

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA MECÂNICA

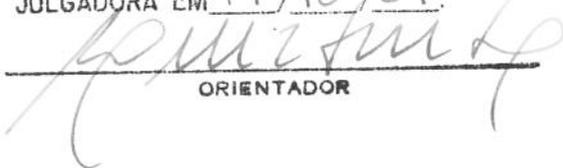
Considerações Ambientais em Termoeconomia : Um estudo de caso.

FEM 50/94

Autor : **Marcelo Riso Errera**

Orientador : **Luiz Fernando Milanez**

ESTE EXEMPLAR CORRESPONDE A REDAÇÃO FINAL
DA TESE DEFENDIDA POR MARCELO RISSO
ERRERA E APROVADA PELA
COMISSÃO JULGADORA EM 14/10/94.


ORIENTADOR

UNICAMP
BIBLIOTECA CENTRAL

9619985

UNIDADE	BC
N.º CHAMADA:	T/UNICAMP
	Er 78c
V.	Ex.
T.º DO BC	29135
PROC.	667/96
C	<input type="checkbox"/>
D	<input checked="" type="checkbox"/>
PREÇO	R\$ 11,00
DATA	26/11/96
N.º CPD	

CM000954886

FICHA CATALOGRAFICA ELABORADA PELA
BIBLIOTECA CENTRAL - UNICAMP

Errera, Marcelo Risso

Er78c Consideracoes ambientais em termoeconomia : um estudo de caso /
Marcelo Risso Errera. -- Campinas, SP : [s.n.], 1994.

Orientador : Luiz Fernando Milanez.

Dissertacao (mestrado) - Universidade Estadual de Campinas.
Faculdade de Engenharia Mecanica.

1. Termoeconomia. 2. Meio ambiente. 3. Analise termica.
I. Milanez, Luiz Fernando. II. Universidade Estadual de
Campinas. Faculdade de Engenharia Mecanica. III. Titulo.

**UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA MECÂNICA
DEPARTAMENTO DE ENERGIA**

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

**Considerações Ambientais em
Termoeconomia: Um estudo de caso.**

Autor : **Marcelo Riso Errera**

Orientador : **Luiz Fernando Milanez**

Curso : **Engenharia Mecânica**

Unidade : **Faculdade de Engenharia Mecânica**

Área de concentração : **Térmicas e Fluidos**

Trabalho apresentado à comissão de Pós Graduação da Faculdade de Engenharia Mecânica, como requisito para a obtenção do título de Mestre em Engenharia Mecânica.

Campinas, 14 de outubro de 1994

São Paulo - Brasil

**UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA MECÂNICA
DEPARTAMENTO DE ENERGIA**

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

**Considerações Ambientais em
Termoeconomia : Um estudo de caso.**

Autor : **Marcelo Riso Errera**

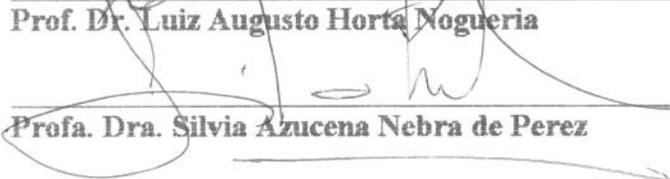
Orientador : **Luiz Fernando Milanez**



Prof. Dr. Luiz Fernando Milanez , Presidente



Prof. Dr. Luiz Augusto Horta Nogueira



Profa. Dra. Silvia Azucena Nebra de Perez

Campinas, 14 de outubro de 1994

A tudo que é lindo e sagrado nesta *aldeia*.

À vida.

Agradecimentos I

Tenho observado em todas as dissertações a gratidão dos autores e atualmente colegas. Parecia-me praxe, uso ou costume. Entretanto, ao chegar a minha vez, este momento só meu, pude entender a importância disto tudo. Vislumbrei a imensidão de pessoas que gostaria de agradecer por maior ou menor contribuição, que no mais das vezes na forma de compreensão e afeto.

Ao olhar tantas tabelas, gráficos e números, vejam, pois realmente o é, nada mais do que o resumo de solidão, fé, empenho, ideal, amor, afeto : vida, o elemento homem, meu ser.

Assim, leiam a lista a seguir, leiam sim ! Vale tanto quanto o *trabalho*.

E agora, num simples gesto, frase roubada de um inestimável amigo, posso dizer :

Pessoal, super valeu !

Agradecimentos II

Alguns agradecimentos especiais ...

À minha família que tanto me incentivou nesta jornada e compreendeu minhas aspirações e sempre, sempre, deixando-me livre para seguir meus próprios caminhos. E mais do que tudo, minha gratidão eterna, pelo amor e carinho.

Um especial agradecimento ao meu irmão Denis por todo o suporte em Vitória.

A Patrícia, esta pessoa maravilhosa que ultimamente vem me ajudando a viver a vida como se deve.

Ao Prof. Luiz Fernando Milanez por tantas coisas além da orientação.

Agradecimentos III

Vou tentar colocar todo mundoserá que cabe ?

Primeiramente ao meu companheiro de *partida*, Ernandes e sua Cristina.

Em terra estranha, o momento mais difícil é a chegada,....não para mim que tive o Paulinho e Wilson (Pe.) para me acolher.

Ao Silvio, a Bia, a Bel, o Rubão e o Pinoti....minhas primeiras grandes conquistas em Campinas.....Valeu !

Ao grande Gilbertinho ! Gente simples que já demonstra tanta sabedoria numa idade do seu próprio tamanho. Foram tantas as idéias que me passaste....

Ao Thomazinho, pelo apoio, amizade e boas idéias. *Super valeu !*

Aos grandes companheiros Ricardo (*Paul*) e Valter.

Aos amigos Armando, Márcio, Élcio, Ricardo Alan, Nelson, Eliel, PC, Francis, João Batista, Perrela, Admilson, Barreda, Claudinho e toda a *galera*.

Ao pessoal de Vitória : Margotto, Fred, Rogério e Sérgio Leite.

A Patrícia Boechat, que então se superava para incentivar minha vinda.

Aos professores da UFES, Luciano Varejão e Rogério Queiroz pelo incentivo e aos da UNICAMP, Sílvia, Gallo, Paulo Correia, Electo e Sinclair.

Ao grande suporte dado pela Neusa e Rodriguez, sempre prestativos e cordiais e ao pessoal da CPG, Denise e Vera.

Ao grande empenho do pessoal da CST, em especial ao Morimoto, ao Samuel e ao Robson. Muito obrigado.

E finalmente, meu muito obrigado ao *Master* Joaquim. Talvez muito disto começou contigo.

O medo de quem navega é a terra firme.

(Amyr Klink)

O melhor momento de um homem não está no início nem no fim, está na Travessia.

