos reagentes, chamada energia de ativação (LARMINIE; DICKS, 2000; O'HAYRE et al., 2006). A Figura 12 ilustra esse comportamento para reações exotérmicas, nas quais ocorre liberação

de energia após o processo. Pode-se notar que o valor da energia tende a se manter constante sem o estímulo inicial.

Figura 12. Diagrama energético para uma reação exotérmica simples.



Fonte: Adaptado de Larminie; Dicks (2000).

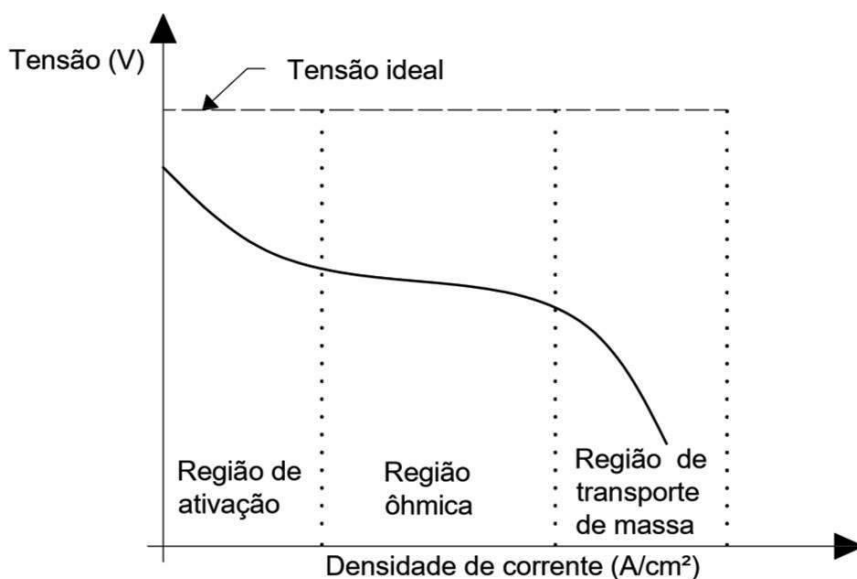
Uma vez que as moléculas não possuem energia suficiente para iniciarem as reações em baixas temperaturas, estas ocorrem lentamente em condições normais de temperatura e pressão (CNTP), ou seja, a 1 atmosfera de pressão e 298 K de temperatura (LARMINIE; DICKS, 2000). Isso interfere diretamente na corrente elétrica gerada, já que esse parâmetro é proporcional à velocidade das reações eletroquímicas. Consequentemente, a célula possuiria desempenho abaixo do desejado. Entre as maneiras de lidar com essa dificuldade, destacam-se a utilização de elementos catalisadores das reações e aumento da temperatura de operação da célula e da área da superfície de reação dos eletrodos (LARMINIE; DICKS, 2000; O'HAYRE et al., 2006). Em células a combustível de baixas temperaturas, o catalisador é um fator que aumenta significativamente o custo inicial do projeto, uma vez que metais nobres são normalmente utilizados para essa função.

A tensão da célula, por sua vez, é limitada pela tensão reversível da reação global do equipamento, representada, para células que utilizam H_2 e O_2 como combustível e agente oxidante, respectivamente, pela equação (7). Nas CNTP, essa tensão tem valor igual a 1,23 V. Em outras palavras, a máxima voltagem de saída de uma célula a combustível tem seu valor limitado a 1,23 V nas CNTP, podendo ser ainda menor, quanto maior for a temperatura de trabalho (BENMOUIZA; CHEKNANE, 2017; HAJI, 2011).

Uma célula a combustível real sempre possui uma tensão menor que a ideal. Isso acontece devido a perdas irreversíveis relacionadas à cinética eletroquímica nas semi-reações nos

eletrodos, resistência interna dos componentes da célula e fatores limitantes do transporte de massa nos eletrodos (HAJI, 2011). Inicialmente, há uma pequena queda da tensão da célula provocada pelo início das reações, que envolve transporte de carga em uma velocidade limitada (região de ativação); em seguida, a voltagem cai linearmente devido à resistência dos componentes utilizados na fabricação do equipamento (região ôhmica); por fim, o fluxo das espécies dentro da célula também provoca queda de tensão (região de transporte de massa) (O'HAYRE et al., 2006; BENMOUIZA; CHEKNANE, 2017). Adicionalmente, as quedas de tensão são maiores quanto maiores são as correntes elétricas de saída (BENMOUIZA; CHEKNANE, 2017). A Figura 13 ilustra a curva de polarização, que indica a tensão em função da densidade de corrente elétrica de uma célula a combustível.

Figura 13. Curva de polarização de uma célula a combustível.



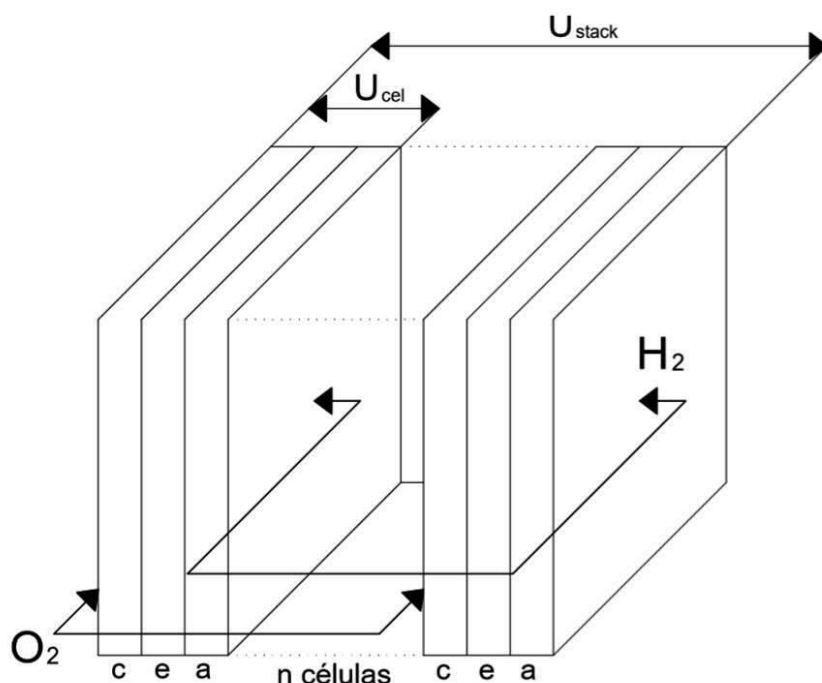
Fonte: Benmouiza; Cheknane (2017); Haji (2011); O'hayre et al. (2006).

Alguns fatores podem influenciar a curva de polarização e, conseqüentemente, no desempenho do equipamento, tais como parâmetros do ambiente (temperatura, pressão, umidade relativa, entre outros), vazões mássicas de combustível e agente oxidante e materiais utilizados na fabricação dos componentes da célula (HAN; CHUNG, 2017).

As tensões geradas por uma célula a combustível, na ordem de 0,7 V, não são úteis de um ponto de vista prático. Portanto, para gerar valores satisfatórios de voltagem, é necessário ligar várias células em série. Tal arranjo denomina-se *stack* (LARMINIE; DICKS, 2000). O *stack* possui tensão total igual à soma das tensões de cada célula, sendo a corrente mantida no mesmo valor de uma única célula. Portanto, um maior número de células no *stack* permite sua operação

com baixos valores de densidade de corrente, o que diminui as perdas, e aumento da tensão de saída. Ele é construído conectando-se os equipamentos de uma maneira na qual há espaço para fluxos de hidrogênio e oxigênio que alimentam todos os ânodos e cátodos, respectivamente. Um esquema de um *stack* com ligação de células em série está ilustrado pela Figura 14, na qual as letras “c”, “e” e “a” se referem ao cátodo, eletrodo e ânodo, respectivamente.

Figura 14. Esquema de um *stack* com células a combustível ligadas em série.



Fonte: Adaptado de Larminie; Dicks (2000).

O melhor desempenho de um *stack* é obtido em densidades de correntes baixas, fato que diminui as quedas de tensão, e ligando-se um número conveniente de células em série, para que a voltagem de saída tenha um valor desejado.

2.3.4 Modelos de célula a combustível

Atualmente, há uma variedade de modelos de célula a combustível em diferentes estágios de desenvolvimento. Embora possam ser classificadas por diversos fatores, o mais utilizado é aquele que leva em consideração o material do eletrólito (ZIOGOU et al., 2017). Diversos modelos desses equipamentos, como os listados na Tabela 2, já são consolidados por trabalhos presentes na literatura. Dentre as suas características de operação, destaca-se a que leva em

conta a temperatura de trabalho, visto que é uma importante propriedade para a escolha do tipo de aplicação.

Tabela 2. Características de modelos consolidados de célula a combustível

Modelo	Espécie transportada	Temperatura de operação [°C]	Característica de operação	Eficiência teórica [%]
Alcalina (AFC)	OH^-	60 – 90	Baixa temperatura	≈ 80
Membrana trocadora de prótons (PEMFC)	H^+	80 – 130	Baixa temperatura	≈ 80
Ácido fosfórico (PAFC)	H^+	160 – 220	Baixa temperatura	≈ 75
Carbonato fundido (MCFC)	CO_3^{2-}	650 – 700	Alta temperatura	≈ 70
Óxido sólido (SOFC)	O^{2-}	800 – 1000	Alta temperatura	60-70

Fonte: Wendt et al. (2000); Sundmacher et al. (2007); Wenzl (2009); De-troya et al. (2016)

O modelo AFC geralmente é produzido com um eletrólito de hidróxido de potássio (KOH), o qual é responsável pelo transporte dos íons OH^- . Esse material reage com o CO_2 , mesmo em quantidades pequenas do gás, o que impede as utilizações diretas do ar como agente oxidante e de um combustível hidrocarboneto. Portanto, em suas aplicações, principalmente no setor de transporte, são necessárias as alimentações de H_2 e O_2 puros (DE-TROYA et al., 2016).

A célula PEMFC é um modelo de estrutura simples e compacta que possui um eletrólito de matriz polimérica, permitindo a passagem de íons H^+ . Atualmente, é o modelo mais desenvolvido tecnologicamente e o mais avançado no mercado, já que sua maior produção diminuiu seu preço de venda em relação aos outros modelos. Sua principal desvantagem é o fato de que a platina, utilizada como catalisador, sofre de contaminação de enxofre e monóxido de carbono (STAFFELL, 2015). Embora o principal setor de utilização da PEMFC seja o

automobilístico, sistemas domésticos de cogeração estão surgindo como alternativas viáveis tecnicamente (DE-TROYA et al., 2016).

Produzida com um eletrólito de ácido fosfórico (H_3PO_4), a PAFC foi o primeiro modelo com aproveitamento de seu calor residual desenvolvido em escala comercial. Por utilizar platina como catalisador, apresenta as mesmas limitações de elementos contaminantes no combustível e no agente oxidante da PEMFC (STAFFELL, 2015). Embora possua baixa eficiência elétrica, sua temperatura de operação é compatível para aproveitamento do calor residual. Assim, pode ser utilizado em aplicações de cogeração de pequeno porte *on site* (DE-TROYA et al., 2016).

A MCFC possui eletrólito de carbonato de lítio e potássio em uma matriz cerâmica, o qual deve permanecer a 650 °C para evitar danos por solidificação. A utilização do níquel, principal elemento catalisador, permite flexibilidade no uso de combustíveis no ânodo, enquanto a demanda do cátodo por CO_2 pode ser suprida por recirculação, uma excelente qualidade operacional (STAFFELL, 2015). Seus elevados desempenho e temperatura de trabalho permitem sua utilização em sistemas de cogeração em grande escala (DE-TROYA et al., 2016; STAFFELL, 2015).

O modelo SOFC utiliza materiais cerâmicos na fabricação de seu eletrólito, que necessitam de altas temperaturas para conduzir íons O^{2-} . Sua temperatura de trabalho, que pode atingir 1000 °C, permite a utilização de catalisadores que suportam diferentes tipos de combustíveis; entretanto, também pode causar degradação dos materiais utilizados em sua fabricação. A SOFC integra sistemas de cogeração de diferentes escalas e com altas eficiências, fatos que contribuíram para o aumento de sua utilização nos últimos anos (STAFFELL, 2015).

Em razão da alta temperatura de trabalho, o calor residual de operação dos dispositivos SOFC e MCFC pode ser recuperado através de uma caldeira de recuperação e utilizado em um ciclo *bottoming*, o qual gera mais eletricidade, aumentando a eficiência global do ciclo (SIMON et al., 2003). Esses equipamentos também possuem maior flexibilidade quanto ao uso de combustível, uma vez que sua estrutura permite a realização da reforma interna de hidrocarbonetos, o que viabiliza o uso de combustíveis usuais como gás natural, biogás e gases de síntese (SUNDMACHER et al., 2007; ARESPACOHAGA et al., 2015). Além disso, diferente dos dispositivos que possuem baixa temperatura de operação, esses sistemas não sofrem com problemas relacionados ao monóxido de carbono (CO). Ao invés, podem utilizar o próprio CO como combustível, não sendo necessária sua extração completa (ARESPACOHAGA et al., 2015; LEE, 2017). A célula SOFC, já comercialmente viável, é integrada na maioria dos estudos de cogeração com células a combustível de alta temperatura

(ANG et al., 2011). Entretanto, trabalhos focados na MCFC vêm aumentando quantitativamente nos últimos anos. Esse modelo possui plantas com eficiência entre 40 e 48%, podendo chegar próximo a 70% se utilizado em ciclos combinados (BORNAPOUR; HOOSHMAND, 2015; MAHMOUDI; GHAVIMI, 2016; MEHRPOOYA et al., 2017).

2.3.5 Ciclos cogeneradores com células a combustível

Todos os modelos de células a combustível apresentados na Tabela 2 estão sendo estudados em ciclos de cogeração. Os equipamentos que trabalham a baixas temperaturas, PEMFC e AFC, são utilizados em sistemas cogeneradores de pequena escala (< 100 kW), como em aplicações domésticas ou pequenas demandas. Nesses casos, esses modelos são mais vantajosos, vistos que a energia térmica requerida nesses locais não exige altas temperaturas de operação das células e, portanto, a energia é melhor aproveitada (VERHAERT; MULDER; DE PAEPE, 2016). Para sistemas de média escala (100-400 kW), o modelo PAFC se mostra uma boa opção, visto que tem maior calor residual que as células PEMFC e AFC, mas em quantidades não tão grandes quanto em modelos que trabalham a altas temperaturas (ITO, 2017). MCFC e SOFC, por outro lado, oferecem compatibilidade com sistemas de grande escala, além da possibilidade de seus calores residuais serem aproveitados de diversas maneiras. O modelo SOFC já se mostra consolidado por trabalhos presentes na literatura, enquanto a MCFC começa a ser estudada mais a fundo, devido à sua capacidade de reutilização de CO_2 (CARAPELLUCCI; SAIA; GIORDANO, 2014).

Sistemas baseados em AFC foram estudados por Verhaert, Mulder e De Paepe (2016) e Yang et al. (2014). Os primeiros autores propuseram um ciclo simples, o qual fornecia potências em torno de 6 kW, enquanto um trocador de calor aproveitava o calor residual da célula e fornecia energia térmica útil. O sistema atingiu eficiências maiores que aqueles baseados em PEMFC e SOFC. O trabalho de Yang et al. (2014), por outro lado, recuperou o calor residual da AFC em um gerador, para que fosse gerada mais eletricidade útil. O sistema híbrido estudado proporcionou aumentos de 23% na densidade de potência² e 10% na eficiência, em comparação com a AFC.

Um sistema de microcogeração de 5 kW baseado no modelo PEMFC foi proposto por Di Marcoberardino e Manzolini (2017). No trabalho, os autores operaram o ciclo com diferentes composições de gás natural e analisaram a redução de gastos com geração ao se utilizar esse

² Potência da célula por unidade de área

sistema, que pode chegar a 1500 euros por ano. PEMFC operando em uma escala de potência entre 50 e 100 kW foi analisada por Facci et al. (2017). O ciclo cogenerador atingiu mais de 80% de eficiência global operando com gás natural.

O calor residual de uma célula PAFC foi aproveitado por Yang, Zhang e Hu (2016) para acionar um sistema de refrigeração por absorção. A simulação apontou aumentos na densidade máxima de potência e na eficiência do sistema em 2,6% e 3%, respectivamente. O mesmo modelo foi utilizado por Ito (2017) em um ciclo de 400 kW de geração elétrica, no qual o calor residual produziu água quente para um prédio. Embora as demandas energéticas tenham sido supridas, o tempo de 8 anos de *payback* e o aumento das emissões de CO₂ ainda precisam ser otimizadas, segundo o autor.

Pirkandi et al. (2012) estudaram o aproveitamento do calor residual de uma célula SOFC para pré-aquecer os gases de entrada dos eletrodos e aquecer uma vazão de água. Além de notarem um aumento da eficiência global para 73%, os autores avaliaram a mudança de desempenho do equipamento operando com diferentes parâmetros. Um complexo sistema contendo uma célula SOFC, turbina a gás e um ciclo Rankine orgânico foi estudado por Zhang et al. (2017). Por conter três formas de geração elétrica, o ciclo alcançou uma alta eficiência global (88,4%).

Um ciclo com diversas modificações foi estudado por Carapellucci, Saia e Giordano (2014). Nele, um modelo MCFC foi adicionado em um sistema com turbinas a gás e a vapor. Gradualmente, recirculação de gases no ânodo e captura de CO₂ foram sendo adicionados para avaliação do desempenho do ciclo. A máxima eficiência foi de 51,8%, com geração de 60,6 MW e redução significativa de emissão de CO₂, devido ao sistema de captura. Em seu trabalho, Mehrpooya, Sayyad e Zonouz (2017) avaliaram uma planta baseada em MCFC, no qual o calor residual acionava um motor stirling e um sistema de refrigeração por absorção, além de os gases de exaustão acionarem uma turbina e um trocador de calor. Uma eficiência global de 71,7% foi atingida para uma geração líquida de 4479 kW.

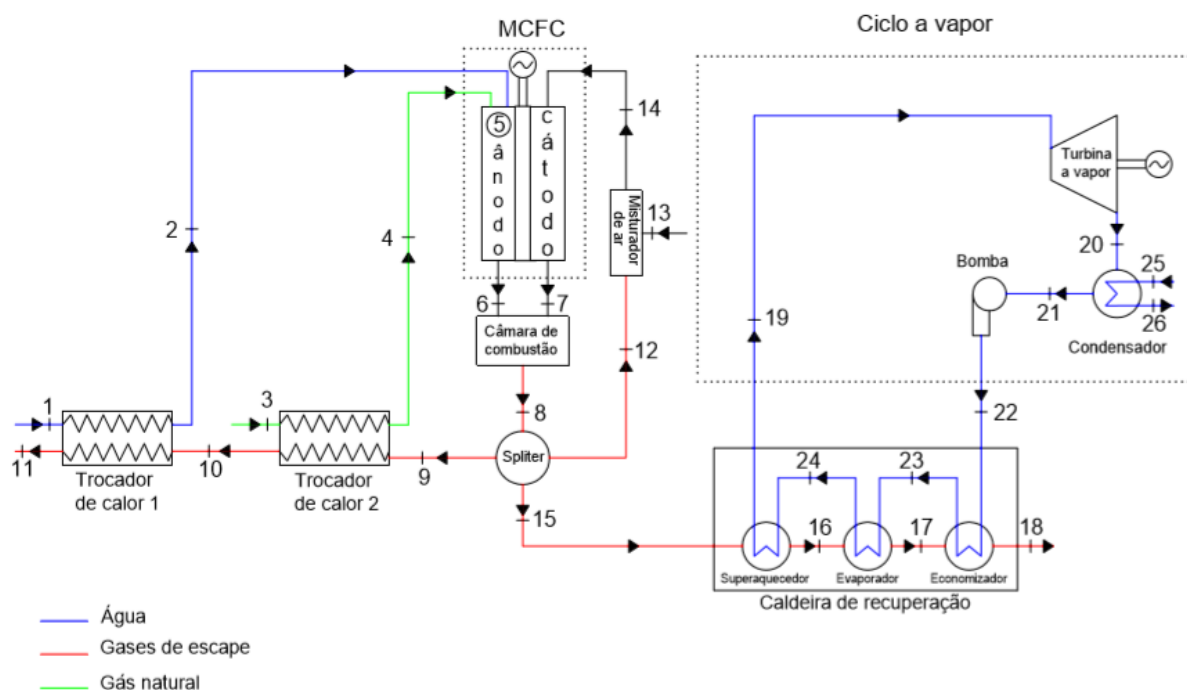
3 MATERIAIS E MÉTODOS

Nessa seção é apresentado o ciclo proposto para o projeto, bem como os métodos utilizados para as análises técnica (energética e exergética) e econômica. Todos os cálculos da análise técnica e econômica apresentados foram solucionados pelo *software Engineering Equation Solver (EES)*, enquanto os produtos da reforma foram obtidos através do *STANJAN Chemical Equilibrium Solver*.

3.1 CICLO PROPOSTO

O ciclo proposto neste trabalho é uma combinação de célula a combustível de carbonato fundido com um ciclo a vapor. A célula opera com reforma interna a vapor utilizando gás natural e recirculação dos gases de escape oriundos de um processo de combustão. O ciclo é apresentado na Figura 15.

Figura 15. Configuração do ciclo proposto



Fonte: Autoria própria

No ciclo da Figura 15, água em temperatura ambiente é pré-aquecida entre os pontos 1 e 2 através do trocador de calor 1. Entre os pontos 3 e 4, o gás natural, combustível utilizado na reforma, é pré-aquecido através do trocador de calor 2 antes de entrar, juntamente com a água,

no reformador presente no ânodo, para que ocorra a reforma dentro da célula (ponto 5). Os produtos da semi-reação do ânodo e os gases que não reagiram, representados pelo ponto 6, são liberados e se misturam aos gases de saída do cátodo, representados pelo ponto 7, na câmara de combustão. Após a queima, os gases de escape (ponto 8) se dividem em três vazões através de um *splitter* simples: a vazão do ponto 9 é direcionada para pré-aquecer a água e o gás natural através dos trocadores de calor 1 e 2; a vazão do ponto 12 recebe ar (ponto 13) para se enriquecer de N_2 e O_2 e diminuir sua temperatura antes de voltar ao cátodo (ponto 14), onde ocorre a semi-reação deste eletrodo; e, por fim, o ponto 15 alimenta uma caldeira de recuperação. Nesse equipamento, os gases de escape liberam calor e diminuem sua temperatura até o ponto 18. O fluxo de água que opera o ciclo a vapor recebe o calor rejeitado por esses gases e é superaquecido (ponto 19) antes de entrar na turbina a vapor. Após sua expansão, a água entra no condensador (ponto 20) para sua total condensação. Nesse componente, a rejeição de calor aquece um fluxo de água de arrefecimento, representado pelos pontos 25 e 26. Após sair do condensador, a água do ciclo a vapor segue para a entrada da bomba, representada pelo ponto 21, para que sua pressão seja elevada antes da entrada da caldeira de recuperação (ponto 22). Todos os pontos descritos, juntamente com seus respectivos estados, estão representados na Tabela 3.

Tabela 3. Descrição dos pontos do ciclo

(continuação)

Ponto	Descrição	Ponto	Descrição
1	Água fria	11	Gases de escape
2	Vapor	12	Gases de escape
3	Gás natural frio	13	Ar atmosférico
4	Gás natural pré-aquecido	14	Mistura gasosa
5	Gás de síntese rico em H_2	15	Gases de escape
6	Produtos da semi-reação do ânodo e gases que não reagiram	16	Gases de escape
7	Produtos da semi-reação do cátodo e gases que não reagiram	17	Gases de escape
8	Gases de escape	18	Gases de escape
9	Gases de escape	19	Vapor superaquecido
10	Gases de escape	20	Mistura bifásica

Tabela 3. Descrição dos pontos do ciclo

(conclusão)			
Ponto	Descrição	Ponto	Descrição
21	Água líquida	24	Vapor saturado
22	Água líquida pressurizada	25	Água fria
23	Água quente	26	Água fria

Fonte: Autoria própria

Tanto a célula a combustível quanto a turbina a vapor geram potência útil para o ciclo. A bomba, por outro lado, consome parte desta energia para seu funcionamento. O sistema possui, então, uma potência líquida, que é representada pela equação (8), na qual o termo $\dot{W}$ representa a potência gerada ou consumida pelo componente, e os subscritos MCFC, t e b representam célula a combustível de carbonato fundido, turbina a vapor e bomba, respectivamente

$$\dot{W}_{liq} = \dot{W}_{MCFC} + \dot{W}_t - \dot{W}_b \quad (8)$$

Para o sistema como um todo, define-se a eficiência de geração do ciclo como a relação entre energia útil gerada e energia primária utilizada. Como compara dois valores energéticos, é chamada de eficiência de 1ª lei, referenciando a 1ª lei da termodinâmica. Em termos práticos, essa eficiência é equacionada como a divisão entre a potência líquida gerada pelo ciclo e a energia contida no combustível considerando-se seu poder calorífico inferior, conforme equação (9), na qual $\dot{n}$ e $\overline{PCI}$ representam a vazão molar e o poder calorífico inferior, respectivamente. O subscrito gn indica a utilização desses parâmetros para o gás natural.

$$\eta_{cicloI} = \frac{\dot{W}_{liq}}{\dot{n}_{gn} \overline{PCI}_{gn}} \quad (9)$$

Adicionalmente à comparação em termos energéticos, é conveniente obter-se a relação entre potência líquida gerada e os valores de exergia das fontes primárias em suas condições iniciais, definindo-se, portanto, a eficiência de 2ª lei para o ciclo, conforme equação (10), em que $\dot{E}x_i$ representa a taxa de transferência de exergia total do ponto i .

$$\eta_{cicloII} = \frac{\dot{W}^{líq}}{\dot{E}_{X1} + \dot{E}_{X3}} \quad (10)$$

3.1.1 Análise técnica

A análise técnica baseia-se fundamentalmente nos balanços de massa, energia e exergia. Considera-se, para aplicação dessa análise nos componentes do ciclo, volumes de controle em regime permanente, sem qualquer tipo de acúmulo de massa ou energia. Todos os fluidos gasosos presentes no sistema são tratados como gases ideais.