(Milton Nascimento)

SUMÁRIO

RESUMO	xi
ABSTRACT	xii
LISTA DE TABELAS	xiii
LISTA DE FIGURAS	xv
NOMENCLATURA	xvi
CAPÍTULO 1 INTRODUÇÃO	1
APRESENTAÇÃO	1
MOTIVAÇÃO.....	2
OBJETIVOS	3
CONCLUSÕES	4
1 - BREVE REVISÃO TEÓRICA.....	5
1.1 - MICROECONOMIA	5
1.1.1 - Teoria de Custos.....	5
1.1.2 - Variação do dinheiro no tempo (TMV)	7
1.1.3 - Medidas de Rentabilidade.....	8
1.2 - INTRODUÇÃO À OTIMIZAÇÃO	8
1.3 - MULTIPLICADORES DE LAGRANGE.....	13
1.4 - FATORAÇÃO LU.....	14
1.5 - ALGORITMO DE BUSCA	15
1.6 - CONCEITOS DE TERMODINÂMICA.....	15
1.7 - POLUIÇÃO ATRAVÉS DE PARTÍCULAS	16
2 - SISTEMA DE EXTINÇÃO DE COQUE SIDERÚRGICO INCANDESCENTE.....	17
2.1 - APRESENTAÇÃO.....	17
2.2 - DESCRIÇÃO DE UM CDQ.....	19
2.2.1 - Histórico :.....	19
2.2.2 - Brève descrição do processo.....	19
2.2.3 - Aspectos gerais e ambientais do CDQ da Companhia Siderúrgica de Tubarão.....	20
CAPÍTULO 2 ANÁLISE TERMODINÂMICA.....	28

INTRODUÇÃO	28
2.1 - COLETA DE DADOS	29
2.1.1 - METODOLOGIA	29
2.1.1.1 - Procedimento geral	29
2.1.1.2 - Procedimento para estimativa dos fluxos de coque	29
2.1.1.3 - Procedimento para estimativa da geração de finos	30
2.1.2 - DELIMITAÇÃO DOS VOLUMES DE CONTROLE	31
2.1.2.1 - VC - câmara :	31
2.1.2.2 - VC - caldeira :	33
2.1.3 - CONSIDERAÇÕES SOBRE OS GASES	34
2.1.4 - COQUE (PROPRIEDADES)	35
2.2 - BALANÇO DE MASSA	42
2.2.1 - ÁGUA E VAPOR	42
2.2.2 - COQUE	43
2.2.3 - GASES	45
2.3 - BALANÇO DE ENERGIA	47
2.3.1 - BALANÇO PARA O VC - CÂMARA	47
2.3.1.1 - Coque	48
2.3.1.2 - Gás circulante	49
2.3.1.3 - Sistemas de alívio (bleeders)	50
2.3.1.4 - Totalização	51
2.3.2 - BALANÇO PARA VC - CALDEIRA	52
2.3.3 - CONCLUSÃO	53
2.4 - BALANÇO DE EXERGIA	55
2.4.1 - ESTADO DE REFERÊNCIA	55
2.4.2 - EQUACIONAMENTO	55
2.4.3 - BALANÇO PARA VC - CDQ	56
2.4.4 - BALANÇO PARA VC - CWQ	59
2.5 - CONSIDERAÇÕES FINAIS	63
2.5.3 - GERAÇÃO DE IRREVERSIBILIDADES (CDQ E CWQ)	63
CAPÍTULO 3 TERMOECONOMIA COM CONSIDERAÇÕES AMBIENTAIS	65

INTRODUÇÃO	65
3.1 - BREVE DESCRIÇÃO DE TERMOCHEMIA	69
3.2 - ENVIRONOMICS.....	71
<i>Introdução</i>	71
<i>Definições</i>	72
<i>Descrição</i>	72
<i>Metodologia</i>	73
<i>Considerações Ambientais</i>	74
<i>Breve esquema da abordagem</i>	76
CAPÍTULO 4 ENVIRONOMICS NO CDQ	81
INTRODUÇÃO	81
4.1 - DIAGRAMA FUNCIONAL	82
4.2 - CENÁRIOS.....	84
<i>Físico</i>	84
<i>Operacional</i>	84
<i>Econômico</i>	84
<i>Ambiental</i>	86
4.3 - MODELO FUNCIONAL	86
<i>Unidade 2</i>	87
<i>Unidade 3</i>	88
<i>Unidade 1</i>	91
<i>Unidade 4</i>	96
<i>Sistema de Equações</i>	96
<i>Otimização</i>	98
<i>Resultados</i>	98
<i>Decisão</i>	99
COMENTÁRIOS FINAIS	100
CONCLUSÕES.....	102
<i>Análise Termodinâmica</i>	102
<i>Termoeconomia com considerações ambientais no CDQ</i>	102
APÊNDICE A	105
APÊNDICE B.....	109

APÊNDICE C	121
APÊNDICE D	127

RESUMO

Um estudo termodinâmico foi realizado num sistema de apagamento de coque a seco - CDQ ¹ numa siderúrgica brasileira. Através da Análise Exergética ratifica-se o sistema de apagamento a seco como operacional e ecologicamente mais adequado que o a úmido - CWQ ².

Expressões foram desenvolvidas para estimar a geração de material particulado, seus índices de reciclagem e venda, e a perda de coque por combustão no interior da câmara de extinção. Tudo baseado em dados operacionais.

Para a análise termodinâmica foram desenvolvidas expressões para o calor específico, entalpia, entropia, exergias física e química do coque estudado, e comparadas com a literatura.

Para uma análise completa, introduziu-se os aspectos econômicos e ambientais através da "Environmental Thermo-economic Functional Approach" - *Environomics*. Esta abordagem foi introduzida através de dados reais disponíveis e da literatura.

Conclui-se otimizando o sistema estabelecendo decisões sobre as eficiências de redução das emissões atmosféricas (particulados) dos dispositivos de controle ambiental.

Após o estudo de caso, é realizado um ensaio sobre diversos cenários ambientais e econômicos com a finalidade de observar o comportamento da metodologia utilizada, realizando discussões dentro da ótica empresa-comunidade e suas implicações. As curvas obtidas seguem a "Regla del Notario".

¹ *Coke Drying Quenching System.*

² *Coke Wet Quenching System.*

ABSTRACT

A thermodynamic analysis was carried out for a coke dry quenching (CDQ) unit of a Brazilian iron & steel making plant. By means of the exergetic analysis it is stressed that the dry process is more adequate regarding energy consumption and impact on the environment than the wet (CWQ). Manufacturer data were used and expressions were developed to estimate the generation of particulates, their recycling and selling indexes, and the coke loss by combustion inside the extinction chamber. To perform de thermodynamic analysis, expressions for heat capacity, enthalpy, entropy, chemical and physical exergy were also developed. Such expressions were found to have good agreement with the literature.

Based on physical and technical analysis of the process, this study is extended to include thermoeconomic approach with environmental considerations using the "Environmental Thermoeconomic Functional Approach (Environomics)". The system is optimized respective to the efficiencies of the emissions reductions (particulates) of the environmental control devices (fabric filters). The results are presented in the trade off graphs and tables and discussed. The curves obtained follow the "Regla del Notario" (Notary's Law) and all the extensions to the community are commented and discussed.

LISTA DE TABELAS

Tabela	Página
Tabela 1.1. Amostra de composição do coque (Sanchas da Cruz, 1993b) .	17
Tabela 1.2. Composição do gás de alívio no bleeder inferior (amostra).	21
Tabela 1.3. Comparação dos resultados para a Equação (1.11).	23
Tabela 2.1. Média mensal e diária de produção de coque [ton / h]	30
Tabela 2.2 Parcelas dos finos retidos (CST, 1984b)	31
Tabela 2.3 Parcelas de finos gerados por dispositivo.	31
Tabela 2.4. Fluxos de Energia no VC - <i>Câmara</i> .	32
Tabela 2.5. Fluxos de energia no VC - <i>Caldeira</i>	33
Tabela 2.6. Composição do gás de alívio no bleeder inferior (calculada)	35
Tabela 2.7. Composição do gás de alívio no Bleeder superior (CST, 1984b)	35
Tabela 2.8. Composição adotada para o coque Sanchas da Cruz, 1993b	36
Tabela 2.9. Comparação dos valores para exergia química do coque.	40
Tabela 2.10. Água no CDQ	42
Tabela 2.11. Vapor do CDQ	43
Tabela 2.12. Balanço de Coque	43
Tabela 2.13. Fluxo de Carbono no bleeder inferior	44
Tabela 2.14. Fluxo de Carbono no bleeder superior	44
Tabela 2.15. Balanço de Coque (2)	45
Tabela 2.16. Fluxo do elemento oxigênio no bleeder inferior	45
Tabela 2.17. Fluxo do elemento oxigênio no bleeder superior	45
Tabela 2.18. Fluxos de nitrogênio no CDQ.	46
Tabela 2.19. Comparação de N ₂ injetado no CDQ [Nm ³ / h].	46
Tabela 2.20. Comparação do fluxo de ar [Nm ³ / h].	46
Tabela 2.21. Energia associada ao coque.	49
Tabela 2.22. Condições de entrada e saída para o gás ciculante	49
Tabela 2.23. Fluxo de energia associado ao gás circulante (entrada).	50
Tabela 2.24. Fluxo de energia associado ao gás circulante (saída).	50
Tabela 2.25. Condições de saída para os sistemas de alívio	50
Tabela 2.26. Fluxo de energia associado ao Bleeder Inferior	51

Tabela	Página
Tabela 2.27. Fluxo de energia associado Bleeder Superior.....	51
Tabela 2.28. Balanço de Energia para VC - <i>Câmara</i>	52
Tabela 2.29. Energia associada à água.	52
Tabela 2.30. Balanço de Energia para VC - <i>Caldeira</i>	53
Tabela 2.31. Balanço de Energia no VC - <i>CDQ</i>	53
Tabela 2.32. Fluxos de entrada de exergia no VC- <i>CDQ</i>	57
Tabela 2.33. Fluxos de saída de exergia no VC- <i>CDQ</i>	57
Tabela 2.34. Condições para água e vapor no CWQ	60
Tabela 2.35. Fluxos de Exergia no VC- <i>CWQ</i>	61
Tabela 2.36. Total de exergia destruída em ano.	64
Tabela 4.1. Custos anualizados das unidades	85
Tabela 4.2. Custos e preços de recursos e produtos.....	85
Tabela 4.3. Expressões de custos e receitas para Environomics.	86
Tabela 4.4. Valor de Finos.....	90
Tabela 4.5. Índice de geração de Finos para a unidade 1.....	94
Tabela 4.6. Recursos nos dispositivos de controle ambiental.....	95
Tabela 4.7. Cenários Ambientais.....	100

LISTA DE FIGURAS

Figura	Página
Figura 1.1. Caminhos para realizar decisões.....	9
Figura 1.2. Região factível para a otimização.....	11
Figura 1.3. Esquema de um CWQ.....	18
Figura 1.4. Esquema de um CDQ.....	20
Figura 1.5. Produção de coque em setembro de 93.....	23
Figura 1.6. Consumo de nitrogênio setembro de 93.....	24
Figura 1.7. Distribuição do vapor gerado.....	24
Figura 1.8. Rendimentos de coque e N ₂ para setembro de 93.....	25
Figura 1.9. Índice de finos coletados no CDQ.....	26
Figura 1.10. Utilização dos finos coletados.....	26
Figura 2.1. VC - <i>Câmara</i>	32
Figura 2.2. VC - <i>Caldeira</i>	33
Figura 2.3. Expressões para o calor específico do coque.....	37
Figura 2.4. Diagrama de Grassman para <i>CDQ</i>	59
Figura 2.5. Diagrama de Grassman para <i>CWQ</i>	61
Figura 2.6. Exergia destruída nos dois processos (kJ/kg coque).....	63
Figura 3.1. Interação do sistema com o exterior.....	67
Figura 3.2. Unidade da T.F.A.(Frangopoulos).....	69
Figura 3.3. Subsistema na Termoeconomia de Valero & Lozano.....	70
Figura 3.4. Unidade com dispositivo de controle.....	72
Figura 4.1. Diagrama funcional do CDQ.....	83
Figura 4.2. Eficiências ótimas para os despoeiramentos.....	99
Figura 4.3. Representação de três diretrizes ambientais.....	100
Figura 4.4. Decisões para várias cenários ambientais.....	101

NOMECLATURA *

Letras Latinas

a	coeficiente de proporcionalidade em $c(t) = a.t + b$ (Equação 2.9)	kcal/kg°C ²
b	coeficiente independente em $c(t) = a.t + b$ (Equação 2.9)	kcal/kg°C
c	calor específico do coque (Equação 2.9)	kcal/kg°C
c	teor de carbono no coque (molecular) (Eq. 2.19)	%
C	teor de massa de carbono no carvão (Eq. 2.16)	%
C1	definida pela Equação (2.10)b	kcal/kg
C2	definida pela Equação (2.10)e	kcal/kg
C3	definida pela Equação (2.13)d	kcal/kg
C4	definida pela Equação (2.15)b	kcal/kg
c_p, \tilde{c}_p	calor específico a pressão constante (base mássica e molar)	kcal/kg°C
c_v, \tilde{c}_v	calor específico a volume constante (base mássica e molar)	kcal/kg°C
E	exergia	kJ
e	erros e desvios	%
f	fluxo ou grandeza medida em campo no CDQ	-
g	Fluxo de gás circulante ou de resfriamento de coque (ou kg / h)	Nm ³ / h
\bar{h}_f^0	entalpia de formação	kJ/kmol
h	entalpia específica	kJ/kg
H	teor de massa de hidrogênio no carvão (Eq. 2.16)	%
H	Fluxo de Entalpia (Eq. 2.28)	kW
I	irreversibilidade gerada	kJ
i	irreversibilidade gerada específica por coque extinto	kJ/kg
L	Lagrangeano da Função Objetivo em Optimização	-
M	massa molecular	kg/kmol
m	massa ou fluxo de massa	kg / h
N	taxa de desperdício de Exergia (Eq. 2.46).	Kw _e
N	teor de massa de nitrogênio no carvão (Eq. 2.16)	%

* Muitas variáveis foram definidas ao longo do texto.

n	vazão molar	kmol / h
O	teor de massa de oxigênio no carvão (Eq. 2.16)	%
P , p	pressão	MPa
p	emissão de poluente	kg / h
Q	vazão de gás (Nm ³ /h) ou fluxo de calor (kW)	-
s	teor de enxofre no coque (base molecular)	%
s	entropia específica	kJ/kg K
S	Entropia	kJ / K
S	teor de massa de enxofre no carvão (Eq. 2.16)	%
t	temperatura	°C
T	temperatura	K
T ⁰	temperatura padrão, 298,15	K
T ₀	temperatura ambiente, 298,15	K
U	Energia Interna	kJ
v	vapor	kg/h
v	vetor de variáveis independentes Fig. 3.2	-
x	concentração molar	%
y	função ou produto da Análise Funcional	kcal / h
W	Potência (kW) / Trabalho (kJ)	-
Z	custo instalado anualizados	US\$ / h
V	Volume	m ³

Letras Gregas e outros símbolos

ΔG	variação da grandeza G (genérica)	-
δ	grau de redução de poluição (Eq. 3.2)	-
$\tilde{\epsilon}_0$	exergia química	kJ / kmol
η_b	eficiência global do soprador	-
θ	Temperatura relativa (T - 298,15)	K
\mathfrak{R}	constante universal dos gases	
\tilde{c}_p^e	calor específico conforme definido pela Equação 2.8	kJ/kmol
Ξ	exergia de não - fluxo ou exergia de um sistema fechado	kJ
τ	tempo	s
ρ	densidade	kg / m ³