Para um determinado ponto i do ciclo, a relação entre as vazões mássicas e molares é representada pela equação (11).

$$\dot{m}_i = \dot{n}_i \cdot MM_i \quad (11)$$

A massa molar de cada fluido é calculada através da soma das massas molares de cada elemento presente no fluxo, conforme equação (12), na qual X_j representa a fração molar da substância j presente na mistura gasosa.

$$MM_i = \sum X_j MM_j \quad (12)$$

Uma vez que operam em regime permanente, a continuidade dos componentes é formulada conforme equação (13).

$$\sum \dot{m}_e = \sum \dot{m}_s \quad (13)$$

Todos os componentes do ciclo são analisados segundo a primeira lei da termodinâmica para um volume de controle operando em regime permanente, desprezando-se as variações de energias cinética e potencial, conforme equação (14).

$$0 = \dot{Q}_{vc} - \dot{W}_{vc} + \sum \dot{n}_e \cdot \bar{h}_e - \sum \dot{n}_s \cdot \bar{h}_s \quad (14)$$

Do ponto de vista exergetico, a análise é feita segundo o balanço de taxa de transferência de exergia dos componentes, desprezando-se os parâmetros associados às energias cinética e potencial. A equação (15) representa esse balanço, na qual o termo $\dot{E} x^{\dot{W}}$ representa a taxa de transferência de exergia relacionada à potência consumida ou gerada pelo componente k , enquanto $\dot{E} x^{\dot{Q}}$ refere-se a esse parâmetro relacionado ao calor absorvido ou rejeitado pelo componente. Nesta equação, define-se que a taxa de transferência de irreversibilidade de um equipamento, $\dot{I}_k$, é igual a sua variação da taxa de geração de exergia. Em outras palavras, a irreversibilidade é a quantificação de perdas exergeticas em um determinado componente k .

$$\left(\dot{E} x^{\dot{W}} + \dot{E} x^{\dot{Q}} + \sum \dot{n} \bar{e} \right)_{k,e} - \left(\dot{E} x^{\dot{W}} + \dot{E} x^{\dot{Q}} + \sum \dot{n} \bar{e} \right)_{k,s} = \dot{I}_k \quad (15)$$

O cálculo da exergia específica total de cada ponto é feito com base na equação (16), a qual considera as exergias física e química do fluido (MATELLI; BAZZO, 2005).

$$\bar{e}_i = \bar{e}_{f,i} + \bar{e}_{q,i} \quad (16)$$

As exergias física e química específicas são calculadas conforme equações (17) e (18), respectivamente (MATELLI; BAZZO, 2005).

$$\bar{e}_{q,i} = \sum_{j=1}^N X_j \bar{\xi}_j + T_0 \bar{R} (X_j \ln X_j) \quad (17)$$

$$\bar{e}_{f,i} = (\bar{h}_i - \bar{h}_0) - T_0 (\bar{s}_i - \bar{s}_0) \quad (18)$$

A exergia química padrão, ξ , é uma propriedade característica de cada substância j e, portanto, é tabelada. A Tabela 4 possui valores desse parâmetro para as substâncias usadas nesse trabalho, bem como a numeração de j utilizada para cada substância.

Tabela 4. Exergia química padrão de diversas substâncias

j	Substância	ξ (kJ/kmol)
1	H ₂	238490
2	CO	275430
3	CO ₂	20140
4	H ₂ O _(g)	11710
	H ₂ O _(l)	3120
5	CH ₄	836510
6	C ₂ H ₆	1504360
7	N ₂	720
8	O ₂	3970
9	C ₃ H ₈	2163190
10	C ₄ H ₁₀	2818930
11	C ₅ H ₁₂	3477050
12	C ₆ H ₁₄	4131590

Fonte: Kotas (1985)

O cálculo da taxa de transferência de exergia total em cada ponto do ciclo é feito através da equação (19).

$$\dot{E}_{Xi} = \bar{e}_i \cdot \dot{n}_i \quad (19)$$

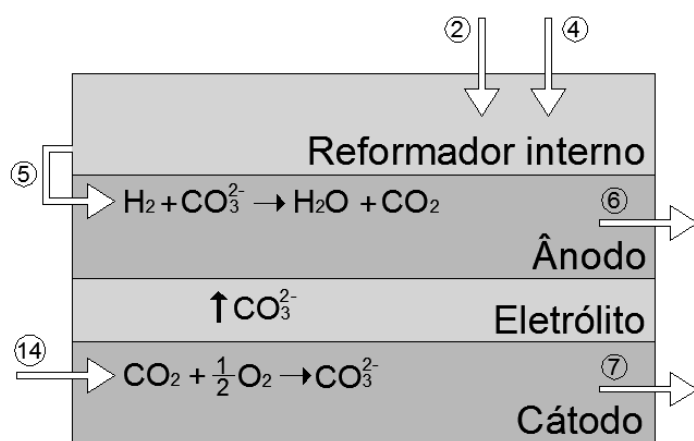
A relação entre a exergia que sai de um determinado componente e a exergia que entra nele é chamada de eficiência racional (ψ), representada pela equação (20). Esse parâmetro revela as perdas exergéticas do ciclo e aponta quais componentes devem ser otimizados para se obter uma melhora na eficiência.

$$\psi_k = \frac{\Delta \dot{E}_{Xs}}{\Delta \dot{E}_{Xe}} = 1 - \frac{\dot{I}_k}{\Delta \dot{E}_{Xe}} \quad (20)$$

3.1.1.1 MCFC

Para a análise da célula a combustível de carbonato fundido, considera-se as suas temperaturas uniformes e constantes, o sistema gerando energia em processo adiabático, todo o calor rejeitado pela célula sendo absorvido pelo reformador para o processo de reforma e reações eletroquímicas realizadas no equilíbrio. O dispositivo, com os respectivos pontos de entrada e saída do ciclo, está representado pela Figura 16.

Figura 16. Célula a combustível de carbonato fundido



Fonte: Autoria própria

Pode-se notar, através da Figura 16, os fluxos de vapor (ponto 2) e gás natural pré-aquecido (ponto 4) entrando no reformador interno. A composição de gás natural, a qual é formada principalmente por metano, com traços de outros hidrocarbonetos, nitrogênio e dióxido de carbono, é apresentada detalhadamente na seção 3.2 deste trabalho. O gás de síntese rico em hidrogênio (ponto 5) reage com íons carbonato, provenientes da semi-reação do cátodo que, por sua vez, recebe uma mistura contendo as substâncias necessárias (CO_2 e O_2) para a formação do carbonato. Os gases que saem dos eletrodos (pontos 6 e 7) são compostos pelos produtos das semi-reações e substâncias que não reagiram nesses processos.

A reação global desse equipamento, conforme ilustra a Figura 16, é representada pela equação (21).



O potencial real máximo da célula é limitado pela energia livre de Gibbs, uma vez que sua conversão se dá através de uma reação eletroquímica. Esse parâmetro, chamado de potencial reversível de Nerst, é calculado através da equação (22), levando-se em conta a reação global da MCFC (LARMINIE; DICKS, 2000). Nessa equação, o termo pp_j representa a pressão parcial da substância j nos eletrodos indicados.

$$E^0 = E_{ca} + \frac{\bar{R}T_{cel}}{n_e F} \ln \left(\frac{pp_{H_2(an)} \cdot pp_{O_2(cat)}^{\frac{1}{2}} \cdot pp_{CO_2(cat)}}{pp_{H_2O(an)} \cdot pp_{CO_2(an)}} \right) \quad (22)$$

O termo E_{ca} , o qual representa o potencial da célula para circuito aberto (sem perdas), é calculado através da equação (23), a qual leva em consideração o número de elétrons liberado na semi-reação do ânodo, n_e , e a constante de Faraday, F .

$$E_{ca} = \frac{-\Delta \bar{g}_{fo}}{n_e F} \quad (23)$$

A variação da energia livre de Gibbs de formação, representada pela equação (24), é função da temperatura de operação da célula (ZHANG; LIN; CHEN, 2011).

$$-\Delta \bar{g}_{fo} = 242000 - 45,8T_{cel} \quad (24)$$

O potencial real da célula é calculado considerando-se as perdas devido aos sobrepotenciais dos eletrodos e ôhmico. O método de quantificação dessas perdas para a MCFC com temperatura de operação entre 600 e 700 °C foi desenvolvido por Yuh e Selman (1991) e é, atualmente, utilizado em diversos trabalhos (ZHANG; LIN; CHEN, 2011). Os sobrepotenciais anódico, catódico e ôhmico estão representados pelas equações (25), (26) e (27), respectivamente.

$$U_{an} = 2,27 \cdot 10^{-9} j \exp \left(\frac{E_{atv(an)}}{RT_{cel}} \right) pp_{H_2(an)}^{-0,42} pp_{CO_2(an)}^{-0,17} pp_{H_2O(an)}^{-1} \quad (25)$$

$$U_{cat} = 7,50510^{-10} j \exp \left(\frac{E_{atv(cat)}}{RT_{cel}} \right) pp_{O_2(cat)}^{-0,43} pp_{CO_2(cat)}^{-0,09} \quad (26)$$

$$U_{ohm} = 5 \cdot 10^{-5} j \exp \left[3016 \left(\frac{1}{T_{cel}} - \frac{1}{923} \right) \right] \quad (27)$$

Assim, descontadas as perdas, o potencial líquido de uma célula é calculado através da equação (28).

$$U_{cel} = E^0 - U_{an} - U_{cat} - U_{ohm} \quad (28)$$

A potência de uma célula, portanto, será função do seu potencial, sua densidade de corrente, j , e sua área, A , conforme equação (29).

$$\dot{W}_{cel} = jAU_{cel} \quad (29)$$

Considerando N células na composição do *stack*, a potência gerada pela MCFC é obtida somando-se a potência gerada por cada célula, conforme equação (30).

$$\dot{W}_{MCFC} = N \dot{W}_{cel} \quad (30)$$

Define-se a eficiência de conversão da MCFC como a relação entre a potência real gerada pela célula e a entalpia da reação eletroquímica global, conforme equação (31)

$$\eta_{MCFC} = \frac{\dot{W}_{MCFC}}{-\Delta \dot{H}} = \frac{n_e F U_{cell}}{-\Delta \bar{h}} \quad (31)$$

A variação de entalpia da reação global $\Delta \bar{h}$ é calculada pela equação (32), na qual as entalpias foram obtidas na temperatura de operação da célula.

$$\Delta \bar{h} = \sum (X_j \bar{h}_j)_{produtos} - \sum (X_j \bar{h}_j)_{reagentes} = \bar{h}_{H_2O} - \bar{h}_{H_2} - \frac{1}{2} \bar{h}_{O_2} \quad (32)$$

Pode-se definir as eficiências de 1ª e 2ª Leis de uma célula a combustível que opera com reforma de gás natural como a relação entre a energia gerada pela célula e aquela contida no

combustível considerando seu poder calorífico superior (1ª Lei) ou relacionando-a com a exergia do combustível (2ª Lei), conforme equações (33) e (34).

$$\eta_{el, I} = \frac{\dot{W}_{MCFC}}{\dot{n}_{gn} \overline{PCI}_{gn}} \quad (33)$$

$$\eta_{el, II} = \frac{\dot{W}_{MCFC}}{\dot{E}_{X1} + \dot{E}_{X3}} \quad (34)$$

A vazão molar de H_2 necessária para a geração de potência de uma célula ($\dot{W}_{cel}$) é obtida através da equação (35) (MATELLI; BAZZO, 2005).

$$\dot{n}_{H_2, cel} = \frac{\dot{W}_{cel}}{n_e F U_{cel}} \quad (35)$$

Como a MCFC é formada por N células, deve-se somar a vazão molar de H_2 de cada célula para se obter a vazão total do *stack*, conforme equação (36).

$$\dot{n}_{H_2, stack} = N \dot{n}_{H_2, cel} \quad (36)$$

Considerando que não é possível que o H_2 seja consumido em sua totalidade dentro do ânodo, é conveniente definir uma taxa de utilização de hidrogênio, ϕ_{H_2} , como a relação entre a vazão de hidrogênio consumida pelo *stack* e aquela produzida pela reforma a vapor, conforme equação (37).

$$\phi_{H_2} = \frac{\dot{n}_{H_2, stack}}{\dot{n}_{H_2, reforma}} \quad (37)$$

Considera-se que todo o hidrogênio que é consumido no *stack*, já considerando sua taxa de utilização, se torna reagente da semi-reação do ânodo, produzindo H_2O e $CO_{2(an)}$ em quantidades estequiométricas, conforme equação (38).

$$\dot{n}_{H_2, stack} = \dot{n}_{CO_2(an)} = \dot{n}_{H_2O(an)} \quad (38)$$

A vazão de saída do ânodo é formada por gases do produto da reforma que não reagiram somados aos fluxos de CO_2 e H_2O que foram produzidos na semi-reação deste eletrodo. Seu balanço molar, portanto, é representado pela equação (39), na qual $\dot{n}_6$ e $\dot{n}_5$ são os fluxos molares dos pontos 6 e 5, respectivamente.

$$\dot{n}_6 = \dot{n}_5 - \dot{n}_{H_2, stack} + \dot{n}_{CO_2(an)} + \dot{n}_{H_2O(an)} \quad (39)$$

O cátodo, por sua vez, recebe vazões de $CO_{2(cat)}$ e O_2 que fornecem os íons carbonato (CO_3^{2-}) em quantidade suficiente para que todo o hidrogênio do *stack* seja consumido no ânodo, conforme equação (40).

$$\dot{n}_{CO_2(cat)} = 2 \dot{n}_{O_2(cat)} = \dot{n}_{H_2, stack} \quad (40)$$

Assim como ocorre com o H_2 no ânodo, não é possível que os fluxos de CO_2 e O_2 fornecidos ao cátodo sejam totalmente consumidos. Portanto, são estabelecidas as taxas de utilização de CO_2 e O_2 neste eletrodo, conforme as equações (41) e (42), respectivamente (DUAN et al., 2016; CARAPELLUCCI; SAIA; GIORDANO, 2014). Os termos $X[14;3]$ e $X[14;8]$ representam as frações molares de CO_2 e O_2 no ponto 14, respectivamente

$$\phi_{CO_2} = \frac{\dot{n}_{CO_2(cat)}}{\dot{n}_{14}X[14;3]} \quad (41)$$

$$\phi_{O_2} = \frac{\dot{n}_{O_2(cat)}}{\dot{n}_{14}X[14;8]} \quad (42)$$

A vazão de saída do cátodo é formada por gases que não reagiram neste eletrodo, subtraindo-se o fluxo de íons carbonato que foram fornecidos à semi-reação do ânodo. Seu balanço molar, portanto, é representado pela equação (43), na qual os termos $\dot{n}_7$ e $\dot{n}_{14}$ são os fluxos molares dos pontos 7 e 14, respectivamente.

$$\dot{n}_7 = \dot{n}_{14} - \dot{n}_{CO_2(cat)} - \dot{n}_{O_2(cat)} \quad (43)$$

3.1.1.2 Trocadores de calor

Os trocadores de calor recebem gases de escape da câmara de combustão como fonte térmica para pré-aquecimento da água e do gás natural, que são utilizados na reforma a vapor na célula a combustível. Os balanços de massa desses equipamentos são representados pelas equações (44-47).

$$\dot{m}_1 = \dot{m}_2 \quad (44)$$

$$\dot{m}_{10} = \dot{m}_{11} \quad (45)$$

$$\dot{m}_3 = \dot{m}_4 \quad (46)$$

$$\dot{m}_9 = \dot{m}_{10} \quad (47)$$

Os balanços de energia nos trocadores 1 e 2, respectivamente, são representados pelas equações (48) e (49).

$$\dot{n}_{10}(\bar{h}_{10} - \bar{h}_{11}) = \dot{n}_2(\bar{h}_2 - \bar{h}_1) \quad (48)$$

$$\dot{n}_9(\bar{h}_9 - \bar{h}_{10}) = \dot{n}_4(\bar{h}_4 - \bar{h}_3) \quad (49)$$

3.1.1.3 Splitter

O *splitter* é responsável por dividir a vazão de saída da câmara de combustão em três: uma alimenta os trocadores de calor 1 e 2; outra recebe ar e retorna à célula a combustível pelo cátodo; e, por fim, uma das vazões opera como fonte térmica para uma caldeira de recuperação. Seu balanço de massa é representado pela equação (50).

$$\dot{m}_8 = \dot{m}_9 + \dot{m}_{15} + \dot{m}_{12} \quad (50)$$

3.1.1.4 Misturador de ar

O ponto 12 representa parte da vazão de gases de escape que recircula para a célula a combustível. Para que sua temperatura seja diminuída e sua quantidade de O₂ seja suficiente para a demanda do cátodo, essa vazão recebe ar (ponto 13) através de um misturador de ar, antes de seguir de volta para a célula. Para este processo, o balanço de energia é representado pela equação (51).

$$\dot{n}_{14}\bar{h}_{14} = \dot{n}_{12}\bar{h}_{12} + \dot{n}_{13}\bar{h}_{13} \quad (51)$$

3.1.1.5 Câmara de combustão

A câmara de combustão recebe os gases de saída dos eletrodos da célula a combustível, queimando-os e liberando os gases de escape, compostos por quantidades estequiométricas de CO₂, H₂O e O₂, além da presença do N₂, que não reage. Na simulação, é considerado que todos os átomos de C, H e O que entram na câmara através dos fluxos 6 e 7 formem somente CO₂, H₂O e O₂, enquanto toda a vazão de N₂ é liberada sem alteração na quantidade. As vazões totais de saída de cada elemento são somadas para que seja calculada a vazão total na saída deste equipamento, conforme equação (52).

$$\dot{n}_8 = \dot{n}_{8, CO_2} + \dot{n}_{8, H_2O} + \dot{n}_{8, N_2} + \dot{n}_{8, O_2} \quad (52)$$

Os balanços de massa e energia deste equipamento são representados pelas equações (53) e (54), respectivamente.

$$\dot{m}_8 = \dot{m}_7 + \dot{m}_6 \quad (53)$$

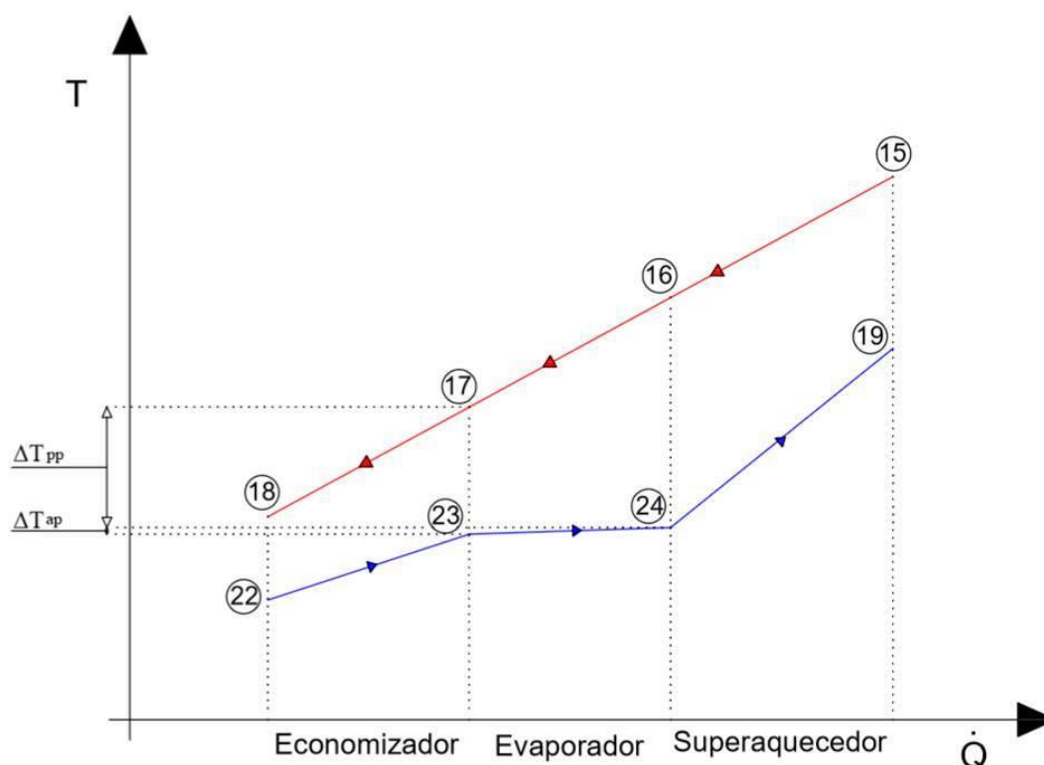
$$\dot{n}_8\bar{h}_8 = \dot{n}_6\bar{h}_6 + \dot{n}_7\bar{h}_7 \quad (54)$$

3.1.1.6 Caldeira de recuperação

A caldeira de recuperação recebe os gases de escape à alta temperatura (ponto 15) e é responsável pela troca de calor com a água, que entra pressurizada no estado líquido (ponto 22) e se transforma em vapor superaquecido (ponto 19), o qual aciona a turbina a vapor. A

modelagem foi feita considerando-se o arranjo de vazões contra-corrente, mais usual nos projetos. O processo é ilustrado pelo gráfico da Figura 17.

Figura 17. Processo de troca de calor na caldeira de recuperação



Fonte: Autoria própria

Na Figura 17, é possível notar uma queda aproximadamente linear de temperatura dos gases de escape. A água, no entanto, sofre mudança de fase ao longo do processo. No economizador, esse fluido é pré-aquecido para uma temperatura próxima à de saturação. No evaporador, atinge essa temperatura e se transforma em vapor saturado. Na sequência, a vazão de água entra no superaquecedor, onde recebe calor e se transforma em vapor superaquecido, seguindo para a turbina.

Para que o processo se aproxime do real, duas diferenças de temperatura são estipuladas. A primeira diferença, chamada de *approach point*, se dá entre a temperatura de saturação atingida pela água e aquela com que ela sai do evaporador. Outra aproximação importante é delimitar a diferença entre a temperatura dos gases de escape saindo do evaporador e aquela de saturação da água. Essa diferença é chamada de *pinch point* (GANAPATHY, 1994). No presente trabalho, o *approach point* e o *pinch point* estão ilustrados na Figura 17 e representados pelas equações (55) e (56).

$$\Delta T_{ap} = T_{24} - T_{23} \quad (55)$$

$$\Delta T_{pp} = T_{17} - T_{24} \quad (56)$$

Pequenos valores de *pinch point* implicam em área de troca térmica e, conseqüentemente, maior recuperação de calor e maior custo deste equipamento; o valor do *approach point*, por outro lado, é adotado a fim de evitar-se formação de vapor no economizador (ELLIOTT; CHEN; SWANEKAMP, 1998). Segundo Elliott, Chen e Swanekamp (1998), os valores usuais desses parâmetros variam entre 11 e 28 °C para o *pinch point* e entre 6 e 17 °C para o *approach point*.

O balanço de massa do economizador está representado pelas equações (57) e (58).

$$\dot{m}_{17} = \dot{m}_{18} \quad (57)$$

$$\dot{m}_{22} = \dot{m}_{23} \quad (58)$$

O balanço de energia deste componente é apresentado pela equação (59).

$$\dot{n}_{18}(\bar{h}_{17} - \bar{h}_{18}) = \dot{n}_{23}(\bar{h}_{23} - \bar{h}_{22}) \quad (59)$$

Para o evaporador, o balanço de massa está representado pelas equações (60) e (61).

$$\dot{m}_{16} = \dot{m}_{17} \quad (60)$$

$$\dot{m}_{23} = \dot{m}_{24} \quad (61)$$

O balanço de energia deste componente segue a formulação da equação (62).

$$\dot{n}_{17}(\bar{h}_{16} - \bar{h}_{17}) = \dot{n}_{24}(\bar{h}_{24} - \bar{h}_{23}) \quad (62)$$

O balanço de massa do superaquecedor está representado pelas equações (63) e (64).

$$\dot{m}_{15} = \dot{m}_{16} \quad (63)$$

$$\dot{m}_{24} = \dot{m}_{19} \quad (64)$$

O balanço de energia deste componente está representado pela equação (65).

$$\dot{n}_{15}(\bar{h}_{15} - \bar{h}_{16}) = \dot{n}_{19}(\bar{h}_{19} - \bar{h}_{24}) \quad (65)$$

3.1.1.7 Turbina a vapor

A turbina recebe fluxo de vapor com pressão e temperatura previamente fixados, expandindo-o e gerando potência útil, que será adicionada ao total de energia gerada pela MCFC. O balanço de massa deste componente está representado pela equação (66).

$$\dot{m}_{19} = \dot{m}_{20} \quad (66)$$

A geração de energia da turbina a vapor é limitada pelo seu valor isentrópico. Porém, em aplicações reais, sua operação apresenta perdas, sendo o valor de seu rendimento isentrópico estimado entre 0,70 e 0,88 (BORGNAKKE; SONNTAG, 2009). A equação (67) representa o rendimento isentrópico da turbina a vapor η_t .

$$\eta_t = \frac{\bar{h}_{19} - \bar{h}_{20}}{\bar{h}_{19} - \bar{h}_{20s}} \quad (67)$$

O valor da entalpia no ponto 20 ideal, $\bar{h}_{20s}$, é aquele que apresenta a mesma entropia da entrada da turbina ($\bar{s}_{20} = \bar{s}_{19}$), o que caracterizaria uma operação isentrópica. Já $\bar{h}_{20}$ representa o valor da entalpia na condição real de operação, em que $s_{20} > s_{19}$. O cálculo da potência gerada é feito com base no balanço de energia deste componente, conforme equação (68).

$$\dot{W}_t = \dot{n}_{19}(\bar{h}_{19} - \bar{h}_{20}) \quad (68)$$

3.1.1.8 Condensador

O condensador recebe a vazão de saída da turbina, onde usualmente se encontra uma mistura bifásica, resultado do processo de expansão. Essa mistura não deve conter mais de 10% de água líquida, uma vez que o excesso dessa quantidade diminui a eficiência da turbina a vapor e pode causar erosão na superfície de suas pás (BORGNAKKE; SONNTAG, 2009). O equipamento, então, troca calor com um fluxo externo de água, liberando água líquida saturada ($x = 0$) de volta ao ciclo. O balanço de massa está representado pelas equações (69) e (70).

$$\dot{m}_{21} = \dot{m}_{20} \quad (69)$$

$$\dot{m}_{26} = \dot{m}_{25} \quad (70)$$

O balanço de energia do condensador está representado pela equação (71).

$$\dot{n}_{20}(\bar{h}_{20} - \bar{h}_{21}) = \dot{n}_{25}(\bar{h}_{26} - \bar{h}_{25}) \quad (71)$$

3.1.1.9 Bomba

A bomba é o equipamento responsável por aumentar a pressão da água antes da entrada da caldeira de recuperação através da adição de trabalho de eixo. Como opera somente com líquidos, é importante que a bomba receba uma vazão cujo título seja nulo, ou seja, água no estado de líquido saturado. O balanço de massa está representado pela equação (72).

$$\dot{m}_{21} = \dot{m}_{22} \quad (72)$$

Assim como a turbina, seu rendimento é limitado pelo valor isentrópico do trabalho realizado, conforme equação (73).

$$\eta_b = \frac{\bar{h}_{22s} - \bar{h}_{21}}{\bar{h}_{22} - \bar{h}_{21}} \quad (73)$$

O valor da entalpia ideal do ponto 22, $\bar{h}_{22s}$, é aquele no qual a entropia é igual à entropia da entrada da bomba ($\bar{s}_{22} = \bar{s}_{21}$), o que caracterizaria a operação isentrópica (ideal) desse

componente. O trabalho realizado pela bomba é calculado através do balanço de energia, conforme equação (74).

$$\dot{W}_b = \dot{n}_{21}(\bar{h}_{22} - \bar{h}_{21}) \quad (74)$$

3.1.2 Análise exergoeconômica

A análise exergoeconômica é aquela que envolve conceitos econômicos e exergéticos que, combinados, indicam o custo exergético de cada fluxo do ciclo. Assim, é possível detalhar quais vazões ou componentes apresentam maior influência no custo da energia gerada pela planta. O objetivo dessa análise é determinar o custo dos produtos do sistema (NAMI; MAHMOUDI; NEMAT, 2017).

A introdução do conceito de análise exergoeconômica foi feita por Tsatsaronis e Pisa (1994). Em seu trabalho, os autores basearam-se no fator de recuperação de capital (FRC), cujo cálculo é apresentado pela equação (75), na qual o termo i representa a taxa de juros aplicada ao ano e n o tempo de operação da planta em anos (NAMI; MAHMOUDI; NEMAT, 2017).

$$FRC = \frac{i(1+i)^n}{(1+i)^n - 1} \quad (75)$$

O FRC é determinante para o cálculo da taxa de custo de cada componente k do ciclo, o qual se refere ao seu custo por unidade de tempo, levando em consideração sua aquisição, operação e manutenção. A equação (76) representa o cálculo desse parâmetro (NAMI; MAHMOUDI; NEMAT, 2017). Nela, Φ é o fator de manutenção, H é o número de horas de operação do sistema e Z_k é o custo de aquisição de determinado componente k , detalhado na seção 3.1.2.1

$$\dot{Z}_k = \frac{Z_k \Phi FRC}{3600H} \quad (76)$$

Cada componente possui taxas de custo de entrada e saída, relacionadas aos respectivos fluxos molares. Seu balanço de custo é apresentado pela equação (77), na qual $\dot{C}_{k,w}$ representa

a taxa de custo do trabalho gerado ou consumido pelo componente k , enquanto o termo $\dot{C}_{k,q}$ representa a taxa de custo do calor rejeitado/absorvido por ele.

$$\dot{C}_{k,s} + \dot{C}_{k,w} = \dot{C}_{k,q} + \dot{C}_{k,e} + \dot{Z}_k \quad (77)$$

Os equipamentos nos quais os processos são adiabáticos possuem o termo $\dot{C}_{k,q}$ nulo, enquanto aqueles que não requerem ou fazem trabalho possuem $\dot{C}_{k,w}$ igual a zero.

Cada parâmetro de taxa de custo é relacionado com um custo exerético de uma vazão do ciclo (TSATSARONIS; PISA, 1994). Portanto a taxa de custo é diretamente proporcional à taxa de transferência de exergia de um determinado ponto i , conforme equação (78).

$$\dot{C}_i = c_i \dot{E}_i \quad (78)$$

O custo exerético específico de um determinado fluxo, c , é definido por seu custo real de aquisição, no caso do gás natural, ou por relações auxiliares, especificadas na seção 3.1.4.3.

3.1.2.1 Funções de custo

O custo de aquisição de um determinado componente pode variar de acordo com trabalhos e autores. Portanto, é importante apresentar e detalhar as funções e o método de cálculo utilizados. No presente trabalho, os custos do splitter e do misturador de ar foram considerados como desprezíveis, conforme análise de outros autores da área (MEHRPOOYA et al., 2017; NAMI; MAHMOUDI; NEMATI, 2017).

3.1.2.1.1 Trocadores de calor

A função de custo para os trocadores de calor 1 e 2 está representada pela equação (79) (ARSALIS, 2008).

$$Z_{1,2} = 130 \left(\frac{A_{1,2}}{0,093} \right)^{0,78} \quad (79)$$

A área do trocador de calor, A_{tc} , calculado através da equação (80) (KAKAÇ, LIU, PRAMUANJAROENKIJ; 2012)

$$A_{1,2} = \frac{\dot{Q}_{tc1,2}}{Uf\Delta TML} \quad (80)$$

A transferência de calor em cada trocador, $\dot{Q}_{tc}$, é obtida através da análise energética desse componente. O fator de correção, f , é dependente do mecanismo de trabalho do trocador de calor e das temperaturas de entrada e saída dos fluidos. Ele foi obtido através de gráficos presentes no livro de Kakaç, Liu e Pramuanjaroenkij (2012), considerando-se um trocador de fluxos cruzados, sem mistura dos fluidos quente e frio. O coeficiente global de transferência de calor, U , foi considerado como 25 W/(m²K) e 15 W/(m²K) para os trocadores de calor 1 e 2, respectivamente, seguindo os parâmetros de Hewitt (2008) para esse modelo de equipamento e considerando o estado dos fluidos que entram neles. A diferença logarítmica de temperatura é calculada pela equação (81).

$$\Delta TML = \frac{(T_{h,s} - T_{c,e}) - (T_{h,e} - T_{c,s})}{\ln \frac{T_{h,s} - T_{c,e}}{T_{h,e} - T_{c,s}}} \quad (81)$$

3.1.2.1.2 MCFC

A função custo que considera somente a célula a combustível de carbonato fundido foi utilizada seguindo o método de Mehrpooya et al. (2017). Entretanto, foram somados a essa função os custos do inversor e dos componentes auxiliares, conforme equações (82-85) (SHIRAZI et al., 2012).

$$Z_3 = Z_{MCFC} + Z_{inv} + Z_{aux} \quad (82)$$

$$Z_{MCFC} = NA_{cel}(2,96T_{cel} - 1907) \quad (83)$$

$$Z_{inv} = 10^5 \left(\frac{\dot{W}_{MCFC}}{500} \right)^{0,7} \quad (84)$$

$$Z_{aux} = 0,1Z_{MCFC} \quad (85)$$

3.1.2.1.3 Câmara de combustão

A câmara de combustão possui função de custo dependente das vazões mássicas de entrada, temperatura de saída e queda de pressão no equipamento, conforme equação (86) (NAMI; MAHMOUDI; NEMATI, 2017)

$$Z_4 = 46,08(\dot{m}_7 + \dot{m}_6)[1 + \exp(0,018T_8 - 26,4)] \frac{1}{0,995 - \frac{P_8}{P_6}} \quad (86)$$

A relação P_8/P_6 , que representa a queda de pressão na câmara de combustão, foi considerada como 0,99.

3.1.2.1.4 Caldeira de recuperação

A função de custo considerada nesse trabalho para a caldeira de recuperação está representada pela equação (87). Ela depende de coeficientes monetários adotados, transferência de calor no equipamento, temperaturas e vazões mássicas de gás e vapor (BAGHERNEJAD, YAGHOUBI; 2011).

$$Z_5 = 4745 \left[\frac{\dot{Q}_{cr}}{\log(T_{15} - T_{18})} \right]^{0,8} + 11820\dot{m}_{24} + 658\dot{m}_{16} \quad (87)$$

3.1.2.1.5 Bomba

Segundo Carapellucci e Giordano (2013), a função de custo da bomba é proporcional à sua pressão de trabalho e ao seu rendimento isentrópico, conforme equação (88).

$$Z_6 = 940 \left(\frac{P_{22}}{1000} \right)^{0,71} \left(1 + \frac{0,2}{1 - \eta_b} \right) \quad (88)$$

3.1.2.1.6 Condensador

Segundo Nami, Mahmoudi e Nemati (2017), o custo de aquisição do condensador é função apenas da vazão mássica do fluido de trabalho, conforme equação (89).

$$Z_7 = 1773 \dot{m}_{20} \quad (89)$$

3.1.2.1.7 Turbina a vapor

A função de custo da turbina a vapor foi equacionada segundo Carapellucci e Giordano (2013). Parâmetros do vapor vivo (vapor de entrada da turbina) e a eficiência isentrópica da turbina são fatores que influenciam diretamente nessa função, conforme equação (90).

$$Z_8 = 5075,5 \dot{W}_t^{0,7} \left[1 + \left(\frac{0,05}{1 - \eta_t} \right)^3 \right] \left[1 + 5 \exp \left(\frac{T_{19} - 866}{10,42} \right) \right] \quad (90)$$

3.2 REFORMA A VAPOR

O processo de reforma a vapor é o responsável por produzir o hidrogênio que é consumido na célula. Na Figura 16, é possível observar o reformador recebendo os fluxos de água e gás natural, que absorvem a energia liberada pelas reações eletroquímicas da célula e reagem na temperatura de trabalho do equipamento.

Como citado no item 2.3.1.1, o principal fator para o cálculo da quantidade de vapor necessária para a reforma é a razão vapor/carbono (λ). Inicialmente, é necessária a composição do gás natural a ser utilizado. Para a região sudeste, a composição comercialmente disponível deste combustível é apresentada na Tabela 5.

Tabela 5. Composição do gás natural comercial na região sudeste

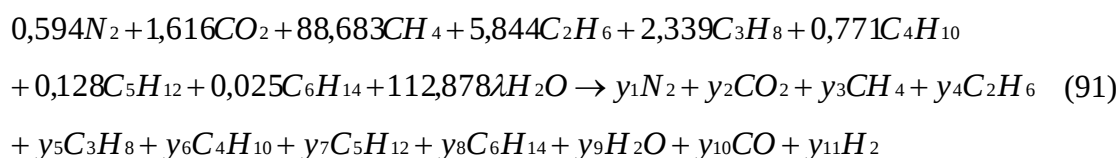
(continuação)	
Substância	Fração volumétrica (%)
N ₂	0,594
CO ₂	1,616
CH ₄	88,683
C ₂ H ₆	5,844
C ₃ H ₈	2,339
C ₄ H ₁₀	0,771

Tabela 5. Composição do gás natural comercial na região sudeste

(conclusão)	
Substância	Fração volumétrica (%)
C_5H_{12}	0,128
C_6H_{14}	0,025

Fonte: Comgás (2017)

A quantidade de átomos de carbono presente no gás natural, considerando-se 100 mols desse combustível, é obtida ao multiplicar-se a porcentagem molar da substância pela quantidade de átomos de carbono presente nela. Para os valores presentes na Tabela 5, é obtido o montante de 112,878 mols de átomos de carbono. Portanto, a reação de reforma do presente trabalho está representada pela equação (91).



Os coeficientes dos produtos da reforma, y , foram obtidos através de simulação pelo programa computacional *STANJAN Chemical Equilibrium Solver*, utilizando dados da composição do gás natural, quantidade de vapor como reagente do processo e temperatura de equilíbrio da reação. O programa determina a composição de equilíbrio da reação de reforma a vapor utilizando o método de elementos potenciais, em uma determinada condição de pressão e temperatura. Informações mais detalhadas sobre esse método são encontradas em (REYNOLDS, 1986).

A vazão mássica após a reforma é apresentada pela equação (92).

$$\dot{m}_5 = \dot{m}_2 + \dot{m}_4 \quad (92)$$

A vazão molar pode ser obtida aplicando-se o conceito de cálculo da vazão de qualquer substância presente no gás de síntese. A equação (93) representa esse cálculo considerando-se o H_2 , como foi aplicado na modelagem original.

$$\dot{n}_5 = \frac{\dot{n}_{H_2, reforma}}{y_{11}} \quad (93)$$

3.3 PREMISSAS ADOTADAS

3.3.1 Ar ambiente

As condições padrão desse ar estão representadas na Tabela 6.

Tabela 6. Condições do ar ambiente

Parâmetro	Valor
Composição	79%N ₂ / 21%O ₂
Temperatura [K]	298,15
Pressão [kPa]	101,3

Fonte: Autoria própria

3.3.2 MCFC

As condições de operação da célula, representadas na Tabela 7, estão de acordo com referências de trabalhos da área.

Tabela 7. Parâmetros de operação fixados para a MCFC

(continuação)		
Parâmetro	Valor	Fonte
Temperatura de operação (T)	923 [K]	Yang et al. (2016); Duan et al. (2016).
Pressão de operação (P)	101,3 [kPa]	Yoshiba; Izaki; Watanabe (2004).
Energia de ativação do cátodo (E _{atv(cat)})	77300 [kJ/kmol]	Zhang et al. (2016); Zhang et al. (2011).
Energia de ativação do ânodo (E _{atv(an)})	53500 [kJ/kmol]	Zhang et al. (2016); Zhang et al. (2011).
ϕ_{CO_2}	0,85	Duan et al. (2016).
Densidade de corrente (j)	1000 [A/m ²]	Vatani et al. (2013).

Tabela 7. Parâmetros de operação fixados para a MCFC

(conclusão)		
Parâmetro	Valor	Fonte
Número de células no stack	350	-
Potência gerada ($\dot{W}_{MCFC}$)	10000 [kW]	-

Fonte: Adaptado pelo autor

A Tabela 7 apresenta alguns parâmetros que são fixos para a melhor operação da célula. A temperatura de operação segue um valor característico de trabalho real do equipamento. A pressão de operação do ciclo foi fixada como a mesma do ambiente, uma vez que fluidos pressurizados podem levar a uma menor vida útil do *stack* (SÁNCHEZ et al., 2011). A densidade de corrente pode variar de acordo com o projeto, sendo desejável um valor que não intensifique as perdas, conforme discutido na seção 2.3.3.

A potência gerada pela célula a combustível pode variar de acordo com a sua área e a quantidade de células no *stack*, sendo característica inicial de projeto de uma planta geradora. Portanto, foi fixado um valor de geração de 10 MW, a fim de analisar seu comportamento para sistemas de grande porte. Entretanto, uma análise de sensibilidade foi feita a fim de observar o comportamento dos parâmetros de saída com a variação da capacidade da planta.

3.3.3 Fatores econômicos

Relações auxiliares são necessárias para tornar o número de equações igual ao número de incógnitas no sistema de equações que representa a análise exergoeconômica do ciclo (TSATSARONIS; PISA, 1994). A Tabela 8 fornece as relações utilizadas nesse trabalho.

Tabela 8. Relações auxiliares para a análise exergoeconômica

(continuação)	
Componente	Relações
Trocador de calor 2	$C_9 = C_{10}$
MCFC	$C_5 = C_6$
	$C_7 = C_{14}$
Condensador	$C_{25} = C_{26}$
Misturador de ar	$C_{12} = C_{14}$

Tabela 8. Relações auxiliares para a análise exergoeconômica
(conclusão)

Componente	Relações
Splitter	$c_8 = c_9 = c_{12} = c_{15}$
Relações de custo [USD/kJ]	Fonte
$c_1 = 3,1E-6$	-
$c_3 = 7,47E-6$	Nami; Mahmoudi; Nemati (2017)
$c_{11} = 0$	-
$c_{18} = 0$	-
$c_{25} = 0$	-

Fonte: Adaptado pelo autor

Através da Tabela 8, pode-se notar que os custos exergéticos das correntes dos gases de escape nas saídas do trocador de calor 2 e da caldeira de recuperação são considerados nulos, uma vez que são resíduos da geração do sistema. A vazão da água de arrefecimento do condensador também é considerada sem custo para essa análise, já que ela possui única função de resfriamento e é externa ao ciclo.

A análise exergoeconômica do ciclo foi baseada levando-se em consideração valores de operação da planta, os quais foram selecionados baseados em dados teóricos encontrados nas referências citadas na Tabela 9.

Tabela 9. Dados assumidos para a análise exergoeconômica

Parâmetro	Valor	Fonte
Anos de operação (n)	20 [anos]	Nami; Mahmoudi; Nemati (2017)
Fator de manutenção (Φ)	1,06	Nami; Mahmoudi; Nemati (2017)
Horas anuais de operação (H)	8000 [h/ano]	Mehrpooya et al. (2017)
Taxa de juros ao ano (i)	0,1	Mehrpooya et al. (2017)

Fonte: Adaptado pelo autor

3.3.4 Reforma a vapor

As vazões de água e gás natural são pré-aquecidas antes de entrar na célula. Suas temperaturas antes e depois da troca de calor foram fixadas conforme equações (94) e (95), respectivamente.

$$T_1 = T_3 = 298,15 \text{ K} \quad (94)$$

$$T_2 = T_4 = 383,15 \text{ K} \quad (95)$$

A razão vapor/carbono, λ , e a taxa de utilização do hidrogênio, ϕ_{H_2} , com valores representados pelas equações (96) e (97), respectivamente, foram fixadas conforme valores utilizados por pesquisadores da área (ERSÖZ, 2008; MATELLI; BAZZO, 2005).

$$\lambda = 3 \quad (96)$$

$$\phi_{H_2} = 0,9 \quad (97)$$

3.3.5 Ciclo combinado

As premissas da planta adotadas são mostradas na Tabela 10.

Tabela 10. Dados assumidos para a planta

Parâmetro	Valor
Temperatura do fluido aquecido (T_2, T_4)	383,15 [K]
Temperatura de saída dos gases de exaustão (T_{11})	423 [K]
Variação de temperatura do <i>pintch point</i> (ΔT_{pp})	20 [K]
Variação de temperatura do <i>approach point</i> (ΔT_{ap})	10 [K]

Fonte: Autoria própria

A temperatura do ponto 11, que representa a saída dos gases de escape do ciclo para o ambiente, foi fixada, para que fosse evitado o desgaste da tubulação devido à baixa temperatura (DUAN et al., 2016).

Com relação ao ciclo a vapor, suas condições representadas pela Tabela 11.

Tabela 11. Condições de operação do ciclo a vapor

Parâmetro	Valor
Temperatura do vapor vivo (T_{19})	600 [K]
Pressão do vapor vivo (P_{19})	1500 [kPa]
Temperatura de entrada da água de resfriamento do condensador (T_{25})	298,15 [K]
Temperatura de saída da água de resfriamento do condensador (T_{26})	303,15 [K]
Pressão de trabalho do condensador (P_{20})	50 [kPa]

Fonte: Autoria própria

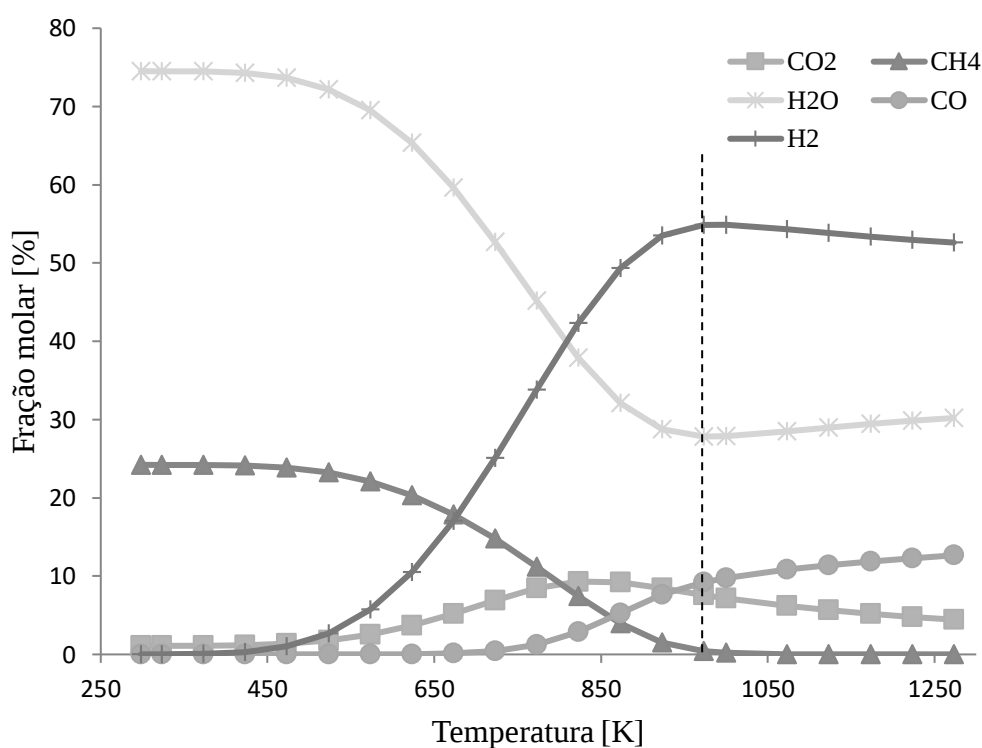
4 RESULTADOS E DISCUSSÕES

Nesse capítulo são apresentados e discutidos os resultados das simulações realizadas para a reforma a vapor do gás natural, pelo *software STANJAN Chemical Equilibrium Solver*, e operação do ciclo combinado, pelo *Engineering Equation Solver (EES)*.

4.1 REFORMA A VAPOR

As curvas da Figura 18 apresentam o resultado da simulação da reação de reforma a vapor do gás natural pelo *STANJAN* para as mesmas composições e vazões de combustível e água utilizados neste trabalho, porém em diferentes temperaturas.