ϕ correlação entre P.C.I. e exergia química padrão

Subscritos

1, 2 ..	números (vide tabelas 2.4, 2.5 e pg. 42)
0	referente ao meio ambiente ou estado de referência
a	água desaerada para produção de vapor
ar	ar
car	finos da carga de coque incandescente
cicl	ciclones
col	coletor primário
C	referente ao carbono
CO	referente ao monóxido de carbono
coque	<i>relativo ao coque</i>
d	exergia destruída
desc	finos da descarga de coque extinto
ext	extinto
efluentes	efluentes
<i>finos</i>	relativo ao fluxo de finos em suspensão nos gases
g	gás circulante
gás	gás
gen	entropia gerada
in	entrada
inc	incandescente
inf	<i>bleeder inferior</i>
k	índice de somatório
l	líquido saturado no CWQ
mistura	mistura de gases
N ₂	nitrogênio
out	saída
P	<i>produtos de combustão</i>
p	pressão constante
r	coque perdido por combustão
ref	referência

rm	referente aos dispositivos de controle ambiental
R	reagentes Eq. 2.28
R	total de unidades Fig. 3.2
s	enxofre
sup	<i>bleeder superior</i>
v	vapor
VC	volume de controle

Sobrescritos

tm	exergia termo mecânica
ph	exergia física
ch	exergia química
q	relativa ao fluxo de calor
ε	base exergética
*	Solução correspondente ao ótimo

Abreviações

CDQ	Coke Dry Quenching
CST	Companhia Siderúrgica de Tubarão
CWQ	Coke Wet Quenching
P.C.I.	poder calorífico inferior kJ / kg

Capítulo 1

INTRODUÇÃO

APRESENTAÇÃO

Esta dissertação está dividida nos quatro capítulos abaixo, de acordo com o desenvolvimento do trabalho:

- 1 - *Introdução ;*
- 2 - *Análise Termodinâmica ;*
- 3 - *Termoeconomia com considerações ambientais ;*
- 4 - *"Environomics" no sistema de apagamento de coque a seco ;*

Conclusão :

No próximo capítulo, é apresentado tudo sobre os balanços de massa, energia e exergia. No terceiro, são apresentadas algumas considerações sobre Termoeconomia como uma preparação ao quarto capítulo. Este último, por sua vez, apresenta o problema termoeconômico, seus resultados e conclusões. Tendo apresentado subsídios suficientes, realiza-se um ensaio num hipotético cenário de política ambiental e alguns comentários finais são feitos juntos com sugestões para futuros (e atuais !) trabalhos.

Neste capítulo, apresenta-se o problema, suas implicações, os objetivos e fatores que o motivaram, além de uma breve revisão dos conceitos utilizados. Para isto, apresentam-se as seguintes seções :

Motivação, Objetivos , Conclusões (antecipação), Breve revisão e Sistemas de apagamento de coque.

Motivação

As equipes de Meio Ambiente em todas as atividades na sociedade atual, usualmente tomam decisões em várias circunstâncias. As mais comuns são em investimentos para controle e tratamento de efluentes industriais, em determinar penalizações e na flexibilidade dos padrões permitidos para qualquer tipo de poluição. Algumas das dificuldades encontradas são os poucos subsídios disponíveis para auxiliar a decisão, conhecidos como *ferramentas de apoio a decisão*.

É comum ocorrer no meio industrial situações nas quais surgem interesses aparentemente conflitantes numa primeira análise a problemas ambientais. Diversos setores da empresa; produção, financeiro, ambiental, utilidades, *marketing*, possuem visões diferentes destas questões e geralmente não há um modo sistemático de resolver estes *conflitos*.

Assim, este trabalho consiste numa tentativa de demonstrar que, se analisado globalmente, aqueles conflitos iniciais de interesses diversos tendem a se resolver, e ainda, de modo a privilegiar o aspecto ecológico do problema.

Acreditava-se que uma abordagem nova, a *Termoeconomia*, seria muito adequada para oferecer suporte as decisões ambientais. Deste modo, pesquisaram-se as diversas correntes desta ferramenta e através de uma análise inicial, foi selecionada a que melhor se adaptaria a um problema concreto. Além disso, para melhor conhecê-la, também foi escolhido um problema real na indústria siderúrgica e que, naquele momento, era determinar alterações nos seus sistemas de controle de emissões de partículas.

Para tanto, estabeleceu-se um convênio entre a Faculdade de Engenharia Mecânica e Companhia Siderúrgica de Tubarão¹, CST, situada em Vitória, ES. Estava assim estabelecido um cenário para o estudo com dados reais, metodologia moderna, e ênfase nos aspectos ecológicos.

¹ N.A.: A escolha da CST para este estudo vem de encontro com o interesse desta empresa e do autor pois ambos pertencem a mesma comunidade.(FEM nº 70/93).

Conclusões

Antes de apresentar todo o trabalho, adiantam-se algumas das conclusões * a que pode se chegar-se através deste estudo :

- Incluir a Segunda Lei da Termodinâmica em análises térmicas convencionais, permite conhecer melhor os processos, fornecendo assim subsídios para o controle e melhorias operacionais;

- Ainda através da Segunda Lei, permite-se enxergar os processos sob o ponto de vista ecológico, compará-los e realizar a melhor escolha entre as tecnologias disponíveis;

- Ao considerar os aspectos operacionais, termodinâmicos, ambientais e econômicos juntos na análise, permite-se estabelecer cenários mais consistentes para realizar decisões ;

- Caso o Estado estabeleça políticas ambientais que permitam ser expressas matematicamente, em muito facilitaria aos analistas ambientais da indústria e dos órgãos governamentais tornando as análises mais heurísticas ;

- A *Termoeconomia com considerações ambientais* se mostra eficiente ao ser aplicada num problema real :

- Também pode se perceber que a maior limitação destas abordagens estão na obtenção dos cenários econômicos, físicos e ambientais corretos ;

* N.A.: Usualmente os leitores são levados a folhear o trabalho em busca das Conclusões do mesmo. Para facilitar a consulta, optou-se por antecipá-las resumidamente em tópicos.

Objetivos

Os objetivos principais deste trabalho foram :

- Conhecer e avaliar o desempenho de uma abordagem termoeconômica com considerações ambientais no meio industrial, implementando a metodologia intitulada "Environmental Thermo-economic Functional Approach (TFA)" (Frangopoulos, 1992a & b);
- Realizar análise termodinâmica no processo de apagamento de coque a seco utilizando a primeira e segunda Leis da Termodinâmica.
- Estabelecer comparação sob o ponto de vista ecológico, entre os processos de apagamento de coque a úmido (CWQ) e a seco (CDQ) quanto as irreversibilidades geradas ;
- Realizar um ensaio com cenário considerando algumas políticas ambientais hipotéticas expressas em forma matemática.
- Demonstrar que ao se analisar as questões ambientais de uma maneira global, tende-se a decidir favoravelmente ao Meio Ambiente.

1 - Breve Revisão Teórica

Por se tratar de uma visão interdisciplinar de um problema, alguns conceitos são apresentados de forma breve outros indicada bibliografia, de modo a auxiliar a compreensão deste trabalho, sem o propósito de apresentá-los formalmente.

1.1 - Microeconomia

Abaixo são apresentados alguns conceitos de Microeconomia.

1.1.1 - Teoria de Custos

O custo da produção, da administração, do controle ambiental, qualquer custo, é determinado pelas condições físicas de produção, o preço dos recursos e a conduta econômica do empresário. Assim, o custo representa o esforço de capital realizado para produzir, administrar ou transportar algum serviço ou produto (Ferguson, 1980).

Os custos são classificados por sua variação com a produção, a maneira como são alocados e sua representação econômica.

DEFINIÇÃO

Custo Social de Produção :

É o custo que uma sociedade suporta quando seus recursos são utilizados para produzir uma dada mercadoria (Ferguson, 1980). Do ponto de vista social, o objetivo da atividade econômica é obter o máximo possível do conjunto de reservas existentes. Um interesse especial deve ser dado para o contexto ambiental desse trabalho, pois pode se considerar o Meio Ambiente como um recurso pertencente a toda a sociedade.