Figura 18. Simulação da reforma a vapor do gás natural em diferentes temperaturas



Fonte: Autoria própria

Com exceção do metano, os hidrocarbonetos presentes no gás natural não possuem fração molar significativa no gás de síntese. Mais informações sobre esses valores podem ser verificadas na Tabela 12.

É possível notar, através da Figura 18, que a produção de hidrogênio pela reação de reforma é insignificante até 450 K. Após essa temperatura, a água começa a ser consumida

como reagente e, conseqüentemente, a sofrer uma diminuição em seu volume; enquanto a produção de H_2 tem um aumento significativo e atinge seu máximo em torno de 1000 K, quando sua fração molar é 54,9%. Nessa faixa de temperatura, pode ser visto que o CH_4 é quase todo consumido. O monóxido de carbono começa a ser formado em maior quantidade a partir de 850 K, mesma faixa de temperatura na qual o CO_2 apresenta um pico de produção.

A reação de reforma ocorre, neste trabalho, na mesma temperatura de operação da célula, 923 K, representada pela linha tracejada. Assim, a produção de hidrogênio para alimentação do *stack* se mostrou otimizada, uma vez que a célula opera em temperatura próxima àquela de produção máxima deste combustível. A Tabela 12 apresenta os valores dos coeficientes estequiométricos no equilíbrio da reação de reforma para 923 K, obtidos através do *STANJAN* e nomeados de acordo com a equação (91).

Tabela 12. Coeficientes estequiométricos para os produtos da reforma

Coeficiente	y ₁	y ₂	y ₃	y ₄	y ₅	y ₆
Valor [%]	0,093	8,427	1,521	3,610E-6	3,040E-11	4,050E-16
Coeficiente	y ₇	y ₈	y ₉	y ₁₀	y ₁₁	-
Valor [%]	3,650E-21	2,810E-26	28,783	7,645	53,533	-

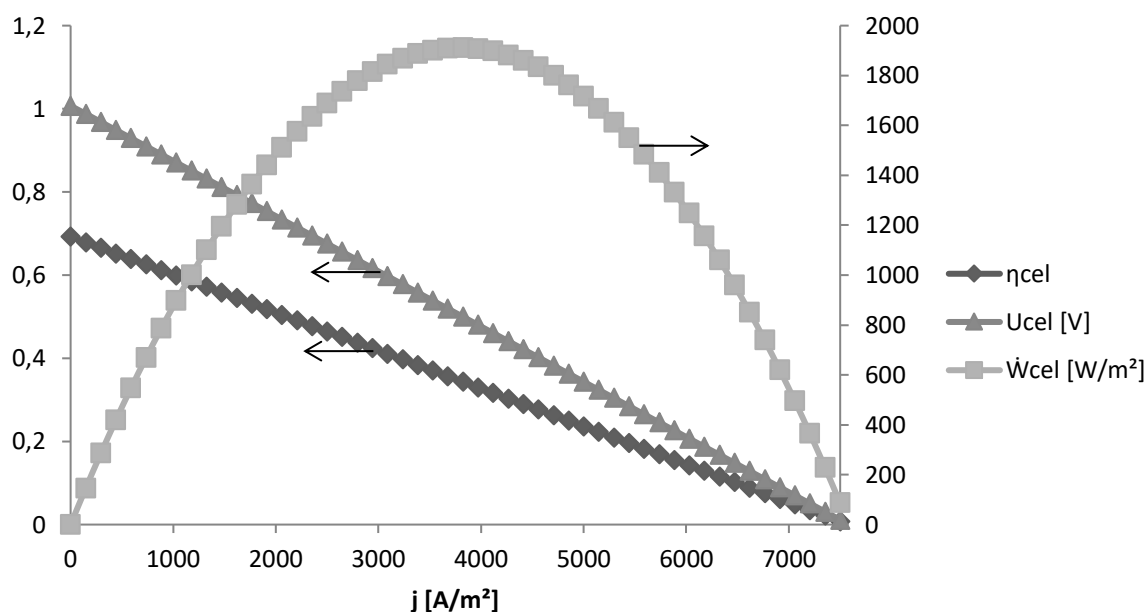
Fonte: Autoria própria

4.2 CICLO COMBINADO

4.2.1 Análise técnica

A célula a combustível é o principal componente gerador dentro do ciclo. Para caracterizar seu comportamento, é fundamental conhecer a sua curva de polarização. A Figura 19 ilustra a curva de polarização da célula do presente trabalho, com base na variação da densidade de corrente e os valores de $\dot{W}_{cel}$, U_{cel} e η_{cel} correspondentes. É possível observar que, embora a célula apresente valor máximo de potência com densidade de corrente em torno de 4000 A/m², o aumento desse parâmetro aumenta a queda de tensão no equipamento, conforme discutido no item 2.3.3.

Figura 19. Curva de polarização da MCFC deste trabalho



Fonte: Autoria própria.

A Figura 19 apresenta um comportamento linear da tensão e da eficiência da célula em função da densidade de corrente, de acordo com as equações (25-27). Embora essas equações sejam limitadas pelo intervalo de temperatura de operação da célula, a densidade de corrente pode variar livremente.

Considerando-se o valor de densidade de corrente adotado como aquele mostrado na Tabela 7, os resultados da simulação para as potências geradas pela célula e a líquida do ciclo, bem como as eficiências da 1ª Lei, estão representados pela Tabela 13.

Tabela 13. Resultados da simulação do ciclo combinado

Parâmetro	U_{cel}	$\dot{W}_{líq}$	η_{MCFC}	$\eta_{el,I}$	$\eta_{ciclo,I}$	$\eta_{el,II}$	$\eta_{ciclo,II}$	ϕ_{O_2}
	[V]	[kW]	[%]	[%]	[%]	[%]	[%]	-
Valor	0,84	10839	65,58	57,74	62,58	54,66	59,25	0,42

Fonte: Autoria própria

Através da Tabela 13, é possível observar características da célula a combustível, como o valor da tensão levando em consideração as perdas no equipamento e a alta eficiência eletroquímica, superior a 65%. Além disso, o fator de utilização de O_2 indica que a vazão de ar foi suficiente para suprir a quantidade necessária desse gás no cátodo.

Com relação aos parâmetros do ciclo, nota-se que a turbina a vapor foi responsável por aumentar a potência líquida da planta em 839 kW. Houve também aumentos de 4,8% na eficiência energética e 4,6% na eficiência exergética da configuração com o reaproveitamento do calor residual da célula a combustível nas condições apresentadas. Para ciclos combinados com MCFC, estudos presentes na literatura apresentam eficiências globais na faixa de 65-70%, próximo do atingido por este trabalho (RASHIDI; BERG; DINCER, 2009).

Como comparação do aumento da eficiência energética após o aproveitamento do calor residual da célula em outros trabalhos, Lunghi, Ubertini e Desideri (2001) aumentaram a eficiência energética de 59% para até 67%; Mastropasqua et al. (2017) elevaram a eficiência do ciclo com MCFC e um motor de combustão interna em quase 9%; e Baronci et al. (2015) conduziram um trabalho no qual o ciclo combinado da MCFC com um ciclo Rankine orgânico aumentou a eficiência global do sistema em 11%.

A planta desse trabalho, operando sob as condições propostas, apresentou valores de aumento um pouco menores, fato que pode ser explicado pela baixa disponibilidade de vapor para a turbina do ciclo Rankine. Maiores quantidades de gases de escape disponíveis para a produção de vapor poderiam aumentar a participação da turbina na geração total da planta, que, no presente trabalho, foi de pouco mais de 8,4%. Para isso, seria necessária uma nova configuração, na qual o pré-aquecimento das vazões de gás natural e água para reforma seria feito pelos gases de saída dos eletrodos, os quais possuem alta temperatura, antes de sua entrada na câmara de combustão. Assim, os produtos da queima seriam divididos somente para a entrada do cátodo e aquecimento da água na caldeira de recuperação.

Os parâmetros relacionados às vazões dos fluidos em cada ponto do ciclo, suas respectivas propriedades termodinâmicas e suas taxas de transferência de exergia são apresentados pela Tabela 14. Os resultados foram obtidos através do *software* EES.

Tabela 14. Parâmetros dos pontos do ciclo

(continuação)

i	$\dot{m}_i$ [kg/s]	$\dot{n}_i$ [kmol/s]	MM_i [kg/kmol]	P_i [kPa]	T_i [K]	$\bar{h}_i$ [kJ/kmol]	$\bar{s}_i$ [kJ/kmol K]	$\dot{E}x_i$ [kW]
1	1,217	0,06754	18,02	101,3	298,2	1889	6,61	210,7
2	1,217	0,06754	18,02	101,3	383,2	48570	133,5	1389
3	0,3681	0,01994	18,46	101,3	298,2	-81060	192,4	18083
4	0,3681	0,01994	18,46	101,3	383,2	-77585	202,6	18091
5	1,585	0,128	12,38	101,3	923	-91485	197,6	22188
6	5,285	0,1896	27,87	101,3	923	-257323	240,8	10334

Tabela 14. Parâmetros dos pontos do ciclo

(conclusão)

i	$\dot{m}_i$ [kg/s]	$\dot{n}_i$ [kmol/s]	MM_i [kg/kmol]	P_i [kPa]	T_i [K]	$\bar{h}_i$ [kJ/kmol]	$\bar{s}_i$ [kJ/kmol K]	$\dot{E}_{X_i}$ [kW]
7	30,56	1,204	25,38	101,3	923	-53990	227,5	14115
8	35,85	1,386	25,87	101,3	1041	-82142	234,2	22568
9	3,894	0,1505	25,87	101,3	1041	-82142	234,2	2452
10	3,894	0,1505	25,87	101,3	1028	-82603	233,8	2402
11	3,894	0,1505	25,87	101,3	423	-103548	203,4	613,2
12	27,36	1,057	25,87	101,3	1041	-82142	234,2	17223
13	6,905	0,2393	28,85	101,3	298,2	0	194,3	30,75
14	34,26	1,297	26,42	101,3	923	-66981	229,6	15775
15	4,596	0,1777	25,87	101,3	1041	-82142	234,2	2894
16	4,596	0,1777	25,87	101,3	972,1	-84692	231,7	2575
17	4,596	0,1777	25,87	101,3	491,5	-101344	208,2	859,5
18	4,596	0,1777	25,87	101,3	371,8	-105173	199,3	651,9
19	1,486	0,08247	18,02	1500	600	55782	126,4	2464
20	1,486	0,08247	18,02	50	354,5	45580	130,9	1512
21	1,486	0,08247	18,02	50	354,5	6135	19,66	286,7
22	1,486	0,08247	18,02	1500	354,7	6169	19,68	289
23	1,486	0,08247	18,02	1500	461,5	14417	39,98	469,9
24	1,486	0,08247	18,02	1500	471,5	50290	116,1	2265
25	155,5	8,633	18,02	101,3	298,2	1889	6,61	26935
26	155,5	8,633	18,02	101,3	303,2	2266	7,864	26962

Fonte: Autoria própria

É possível notar, através da Tabela 14, a necessidade de uma maior vazão de recirculação no cátodo (ponto 14), em comparação com aquela presente no ânodo (ponto 5). Isso acontece devido à adição da vazão de ar através do misturador (ponto 13), o qual tem função tanto de resfriamento da vazão de recirculação do gás de escape quanto alimentação de O₂, suprimindo a demanda dessa substância no cátodo. A temperatura máxima atingida pelo ciclo é a temperatura adiabática de chama após a câmara de combustão (pontos 8, 9, 12 e 15). As vazões liberadas ao ambiente (pontos 11 e 18) apresentam temperaturas elevadas o suficiente para evitar corrosão na sua tubulação de transporte.

Com relação às frações molares de cada substância presente nos fluidos, a Tabela 15 apresenta esses valores para cada ponto do ciclo. Os parâmetros $X_{i,j}$ se referem às frações molares de cada substância j , as quais estão listadas na primeira linha da Tabela 15, presentes no fluxo correspondente ao ponto i . Os resultados foram obtidos através do *software* EES.

Tabela 15. Frações molares de cada substância do ciclo

	H ₂	CO	CO ₂	H ₂ O	CH ₄	C ₂ H ₆	N ₂	O ₂	C ₃ H ₈	C ₄ H ₁₀	C ₅ H ₁₂	C ₆ H ₁₄
i	X _{i,1}	X _{i,2}	X _{i,3}	X _{i,4}	X _{i,5}	X _{i,6}	X _{i,7}	X _{i,8}	X _{i,9}	X _{i,10}	X _{i,11}	X _{i,12}
1	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0
2	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0
3	0	0	0,016	0	0,887	0,060	0,006	0	0,023	0,008	0,001	≈ 0
4	0	0	0,016	0	0,887	0,060	0,006	0	0,023	0,008	0,001	≈ 0
5	0,535	0,076	0,084	0,288	0,015	≈ 0	0,001	0	≈ 0	≈ 0	≈ 0	≈ 0
6	0,036	0,052	0,382	0,519	0,010	≈ 0	0,001	0	≈ 0	≈ 0	≈ 0	≈ 0
7	0	0	0,009	0,292	0	0	0,663	0,035	0	0	0	0
8	0	0	0,069	0,333	0	0	0,577	0,022	0	0	0	0
9	0	0	0,069	0,333	0	0	0,577	0,022	0	0	0	0
10	0	0	0,069	0,333	0	0	0,577	0,022	0	0	0	0
11	0	0	0,069	0,333	0	0	0,577	0,022	0	0	0	0
12	0	0	0,069	0,333	0	0	0,577	0,022	0	0	0	0
13	0	0	0	0	0	0	0,790	0,210	0	0	0	0
14	0	0	0,056	0,271	0	0	0,616	0,057	0	0	0	0
15	0	0	0,069	0,333	0	0	0,577	0,022	0	0	0	0
16	0	0	0,069	0,333	0	0	0,577	0,022	0	0	0	0
17	0	0	0,069	0,333	0	0	0,577	0,022	0	0	0	0
18	0	0	0,069	0,333	0	0	0,577	0,022	0	0	0	0
19	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0
20	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0
21	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0
22	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0
23	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0
24	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0
25	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0
26	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0

Fonte: Autoria própria

Na Tabela 15, a composição dos pontos 3 e 4 é aquela do gás natural, enquanto aquela do ponto 5 se refere ao gás de síntese pós-reforma. As frações molares que possuem valores muito

baixos foram aproximadas a zero, deixando claro que as misturas gasosas possuem traços dessas substâncias. Observa-se, a partir do ponto 8, somente a presença dos produtos da combustão na câmara, com aumento das frações molares de O_2 e N_2 após a entrada de ar no ciclo (ponto 13).

Para que o comportamento exergetico de cada componente seja verificado, a Tabela 16 indica os valores obtidos de suas eficiências racionais e taxas de transferência irreversibilidade.

Tabela 16. Parâmetros exergeticos dos componentes

k	Componente	$\dot{I}_k$ [kW]	Ψ [%]
1	Trocador de calor 1	610,7	76,63
2	Trocador de calor 2	40,85	99,8
3	Célula a combustível	806,3	97,71
4	Câmara de combustão	1881	92,31
5	Caldeira de recuperação	66,75	97,9
6	Bomba	0,47	99,84
7	Condensador	1198	95,78
8	Turbina a vapor	110,6	95,51
9	Misturador de ar	1479	91,43
10	Splitter	0	100

Fonte: Autoria própria

Como pode ser observado pela Tabela 16, o trocador de calor 1 é o equipamento com menor eficiência racional, visto que há uma quantidade significativa de calor latente absorvido pela água durante sua mudança de fase. O misturador de ar e a câmara de combustão seguem como os componentes com menor valor desse parâmetro. O splitter, por ter a função somente de separação de vazões, sem que ocorra troca de calor, perda de carga ou reação química durante o processo, possui valores iguais para as exergias de entrada e saída. Quanto à taxa de transferência de irreversibilidade, a câmara de combustão é o equipamento que apresenta maior valor, ou seja, é o componente que possui maior exergia destruída durante seu processo.

Para maiores informações sobre o equacionamento utilizado para o cálculo de todos os parâmetros do ciclo, consultar o Apêndice A.

4.2.2 Análise exergoeconômica

A Tabela 17 apresenta os valores de aquisição e a taxa de custo de cada componente considerado no ciclo.

Tabela 17. Custo de aquisição e taxas de custo dos componentes

k	Componente	Z_k [USD]	$\dot{Z}_k$ [USD/h]
1	Trocador de calor 1	92060	0,2344
2	Trocador de calor 2	24961	0,0634
3	Célula a combustível	11611302	29,56
4	Câmara de combustão	330472	0,8280
5	Caldeira de recuperação	1623473	4,14
6	Bomba	2507	0,0064
7	Condensador	2635	0,0067
8	Turbina a vapor	594917	1,5120

Fonte: Autoria própria

É possível observar, através da Tabela 17, que a célula a combustível, a qual já considera os custos de equipamentos auxiliares e do inversor, é o componente que exige o maior investimento da planta, seguida da caldeira de recuperação. Os trocadores de calor, a bomba e condensador, que possuem pouca complexidade e grande consolidação no mercado, aparecem como equipamentos de baixo investimento requerido.

Para a planta modelada, os custos de geração de energia elétrica pela célula a combustível e pela a turbina a vapor são representadas na Tabela 18, que também informa o custo específico total da geração de energia, calculado através de uma média ponderada dos custos desses dois equipamentos.

Tabela 18. Resultados econômicos do ciclo combinado

Parâmetro	C_{MCFC}	C_t	C_{total}
	[USD/kWh]	[USD/kWh]	[USD/kWh]
Valor	0,3971	1,3118	0,4679

Fonte: Autoria própria

No Brasil, segundo a resolução normativa nº 414 da Agência Nacional de Energia Elétrica (ANEEL), a tarifa é cobrada de maneira diferente para dois grupos de consumidores: o grupo A é composto normalmente por indústrias e comércios de médio ou grande porte; o grupo B é composto geralmente por residências. Nota-se, portanto, que a planta projetada por esse trabalho abrangeria a demanda do grupo A.

Segundo a AES Eletropaulo (2017), a tarifa de energia elétrica do grupo A varia de 0,22885 a 0,34899 R\$/kWh, dependendo do horário de sua utilização. Na cotação do dólar do dia 06/12/2017, isso representa valores entre 0,071 e 0,108 USD/kWh.

Verda e Nicolin (2010) e Mahmoudi e Ghavimi (2016) estudaram ciclos cogeneradores complexos com MCFC e apresentaram custo mínimo para seus ciclos de 0,04509 e 0,0451 €/kWh, que representam, na cotação do dólar do dia 06/12/2017, 0,053 USD/kWh. Os valores apresentados pelos autores se mostraram 25,3% abaixo da menor tarifa brasileira em curso atualmente e 55,8% abaixo do custo unitário médio da energia gerada por células a combustível, segundo McPhail et al. (2015).

Com relação à geração termelétrica a gás natural, Tolmsquim (2016) relata custos de geração variando entre 0,13 e 0,14 USD/kWh para usinas que operam a ciclo simples (ciclo a gás) e entre 0,084 e 0,090 USD/kWh para usinas que operam a ciclo combinado (ciclo a gás e ciclo a vapor). Entretanto, o autor lista outros trabalhos que indicaram valores diferentes, como International Energy Agency (2010), que relatou custos de geração entre 0,200 e 0,223 USD/kWh para usinas a ciclo simples e entre 0,065 – 0,080 USD/kWh para usinas a ciclo combinado; e Department of Energy & Climate Change (2013), que indicou custos entre 0,246 e 0,277 USD/kWh para ciclo simples e entre 0,116 e 0,120 USD/kWh para ciclo combinado.

O custo relativamente alto da geração de energia do presente trabalho era esperado, uma vez que a MCFC não é ainda um modelo de célula a combustível consolidado comercialmente no mercado e, portanto, possui alto preço de investimento. Além disso, observa-se uma baixa disponibilidade de vapor para a turbina do ciclo a vapor, fazendo com que este componente carregue diversos custos dos componentes a montante. Com isso, o custo exergético da energia gerada pela turbina a vapor é relativamente alto.

4.2.3 Análise de sensibilidade

Para identificar os parâmetros que mais influenciam no custo da energia gerada pela planta, foi feita uma análise de sensibilidade com fatores que foram assumidos, mas que podem ser variados. A análise consistiu em diminuir em 20% os valores dos parâmetros selecionados,

com exceção das temperaturas ambientes e de operação da célula, para que não tivessem valores fora da realidade. A temperatura mínima de trabalho da MCFC foi adotada conforme Zhang, Lin e Chen (2011). A Tabela 19 apresenta os resultados dessa análise.

Tabela 19. Resultados da análise de sensibilidade

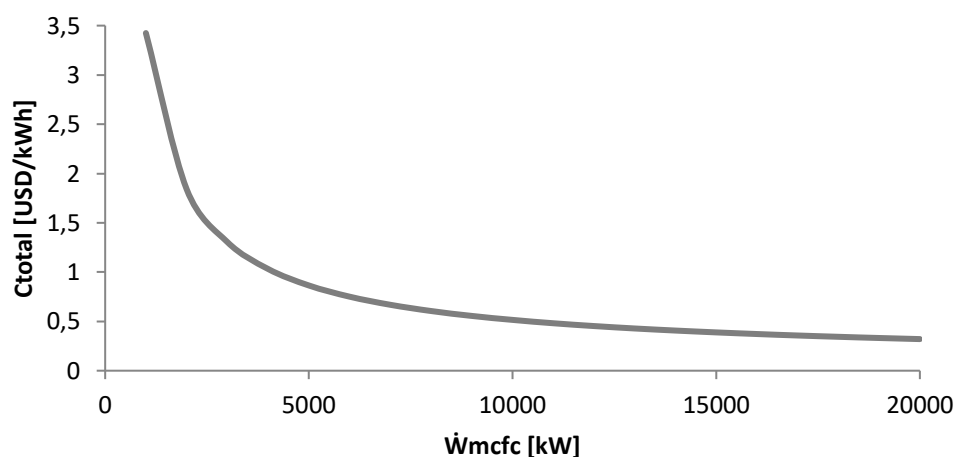
	Parâmetro	Valor padrão	Valor variado	Δc_{total} [%]	$\Delta \dot{W}_{\text{líquida}}$ [%]	$\Delta \eta_{\text{el,I}}$ [%]	$\Delta \eta_{\text{el,II}}$ [%]
Projeto	j [A/m ²]	1000	800	-0,48	-0,26	+2,00	+1,90
	ϕ_{co2}	0,85	0,68	-0,1	-0,12	-0,08	-0,07
	T [K]	923	893	-6E-5	+1,62	-4,83	-4,57
	T ₀ [K]	298	288	-0,2	-0,12	-0,08	-0,07
	$\dot{W}_{\text{mcfc}}$ [kW]	10000	8000	+18,26	-20,00	-0,08	-0,07
Econômicos	c ₁ [USD/kJ]	3,10E-06	2,48E-06	0,00	-	-	-
	c ₃ [USD/kJ]	7,47E-06	5,98E-06	-5,27	-	-	-
	n [anos]	20	16	+0,43	-	-	-
	H [horas/ano]	8000	6400	+0,17	-	-	-
	i	0,1	0,08	+0,17	-	-	-

Fonte: Autoria própria

Através da Tabela 19, é possível notar de que forma os parâmetros selecionados influenciam percentualmente no custo de energia gerada, na potência líquida da planta e nas eficiências de 1^a e 2^a lei. A pouca influência da diminuição temperatura de operação da célula está de acordo com os resultados apresentados por Verda e Nicolin (2010).

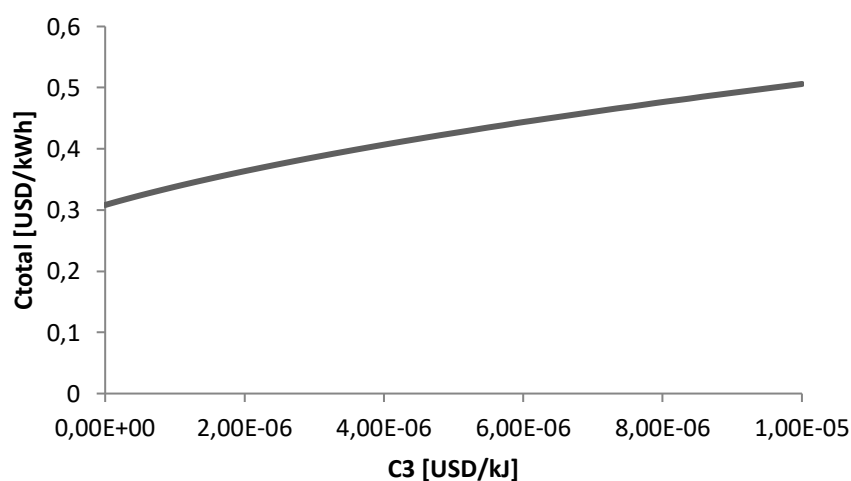
Nota-se que os parâmetros que mais modificam o custo total da energia gerada pela planta são a potência da MCFC e o custo exergético do gás natural, c₃. Portanto, torna-se conveniente apresentar as curvas de comportamento do custo em função dessas variáveis. As Figuras 20 e 21 ilustram esse comportamento em relação à potência da célula e ao custo do combustível, respectivamente.

Figura 20. Influência da potência da MCFC no custo da energia gerada



Fonte: Autoria própria.

Figura 21. Influência do custo do gás natural no custo da energia gerada



Fonte: Autoria própria

A Figura 20 ilustra claramente o conceito de economia de escala, mostrando que plantas de maior porte são mais viáveis economicamente e, portanto, mais praticadas no mercado energético atual, o qual se baseia na distribuição centralizada de energia. A curva indica que a configuração proposta tem potencial para ser competitiva no mercado, a depender de sua potência.

A Figura 21 indica como o preço do gás natural influencia na viabilidade da planta. No Brasil, dados da Petrobrás (2017) indicam aumentos regulares na coleta de petróleo e gás natural na região do pré-sal. Portanto, no cenário futuro, espera-se uma maior oferta desse combustível e, conseqüentemente, um menor preço. Esse fato pode influenciar positivamente

na busca por novas formas de geração de energia, como a configuração proposta por esse trabalho.

Para maiores informações sobre o equacionamento utilizado para o cálculo de todos os parâmetros econômicos do ciclo, consultar o Apêndice B.

5 CONCLUSÕES

O presente trabalho apresentou uma modelagem e simulação numérica de uma célula a combustível de carbonato fundido, a qual opera com reforma interna de gás natural, em um ciclo combinado com uma turbina a vapor. Uma capacidade de geração da célula a combustível de 10 MW foi selecionada como parâmetro inicial para análise técnica do ciclo em geral.

A MCFC apresentou eficiência termoquímica compatível com valores encontrados na literatura e que confirma que células a combustível convertem energia com rendimentos maiores que máquinas térmicas tradicionais, como turbinas e motores. Além disso, o aproveitamento de seu calor residual e a recirculação dos gases de escape da célula se mostraram tecnicamente viáveis como configuração de sistema de geração baseado nesse equipamento.

A análise termodinâmica indicou que grande parte da potência líquida da planta é gerada pela célula, sendo a turbina a vapor responsável por uma parcela pequena da geração. Tal diferença é atribuída à pequena vazão de gases disponibilizada para a geração de vapor, o que sugere o estudo de modificações na configuração do ciclo em trabalhos futuros. Ainda assim, o reaproveitamento do calor residual da célula promoveu aumento das eficiências de 1ª e 2ª leis do ciclo, baseadas nos valores de energia e exergia do combustível, respectivamente.

Através da análise exergética do ciclo, foi possível quantificar a irreversibilidade e a eficiência racional de cada componente presente na configuração. O trocador de calor 1, o misturador de ar e a câmara de combustão foram os equipamentos que apresentaram menor eficiência racional, o que indica que quaisquer ações para melhora do ciclo devem tê-los como foco.

Com base na análise exergoeconômica, foi possível quantificar o custo total da geração de energia elétrica da planta proposta. Embora o valor seja alto em relação a outros meios de geração e à tarifa nacional, a análise de sensibilidade indicou que sistemas de grande porte podem possuir viabilidade econômica e, portanto, serem competitivos dentro do mercado energético. A célula a combustível de carbonato fundido, por ainda não possuir viabilidade comercial, também influencia negativamente nesse parâmetro. Além disso, o preço do gás natural também se mostrou um fator significativamente influente no custo.

De maneira geral, parâmetros do ciclo, como eficiências, vazões e temperaturas, apresentaram valores satisfatórios. As análises energética e exergética apontaram uma configuração tecnicamente viável, com aumento real da eficiência global. Outro fator determinante é a viabilidade comercial do ciclo, que não foi atingida na configuração proposta,

mas que pode ser alcançada com plantas de maior porte e dependendo de fatores econômicos externos.

REFERÊNCIAS

- ACAR, C.; DINCER, I. Impact assessment and efficiency evaluation of hydrogen production methods. **International Journal of Energy Research**. Chichester, Inglaterra, v. 39, n. 13, p. 1757–1768, 2015.
- AES Eletropaulo. **Tarifa de energia elétrica**. 2017. Disponível em <https://www.aeseletropaulo.com.br/poder-publico/prazos-e-tarifas/paginas/tarifa-de-energia-eletrica.aspx>. Acesso em 05 dez. 2017.
- AGÊNCIA NACIONAL DE ENERGIA ELÉTRICA. **Instrução normativa n. 414**. Disponível em http://www2.aneel.gov.br/arquivos/pdf/folder_perguntas%20e%20respostas_414_final.pdf. Acesso em 05 dez. 2017.
- AHMED, A.; AL-AMIN, A. Q.; AMBROSE, A. F. Hydrogen fuel and transport system: a sustainable and environmental future. **International Journal of Hydrogen Energy**, Oxford, Inglaterra, v. 41, n. 3, p. 1369–1380, 2016.
- ALKLAIBI, A. M.; KHAN, M. N.; KHAN, W. A. Thermodynamic analysis of gas turbine with air bottoming cycle. **Energy**, Oxford, Inglaterra, v. 107, p. 603-611, 2016.
- ALOBALID, F.; MERTENS, N.; STARKLOFF, R.; LANZ, T.; HEINZE, C.; EPPLE, B. Progress in dynamic simulation of thermal power plants. **Progress in Energy and Combustion Science**, Oxford, Inglaterra, v. 59, p. 79–162, 2016.
- ANDERSON, T. R.; HAWKINS, E.; JONES, P. D. CO₂, the greenhouse effect and global warming: from the pioneering work of Arrhenius and Callendar to today's Earth system models. **Endeavour**, Oxford, Inglaterra, v. 40, n. 3, p. 178-187, 2016.
- ANDÚJAR, J. M.; SEGURA, F. Fuel cells: history and updating. A walk along two centuries. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, v. 13, n. 9, p. 2309–2322, 2009.
- ANG, S. M. C.; FRAGA, E. S.; BRANDON, N. P.; SAMSATLI, N. J.; BRETT, D. J. L. Fuel cell systems optimisation: methods and strategies. **International Journal of Hydrogen Energy**, Oxford, Inglaterra, v. 36, n. 22, p. 14678–14703, 2011.
- APPLEBY, A. J. From Sir William Grove to today: fuel cells and the future. **Journal of Power Sources**, Lausanne, Suíça, v. 29, p. 3-11, 1990.
- ARESPACOCCHAGA, N.; VALDERRAMA, C.; PEREGRINA, C.; HORNERO, A.; BOUCHY, L.; CORTINA, J. L. On-site cogeneration with sewage biogas via high-temperature fuel cells: benchmarking against other options based on industrial-scale data. **Fuel Processing Technology**, Amsterdam, Holanda, v. 138, p. 654–662, 2015.
- ARSALIS, A. Thermoeconomic modeling and parametric study of hybrid SOFC–gas turbine–steam turbine power plants ranging from 1.5 to 10MWe. **Journal of Power Sources**, Lausanne, Suíça, v. 181, p. 313-326, 2008.
- BAGHERNEJAD, A.; YAGHOUBI, M. Multi-objective exergoeconomic optimization of an

integrated solar combined cycle system using evolutionary algorithms. **International Journal of Energy Research**, Chichester, Inglaterra, v. 35, p. 601-615, 2011.

BALAT, M. Possible methods for hydrogen production. **Energy Sources, Part A: Recovery, Utilization, and Environmental Effects**, Philadelphia, Estados Unidos da América, v. 31, n. 1, p. 39–50, 2008.

BARBIR, F. **Pem Fuel Cells Theory and Practice**. 2. ed. Waltham: Elsevier Inc, 2013.

BARONCI, A.; MESSINA, G.; MCPHAIL, S. J.; MORENO, A. Numerical investigation of a MCFC (molten carbonate fuel cell) system hybridized with a supercritical CO₂ Brayton cycle and compared with a bottoming Organic Rankine Cycle. **Energy**, Oxford, Inglaterra, v. 93, p. 1063-1073, 2015.

BENMOUIZA, K.; CHEKNANE, A. Analysis of proton exchange membrane fuel cells voltage drops for different operating parameters. **International Journal of Hydrogen Energy**, Oxford, Inglaterra, v. 43, p. 3512-3519, 2018.

BIANCHI, M.; PASCALE, A. Emission calculation methodologies for CHP plants. **Energy Procedia**, v. 14, p. 1323–1330, 2012.

BORGNAKKE, C.; SONNTAG, R. E. **Fundamentos da termodinâmica**. 7. ed. São Paulo: Edgard Blucher LTDA, 2009. 659 p.

BORNAPOUR, M.; HOOSHMAND, R. A. An efficient scenario-based stochastic programming for optimal planning of combined heat, power, and hydrogen production of molten carbonate fuel cell power plants. **Energy**, Oxford, Inglaterra, v. 83, p. 734-748, 2015.

CARAPPELLUCCI, R.; GIORDANO, L. A comparison between exergetic and economic criteria for optimizing the heat recovery steam generators of gas-steam power plants. **Energy**, Oxford, Inglaterra, v. 58, p. 458-472, 2013.

CARAPPELLUCCI, R.; SAIA, R.; GIORDANO, L. Study of gas-steam combined cycle power plants integrated with MCFC for carbon dioxide capture. **Energy Procedia**, v. 45, p. 1155–1164, 2014.

CATALÃO, J. P. S. **Electric power systems: advanced forecasting techniques and optimal generation scheduling**. Boca Raton: CRC Press, 2012, 422 p.

CHATRATTANAWET, N. SAEBEA, D.; AUTHAYANUN, S.; ARPORNWICHANOP, A.; PATCHARAVORACHOT, Y. Performance and environmental study of a biogas-fuelled solid oxide fuel cell with different reforming approaches. **Energy**, Oxford, Inglaterra, p. 1–10, 2017.

COMGÁS. **Website da Comgás**: dados do gás natural. 2017. Disponível em: <http://www.comgas.com.br/pt/gasNatural/conhecaGasNatural/Paginas/a-composicao.aspx> Acesso em 27 fev. 2017.

CORIGLIANO, O.; FRAGIACOMO, P. Numerical modeling of an indirect internal CO₂ reforming solid oxide fuel cell energy system fed by biogas. **Fuel**, Londres, Inglaterra, v. 196, p. 352–361, 2017.

D'ARAÚJO, R. P. **Setor Elétrico Brasileiro: uma aventura mercantil**. Brasília: Confea, 2009. 300 p.

DEPARTMENT OF ENERGY & CLIMATE CHANGES. **Electricity Generation Costs**. 2013. Disponível em: <https://www.gov.uk/government/publications/decc-electricity-generation-costs-2013>. Acesso em 06 mar. 2018.

DE-TROYA, J. J.; ÁLVAREZ, C.; GARRIDO, C. F.; CARRAL, L. Analysing the possibilities of using fuel cells in ships. **International Journal of Hydrogen Energy**, Oxford, Inglaterra, v. 41, n. 4, p. 2853–2866, 2016.

DI MARCOBERARDINO, G.; MANZOLINI, G. Investigation of a 5 kW micro-CHP PEM fuel cell based system integrated with membrane reactor under diverse EU natural gas quality. **International Journal of Hydrogen Energy**, Oxford, Inglaterra, v. 42, n. 19, p. 13988–14002, 2017.

DINCER, I.; ACAR, C. A review on clean energy solutions for better sustainability. **International Journal of Energy Research**, Chichester, Inglaterra, v. 39, p. 585–606, 2015a.

DINCER, I.; ACAR, C. Review and evaluation of hydrogen production methods for better sustainability. **International Journal of Hydrogen Energy**, Oxford, Inglaterra, v. 40, n. 34, p. 11094–11111, 2015b.

DINCER, I.; ACAR, C. Innovation in hydrogen production. **International Journal of Hydrogen Energy**, Oxford, Inglaterra, v. 42, n. 22, p. 14843–14864, 2017.

DODDS, P. E.; STAFFEL, I.; HAWKES, A. D.; LI, F.; GRÜNEWALS, P.; MCDOWALL, W.; EKINS, P. Hydrogen and fuel cell technologies for heating: A review. **International Journal of Hydrogen Energy**, Oxford, Inglaterra, v. 40, n. 5, p. 2065–2083, 2015.

DUAN, L.; XIA, K.; FENG, T.; JIA, S.; BIAN, J. Study on coal-fired power plant with CO₂ capture by integrating molten carbonate fuel cell system. **Energy**, Oxford, Inglaterra, v. 117, p. 578–589, 2016.

E4TECH. **The Fuel Cell Industry Review 2016**. Disponível em <http://www.fuelcellindustryreview.com/archive/TheFuelCellIndustryReview2016.pdf>. Acesso em 10 mar. 2017.

ELLIOTT, T. C.; CHEN, K.; SWANEKAMP, R.C. **Standard handbook of powerplant engineering**. 2. ed. Nova Iorque: McGraw-Hill, 1998. 1198 p.

EMPRESA DE PESQUISA ENERGÉTICA (EPE). **Estudos da demanda de energia**. Rio de Janeiro – RJ, 2014. 232 p.

EMPRESA DE PESQUISA ENERGÉTICA (EPE). **Balanco energético nacional**. 2016. 296 p. Disponível em <https://ben.epe.gov.br/BENRelatorioFinal.aspx?anoColeta=2016&anoFimColeta=2015>. Acesso em 15 mar. 2017.

ERSÖZ, A. Investigation of hydrocarbon reforming processes for micro-cogeneration systems.

International Journal of Hydrogen Energy, Oxford, Inglaterra, v. 33, n. 23, p. 7084–7094, 2008.

FACCI, A. L.; LORETI, G.; UBERTINI, S.; BARBIR, F.; CHALKIDIS, T.; ESSLING, R. P.; PETERS, T.; SKOUFA, E.; BOVE, R. Numerical assessment of an automotive derivative CHP fuel cell system. **Energy Procedia**, v. 105, p. 1564–1569, 2017.

FARO, M.; VIRA, A.; PINO, L.; ARICÒ, A. S. Performance evaluation of a solid oxide fuel cell coupled to an external biogas tri-reforming process. **ECS Transactions**, v. 115, p. 238–245, 2013.

FOUQUET, R.; PEARSON, P. J. G. Past and prospective energy transitions: Insights from history. **Energy Policy**, Surrey, Inglaterra, v. 50, p. 1–7, 2012.

GANAPATHY, V. **Steam plant calculations manual**. 2. ed. Nova Iorque: Marcel Dekker Inc, 1994, 421 p.

GARCÍA-DÍEZ, E.; LABIANO, F. G.; DIEGO, L. F.; ABAD, A.; GAYÁN, P.; ADÁNEZ, J. Autothermal chemical looping reforming process of fossil liquid fuels. **International Journal of Hydrogen Energy**, Oxford, Inglaterra, v. 42, p. 13633–13642, 2017.

GIANFRANCESCO, A. **Materials for ultra-supercritical and advanced ultra-supercritical power plants**. Cambridge: Elsevier LTD, 2017, 875 p.

GRIGSBY, L. L. **Electric power generation, transmission and distribution**. 3. ed. Boca Raton: CRC Press, 2012, 479 p.

HAJI, S. Analytical modeling of PEM fuel cell i - V curve. **Renewable Energy**, Oxford, Inglaterra, v. 36, p. 451–458, 2011.

HAN, I.; CHUNG, C. A hybrid model combining a support vector machine with an empirical equation for predicting polarization curves of PEM fuel cells. **International Journal of Hydrogen Energy**, Oxford, Inglaterra, v. 42, p. 7023–7028, 2017.

HEINZEL, A.; VOGEL, B.; HUBNER, P. Reforming of natural gas - hydrogen generation for small scale stationary fuel cell systems. **Journal of Power Sources**, Lausanne, Suíça, v. 105, n. 2, p. 202–207, 2002.

HERRERA, M. D. M.; ARRIETA, F. R. P.; SODRÉ, J. R. Thermoeconomic assessment of an absorption refrigeration and hydrogen-fueled diesel power generator cogeneration system. **International Journal of Hydrogen Energy**, Oxford, Inglaterra, v. 39, n. 9, p. 4590–4599, 2014.

HEWITT, G. F. **Heat Exchanger Design Handbook**: part 2 - fluid mechanics and heat transfer. Redding: Begell House, 2008, 5000 p.

HOOGERS, G. **Fuel cell technology handbook**. Boca Raton: CRC Press, 2003, 299 p.

INTERNATIONAL ENERGY AGENCY. **Gas-fired power**. Energy Technology System Analysis Programme (ETSAP). Paris. 2010. Disponível em: www.etsap.org. Acesso em 06

mar. 2018.

INTERNATIONAL ENERGY AGENCY. **Co-generation and renewables**: solutions for a low-carbon energy future. Paris: IEA Publications, 2011, 31 p.

ITO, H. Economic and environmental assessment of phosphoric acid fuel cell-based combined heat and power system for an apartment complex. **International Journal of Hydrogen Energy**, Oxford, Inglaterra, v. 42, p. 15449–15463, 2017.

KAKAÇ, S.; LIU, H.; PRAMUANJAROENKIJ, A. **Heat Exchangers**: selection, rating and thermal design. Boca Raton: CRC Press, 2012. 605 p.

KIM, Y. J.; LEE, M. C. Comparison of thermal performances of external and internal reforming molten carbonate fuel cells using numerical analyses. **International Journal of Hydrogen Energy**, Oxford, Inglaterra, v. 42, p. 3510-3520, 2017.

KOTAS, T. J. **The exergy method of thermal plant analysis**. Malabar: Krieger Publishing Company, 1995, 296 p.

LARMINIE, J.; DICKS, A. **Fuel cell systems explained**. West Sussex: John Wiley & Sons, 2000, 302 p.

LEE, C. G. Influence of temperature on the anode reaction in a molten carbonate fuel cell. **Journal of Electroanalytical Chemistry**, Lausanne, Suíça v. 785, p. 152-158, 2017.

LEO, T. J.; DURANGO, J. A.; NAVARRO, E. Exergy analysis of PEM fuel cells for marine applications. **Energy**, Oxford, Inglaterra, v. 35, n. 2, p. 1164–1171, 2010.

LUNGHI, P.; UBERTINI, S.; DESIDERI, U. Highly efficient electricity generation through a hybrid molten carbonate fuel cell-closed loop gas turbine plant. **Energy Conversion and Management**, Oxford, Inglaterra, v. 42, p.1657-1672, 2001.

MAHMOUDI, S. M. S.; GHAVIMI, A. R. Thermoeconomic analysis and multi objective optimization of a molten carbonate fuel cell – supercritical carbon dioxide – organic Rankin cycle integrated power system using liquefied natural gas as heat sink. **Applied Thermal Engineering**, Oxford, Inglaterra, v. 107, p. 1219-1232, 2016.

MASTROPASQUA, L.; SPINELLI, M.; PAGANONI, A.; CAMPANARI, S. Preliminary design of a MW-class demo system for CO₂ capture with MCFC in a university campus cogeneration plant. **Energy Procedia**, v. 126, p. 453-460, 2017.

MATELLI, A.; BAZZO, E. A methodology for thermodynamic simulation of high temperature, internal reforming fuel cell systems. **Journal of Power Sources**, Lausanne, Suíça, v. 142, p. 160–168, 2005.

MCPHAIL, S. J.; LETO, L.; PIETRA, M. D.; CIGOLOTTI, V.; MORENO, A. **International status of molten carbonate fuel cells technology**: anexo 23. Roma: National Agency for New Technologies, Energy and Sustainable Economic Development, 2015, 34 p.

MEHRPOOYA, M.; ANSARINASAB, H.; SHARIFZADEH, M. M. M.; ROSEN, M. A.

Process development and exergy cost sensitivity analysis of a hybrid molten carbonate fuel cell power plant and carbon dioxide capturing process. **Journal of Power Sources**, Lausanne, Suíça, v. 364, p. 299-315, 2017.

MEHRPOOYA, M.; SAYYAD, S.; ZONOUZ, M. J. Energy, exergy and sensitivity analyses of a hybrid combined cooling, heating and power (CCHP) plant with molten carbonate fuel cell (MCFC) and Stirling engine. **Journal of Cleaner Production**, Amsterdam, Holanda, v. 148, p. 283–294, 2017.

MINUTILLO, M.; PERNA, A.; JANNELLI, E. SOFC and MCFC system level modeling for hybrid plants performance prediction. **International Journal of Hydrogen Energy**, Oxford, Inglaterra, v. 39, p. 21688-21699, 2014.

MOMIRLAN, M.; VEZIROGLU, T. N. The properties of hydrogen as fuel tomorrow in sustainable energy system for a cleaner planet. **International Journal of Hydrogen Energy**, Oxford, Inglaterra, v. 30, n. 7, p. 795–802, 2005.

NAMI, H.; MAHMOUDI, S. M. S.; NEMATI, A. Exergy, economic and environmental impact assessment and optimization of a novel cogeneration system including a gas turbine, a supercritical CO₂ and an organic Rankine cycle (GT-HRSG/SCO₂). **Applied Thermal Engineering**, Oxford, Inglaterra, v. 110, p. 1315-1330, 2017.

NIKOLAIDIS, P.; POULLIKKAS, A. A comparative overview of hydrogen production processes. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, v. 67, p. 597–611, 2017.

NODA, Z.; HIRATA, K.; HAYASHI, A.; TAKAHASHI, T.; NAKAZATO, N.; SAIGUSA, K.; SEO, A.; SUZUKI, K.; ARIURA, S.; SHINKAI, H.; SASAKI, K. Hydrogen pump-type impurity sensors for hydrogen fuels. **International Journal of Hydrogen Energy**, Oxford, Inglaterra, v. 42, n. 5, p. 3281–3293, 2017.

O'HAYRE, R.; CHA, S. W.; COLELLA, W. G.; PRINZ, F. B. **Fuel cell fundamentals**. New Jersey: John Wiley & Sons, 2016, 580 p.

PÉREZ, N. P.; SADAMITSU, M. T.; SILVEIRA, J. L.; ANTUNES, J. S.; TUNA, C. E.; VALLE, A. E.; SILVA, N. F. Energetic and exergetic analysis of a new compact trigeneration system run with liquefied petroleum gas. **Energy**, Oxford, Inglaterra, v. 90, p. 1411–1419, 2015.

PETROBRAS. **Fatos e dados**. 2017. Disponível em: <http://www.petrobras.com.br/fatos-e-dados/atingimos-meta-de-producao-pelo-segundo-ano-consecutivo-e-com-recordes-historicos.htm>. Acesso em: 26 set. 2017.

PIRKANDI, J.; GHASSEMI, M.; HAMEDI, M. H.; MOHAMMADI, R. Electrochemical and thermodynamic modeling of a CHP system using tubular solid oxide fuel cell (SOFC-CHP). **Journal of Cleaner Production**, Amsterdam, Holanda, v. 29–30, p. 151–162, 2012.

PIRKANDI, J.; MAHMOODI, M.; OMMIAN, M. An optimal configuration for a solid oxide fuel cell-gas turbine (SOFC-GT) hybrid system based on thermo-economic modelling. **Journal of Cleaner Production**, Amsterdam, Holanda, v. 144, p. 375-386, 2017.

RASHIDI, R.; BERG, P.; DINCER, I. Performance investigation of a combined MCFC system. **International Journal of Hydrogen Energy**, Oxford, Inglaterra, v. 34, n. 10, p. 4395–4405, 2009.

REN21. **Global Status Report**. Paris: REN21 Secretariat, 2017. Disponível em http://www.ren21.net/wp-content/uploads/2017/06/17-8399_GSR_2017_Full_Report_0621_Opt.pdf. Acesso em 10 jul. 2017.

REXED, I.; PIETRA, M. D.; MCPHAIL, S.; LINDBERGH, G.; LAGERGREN, C. Molten carbonate fuel cells for CO₂ separation and segregation by retrofitting existing plants – An analysis of feasible operating windows and first experimental findings. **International Journal of Greenhouse Gas Control**, v. 35, p. 120-1130, 2015.

REYNOLDS, W. C. **The element potential method for chemical equilibrium analysis: implementation in the interactive program STANJAN**. Stanford: Department of Mechanical Engineering, Stanford University, 1986, 48 p.

SAGHAFIFAR, M.; GADALLA, M. Analysis of Maisotsenko open gas turbine bottoming cycle. **Applied Thermal Engineering**, Oxford, Inglaterra, v. 82, p. 351-359, 2015.

SÁNCHEZ, D.; ESCALONA, J. M. M.; MONJE, B.; CHACARTEGUI, R.; SÁNCHEZ, T. Preliminary analysis of compound systems based on high temperature fuel cell, gas turbine and Organic Rankine Cycle. **Journal of Power Sources**, Lausanne, Suíça, v. 196, n. 9, p. 4355–4363, 2011.

SANTOLI, L. DE; BASSO, G. LO; BRUSCHI, D. Energy characterization of CHP (combined heat and power) fuelled with hydrogen enriched natural gas blends. **Energy**, Oxford, Inglaterra, v. 60, p. 13–22, 2013.