Possivelmente, o *custo social de produção* pode se apresentar através dos investimentos feito pelo Estado no tratamento das doenças causadas devido a poluição, seu monitoramento, na recuperação de ecossistemas e nas horas perdidas de mão-de-obra motivadas por doenças ocupacionais de causa ambiental.

CLASSIFICAÇÃO

Os custos são classificados de várias maneiras estando abaixo enumerados os de interesse direto para este trabalho.

Inicialmente, quanto ao modo de alocação :

- *Diretos* - São aqueles envolvidos diretamente com a realização do bem econômico (produto ou serviço). Geralmente consistem na mão-de-obra de produção e manutenção, no consumo de matéria prima, insumos, *etc.*
- *Indiretos* - Consistem naqueles relacionados com infra-estrutura, serviços e matérias não utilizados especificamente para a realização do serviço ou produto. São associados à administração, aluguel de imóveis, engenharia, *etc.*

Outra classificação utilizada é quanto a variação do custo em relação a produção do bem. Podem ser :

- *Fixos* - Como o próprio nome indica, não dependem da produção. Os custos do equipamento, seguro, aluguel, *etc.*, são considerados fixos dentro das escalas de produção.
- *Variáveis* - Dependem da quantidade produzida. Seguem relações matemáticas com a produção (ex. : matéria prima, insumos, utilidades, *etc.*).

Ambas as classificações seguem critérios flexíveis de acordo com cada empresa. Deste modo, a mesma despesa pode ser considerada *custo direto* ou *indireto* conforme o analista.

TIPOS

Outros custos, além dos indicadores de despesas, que surgem constantemente em análises de investimentos ou estudos de projetos, são os *custos marginais, unitários, anualizados e instalados*. As definições abaixo são as mais comuns encontradas na literatura:

- *Custo Unitário* - É a despesa para se realizar cada unidade de produto. Geralmente é baseado em itens, massa, volume, *etc.* Também pode ser compreendido como o rateio do custo total de produção por cada item produzido.
- *Custo Marginal* - É o acréscimo no custo total atribuído ao aumento de uma unidade adicional a ser produzida. Matematicamente falando, é representado pela derivada do Custo Total em relação à quantidade produzida, nas condições operacionais do momento. Pode coincidir com o custo unitário.

- *Custo Anualizado* - É o custo total de um recurso de produção dividido ao longo de sua vida útil (em anos) com base numa taxa de interesse ou de atratividade, i .
- *Custo Instalado* - São todos aqueles envolvidos com a infra-estrutura para a produção. Excluem os insumos e matéria prima utilizados.
- *Preço Sombra* - Reflete a sensibilidade do custo total caso aumente levemente a quantidade utilizada de um recurso em questão (Hillier Liebermann, 1990). Sob o ponto de vista de otimização, representa a variação da função objetivo no caso de se relaxar alguma restrição relativa àquele recurso em questão (vide *Otimização*).

1.1.2 - Variação do dinheiro no tempo (TMV)

Em todas as considerações no Brasil, o conceito da variação do dinheiro no tempo se apresenta naturalmente. A inflação mensal na vida do analista o motiva a considerar estes aspectos. Entretanto, em análises econômicas a correção monetária devido à inflação não é a única responsável pela variação ao longo do tempo. Associa-se o dinheiro ao tempo através de valor presente e valor futuro utilizando uma taxa de atratividade ou de interesse. Esse trabalho será desenvolvido em dólares norte-americanos e será considerada somente a variação monetária anual. Para análise em períodos longos deve ser considerada a inflação anual norte-americana.

O valor futuro de um investimento após decorrer um período de n anos é expresso por:

$$F_n = P \cdot (1 + i)^n \quad (1.1)$$

onde,

- F *valor futuro do investimento após n anos ;*
 P *valor atual do investimento ;*
 i *taxa de interesse anual e constante;*

Para se obter o valor atual de um fluxo de caixa no futuro,

$$P = \frac{F_n}{(1 + i)^n} \quad (1.2)$$

Em caso de distribuir um valor atual em anuidades uniformes se utiliza a expressão abaixo:

$$r = \frac{[i(1+i)^n]}{[(1+i)^n - 1]} \quad (1.3)a$$

e

$$R = r \cdot P \quad (1.3)b$$

onde,

r Taxa de recuperação de capital,

R Anualidade, \$.

1.1.3 - Medidas de Rentabilidade

Geralmente os projetos econômicos são avaliados com base em alguma medida da rentabilidade. No contexto de otimização econômica, a função objetivo deve expressar alguma delas (*minimizar custos e tempo de retorno de investimento, maximizar fluxo de caixa e outros*).

Alguns dos modelos mais utilizados são os seguintes :

Payback Period (PBP) ;

Custos Anualizados ;

Valor Presente ;

Valor Futuro ;

Além disto, apresenta-se também o conceito de receita potencial :

- *Receita Potencial - É a quantia disponível caso haja mudança na conduta econômica de um sistema.*

Para leitura em Microeconomia, recomenda-se Varian, 1984, Alpha Chiang, 1982 e Ferguson, 1980.

1.2 - Introdução à Otimização

Antes de entrar no conceito matemático de otimização, apresentam-se alguns aspectos gerais em análises semelhantes a deste trabalho. Primeiramente, é importante saber que *otimizar*

um problema não é simplesmente melhorá-lo, mas estabelecer critérios, simplificações e dentro do viável buscar a *melhor* alternativa.

Em alguns casos a formulação do problema é a etapa fundamental. O caminho para se formular qualquer problema de otimização consiste em identificar os elementos essenciais de um processo e organizá-los numa forma matemática. Para expressar otimização em termos matemáticos deve-se identificar:

- a) A função objetivo (rendimentos, emissões, produção, etc.);
- b) As restrições (modelo do processo);

A função objetivo representa lucro, custo, consumo de energia, produtividade, rendimento, nível de emissão ou qualquer critério que o analista julgue representativo.

O modelo do sistema (restrições) descreve a relação entre as variáveis relevantes do processo e o espaço matemático de soluções para as equações estabelecidas. Sob o ponto de vista do analista, as restrições evitam que ocorram pressões absolutas negativas, temperaturas elevadíssimas, fluxo de massa negativo ou, que num problema de minimizar o custo, o analista opte por custo zero, isto é, por não operar.

Uma representação esquemática clássica ilustra como funciona a tomada de decisão numa situação real através dos campos da experiência e da matemática (Figura 1.1) :