SCHRÖDERS, S.; VERFONDERN, K.; ALLELEIN, H. J. Energy economic evaluation of solar and nuclear driven steam methane reforming processes. **Nuclear Engineering and Design**, Amsterdam, Holanda, 2017. Disponível em <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0029549317303813>. Acesso em 20 out. 2017.

SHARAF, O. Z.; ORHAN, M. F. An overview of fuel cell technology : Fundamentals and applications. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, v. 32, p. 810–853, 2014.

SHIRAZI, A.; AMINYAVARI, M.; NAJAFI, B.; RINALDI, F.; RAZAGHI, M. Thermal-economic-environmental analysis and multi-objective optimization of an internal-reforming solid oxide fuel cell-gas turbine hybrid system. **International Journal of Hydrogen Energy**, Oxford, Inglaterra, v. 37, p. 19111-19124, 2012.

SIMON, G.; PARODI, F.; FERMEGLIA, M.; TACCANI, R. Simulation of process for electrical energy production based on molten carbonate fuel cells. **Journal of Power Sources**, Lausanne, Suíça, v. 115, p. 210-218, 2003.

STAFFELL, I. Zero carbon infinite COP heat from fuel cell CHP. **Applied Energy**, Londres, Inglaterra, v. 147, p. 373–385, 2015.

STAFFELL, I.; GREEN, R. The cost of domestic fuel cell micro - CHP systems. **International Journal of Hydrogen Energy**, Oxford, Inglaterra, v. 38, p. 1088–1102, 2013.

SUNDMACHER, K.; KIENLE, A.; PESCH, H. J.; BERNDT, J. F.; HUPPMANN, G. **Molten carbonate fuel cell**: modeling, analysis, simulation, and control. Weinheim: Wiley-VCH Verlag GmbH & Co, 2007. 243 p.

TOLMASQUIM, M. T. **Energia termelétrica**: gás natural, biomassa, carvão, nuclear. Rio de Janeiro: EPE, 2016, 417 p.

TSATSARONIS, G.; PISA, J. Exergoeconomic evaluation and optimization of energy systems: application to the CGAM problem. **Energy**, Oxford, Inglaterra, v. 19, n. 3, p. 287-321, 1994.

VATANI, A.; KHAZAELI, A.; ROSHANDEL, R.; PANJESHAHI, M. H. Thermodynamic analysis of application of organic Rankine cycle for heat recovery from an integrated DIR-MCFC with pre-reformer. **Energy Conversion and Management**, Oxford, Inglaterra, v. 67, p. 197-207, 2013.

VERDA, V.; NICOLIN, F. Thermodynamic and economic optimization of a MCFC-based hybrid system for the combined production of electricity and hydrogen. **International Journal of Hydrogen Energy**, Oxford, Inglaterra, v. 35, p. 794-806, 2010.

VERHAERT, I.; MULDER, G.; DE PAEPE, M. Evaluation of an alkaline fuel cell system as a micro-CHP. **Energy Conversion and Management**, Oxford, Inglaterra, v. 126, p. 434–445, 2016.

VERSTRAETE, D. On the energy efficiency of hydrogen-fuelled transport aircraft. **International Journal of Hydrogen Energy**, Oxford, Inglaterra, v. 40, n. 23, p. 7388–7394, 2015.

WANG, J.; LAM, K.Y.; SACCOCCIO, M.; GAO, Y.; CHEN, D.; CIUCCI, F. Ca and In co-doped BaFeO_{3-δ} as a cobalt-free cathode material for intermediate-temperature solid oxide fuel cells. **Journal of Power Sources**, Lausanne, Suíça, v. 324, p. 224-232, 2016.

WENDT, H.; GÖTZ, M.; LINARDI, M. Tecnologia de células a combustível. **Química Nova**. São Paulo, Brasil, v. 23 (4), p. 538-546, 2000.

WENZL, H. Batteries and fuel cells. In: GARCHE, J.; DYER, C. K.; MOSELEY, P. T.; OGUMI, Z.; RAND, D. A. J.; SCROSATI, B. **Encyclopedia of Electrochemical Power Sources**. Elsevier Science, 2009, 4538 p.

WILBERFORCE, T.; ALASWAD, A.; PALUMBO, A.; DASSISTI, M.; OLABI, A. G. Advances in stationary and portable fuel cell applications. **International Journal of Hydrogen Energy**, Oxford, Inglaterra, v. 41, n. 37, p. 16509–16522, 2016.

YANG, P.; ZHU, Y.; ZHANG, P.; ZHANG, H.; HU, Z.; ZHANG, J. Performance evaluation of an alkaline fuel cell / thermoelectric generator hybrid system. **International Journal of Hydrogen Energy**, Oxford, Inglaterra, v. 39, p. 11756–11762, 2014.

YANG, P.; ZHANG, H.; HU, Z. Parametric study of a hybrid system integrating a phosphoric

acid fuel cell with an absorption refrigerator for cooling purposes. **International Journal of Hydrogen Energy**, Oxford, Inglaterra, v. 41, n. 5, p. 3579–3590, 2016.

YEUNG, K. L.; HAN, W. Zeolites and mesoporous materials in fuel cell applications. **Catalysis Today**, Amsterdam, Holanda, v. 236, p. 182-205, 2014.

YOSHIBA, F.; IZAKI, Y.; WATANABE, T. Wide range load controllable MCFC cycle with pressure swing operation. **Journal of Power Sources**, Lausanne, Suíça, v. 137, n. 2, p. 196–205, 2004.

YUH, C. Y.; SELMAN, J. R. The Polarization of Molten Carbonate Fuel Cell Electrodes. **Journal of The Electrochemical Society**, Baltimore, Estados Unidos da América, v. 138, n. 12, p. 3649–3656, 1991.

ZHANG, H.; LIN, G.; CHEN, J. Performance analysis and multi-objective optimization of a new molten carbonate fuel cell system. **International Journal of Hydrogen Energy**, Oxford, Inglaterra, v. 36, n. 6, p. 4015–4021, 2011.

ZHANG, S.; LIU, H.; LIU, M.; SAKAUE, E.; LI, N.; ZHAO, Y. An efficient integration strategy for a SOFC-GT-SORC combined system with performance simulation and parametric optimization. **Applied Thermal Engineering**, Oxford, Inglaterra, v. 121, p. 314–324, 2017.

ZHUANG, Y.; QIAN, Y.; HONG, G. The effect of ethanol direct injection on knock mitigation in a gasoline port injection engine. **Fuel**, Londres, Inglaterra, v. 210, p. 187-197, 2017.

ZIOGOU, C.; PAPADOPOULOU, S.; PISTIKOPOULOS, E.; GEORGIADIS, M.; VOUTETAKIS, S. Model-based predictive control of integrated fuel cell systems – from design to operation. In: KOPANOS, M. G.; GEORGIADIS, M. C. **Advances in energy systems engineering**. Cham: Springer, 2017. p. 387-438.

APÊNDICE A – Equacionamento utilizado na simulação técnica do ciclo

"Parâmetros de referência"

$T_0 = 298,15 \text{ [K]}$

$P_0 = 101,3 \text{ [kPa]}$

"!Espécies químicas envolvidas"

$\text{Subs}\$[1] = \text{'H2'}$

$\text{Subs}\$[2] = \text{'CO'}$

$\text{Subs}\$[3] = \text{'CO2'}$

$\text{Subs}\$[4] = \text{'H2O'}$

$\text{Subs}\$[5] = \text{'CH4'}$

$\text{Subs}\$[6] = \text{'C2H6'}$

$\text{Subs}\$[7] = \text{'N2'}$

$\text{Subs}\$[8] = \text{'O2'}$

$\text{Subs}\$[9] = \text{'C3H8'}$

$\text{Subs}\$[10] = \text{'C4H10'}$

$\text{Subs}\$[11] = \text{'C5H12'}$

$\text{Subs}\$[12] = \text{'C6H14'}$

"!Exergias químicas padrão (kJ/kmol) das espécies químicas envolvidas (Apêndice A: Kotas)"

$\text{epsilon}_0[1] = 238490$

$\text{epsilon}_0[2] = 275430$

$\text{epsilon}_0[3] = 20140$

$\text{epsilon}_0[4] = 11710$

$\text{epsilon}_0[5] = 836510$

$\text{epsilon}_0[6] = 1504360$

$\text{epsilon}_0[7] = 720$

$\text{epsilon}_0[8] = 3970$

$\text{epsilon}_0[9] = 2163190$

$\text{epsilon}_0[10] = 2818930$

$\text{epsilon}_0[11] = 3477050$

$\text{epsilon}_0[12] = 4134590$

"!PCI do gás natural"

$\text{PCI} = \text{sum} (X[3;a]) * \text{lowerheatingvalue}(\text{Subs}\$[a]); a = 1;12$

$\text{PCI_kg} = \text{PCI} / (\text{sum} ((X[3;a]) * \text{molarmass}(\text{Subs}\$[a]); a = 1;12))$

"!ANÁLISE ELETROQUÍMICA"

$U_{\text{cel}} = E - U_{\text{an}} - U_{\text{cat}} - U_{\text{ohm}}$

$W_{\text{dot_cel}} = j * A * U_{\text{cel}}$ "potência de saída da MCFC"

$W_{\text{dot_MCFC}} = (W_{\text{dot_cel}} * N) / 1000$

$\text{eta_MCFC} = ((n_e * F) * U_{\text{cel}}) / (0 - \Delta H)$ "eficiência da MCFC"

$E = E_0 + (((R * T) / (n_e * F)) * \ln ((p_{\text{H2_an}} * (p_{\text{O2_cat}} ^{0,5}) * p_{\text{CO2_cat}}) / (p_{\text{H2O_an}} * p_{\text{CO2_an}})))$ "potencial de equilíbrio"

$\Delta G_f = 242000 - 45,8 * T$ "variação da energia livre de Gibbs"

$E_0 = \Delta G_f / (n_e * F)$ "potencial ideal padrão"

$U_{\text{an}} = (2,27 / (10 ^ 9)) * j * \exp(E_{\text{atv_an}} / (R * T)) * (1 / (p_{\text{H2_an}} ^{0,42})) * (1 / (p_{\text{CO2_an}} ^{0,17})) * (1 / p_{\text{H2O_an}})$ "Superpotencial do ânodo"

$U_{cat} = (7,505 / 10^{10}) * j * \exp(E_{atv_cat} / (R * T)) * (1 / (pp_{O2_cat}^{0,43})) * (1 / (pp_{CO2_cat}^{0,09}))$ "Superpotencial do cátodo"

$U_{ohm} = (0,5 / 10^4) * j * \exp(3016 * ((1 / T) - (1 / 923)))$

$n_{dot_H2_cel} = W_{dot_cel} / (2 * F * U_{cel})$

$n_{dot_H2_stack} = N * n_{dot_H2_cel}$

$\phi = n_{dot_H2_stack} / n_{dot_H2_reforma}$

"!PARÂMETROS CONSIDERADOS"

DELTAT_ap = 10 [K]

DELTAT_pp = 20 [K]

"Equações"

$n_e = 2$ "número de elétrons liberados na reação de dissociação"

$F = 96487$ "constante de Faraday"

$R = 8,314$ [J/mol K] "constante universal dos gases"

"Célula"

$W_{dot_MCFC} = 10000$ [kW]

$j = 1000$ [A/m²] "densidade de corrente"

$E_{atv_an} = 53500$ [kJ/kmol] "energia de ativação do ânodo"

$E_{atv_cat} = 77300$ [kJ/kmol] "energia de ativação do cátodo"

$T = 923$ [K] "temperatura de operação da célula"

$P = P_0$ "pressão de operação da célula"

$N = 350$ [unidades]

$\phi = 0,9$ "fator de utilização de H2"

"!Cálculo da variação de entalpia da reação"

$h_{H2} = \text{enthalpy}(H2; T=T)$

$h_{O2} = \text{enthalpy}(O2; T=T)$

$h_{CO2_c} = \text{enthalpy}(CO2; T=T)$

$h_{H2O} = \text{enthalpy}(H2O; T=T)$

$h_{CO2_a} = \text{enthalpy}(CO2; T=T)$

$\Delta H = h_{H2O} - h_{H2} - (0,5 * h_{O2})$

"!pressões parciais - MUDAR QUANDO EQUACIONAR AS FRAÇÕES MOLARES DOS PONTOS"

$pp_{H2_an} = X[5;1]$

$pp_{CO2_an} = X[5;3]$

$pp_{H2O_an} = X[5;4]$

$pp_{N2_cat} = 0,6159$

$pp_{O2_cat} = 0,05671$

$pp_{CO2_cat} = 0,05594$

$pp_{H2O_cat} = 0,2714$

"!PONTO 1 - Água para reforma"

"Vazões"

$n_{dot}[1] = m_{dot}[1] / MM[1]$

$n_{dot}[2] = n_{dot}[4] * 3,38634$ "razão vapor/carbono é 3, e razão vapor/gás natural é 3,38634, já que foi desconsiderado o N2"

"Massa molar"

MM[1] = **molarmass**(H2O)

"Parâmetros"

T[1] = T_0

P[1] = P_0

"Frações molares"

X[1;1] = 0

X[1;2] = 0

X[1;3] = 0

X[1;4] = 1

X[1;5] = 0

X[1;6] = 0

X[1;7] = 0

X[1;8] = 0

X[1;9] = 0

X[1;10] = 0

X[1;11] = 0

X[1;12] = 0

"Propriedades termodinâmicas"

h[1] = **enthalpy**(Water;T=T[1];P=P[1])

s[1] = **entropy**(Water;T=T[1];P=P[1])

"Exergias"

"química"

e|q_x[1] = 3120

"física"

e|f_x[1] = (h[1] - **enthalpy**(Water;T=T_0;P=P_0)) - T_0 * (s[1] - **entropy**(Water;T=T_0;P=P_0))

"total"

e_x[1] = e|q_x[1] + e|f_x[1]

E_dot_x[1] = n_dot[1] * e_x[1]

"!PONTO 2 - Vapor"

"Massa molar"

MM[2] = MM[1]

"Parâmetros"

T[2] = 383,15 [K]

P[2] = P[1]

"Frações molares"

X[2;1] = X[1;1]

X[2;2] = X[1;2]

X[2;3] = X[1;3]

X[2;4] = X[1;4]

X[2;5] = X[1;5]

X[2;6] = X[1;6]

X[2;7] = X[1;7]

X[2;8] = X[1;8]

X[2;9] = X[1;9]

X[2;10] = X[1;10]

X[2;11] = X[1;11]

X[2;12] = X[1;12]

"Propriedades termodinâmicas"

h[2] = **enthalpy**(Water;T=T[2];P=P[2])

$s[2] = \text{entropy}(\text{Water}; T=T[2]; P=P[2])$

"Exergias"

"química"

$e|q_x[2] = \text{epsilon}_0[4]$

"física"

$e|f_x[2] = (h[2] - \text{enthalpy}(\text{Water}; T=T_0; P=P_0)) - T_0 * (s[2] - \text{entropy}(\text{Water}; T=T_0; P=P_0))$

"total"

$e_x[2] = e|q_x[2] + e|f_x[2]$

$E_dot_x[2] = n_dot[2] * e_x[2]$

"!PONTO 3 - Gás natural"

"Vazões"

$n_dot[3] = m_dot[3] / MM[3]$

"Massa molar"

$MM[3] = (\text{sum}(X[3;a] * \text{molarmass}(\text{Subs}[a]); a = 1;12))$

"Parâmetros"

$T[3] = T_0$

$P[3] = P_0$

"Frações molares"

$X[3;1] = 0$

$X[3;2] = 0$

$X[3;3] = 0,01616$

$X[3;4] = 0$

$X[3;5] = 0,88683$

$X[3;6] = 0,05844$

$X[3;7] = 0,00594$

$X[3;8] = 0$

$X[3;9] = 0,02339$

$X[3;10] = 0,00771$

$X[3;11] = 0,00128$

$X[3;12] = 0,00025$

"Propriedades termodinâmicas"

$h[3] = \text{sum}(X[3;a] * \text{enthalpy}(\text{Subs}[a]; T=T[3]); a = 1;12)$

$s[3] = \text{sum}(X[3;a] * \text{entropy}(\text{Subs}[a]; T=T[3]; P=P[3]); a = 1;12)$

"Exergias"

"química"

$e|q_x[3] = \text{sum}((X[3;a] * \text{epsilon}_0[a]); a = 1;12) + T_0 * R * (X[3;3] * \ln(X[3;3]) + X[3;5] * \ln(X[3;5]) + X[3;6] * \ln(X[3;6]) + X[3;7] * \ln(X[3;7]) + X[3;9] * \ln(X[3;9]) + X[3;10] * \ln(X[3;10]) + X[3;11] * \ln(X[3;11]) + X[3;12] * \ln(X[3;12]))$

"física"

$e|f_x[3] = (h[3] - \text{sum}(X[3;a] * \text{enthalpy}(\text{Subs}[a]; T=T_0); a = 1;12)) - (T_0 * (s[3] - \text{sum}(X[3;a] * \text{entropy}(\text{Subs}[a]; T=T_0; P=P_0); a = 1;12)))$

"total"

$e_x[3] = e|q_x[3] + e|f_x[3]$

$E_dot_x[3] = n_dot[3] * e_x[3]$

"!PONTO 4 - Gás natural pré-aquecido"

"Massa molar"

$MM[4] = MM[3]$

"Parâmetros"

$T[4] = T[2]$

$P[4] = P[2]$

"Frações molares"

$X[4;1] = X[3;1]$
 $X[4;2] = X[3;2]$
 $X[4;3] = X[3;3]$
 $X[4;4] = X[3;4]$
 $X[4;5] = X[3;5]$
 $X[4;6] = X[3;6]$
 $X[4;7] = X[3;7]$
 $X[4;8] = X[3;8]$
 $X[4;9] = X[3;9]$
 $X[4;10] = X[3;10]$
 $X[4;11] = X[3;11]$
 $X[4;12] = X[3;12]$

"Propriedades termodinâmicas"

$h[4] = \text{sum}(X[4;a] * \text{enthalpy}(\text{Subs}\$[a]; T=T[4]) ; a = 1;12)$
 $s[4] = \text{sum}(X[4;a] * \text{entropy}(\text{Subs}\$[a]; T=T[4]; P=P[4]) ; a = 1;12)$

"Exergias"**"química"**

$e|q_x[4] = \text{sum}((X[4;a] * \text{epsilon}_0[a]) ; a = 1;12) + T_0 * R * (X[4;3] * \ln(X[4;3]) + X[4;5] * \ln(X[4;5]) +$
 $X[4;6] * \ln(X[4;6]) + X[4;7] * \ln(X[4;7]) + X[4;9] * \ln(X[4;9]) + X[4;10] * \ln(X[4;10]) + X[4;11] * \ln(X[4;11])$
 $+ X[4;12] * \ln(X[4;12]))$

"física"

$e|f_x[4] = (h[4] - \text{sum}(X[4;a] * \text{enthalpy}(\text{Subs}\$[a]; T=T_0) ; a = 1;12)) - (T_0 * (s[4] - \text{sum}(X[4;a] * \text{entropy}(\text{Subs}\$[a]; T=T_0; P=P_0) ; a = 1;12)))$

"total"

$e_x[4] = e|q_x[4] + e|f_x[4]$
 $E_dot_x[4] = n_dot[4] * e_x[4]$

"!PONTO 5 - Reforma"

$m_dot[2] + m_dot[4] = m_dot[5]$

"Vazões"

$n_dot[5] = n_dot_H2_reforma / X[5;1]$
 $m_dot[5] = n_dot[5] * MM[5]$

"Massa molar"

$MM[5] = (\text{sum}(X[5;a] * \text{molarmass}(\text{Subs}\$[a]); a=1;12))$

"Parâmetros"

$T[5] = T$
 $P[5] = P$

"Frações molares - STANJAN"

$X[5;1] = 0,53533$
 $X[5;2] = 0,076446$
 $X[5;3] = 0,084265$
 $X[5;4] = 0,28783$
 $X[5;5] = 0,015211$
 $X[5;6] = 0,36064 * (10 ^ (0-7))$
 $X[5;7] = 0,00092576$
 $X[5;8] = 0$
 $X[5;9] = 0,30393 * (10 ^ (0-12))$
 $X[5;10] = 0,40505 * (10 ^ (0 -17))$
 $X[5;11] = 0,36527 * (10 ^ (0-22))$
 $X[5;12] = 0,2813 * (10 ^ (0-27))$

"Variáveis termodinâmicas"

h[5] = **sum**(X[5;a] * **enthalpy**(Subs[a];T=T[5]); a = 1;12)
s[5] = **sum**(X[5;a] * **entropy**(Subs[a];T=T[5];P=P[5]); a = 1;12)

"Exergias"

z = **sum**((X[5;a] * epsilon_0[a]); a = 1;12)

"química"

e|q_x[5] = z + T_0 * R * (X[5;1] * **ln**(X[5;1]) + X[5;2] * **ln**(X[5;2]) + X[5;3] * **ln**(X[5;3]) + X[5;4] * **ln**(X[5;4]) + X[5;5] * **ln**(X[5;5]) + X[5;6] * **ln**(X[5;6]) + X[5;7] * **ln**(X[5;7]) + X[5;9] * **ln**(X[5;9]) + X[5;10] * **ln**(X[5;10]) + X[5;11] * **ln**(X[5;11]) + X[5;12] * **ln**(X[5;12]))

"física"

e|f_x[5] = (h[5] - **sum**(X[5;a] * **enthalpy**(Subs[a];T=T_0); a = 1;12)) - T_0 * (s[5] - **sum**(X[5;a] * **entropy**(Subs[a];T=T_0;P=P_0); a = 1;12))

"total"

e_x[5] = e|q_x[5] + e|f_x[5]

E_dot_x[5] = n_dot[5] * e_x[5]

"!ÂNODO"

n_dot_co2_an = n_dot_h2_stack "formação de CO2 por meio da semi-reação no ânodo"

n_dot_h2o_an = n_dot_h2_stack "formação de H2O por meio da semi-reação no ânodo"

"!PONTO 6 - Saída do ânodo"

"Vazões"

m_dot[6] = n_dot[6] * MM[6]

"Massa molar"

MM[6] = (**sum**(X[6;a] * **molar**mass(Subs[a]); a = 1;12))

"Parâmetros"

T[6] = T

P[6] = P

"Frações molares"

X[6;1] = (n_dot_H2_reforma - n_dot_H2_stack) / n_dot[6]

X[6;2] = (n_dot[5] * X[5;2]) / n_dot[6]

X[6;3] = ((n_dot[5] * X[5;3]) + n_dot_co2_an) / n_dot[6]

X[6;4] = ((n_dot[5] * X[5;4]) + n_dot_h2o_an) / n_dot[6]

X[6;5] = (n_dot[5] * X[5;5]) / n_dot[6]

X[6;6] = (n_dot[5] * X[5;6]) / n_dot[6]

X[6;7] = (n_dot[5] * X[5;7]) / n_dot[6]

X[6;8] = (n_dot[5] * X[5;8]) / n_dot[6]

X[6;9] = (n_dot[5] * X[5;9]) / n_dot[6]

X[6;10] = (n_dot[5] * X[5;10]) / n_dot[6]

X[6;11] = (n_dot[5] * X[5;11]) / n_dot[6]

X[6;12] = (n_dot[5] * X[5;12]) / n_dot[6]

"Propriedades termodinâmicas"

h[6] = **sum**((X[6;a] * **enthalpy**(Subs[a];T=T[6])); a = 1;12)

s[6] = **sum**((X[6;a] * **entropy**(Subs[a];T=T[6];P=P[6])); a = 1;12)

"Exergias"

"química"

e|q_x[6] = **sum**((X[6;a] * epsilon_0[a]); a = 1;12) + T_0 * R * (X[6;1] * **ln**(X[6;1]) + X[6;2] * **ln**(X[6;2]) + X[6;3] * **ln**(X[6;3]) + X[6;4] * **ln**(X[6;4]) + X[6;5] * **ln**(X[6;5]) + X[6;6] * **ln**(X[6;6]) + X[6;7] * **ln**(X[6;7]) + X[6;9] * **ln**(X[6;9]) + X[6;10] * **ln**(X[6;10]) + X[6;11] * **ln**(X[6;11]) + X[6;12] * **ln**(X[6;12]))

"física"

e|f_x[6] = (h[6] - **sum**((X[6;a] * **enthalpy**(Subs[a];T=T_0)); a = 1;12)) - T_0 * (s[6] - **sum**((X[6;a] * **entropy**(Subs[a];T=T_0;P=P_0)); a = 1;12))

"total"

e_x[6] = e|q_x[6] + e|f_x[6]

$$E_dot_x[6] = e_x[6] * n_dot[6]$$

!"CÁTODO"

$n_dot_co2_cat = n_dot_h2_stack$ "fluxo de co2 deixando o cátodo"