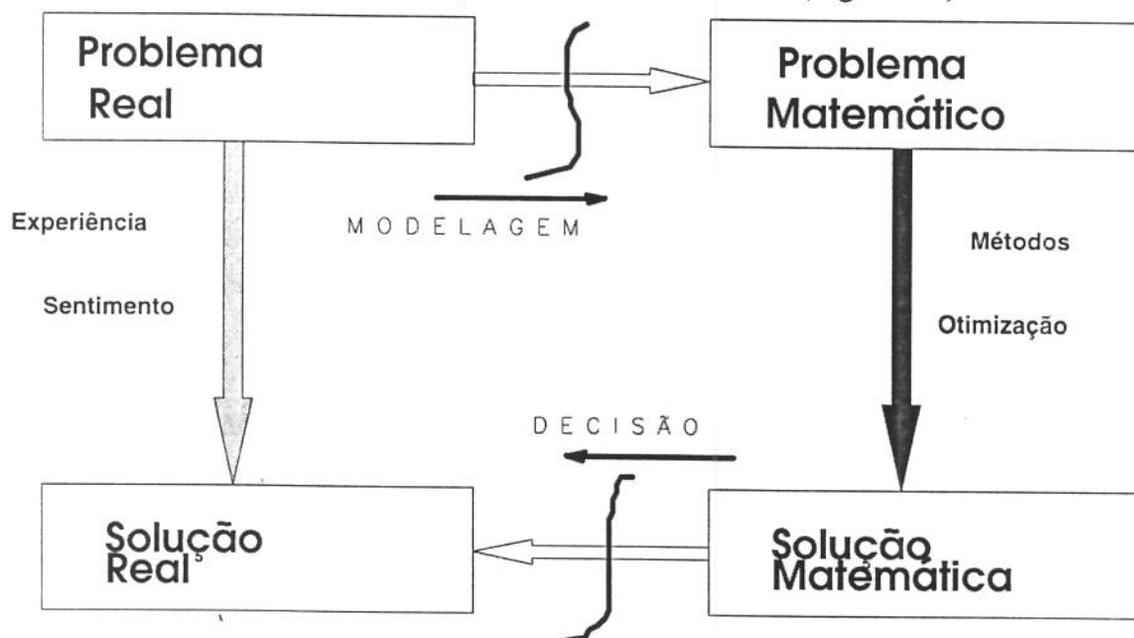


Figura 1.1. Caminhos para realizar decisões

No mundo real, o analista estabelece o que será decidido, os objetivos almejados, as repercussões favoráveis e desfavoráveis e a exatidão com a qual deseja decidir. Feito isto, transporta-se o problema da forma real para o campo matemático realizando a modelagem. Neste mundo fisicamente abstrato, mas com regras bem definidas, o analista realiza a otimização e obtém uma única solução. Esta solução por sua vez está na forma numérica e é necessário convertê-la para uma decisão no mundo **real**. É de se esperar que esta decisão, apoiada em métodos, venha a ser melhor ou ao menos melhor justificada, do que se o decisor percorresse apenas o caminho da experiência e do sentimento.

Abaixo uma lista de algumas possíveis aplicações de otimização :

- ✓ Determinar a localização de uma unidade de produção ;
- ✓ rotas de transporte para distribuição de óleos residuais, gás e produtos refinados e
- ✓ ponto de operação de equipamentos como reatores tubulares, colunas, absorvedores, turbinas, trocadores de calor, caldeiras. etc. ;
- ✓ Dimensionar e disposição de linhas de tubulação ;
- ✓ Projetar Trocadores de Calor (Geração de Entropia) ;
- ✓ Minimizar emissões atmosféricas dos CDQ's ;

Nem sempre os modelos matemáticos são complexos. Os analistas devem estabelecer suas metas de acordo com o processo e a disponibilidade de dados. Algo de interessante em otimização é o fato de modelos matemáticos muito semelhantes atenderem diversas aplicações distintas.

Existem inúmeras técnicas de modelagem, quase todas vinculadas com o método matemático utilizado para resolvê-las. De um modo geral, todos os problemas de otimização têm as mesmas características.. As restrições do modelo ainda podem ser de dois tipos.

- b.1) Restrições de igualdade ;
- b.2) Restrições de Canalização (faixas de trabalho) ;

As restrições **(b)** definem a *região factível* ou as *soluções viáveis*, isto é, combinações entre as variáveis de modo que seja possível sua implementação no sistema. Sem se preocupar com o desempenho do processo sob o critério escolhido na função objetivo **(a)**, identificar essa região é o passo inicial para se obter a **melhor opção**. Uma ilustração clássica demonstra as intersecções das regiões de factibilidade definidas por diversas restrições (Figura 1.2, baseada em Edgar e Himmelblau, 1988).

O elemento **a)**, a função ou funções objetivo, determina qual dentre todas as soluções viáveis deve ser adotada : a *melhor* - a **ótima** . Vários critérios podem ser combinados determinando assim um conjunto de soluções ótimas. Neste caso, o decisor escolherá uma destas soluções conforme a importância atribuída para cada critério. Um excelente exemplo do uso de *Programação Multi-Objetivo* num problema de cogeração pode ser visto em Ballestrieri, 1994.

Formalmente otimizar é expressar o problema na seguinte forma :

$$\text{Min } f(\bar{x})$$

Sujeito a :

$$\bar{h}(\bar{x}) = 0 \quad (1.4)$$

$$\bar{g}(\bar{x}) \leq 0$$

onde,

- x vetor constituído de todas as variáveis independentes (decisão);
- h vetor contendo todas as restrições de igualdade ;
- g vetor formado pelas restrições de desigualdade ;

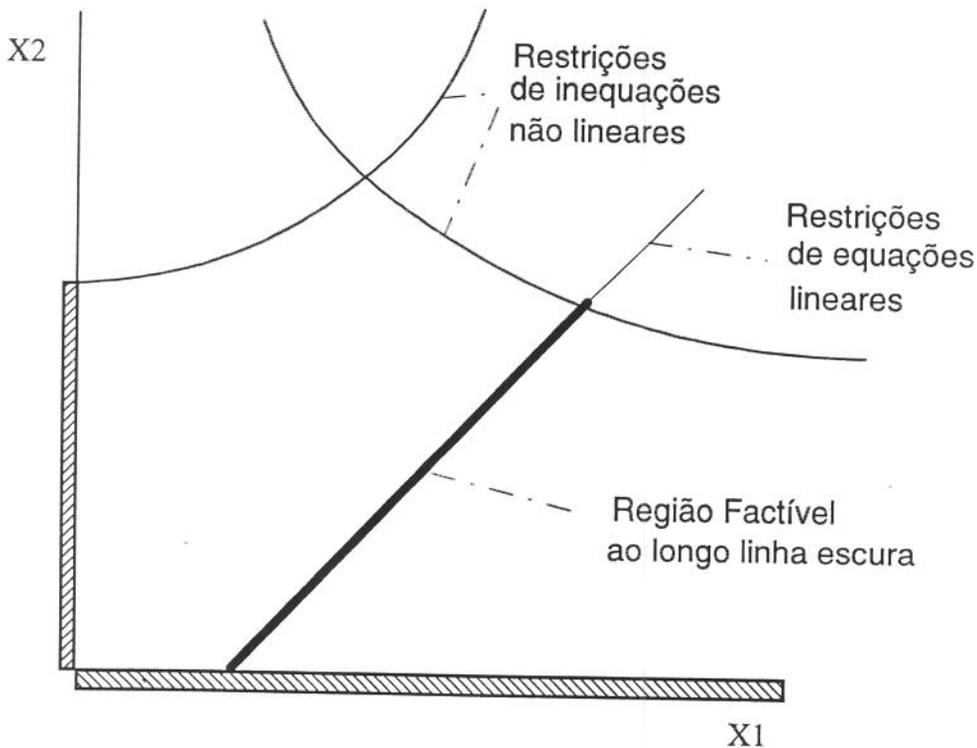


Figura 1.2. Região factível para a otimização (Edgar & Himmelblau, 1988)

A Figura anterior (Figura 1.2) ilustra um problema semelhante ao exemplo abaixo :

$$\text{Min } f(\bar{x}) = 5x_1 + 12,6x_2 - (x_1 - x_2)^3$$

sujeito às seguintes restrições :

(equações)

$$x_2 - 1,2x_1 + 2,4 = 0 \quad (\text{reta})$$

e,

(inequações)

$$x_2 - \left[\frac{x_1}{-0,4 + 0,3x_1} \right]^2 \leq 0$$

(delimitado por curvas)

$$x_2 - [3x_1^{2,2} + 3,5] \leq 0$$

(positividade)

$$x_1 \geq 0 \quad x_2 \geq 0 \quad (\text{eixos coordenadas})$$

Geralmente as relações entre as variáveis não aparecem como a disposição acima e, portanto, deve-se manipulá-las deixando-as numa forma *canônica*. Os métodos de programação matemática desenvolvidos para resolver problemas de otimização necessitam desta forma. Geralmente os problemas são enunciados para *minimizar* e no caso de um problema de *maximização*, basta multiplicar a função objetivo por (-1) .