$n_dot_o2_cat = n_dot_h2_stack / 2$ "fluxo de o2 deixando o cátodo"

!"PONTO 7 - Saída do cátodo"

"Vazões"

$$m_dot[7] = n_dot[7] * MM[7]$$

"Massa molar"

$$MM[7] = (\text{sum}(X[7;a] * \text{molarmass}(\text{Subs}\$[a]); a = 1;12))$$

"Parâmetros"

$$T[7] = T$$

$$P[7] = P$$

"Frações molares"

$$X[7;1] = 0$$

$$X[7;2] = 0$$

$$X[7;3] * n_dot[7] = ((n_dot[14] * X[14;3]) - n_dot_co2_cat)$$

$$X[7;4] * n_dot[7] = (n_dot[14] * X[14;4])$$

$$X[7;5] = 0$$

$$X[7;6] = 0$$

$$X[7;7] * n_dot[7] = (n_dot[14] * X[14;7])$$

$$X[7;8] * n_dot[7] = ((n_dot[14] * X[14;8]) - n_dot_o2_cat)$$

$$X[7;9] = 0$$

$$X[7;10] = 0$$

$$X[7;11] = 0$$

$$X[7;12] = 0$$

"Propriedades termodinâmicas"

$$h[7] = \text{sum}((X[7;a] * \text{enthalpy}(\text{Subs}\$[a]; T=T[7])); a = 1;12)$$

$$s[7] = \text{sum}((X[7;a] * \text{entropy}(\text{Subs}\$[a]; T=T[7]; P=P[7])); a = 1;12)$$

"Exergias"

"química"

$$e|q_x[7] = \text{sum}((X[7;a] * \text{epsilon}_0[a]); a = 1;12) + T_0 * R * (X[7;3] * \ln(X[7;3]) + X[7;4] * \ln(X[7;4]) + X[7;7] * \ln(X[7;7]) + X[7;8] * \ln(X[7;8]))$$

"física"

$$e|f_x[7] = (h[7] - \text{sum}((X[7;a] * \text{enthalpy}(\text{Subs}\$[a]; T=T_0)); a = 1;12)) - T_0 * (s[7] - \text{sum}((X[7;a] * \text{entropy}(\text{Subs}\$[a]; T=T_0; P=P_0)); a = 1;12))$$

"total"

$$e_x[7] = e|q_x[7] + e|f_x[7]$$

$$E_dot_x[7] = e_x[7] * n_dot[7]$$

!"PONTO 8 - Saída da câmara de combustão"

"Massa molar"

$$MM[8] = (\text{sum}(X[8;a] * \text{molarmass}(\text{Subs}\$[a]); a=1;12))$$

"Parâmetros"

$$P[8] = P$$

"Frações molares"

$$X[8;1] = 0$$

$$X[8;2] = 0$$

$$X[8;3] = a_C / n_dot[8]$$

$$X[8;4] = a_H / n_dot[8]$$

$$X[8;5] = 0$$

$X[8;6] = 0$
 $X[8;7] = a_N / n_dot[8]$
 $X[8;8] = a_O / n_dot[8]$
 $X[8;9] = 0$
 $X[8;10] = 0$
 $X[8;11] = 0$
 $X[8;12] = 0$

"Propriedades termodinâmicas"

$h[8] = \text{sum}((X[8;a] * \text{enthalpy}(\text{Subs}\$[a]; T=T[8])); a = 1;12)$
 $s[8] = \text{sum}((X[8;a] * \text{entropy}(\text{Subs}\$[a]; T=T[8]; P=P[8])); a = 1;12)$

"Exergias"

"química"

$e|q_x[8] = \text{sum}((X[8;a] * \text{epsilon}_0[a]); a = 1;12) + T_0 * R * (X[8;3] * \ln(X[8;3]) + X[8;4] * \ln(X[8;4]) + X[8;7] * \ln(X[8;7]) + X[8;8] * \ln(X[8;8]))$

"física"

$e|f_x[8] = (h[8] - \text{sum}((X[8;a] * \text{enthalpy}(\text{Subs}\$[a]; T=T_0)); a = 1;12)) - T_0 * (s[8] - \text{sum}((X[8;a] * \text{entropy}(\text{Subs}\$[a]; T=T_0; P=P_0)); a = 1;12))$

"total"

$e_x[8] = e|q_x[8] + e|f_x[8]$
 $E_dot_x[8] = n_dot[8] * e_x[8]$

"!PONTO 9"

"Vazões"

$m_dot[9] = n_dot[9] * MM[9]$

"Massa molar"

$MM[9] = MM[8]$

"Parâmetros"

$P[9] = P[8]$
 $T[9] = T[8]$

"Frações molares"

$X[9;1] = X[8;1]$
 $X[9;2] = X[8;2]$
 $X[9;3] = X[8;3]$
 $X[9;4] = X[8;4]$
 $X[9;5] = X[8;5]$
 $X[9;6] = X[8;6]$
 $X[9;7] = X[8;7]$
 $X[9;8] = X[8;8]$
 $X[9;9] = X[8;9]$
 $X[9;10] = X[8;10]$
 $X[9;11] = X[8;11]$
 $X[9;12] = X[8;12]$

"Propriedades termodinâmicas"

$h[9] = \text{sum}((X[9;a] * \text{enthalpy}(\text{Subs}\$[a]; T=T[9])); a = 1;12)$
 $s[9] = \text{sum}((X[9;a] * \text{entropy}(\text{Subs}\$[a]; T=T[9]; P=P[9])); a = 1;12)$

"Exergias"

"química"

$e|q_x[9] = \text{sum}((X[9;a] * \text{epsilon}_0[a]); a = 1;12) + T_0 * R * (X[9;3] * \ln(X[9;3]) + X[9;4] * \ln(X[9;4]) + X[9;7] * \ln(X[9;7]) + X[9;8] * \ln(X[9;8]))$

"física"

$e|f_x[9] = (h[9] - \text{sum}((X[9;a] * \text{enthalpy}(\text{Subs}\$[a]; T=T_0)); a = 1;12)) - T_0 * (s[9] - \text{sum}((X[9;a] * \text{entropy}(\text{Subs}\$[a]; T=T_0; P=P_0)); a = 1;12))$

"total"

$e_x[9] = e|q_x[9] + e|f_x[9]$
 $E_dot_x[9] = n_dot[9] * e_x[9]$

!"PONTO 10"

"Massa molar"

$MM[10] = MM[8]$

"Parâmetros"

$P[10] = P[8]$

"Frações molares"

$X[10;1] = X[8;1]$

$X[10;2] = X[8;2]$

$X[10;3] = X[8;3]$

$X[10;4] = X[8;4]$

$X[10;5] = X[8;5]$

$X[10;6] = X[8;6]$

$X[10;7] = X[8;7]$

$X[10;8] = X[8;8]$

$X[10;9] = X[8;9]$

$X[10;10] = X[8;10]$

$X[10;11] = X[8;11]$

$X[10;12] = X[8;12]$

"Propriedades termodinâmicas"

$h[10] = \text{sum}((X[10;a] * \text{enthalpy}(\text{Subs}\$[a]; T=T[10])); a = 1;12)$

$s[10] = \text{sum}((X[10;a] * \text{entropy}(\text{Subs}\$[a]; T=T[10]; P=P[10])); a = 1;12)$

"Exergias"

"química"

$e|q_x[10] = \text{sum}((X[10;a] * \text{epsilon}_0[a]); a = 1;12) + T_0 * R * (X[10;3] * \ln(X[10;3]) + X[10;4] * \ln(X[10;4]) + X[10;7] * \ln(X[10;7]) + X[10;8] * \ln(X[10;8]))$

"física"

$e|f_x[10] = (h[10] - \text{sum}((X[10;a] * \text{enthalpy}(\text{Subs}\$[a]; T=T_0)); a = 1;12)) - T_0 * (s[10] - \text{sum}((X[10;a] * \text{entropy}(\text{Subs}\$[a]; T=T_0; P=P_0)); a = 1;12))$

"total"

$e_x[10] = e|q_x[10] + e|f_x[10]$

$E_dot_x[10] = n_dot[10] * e_x[10]$

!"PONTO 11"

"Massa molar"

$MM[11] = MM[8]$

"Parâmetros"

$P[11] = P[8]$

$T[11] = 423 \text{ [K]}$ "recomendado"

"Frações molares"

$X[11;1] = X[8;1]$

$X[11;2] = X[8;2]$

$X[11;3] = X[8;3]$

$X[11;4] = X[8;4]$

$X[11;5] = X[8;5]$

$X[11;6] = X[8;6]$

$X[11;7] = X[8;7]$

$X[11;8] = X[8;8]$

$X[11;9] = X[8;9]$

$X[11;10] = X[8;10]$

$X[11;11] = X[8;11]$

$$X[11;12] = X[8;12]$$

"Propriedades termodinâmicas"

$$h[11] = \text{sum}((X[11;a] * \text{enthalpy}(\text{Subs}\$[a]; T=T[11])); a = 1;12)$$

$$s[11] = \text{sum}((X[11;a] * \text{entropy}(\text{Subs}\$[a]; T=T[11]; P=P[11])); a = 1;12)$$

"Exergias"

"química"

$$e|q_x[11] = \text{sum}((X[11;a] * \text{epsilon}_0[a]); a = 1;12) + T_0 * R * (X[11;3] * \ln(X[11;3]) + X[11;4] * \ln(X[11;4]) + X[11;7] * \ln(X[11;7]) + X[11;8] * \ln(X[11;8]))$$

"física"

$$e|f_x[11] = (h[11] - \text{sum}((X[11;a] * \text{enthalpy}(\text{Subs}\$[a]; T=T_0)); a = 1;12)) - T_0 * (s[11] - \text{sum}((X[11;a] * \text{entropy}(\text{Subs}\$[a]; T=T_0; P=P_0)); a = 1;12))$$

"total"

$$e_x[11] = e|q_x[11] + e|f_x[11]$$

$$E_dot_x[11] = n_dot[11] * e_x[11]$$

"!PONTO 12"

"Vazões"

$$m_dot[12] = n_dot[12] * MM[12]$$

"Massa molar"

$$MM[12] = MM[8]$$

"Parâmetros"

$$P[12] = P[8]$$

$$T[12] = T[8]$$

"Frações molares"

$$X[12;1] = X[8;1]$$

$$X[12;2] = X[8;2]$$

$$X[12;3] = X[8;3]$$

$$X[12;4] = X[8;4]$$

$$X[12;5] = X[8;5]$$

$$X[12;6] = X[8;6]$$

$$X[12;7] = X[8;7]$$

$$X[12;8] = X[8;8]$$

$$X[12;9] = X[8;9]$$

$$X[12;10] = X[8;10]$$

$$X[12;11] = X[8;11]$$

$$X[12;12] = X[8;12]$$

"Propriedades termodinâmicas"

$$h[12] = \text{sum}((X[12;a] * \text{enthalpy}(\text{Subs}\$[a]; T=T[8])); a = 1;12)$$

$$s[12] = \text{sum}((X[12;a] * \text{entropy}(\text{Subs}\$[a]; T=T[12]; P=P[12])); a = 1;12)$$

"Exergias"

"química"

$$e|q_x[12] = \text{sum}((X[12;a] * \text{epsilon}_0[a]); a = 1;12) + T_0 * R * (X[12;3] * \ln(X[12;3]) + X[12;4] * \ln(X[12;4]) + X[12;7] * \ln(X[12;7]) + X[12;8] * \ln(X[12;8]))$$

"física"

$$e|f_x[12] = (h[12] - \text{sum}((X[12;a] * \text{enthalpy}(\text{Subs}\$[a]; T=T_0)); a = 1;12)) - T_0 * (s[12] - \text{sum}((X[12;a] * \text{entropy}(\text{Subs}\$[a]; T=T_0; P=P_0)); a = 1;12))$$

"total"

$$e_x[12] = e|q_x[12] + e|f_x[12]$$

$$E_dot_x[12] = n_dot[12] * e_x[12]$$

"!PONTO 13 - ar"

"Vazões"

$$m_dot[13] = n_dot[13] * MM[13]$$

"Massa molar"

$$MM[13] = (\text{sum}(X[13;a] * \text{molarmass}(\text{Subs}\$[a]); a=1;12))$$

"Parâmetros"

$$T[13] = T_0$$

$$P[13] = P_0$$

"Frações molares"

$$X[13;1] = 0$$

$$X[13;2] = 0$$

$$X[13;3] = 0$$

$$X[13;4] = 0$$

$$X[13;5] = 0$$

$$X[13;6] = 0$$

$$X[13;7] = 0,79$$

$$X[13;8] = 0,21$$

$$X[13;9] = 0$$

$$X[13;10] = 0$$

$$X[13;11] = 0$$

$$X[13;12] = 0$$

"Propriedades termodinâmicas"

$$h[13] = \text{sum}((X[13;a] * \text{enthalpy}(\text{Subs}\$[a]; T=T[13])); a = 1;12)$$

$$s[13] = \text{sum}((X[13;a] * \text{entropy}(\text{Subs}\$[a]; T=T[13]; P=P[13])); a = 1;12)$$

"Exergias"

"química"

$$e|q_x[13] = \text{sum}((X[13;a] * \text{epsilon}_0[a]); a = 1;12) + T_0 * R * (X[13;7] * \ln(X[13;7]) + X[13;8] * \ln(X[13;8]))$$

"física"

$$e|f_x[13] = (h[13] - \text{sum}((X[13;a] * \text{enthalpy}(\text{Subs}\$[a]; T=T_0)); a = 1;12)) - T_0 * (s[13] - \text{sum}((X[13;a] * \text{entropy}(\text{Subs}\$[a]; T=T_0; P=P_0)); a = 1;12))$$

"total"

$$e_x[13] = e|q_x[13] + e|f_x[13]$$

$$E_dot_x[13] = n_dot[13] * e_x[13]$$

"!PONTO 14"

$$\phi_{co2} = 0,85$$

$$n_dot[14] = n_dot[12] * (X[12;1] + X[12;2] + X[12;3] + X[12;4] + X[12;5] + X[12;6] + X[12;7] + X[12;8] + X[12;9] + X[12;10] + X[12;11] + X[12;12]) + n_dot[13] * (X[13;7] + X[13;8])$$

$$\phi_{co2} = n_dot_co2_cat / (n_dot[14] * X[14;3])$$

$$\phi_{o2} = n_dot_o2_cat / (n_dot[14] * X[14;8])$$

"Vazões"

$$m_dot[14] = n_dot[14] * MM[14]$$

"Massa molar"

$$MM[14] = (\text{sum}(X[14;a] * \text{molarmass}(\text{Subs}\$[a]); a=1;12))$$

"Parâmetros"

$$P[14] = P[12]$$

$$T[14] = T \text{ "recomendado"}$$

"Frações molares"

$$X[14;1] = 0$$

```

X[14;2] = 0
X[14;3] * n_dot[14] = n_dot[12] * X[12;3]
X[14;4] * n_dot[14] = n_dot[12] * X[12;4]
X[14;5] = 0
X[14;6] = 0
X[14;7] * n_dot[14] = (n_dot[12] * X[12;7]) + (n_dot[13] * X[13;7])
X[14;8] * n_dot[14] = (n_dot[12] * X[12;8]) + (n_dot[13] * X[13;8])
X[14;9] = 0
X[14;10] = 0
X[14;11] = 0
X[14;12] = 0

```

"Propriedades termodinâmicas"

```

h[14] = sum((X[14;a] * enthalpy(Subs$a;T=T[14])); a = 1;12)
s[14] = sum((X[14;a] * entropy(Subs$a;T=T[14];P=P[14])); a = 1;12)

```

"Exergias"

"química"

```

e|q_x[14] = sum((X[14;a] * epsilon_0[a]); a = 1;12) + T_0 * R * (X[14;3] * ln(X[14;3]) + X[14;4] *
ln(X[14;4]) + X[14;7] * ln(X[14;7]) + X[14;8] * ln(X[14;8]))

```

"física"

```

e|f_x[14] = (h[14] - sum((X[14;a] * enthalpy(Subs$a;T=T_0)); a = 1;12)) - T_0 * (s[14] - sum((X[14;a]
* entropy(Subs$a;T=T_0;P=P_0)); a = 1;12))

```

"total"

```

e_x[14] = e|q_x[14] + e|f_x[14]
E_dot_x[14] = n_dot[14] * e_x[14]

```

"!PONTO 15"

"Vazões"

```

m_dot[15] = n_dot[15] * MM[15]

```

"Massa molar"

```

MM[15] = MM[8]

```

"Parâmetros"

```

P[15] = P[8]

```

```

T[15] = T[8]

```

"Frações molares"

```

X[15;1] = X[8;1]
X[15;2] = X[8;2]
X[15;3] = X[8;3]
X[15;4] = X[8;4]
X[15;5] = X[8;5]
X[15;6] = X[8;6]
X[15;7] = X[8;7]
X[15;8] = X[8;8]
X[15;9] = X[8;9]
X[15;10] = X[8;10]
X[15;11] = X[8;11]
X[15;12] = X[8;12]

```

"Propriedades termodinâmicas"

```

h[15] = sum((X[15;a] * enthalpy(Subs$a;T=T[15])); a = 1;12)
s[15] = sum((X[15;a] * entropy(Subs$a;T=T[15];P=P[15])); a = 1;12)

```

"Exergias"

"química"

$e|q_x[15] = \text{sum}((X[15;a] * \text{epsilon}_0[a]); a = 1;12) + T_0 * R * (X[15;3] * \ln(X[15;3]) + X[15;4] * \ln(X[15;4]) + X[15;7] * \ln(X[15;7]) + X[15;8] * \ln(X[15;8]))$

"física"

$e|f_x[15] = (h[15] - \text{sum}((X[15;a] * \text{enthalpy}(\text{Subs}\$[a]; T=T_0)); a = 1;12)) - T_0 * (s[15] - \text{sum}((X[15;a] * \text{entropy}(\text{Subs}\$[a]; T=T_0; P=P_0)); a = 1;12))$

"total"

$e_x[15] = e|q_x[15] + e|f_x[15]$

$E_dot_x[15] = n_dot[15] * e_x[15]$

"!PONTO 16"

"Massa molar"

$MM[16] = MM[8]$

"Parâmetros"

$P[16] = P[8]$

"Frações molares"

$X[16;1] = X[8;1]$

$X[16;2] = X[8;2]$

$X[16;3] = X[8;3]$

$X[16;4] = X[8;4]$

$X[16;5] = X[8;5]$

$X[16;6] = X[8;6]$

$X[16;7] = X[8;7]$

$X[16;8] = X[8;8]$

$X[16;9] = X[8;9]$

$X[16;10] = X[8;10]$

$X[16;11] = X[8;11]$

$X[16;12] = X[8;12]$

"Propriedades termodinâmicas"

$h[16] = \text{sum}((X[16;a] * \text{enthalpy}(\text{Subs}\$[a]; T=T[16])); a = 1;12)$

$s[16] = \text{sum}((X[16;a] * \text{entropy}(\text{Subs}\$[a]; T=T[16]; P=P[16])); a = 1;12)$

"Exergias"

"química"

$e|q_x[16] = \text{sum}((X[16;a] * \text{epsilon}_0[a]); a = 1;12) + T_0 * R * (X[16;3] * \ln(X[16;3]) + X[16;4] * \ln(X[16;4]) + X[16;7] * \ln(X[16;7]) + X[16;8] * \ln(X[16;8]))$

"física"

$e|f_x[16] = (h[16] - \text{sum}((X[16;a] * \text{enthalpy}(\text{Subs}\$[a]; T=T_0)); a = 1;12)) - T_0 * (s[16] - \text{sum}((X[16;a] * \text{entropy}(\text{Subs}\$[a]; T=T_0; P=P_0)); a = 1;12))$

"total"

$e_x[16] = e|q_x[16] + e|f_x[16]$

$E_dot_x[16] = n_dot[16] * e_x[16]$

"!PONTO 17"

"Massa molar"

$MM[17] = MM[8]$

"Parâmetros"

$P[17] = P[8]$

$T[17] = T[24] + \text{DELTAT_pp}$

"Frações molares"

$X[17;1] = X[8;1]$

$X[17;2] = X[8;2]$

$X[17;3] = X[8;3]$

$X[17;4] = X[8;4]$

$X[17;5] = X[8;5]$
 $X[17;6] = X[8;6]$
 $X[17;7] = X[8;7]$
 $X[17;8] = X[8;8]$
 $X[17;9] = X[8;9]$
 $X[17;10] = X[8;10]$
 $X[17;11] = X[8;11]$
 $X[17;12] = X[8;12]$

"Propriedades termodinâmicas"

$h[17] = \text{sum}((X[17;a] * \text{enthalpy}(\text{Subs}\$[a]; T=T[17])); a = 1;12)$
 $s[17] = \text{sum}((X[17;a] * \text{entropy}(\text{Subs}\$[a]; T=T[17]; P=P[17])); a = 1;12)$

"Exergias"

"química"

$e|q_x[17] = \text{sum}((X[17;a] * \text{epsilon}_0[a]); a = 1;12) + T_0 * R * (X[17;3] * \ln(X[17;3]) + X[17;4] * \ln(X[17;4]) + X[17;7] * \ln(X[17;7]) + X[17;8] * \ln(X[17;8]))$

"física"

$e|f_x[17] = (h[17] - \text{sum}((X[17;a] * \text{enthalpy}(\text{Subs}\$[a]; T=T_0)); a = 1;12)) - T_0 * (s[17] - \text{sum}((X[17;a] * \text{entropy}(\text{Subs}\$[a]; T=T_0; P=P_0)); a = 1;12))$

"total"

$e_x[17] = e|q_x[17] + e|f_x[17]$
 $E_dot_x[17] = n_dot[17] * e_x[17]$

"!PONTO 18"

"Massa molar"

$MM[18] = MM[8]$

"Parâmetros"

$P[18] = P[8]$

"Frações molares"

$X[18;1] = X[8;1]$
 $X[18;2] = X[8;2]$
 $X[18;3] = X[8;3]$
 $X[18;4] = X[8;4]$
 $X[18;5] = X[8;5]$
 $X[18;6] = X[8;6]$
 $X[18;7] = X[8;7]$
 $X[18;8] = X[8;8]$
 $X[18;9] = X[8;9]$
 $X[18;10] = X[8;10]$
 $X[18;11] = X[8;11]$
 $X[18;12] = X[8;12]$

"Propriedades termodinâmicas"

$h[18] = \text{sum}((X[18;a] * \text{enthalpy}(\text{Subs}\$[a]; T=T[18])); a = 1;12)$
 $s[18] = \text{sum}((X[18;a] * \text{entropy}(\text{Subs}\$[a]; T=T[18]; P=P[18])); a = 1;12)$

"Exergias"

"química"

$e|q_x[18] = \text{sum}((X[18;a] * \text{epsilon}_0[a]); a = 1;12) + T_0 * R * (X[18;3] * \ln(X[18;3]) + X[18;4] * \ln(X[18;4]) + X[18;7] * \ln(X[18;7]) + X[18;8] * \ln(X[18;8]))$

"física"

$e|f_x[18] = (h[18] - \text{sum}((X[18;a] * \text{enthalpy}(\text{Subs}\$[a]; T=T_0)); a = 1;12)) - T_0 * (s[18] - \text{sum}((X[18;a] * \text{entropy}(\text{Subs}\$[a]; T=T_0; P=P_0)); a = 1;12))$

"total"

$e_x[18] = e|q_x[18] + e|f_x[18]$
 $E_dot_x[18] = n_dot[18] * e_x[18]$

"!PONTO 19"

"Vazões"

$$m_{\text{dot}}[19] = n_{\text{dot}}[19] * MM[19]$$

"Massa molar"

$$MM[19] = \text{molarmass}(\text{Water})$$

"Parâmetros"

$$P[19] = 1500 \text{ [kPa]}$$

$$T[19] = 600 \text{ [K]}$$

"Propriedades termodinâmicas"

$$h[19] = \text{enthalpy}(\text{Water}; T=T[19]; P=P[19])$$

$$s[19] = \text{entropy}(\text{Water}; T=T[19]; P=P[19])$$

"Exergias"

"química"

$$e|q_x[19] = \text{epsilon}_0[4]$$

"física"

$$e|f_x[19] = h[19] - \text{enthalpy}(\text{Water}; T=T_0; P=P_0) - T_0 * (s[19] - \text{entropy}(\text{Water}; T=T_0; P=P_0))$$

"total"

$$e_x[19] = e|q_x[19] + e|f_x[19]$$

$$E_{\text{dot}}_x[19] = n_{\text{dot}}[19] * e_x[19]$$

"!PONTO 20S"

$$h_{20s} = \text{enthalpy}(\text{Water}; s=s[19]; P=P[20])$$

"!PONTO 20"