Cada restrição define uma sub-região viável (factível), e a intersecção de todas elas define o *Espaço Factível* para o problema.

Classificam-se os métodos de acordo com as funções e equações do modelo. Eles podem ser *lineares* ou *não lineares*, *restritos* ou *irrestritos*, *de programação inteira*, *mista*, *contínuos*, *discretos*, etc..e irão determinar o método de programação matemática a ser utilizado. Costuma-se modelar pensando previamente na técnica de resolução a ser utilizada.

Todos estes conceitos apresentados tem o sentido de auxiliar o acompanhamento deste trabalho. Para maiores detalhes ou formalismo, recomenda-se a leitura de Luenberger, 1984; Bazarra & Shetty, 1979; Hillier & Liebermann, 1990 e Edgar & Himmelblau, 1988.

Um exemplo de aplicação de *Programação Dinâmica* num ciclo Joule-Brayton simplificado, pode ser encontrado em Errera *et al*, 1993. Neste problema foram utilizados os Custos Anualizados e as Irreversibilidades Geradas como função objetivo.

1.3 - Multiplicadores de Lagrange

Em Termoeconomia há uma grande tendência a se utilizar os multiplicadores de Lagrange, pois permitem fazer analogias entre os custos marginais e seus parâmetros multiplicadores. Entretanto estes parâmetros podem ser obtidos também por técnicas mais eficientes de programação matemática.

Em problemas de otimização não-linear de grande porte, recomenda-se utilizar os *Métodos do Gradiente Reduzido* e dos *Gradientes Projetados* (Hillier & Liebermann, 1990).

Seja um problema bi-dimensional (duas variáveis de decisão , x_1 e x_2) no qual se deseje :

$$\begin{aligned} & \text{Min } f(x_1, x_2) \\ & \text{Sujeito a :} \\ & \quad h_j(x_1, x_2) - e = 0 \\ & \quad g_j(x_1, x_2) \leq 0 \end{aligned}$$

onde e é uma constante.

Para resolver o problema é necessário substituir a desigualdade, por uma variável de folga, σ :

$$g_j(x_1, x_2) - \sigma^2 = 0$$

O Lagrangeano desse problema é definido por :

$$L(x_1, x_2, \lambda_j) = f(x_1, x_2) + \sum_{j=1}^m \lambda_j h_j + \sum_{j=m+1}^p \lambda_j [g_j(x_1, x_2) - \sigma_j^2] \quad (1.5)$$

onde :

- m número de equações de restrição ;
- $(p-m)$ número de inequações de restrição ;
- λ multiplicador de Lagrange (Custos marginais) .

E agora o problema pode ser enunciando da seguinte forma:

$$\text{Min } L(x_1, x_2, \lambda_j) \quad (1.6)$$

Se o Lagrangeano da função possuir a primeira derivada contínua (C1), o ponto de mínimo será em :

$$\nabla L(x_1, x_2, \lambda_j) = 0 \quad (1.7)$$

A expressão acima diz que dentro da região das soluções viáveis, o gradiente do Lagrangeano se anula no ponto ótimo. Pode se perceber através da formulação Lagrangeana que o problema de otimização restrita para a função objetivo $f(x_1, x_2)$, se torna irrestrita para o Lagrangeano, $L(x_1, x_2, \lambda_j)$.

O procedimento também pode ser conhecido como a *dualização das restrições*. Dualizar as restrições significa colocá-las na função objetivo e através do multiplicadores de Lagrange, λ_j , penalizá-la para mais na minimização ou menos na maximização, no caso de não atender qualquer das restrições.

Sabe-se do Cálculo que o gradiente de uma função se constitui das primeiras derivadas parciais, e onde ele se anula, corresponde a um ponto crítico (máximo, mínimo ou inflexão).

Existem as condições formais necessárias e suficientes de primeira e segunda ordem, para atender a otimalidade, conhecidas como as condições de Kuhn-Tucker¹. Em caso de problemas de convergência, ou dificuldade em modelagem, aconselha-se verificar se estas condições estão sendo obedecidas.

1.4 - Fatoração LU

Na metodologia utilizada neste trabalho, surge um sistema linear para se resolver. Fora a esparsidade, não há predominância de tipo de matriz dos coeficientes que permitisse fazer uso de rotinas especiais, e além disto não era objetivo a busca do melhor método de resolução deste sistema; apenas procurou-se aquele que apresentasse menos restrições quanto a forma da matriz e fornecesse resultados numéricos de boa qualidade. Para estas situações, a literatura recomenda utilizar a fatoração, ou decomposição **LU** (e.g. Chapra & Canale, 1990). Este procedimento consiste basicamente em dividir o sistema linear original (**A**) em dois subsistemas com matrizes triangulares inferior (Low) e superior (Upper). Em termos algébricos,

$$PA = LU$$

onde, **P** é a matriz permutação correspondente ao pivoteamento na matriz do sistema, **A**.

Para grandes sistemas, pode-se aproveitar a esparsidade da matriz e resolver o sistema iterativamente (Método de Gauss-Seidel, por exemplo.).

¹ Vide bibliografia referente a otimização apresentada na seção anterior.

1.5 - Algoritmo de Busca

Faz-se uso de um algoritmo de busca (solução para equações não-lineares, porque o problema de otimização neste trabalho consiste em obter um ponto onde o gradiente do Lagrangeano da função objetivo, aqui não linear, se anule. Foi utilizado o algoritmo da *Posição Falsa Modificado*, conhecido também como *Regula-Falsi Modificado (MRF)*.

Algumas das vantagens em solucionar equações não-lineares através deste método, é poder omitir as restrições de canalização ou de desigualdade, ao modelar o problema de otimização. Sob o ponto de vista numérico também se torna desejável devido a sua estabilidade e convergência muito semelhantes ao do método de Newton-Raphson, que são atrativas quando não se conhece muito bem o perfil das funções.

Vários algoritmos podem ser encontrados na literatura para o *Regula-Falsi Modificado* (Chapra & Canale, 1990; Ruggiero *et al*, 1988; Carnahan *et al*), sendo que o utilizado aqui foi sugerido em Frangopoulos, 1983.

1.6 - Conceitos de Termodinâmica

Este trabalho pressupõe um conhecimento básico em Termodinâmica, especificamente no uso da Segunda Lei da Termodinâmica. Por isso somente algumas considerações conceituais serão feitas ao longo do trabalho.

Para uma leitura inicial em Termodinâmica, podem ser consultados os livros usualmente utilizados nos programas de graduação : Van Wylen & Sonntag, 1985 , Holman, 1988 e Shapiro & Moran, 1992. Para conceitos avançados em Segunda Lei da Termodinâmica, recomenda-se a leitura de Reistad, 1970; Szargut, 1980; Moran, 1982; Kotas, 1985; Bejan, 1988; Szargut *et al*, 1988, Errera & Milanez, 1994a e Milanez & Gallo, 1992, e as respectivas publicações destes autores nos periódicos e anais que tratam do assunto.

Neste trabalho será utilizado o conceito de exergia ou disponibilidade, usualmente definido na literatura como o trabalho mecânico que se pode obter de uma porção de massa ao levá-la ao equilíbrio com o *ambiente*.