"Massa molar"

$$MM[20] = MM[19]$$

"Parâmetros"

$$P[20] = 50 \text{ [kPa]}$$

$$x_{20} = 0,95$$

"Propriedades termodinâmicas"

$$h[20] = \text{enthalpy}(\text{Water}; x=x_{20}; P=P[20])$$

$$T[20] = \text{temperature}(\text{Water}; P=P[20]; x=x_{20})$$

$$s[20] = \text{entropy}(\text{Water}; x=x_{20}; P=P[20])$$

"Exergias"

"química"

$$e|q_x[20] = \text{epsilon}_0[4]$$

"física"

$$e|f_x[20] = h[20] - \text{enthalpy}(\text{Water}; T=T_0; P=P_0) - T_0 * (s[20] - \text{entropy}(\text{Water}; T=T_0; P=P_0))$$

"total"

$$e_x[20] = e|q_x[20] + e|f_x[20]$$

$$E_{\text{dot}}_x[20] = n_{\text{dot}}[20] * e_x[20]$$

"!PONTO 21"

"Massa molar"

$$MM[21] = MM[20]$$

"Parâmetros"

$$P[21] = P[20]$$

$T[21] = \text{temperature}(\text{Water}; P=P[21]; x=0)$

"Propriedades termodinâmicas"

$h[21] = \text{enthalpy}(\text{Water}; T=T[21]; x=0)$

$s[21] = \text{entropy}(\text{Water}; P=P[21]; x=0)$

"Exergias"

"química"

$e|q_x[21] = 3120$

"física"

$e|f_x[21] = h[21] - \text{enthalpy}(\text{Water}; T=T_0; P=P_0) - T_0 * (s[21] - \text{entropy}(\text{Water}; T=T_0; P=P_0))$

"total"

$e_x[21] = e|q_x[21] + e|f_x[21]$

$E_dot_x[21] = n_dot[21] * e_x[21]$

"!PONTO 22"

"Massa molar"

$MM[22] = MM[21]$

"Parâmetros"

$P[22] = P[19]$

"Propriedades termodinâmicas"

$h[22] = \text{enthalpy}(\text{Water}; T=T[22]; P=P[22])$

$s[22] = \text{entropy}(\text{Water}; T=T[22]; P=P[22])$

"Exergias"

"química"

$e|q_x[22] = 3120$

"física"

$e|f_x[22] = h[22] - \text{enthalpy}(\text{Water}; T=T_0; P=P_0) - T_0 * (s[22] - \text{entropy}(\text{Water}; T=T_0; P=P_0))$

"total"

$e_x[22] = e|q_x[22] + e|f_x[22]$

$E_dot_x[22] = n_dot[22] * e_x[22]$

"!PONTO 23"

"Massa molar"

$MM[23] = MM[22]$

"Parâmetros"

$P[23] = P[22]$

"Propriedades termodinâmicas"

$h[23] = \text{enthalpy}(\text{Water}; T=T[23]; P=P[23])$

$s[23] = \text{entropy}(\text{Water}; T=T[23]; P=P[23])$

"Exergias"

"química"

$e|q_x[23] = 3120$

"física"

$e|f_x[23] = h[23] - \text{enthalpy}(\text{Water}; T=T_0; P=P_0) - T_0 * (s[23] - \text{entropy}(\text{Water}; T=T_0; P=P_0))$

"total"

$e_x[23] = e|q_x[23] + e|f_x[23]$

$E_dot_x[23] = n_dot[23] * e_x[23]$

"!PONTO 24"

"Massa molar"

$MM[24] = MM[23]$

"Parâmetros"

$P[24] = P[23]$

$T[24] - T[23] = \text{DELTAT_ap}$

"Propriedades termodinâmicas"

$h[24] = \text{enthalpy}(\text{Water}; x=1; P=P[24])$

$s[24] = \text{entropy}(\text{Water}; x=1; P=P[24])$

$T[24] = \text{temperature}(\text{Water}; P=P[24]; x=1)$

"Exergias"

"química"

$e|q_x[24] = \text{epsilon}_0[4]$

"física"

$e|f_x[24] = h[24] - \text{enthalpy}(\text{Water}; T=T_0; P=P_0) - T_0 * (s[24] - \text{entropy}(\text{Water}; T=T_0; P=P_0))$

"total"

$e_x[24] = e|q_x[24] + e|f_x[24]$

$E_dot_x[24] = n_dot[24] * e_x[24]$

"!PONTO 25"

"Vazões"

$m_dot[25] = MM[25] * n_dot[25]$

"Massa molar"

$MM[25] = \text{molarmass}(\text{H2O})$

"Parâmetros"

$T[25] = T_0$

$P[25] = P_0$

"Propriedades termodinâmicas"

$h[25] = \text{enthalpy}(\text{Water}; T=T[25]; P=P[25])$

$s[25] = \text{entropy}(\text{Water}; T=T[25]; P=P[25])$

"Exergias"

"química"

$e|q_x[25] = 3120$

"física"

$e|f_x[25] = h[25] - \text{enthalpy}(\text{Water}; T=T_0; P=P_0) - T_0 * (s[25] - \text{entropy}(\text{Water}; T=T_0; P=P_0))$

"total"

$e_x[25] = e|q_x[25] + e|f_x[25]$

$E_dot_x[25] = n_dot[25] * e_x[25]$

"!PONTO 26"

"Massa molar"

$MM[26] = MM[25]$

"Parâmetros"

$T[26] - T[25] = 5$

$P[26] = P_0$

"Propriedades termodinâmicas"

$h[26] = \text{enthalpy}(\text{Water}; T=T[26]; P=P[26])$

$s[26] = \text{entropy}(\text{Water}; T=T[26]; P=P[26])$

"Exergias"

"química"

$e|q_x[26] = 3120$

"física"

$e|f_x[26] = h[26] - \text{enthalpy}(\text{Water}; T=T_0; P=P_0) - T_0 * (s[26] - \text{entropy}(\text{Water}; T=T_0; P=P_0))$

"total"

$$e_x[26] = e|q_x[26] + e|f_x[26]$$

$$E_dot_x[26] = n_dot[26] * e_x[26]$$

"!BALANÇOS NOS COMPONENTES"

"!TROCADOR DE CALOR 1-2"

"Balanços de massa"

$$m_dot[1] = m_dot[2]$$

$$m_dot[11] = m_dot[10]$$

$$n_dot[1] = n_dot[2]$$

$$n_dot[11] = n_dot[10]$$

"Balanço de energia"

$$n_dot[9] * (h[10] - h[11]) = Q_dot_tc1$$

$$Q_dot_tc1 = n_dot[2] * (h[2] - h[1])$$

"!TROCADOR DE CALOR 3-4"

"Balanços de massa"

$$m_dot[3] = m_dot[4]$$

$$m_dot[10] = m_dot[9]$$

$$n_dot[3] = n_dot[4]$$

$$n_dot[10] = n_dot[9]$$

"Balanço de energia"

$$n_dot[9] * (h[9] - h[10]) = Q_dot_tc2$$

$$Q_dot_tc2 = n_dot[4] * (h[4] - h[3])$$

"!CÉLULA A COMBUSTÍVEL"

"!Reformador"

$$Q_dot_ref = n_dot[5] * h[5] - n_dot[4] * h[4] - n_dot[2] * \text{enthalpy}(H2O; T=T[2])$$

"!Ânodo"

"Balanço de massa"

$$n_dot[6] = n_dot[5] - n_dot_h2_stack + n_dot_co2_an + n_dot_h2o_an$$

"!Cátodo"

"Balanços de massa"

$$n_dot[7] = n_dot[14] - n_dot_co2_cat - n_dot_o2_cat$$

"!CÂMARA DE COMBUSTÃO"

"Estequiometria na combustão"

$$\text{"C"} \quad n_dot[6] * (X[6;2] + X[6;3] + X[6;5] + 2 * X[6;6] + 3 * X[6;9] + 4 * X[6;10] + 5 * X[6;11] + 6 * X[6;12]) + n_dot[7] * (X[7;2] + X[7;3] + X[7;5] + 2 * X[7;6] + 3 * X[7;9] + 4 * X[7;10] + 5 * X[7;11] + 6 * X[7;12]) = a_C$$

$$\text{"H"} \quad n_dot[6] * (2 * X[6;1] + 2 * X[6;4] + 4 * X[6;5] + 6 * X[6;6] + 8 * X[6;9] + 10 * X[6;10] + 12 * X[6;11] + 14 * X[6;12]) + n_dot[7] * (2 * X[7;1] + 2 * X[7;4] + 4 * X[7;5] + 6 * X[7;6] + 8 * X[7;9] + 10 * X[7;10] + 12 * X[7;11] + 14 * X[7;12]) = 2 * a_H$$

$$\text{"O"} \quad n_dot[6] * (X[6;2] + 2 * X[6;3] + X[6;4] + 2 * X[6;8]) + n_dot[7] * (X[7;2] + 2 * X[7;3] + X[7;4] + 2 * X[7;8]) = 2 * a_C + a_H + 2 * a_O$$

$$\text{"N"} \quad n_dot[6] * 2 * X[6;7] + n_dot[7] * 2 * X[7;7] = 2 * a_N$$

$$n_dot[8] = a_C + a_H + a_N + a_O$$

"Balanços de massa"

$$m_dot[8] = m_dot[7] + m_dot[6]$$

"Balanço de energia"

$$n_dot[8] * h[8] = n_dot[6] * h[6] + n_dot[7] * h[7]$$

"!SPLITER"

"Balanços de massa"

$$m_dot[8] = m_dot[9] + m_dot[15] + m_dot[12]$$

"!MISTURADOR DE AR"

"Balanço de energia"

$$n_dot[14] * h[14] = n_dot[12] * h[12]$$

"!CALDEIRA DE RECUPERAÇÃO"

$$Q_dot_cr = Q_spr + Q_evap + Q_eco$$

"!superaquecedor"

"Balanços de massa"

$$m_dot[16] = m_dot[15]$$

$$n_dot[16] = n_dot[15]$$

"Balanço de energia"

$$n_dot[15] * (h[15] - h[16]) = Q_spr$$

$$Q_spr = n_dot[19] * (h[19] - h[24])$$

"!Evaporador"

"Balanços de massa"

$$m_dot[17] = m_dot[16]$$

$$n_dot[17] = n_dot[16]$$

$$m_dot[24] = m_dot[23]$$

$$n_dot[24] = n_dot[23]$$

"Balanço de energia"

$$n_dot[17] * (h[16] - h[17]) = Q_evap$$

$$Q_evap = n_dot[24] * (h[24] - h[23])$$

"!Economizador"

"Balanço de massa"

$$m_dot[18] = m_dot[17]$$

$$n_dot[18] = n_dot[17]$$

$$m_dot[23] = m_dot[22]$$

$$n_dot[23] = n_dot[22]$$

"Balanço de energia"

$$n_dot[18] * (h[17] - h[18]) = Q_eco$$

$$Q_eco = n_dot[23] * (h[23] - h[22])$$

"!TURBINA A VAPOR"

"Balanço de massa"

$$m_dot[20] = m_dot[19]$$

$$n_dot[20] = n_dot[19]$$

"Balanço de energia"

"eta_t = 0,78"

eta_t = (h[19] - h[20]) / (h[19] - h_20s)

W_dot_turbina = n_dot[19] * (h[19] - h[20])

"!CONDENSADOR"

"Balanço de massa"

m_dot[21] = m_dot[20]

n_dot[21] = n_dot[20]

m_dot[26] = m_dot[25]

n_dot[26] = n_dot[25]

"Balanço de energia"

n_dot[25] * (h[26] - h[25]) = Q_cond

Q_cond = n_dot[20] * (h[20] - h[21])

"!BOMBA"

"Balanço de massa"

m_dot[22] = m_dot[21]

n_dot[22] = n_dot[21]

W_dot_bomba = n_dot[21] * (h[22] - h[21])

"Balanço de energia"

eta_b = 0,8

eta_b = (enthalpy(Water,s=s[21];P=P[22]) - h[21]) / (h[22] - h[21])

"!EFICIÊNCIAS"

W_dot_liq = W_dot_MCFC + W_dot_turbina - W_dot_bomba

eta_l = W_dot_liq / (PCI * n_dot[4])

eta_e = W_dot_MCFC / (PCI * n_dot[4])

eta_ll = W_dot_liq / (E_dot_x[1] + E_dot_x[3])

eta_ell = W_dot_MCFC / (E_dot_x[1] + E_dot_x[3])

"!EXERGIAS E EFICIÊNCIAS"

"MCFC" Ex_e_MCFC = E_dot_x[2] + E_dot_x[4] + E_dot_x[14]

Ex_s_MCFC = E_dot_x[6] + E_dot_x[7] + W_dot_MCFC

I_dot_MCFC = Ex_e_MCFC - Ex_s_MCFC

psi_MCFC = Ex_s_MCFC / Ex_e_MCFC

"TC1" Ex_e_TC1 = E_dot_x[1] + E_dot_x[10]

Ex_s_TC1 = E_dot_x[2] + E_dot_x[11]

I_dot_TC1 = Ex_e_TC1 - Ex_s_TC1

psi_TC1 = Ex_s_TC1 / Ex_e_TC1

"TC2" Ex_e_TC2 = E_dot_x[9] + E_dot_x[3]

Ex_s_TC2 = E_dot_x[10] + E_dot_x[4]

I_dot_TC2 = Ex_e_TC2 - Ex_s_TC2

psi_TC2 = Ex_s_TC2 / Ex_e_TC2

"CC" Ex_e_CC = E_dot_x[6] + E_dot_x[7]

Ex_s_CC = E_dot_x[8]

I_dot_CC = Ex_e_CC - Ex_s_CC

psi_CC = Ex_s_CC / Ex_e_CC

"SPLITER" Ex_e_spl = E_dot_x[8]

$$\begin{aligned} \text{Ex_s_spl} &= \text{E_dot_x}[9] + \text{E_dot_x}[12] + \text{E_dot_x}[15] \\ \text{I_dot_spl} &= \text{Ex_e_spl} - \text{Ex_s_spl} \\ \text{psi_spl} &= \text{Ex_s_spl} / \text{Ex_e_spl} \end{aligned}$$

"MISTURADOR" $\begin{aligned} \text{Ex_e_mist} &= \text{E_dot_x}[12] + \text{E_dot_x}[13] \\ \text{Ex_s_mist} &= \text{E_dot_x}[14] \\ \text{I_dot_mist} &= \text{Ex_e_mist} - \text{Ex_s_mist} \\ \text{psi_mist} &= \text{Ex_s_mist} / \text{Ex_e_mist} \end{aligned}$

"CR" $\begin{aligned} \text{Ex_e_CR} &= \text{E_dot_x}[15] + \text{E_dot_x}[22] \\ \text{Ex_s_CR} &= \text{E_dot_x}[19] + \text{E_dot_x}[18] \\ \text{I_dot_CR} &= \text{Ex_e_CR} - \text{Ex_s_CR} \\ \text{psi_CR} &= \text{Ex_s_CR} / \text{Ex_e_CR} \end{aligned}$

"TV" $\begin{aligned} \text{Ex_e_TV} &= \text{E_dot_x}[19] \\ \text{Ex_s_TV} &= \text{E_dot_x}[20] + \text{W_dot_turbina} \\ \text{I_dot_TV} &= \text{Ex_e_TV} - \text{Ex_s_TV} \\ \text{psi_TV} &= \text{Ex_s_TV} / \text{Ex_e_TV} \end{aligned}$

"CONDENSADOR" $\begin{aligned} \text{Ex_e_cond} &= \text{E_dot_x}[25] + \text{E_dot_x}[20] \\ \text{Ex_s_cond} &= \text{E_dot_x}[26] + \text{E_dot_x}[21] \\ \text{I_dot_cond} &= \text{Ex_e_cond} - \text{Ex_s_cond} \\ \text{psi_cond} &= \text{Ex_s_cond} / \text{Ex_e_cond} \end{aligned}$

"BOMBA" $\begin{aligned} \text{Ex_e_b} &= \text{E_dot_x}[21] + \text{W_dot_bomba} \\ \text{Ex_s_b} &= \text{E_dot_x}[22] \\ \text{I_dot_b} &= \text{Ex_e_b} - \text{Ex_s_b} \\ \text{psi_b} &= \text{Ex_s_b} / \text{Ex_e_b} \end{aligned}$

APÊNDICE B – Equacionamento utilizado na simulação econômica do ciclo

"Variáveis necessárias da análise termodinâmica"

"!trocadores de calor"

$Q_{\dot{tc}1} = 3153$ [kW]

$Q_{\dot{tc}2} = 69,3$ [kW]

"!MCFC"

$W_{\dot{mcfc}} = 10000$ [kW]

$A_{cel} = 33,99$ [m²]

$N_{cel} = 350$ [unidades]

"!caldeira de recuperação"

$Q_{\dot{cr}} = 4092$ [kW]

"!bomba"

$\eta_b = 0,8$

$P_{22} = 1500$ [kPa]

$W_{\dot{bomba}} = 2,772$ [kW]

"!turbina"

$W_{\dot{turbina}} = 841,4$ [kW]

$\eta_t = 0,8649$

"!Parâmetros de fluxo"

$MM_7 = 25,38$ [kg/kmol]

$MM_6 = 27,87$ [kg/kmol]

$MM_{16} = 25,87$ [kg/kmol]

$MM_{24} = 18,02$ [kg/kmol]

"!EQUIPAMENTOS"

"!Trocador de calor 1 - água"

$U_1 = 0,025$ [kW/m²K] "Referência: heat exchanger design handbook 2008, G.F.HEWITT"

$\Delta T_{ATML_tc1} = ((T[11] - T[1]) - (T[10] - T[2])) / \ln((T[11] - T[1]) / (T[10] - T[2]))$

$RP_1 = (T[2] - T[1]) / (T[10] - T[1])$

$RR_1 = (T[10] - T[11]) / (T[2] - T[1])$

$f_1 = 0,95$ "Heat exchangers - Kakaç, em função de RR e RP"

$A_{tc1} = Q_{\dot{tc}1} / (U_1 * \Delta T_{ATML_tc1} * f_1)$

"Custo de compra"

$Z[1] = 130 * ((A_{tc1} / 0,093)^{0,78})$

"Custos de entrada e saída"

$c[1] = 3,1E-6$ [\$/kJ]

$c[11] = 0$

$C_{\dot{e}1} = c[1] * E_{\dot{1}} + c[10] * E_{\dot{10}}$

$C_{\dot{s}1} = c[11] * E_{\dot{11}} + c[2] * E_{\dot{2}}$

$C_{\dot{w}1} = 0$

$C_{\dot{q}1} = 0$

"!Trocador de calor 2 - gás natural"

$U_2 = 0,015$ [kW/m²K] "Referência: heat exchanger design handbook 2008, G.F.HEWITT"

$\Delta T_{ATML_tc2} = ((T[10] - T[3]) - (T[9] - T[4])) / \ln((T[10] - T[3]) / (T[9] - T[4]))$

$RP_2 = (T[4] - T[3]) / (T[9] - T[3])$

$RR_2 = (T[9] - T[10]) / (T[4] - T[3])$

$f_2 = 0,99$ "Heat exchangers - Kakaç, em função de RR e RP"

$A_{tc2} = Q_{\dot{tc}2} / (U_2 * \Delta T_{ATML_tc2} * f_2)$

"Custo de compra"

$Z[2] = 130 * ((A_{tc2} / 0,093)^{0,78})$

"Custos de entrada e saída"

$c[3] = 7,47E-6$ [\$/kJ]

$$c[9] = c[10]$$

$$\begin{aligned} C_{\text{dot_e}}[2] &= c[9] * E_{\text{dot}}[9] + c[3] * E_{\text{dot}}[3] \\ C_{\text{dot_s}}[2] &= c[10] * E_{\text{dot}}[10] * c[4] * E_{\text{dot}}[4] \\ C_{\text{dot_w}}[2] &= 0 \\ C_{\text{dot_q}}[2] &= 0 \end{aligned}$$

!"MCFC"

"Custo de compra"

$$\begin{aligned} Z_{\text{mcfc}} &= N_{\text{cel}} * A_{\text{cel}} * (2,96 * 923 - 1907) \\ Z_{\text{aux}} &= 0,1 * Z_{\text{mcfc}} \\ Z_{\text{inv}} &= ((W_{\text{dot_MCFC}} / 500)^{0,7}) * 10^5 \\ Z[3] &= Z_{\text{mcfc}} + Z_{\text{aux}} + Z_{\text{inv}} \end{aligned}$$

"Custos de entrada e saída"

$$\begin{aligned} c[4] &= c[6] \\ c[14] &= c[7] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} C_{\text{dot_e}}[3] &= c[2] * E_{\text{dot}}[2] + c[4] * E_{\text{dot}}[4] + c[14] * E_{\text{dot}}[14] \\ C_{\text{dot_s}}[3] &= c[6] * E_{\text{dot}}[6] + c[7] * E_{\text{dot}}[7] \\ C_{\text{dot_q}}[3] &= 0 \\ C_{\text{dot_w}}[3] &= c_{\text{w_mcfc}} * W_{\text{dot_mcfc}} \end{aligned}$$

!"Câmara de combustão"

"Custo de compra"

$$Z[4] = 46,08 * (n_{\text{dot}}[7] * MM_7 + n_{\text{dot}}[6] * MM_6) * (1 + \exp(0,018 * T[8] - 26,4)) * (1 / (0,995 - 0,99))$$

"Custos de entrada e saída"

$$\begin{aligned} C_{\text{dot_e}}[4] &= c[6] * E_{\text{dot}}[6] + c[7] * E_{\text{dot}}[7] \\ C_{\text{dot_s}}[4] &= c[8] * E_{\text{dot}}[8] \\ C_{\text{dot_q}}[4] &= 0 \\ C_{\text{dot_w}}[4] &= 0 \end{aligned}$$

!"Caldeira de recuperação"

"Custo de compra"

$$Z[5] = 4745 * ((Q_{\text{dot_cr}} / \log_{10}(T[15] - T[18]))^{0,8}) + 11820 * n_{\text{dot}}[24] * MM_{24} + 658 * n_{\text{dot}}[16] * MM_{16}$$

"Custos de entrada e saída"

$$c[18] = 0$$

$$\begin{aligned} C_{\text{dot_e}}[5] &= c[22] * E_{\text{dot}}[22] + c[15] * E_{\text{dot}}[15] \\ C_{\text{dot_s}}[5] &= c[18] * E_{\text{dot}}[18] + c[19] * E_{\text{dot}}[19] \\ C_{\text{dot_w}}[5] &= 0 \\ C_{\text{dot_q}}[5] &= 0 \end{aligned}$$

!"Bomba"

"Custo de compra"

$$Z[6] = 940 * ((P_{22}/1000)^{0,71}) * (1 + 0,2/(1-\eta_b))$$

"Custos de entrada e saída"

$$\begin{aligned} C_{\text{dot_e}}[6] &= c[21] * E_{\text{dot}}[21] \\ C_{\text{dot_s}}[6] &= c[22] * E_{\text{dot}}[22] \\ C_{\text{dot_q}}[6] &= 0 \\ C_{\text{dot_w}}[6] &= -c_{\text{w_turbina}} * W_{\text{dot_bomba}} \end{aligned}$$

!"Condensador"

"Custo de compra"

$$Z[7] = 1773 * n_{\text{dot}}[20] * 18,02$$

"Custos de entrada e saída"

$c[25] = c[26]$
 $c[25] = 0$

$C_dot_e[7] = c[20] * E_dot[20] + c[25] * E_dot[25]$
 $C_dot_s[7] = c[21] * E_dot[21] + c[26] * E_dot[26]$
 $C_dot_q[7] = 0$
 $C_dot_w[7] = 0$

"!Turbina a vapor"

"Custo de compra"

$Z[8] = 5075,5 * (W_dot_turbina^{0,7}) * (1 + (0,05 / (1 - \eta_t))^3) * (1 + 5 * \exp((T[19] - 866) / 10,42))$

"Custos de entrada e saída"

$c[19] = c[20]$
 $C_dot_e[8] = c[19] * E_dot[19]$
 $C_dot_s[8] = c[20] * E_dot[20]$
 $C_dot_q[8] = 0$
 $C_dot_w[8] = c_w_turbina * W_dot_turbina$

"!Exhaust mixer"

"Custos de entrada e saída"

$c[12] = c[14]$

"!Splitter"

"Custos de entrada e saída"

$c[8] = c[9]$
 $c[8] = c[12]$
 $c[8] = c[15]$

"Parâmetros econômicos"

$FRC = (i * (1 + i)) / (((1 + i)^n) - 1)$
 $n = 20$ [anos]
 $PHI = 1,06$
 $H = 8000$ [horas]
 $i = 0,1$

"Balanço de custos de cada componente"

Duplicate j=1;8

$Z_dot[j] = Z[j] * FRC * PHI / (H * 3600)$ "taxa de custo, incluindo aquisição, operação e manutenção"

$C_dot_s[j] + C_dot_w[j] = C_dot_q[j] + C_dot_e[j] + Z_dot[j]$

End