Para se comparar processos, geralmente faz-se uso da análise de 1ª Lei da Termodinâmica ou energética. Entretanto, sabe-se que a energia sempre se conserva e a questão se torna no aproveitamento ou não de seus fluxos ao exterior do volume de controle estabelecido. Uma base consistente para comparar sistemas energéticos é avaliar os processos através da 2ª Lei da

Termodinâmica, que não é conservativa e permite estimar o quanto é destruído de exergia em cada situação. Muitos autores também usam o termo entropia e irreversibilidade gerada (e.g. Bejan, 1988, Moran, 1982). Outro ponto importante no uso da exergia, é que ela não é propriedade somente do sistema como a energia, ela está vinculada a ele também a uma referência externa (Gallo & Milanez, 1990).

O conceito de exergia é baseado num estado de referência muito apropriado para se considerar os aspectos ecológicos em análises térmicas : o Meio Ambiente. Por se tratar de uma grandeza física relativa, optou-se em estabelecer como referência para a forma e o estado físico de cada elemento químico, a substância que o contém, encontrada em abundância e em equilíbrio com o meio ambiente.

Assim, os componentes mais comuns na Terra tem exergia nula e as substâncias mais raras têm exergia positiva com valor crescente tanto mais raras forem. Deste modo fica estabelecido uma correlação com seu valor econômico (Gallo & Milanez, 1990).

A importância maior em se escolher um *estado de referência* apropriado, fica evidente ao comparar sistemas semelhantes sujeitos a ambientes diferentes , quanto aos rendimentos. A comparação realizada neste trabalho quanto as irreversibilidades geradas, pois o sistema de apagamento a úmido constituiu-se num processo dissipativo.

1.7 - Poluição através de partículas

A emissão de partículas sólidas será considerada na análise termoeconômica. Uma introdução a estas questões pode ser vista em Theodore & Buornicore, 1988 e Calvert (org.), 1984 e, ainda para assuntos relacionados com a poluição causada pelo uso do carvão, recomenda-se Chadwick *et al* (org.), 1987 e Karcz *et al* e Errera e Milanez, 1994b.

2 - Sistema de extinção de coque siderúrgico incandescente

2.1 - Apresentação

No processo siderúrgico de fabricação do gusa, a matéria prima do aço, se utiliza basicamente o minério de ferro e o carvão mineral. Ambos recebem tratamentos físico-químicos antes de serem colocados no alto-forno, onde são reduzidos junto a outros insumos.

O principal tratamento que o carvão recebe é a coqueificação, onde se desprendem os hidrocarbonetos, alcatrão; tudo o que é usualmente denominado de matéria volátil. O objetivo é deixar o máximo teor de carbono fixo com mínimas quantidades de enxofre e outros elementos que possam afetar a qualidade do gusa.

O produto final de todo o este processo é o **coque**. A rigor, o coque é a parte sólida e celular da substância remanescente da carbonização do carvão mineral, piche e outros resíduos de petróleo. Há uma grande variedade de coque de acordo com diversas procedências e composição básica do respectivo minério. (Perry & Chilton, 1973).

O mecanismo de transformação de carvão em coque ocorre através de complexos fenômenos físicos e químicos. Algumas das mudanças físicas que se processam são a liberação das matérias voláteis e a resolidificação, acompanhadas de alterações químicas como *craqueamento*, despolimerização e condensação (Perry & Chilton, 1973). Na siderurgia faz-se uso do coque denominado *coque de alta temperatura*. Uma composição típica deste coque é apresentada abaixo :

Tabela 1.1. Amostra de composição do coque (Sanchas da Cruz, 1993b) .

Carbono	Enxofre	Cinzas
88,9 %	0,9 %	10,2 %

A coqueificação do carvão ocorre em baterias de fornos constituídos de câmaras, onde se atingem temperaturas elevadas para que a maior parte da matéria volátil se desprenda do carvão.

O coque é desenhado incandescente sendo necessário sua extinção antes de transportá-lo e inserí-lo no alto forno. É neste momento que surge o estudo de caso deste trabalho: o sistema de apagamento de coque.

Apaga-se coque de duas maneiras muito distintas. A mais antiga e convencional é o sistema de extinção a úmido, ou *Coke Wet Quenching, CWQ* e, a mais moderna, que realiza o apagamento a seco, *Coke Dry Quenching, CDQ*.

O sistema de apagamento a úmido, o *CWQ*, pode ser ilustrado brevemente através do esquema apresentado na Figura 1.3.

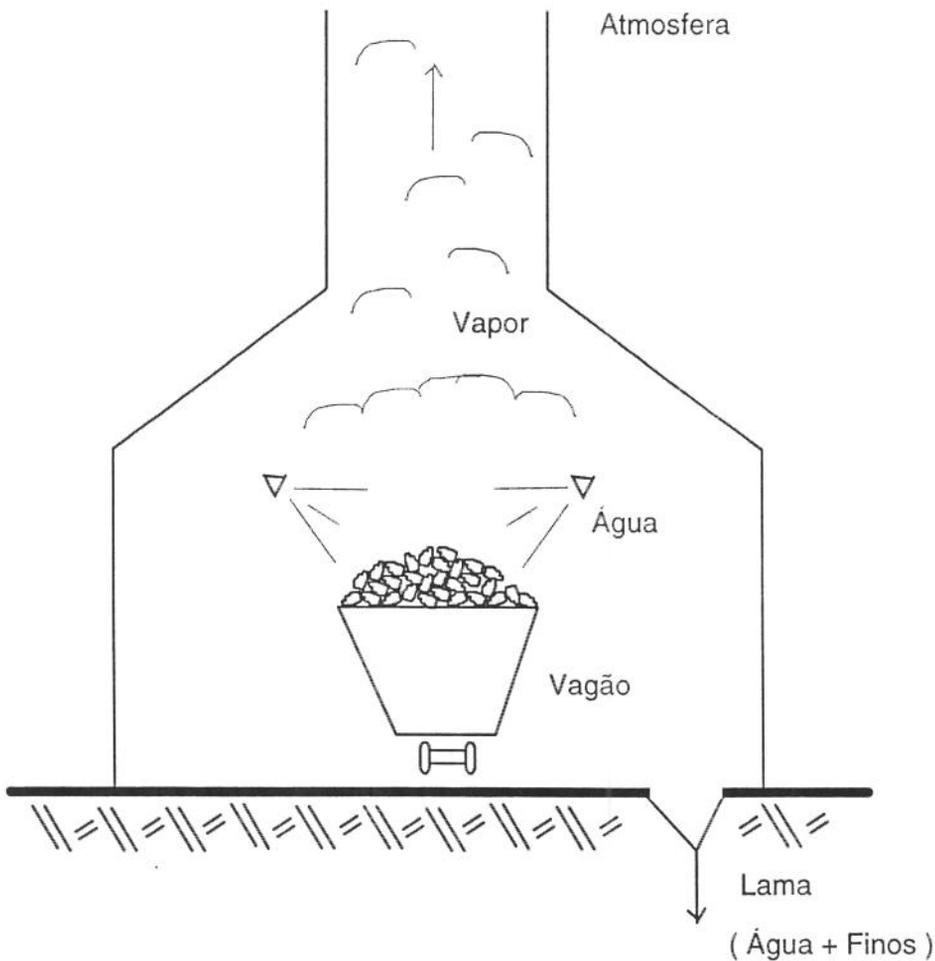


Figura 1.3. Esquema de um CWQ.

Este processo é intermitente, no qual lança-se água sobre o coque incandescente até se apagar toda a carga contida no vagão. Há geração de vapor, que sobe livremente para a atmosfera arrastando consigo partículas (finos de coque¹) e alguns hidrocarbonetos Karcz et al, (*).

O *CWQ* não consiste propriamente num processo térmico, é apenas um *dissipador de energia*.

2.2 - Descrição de um CDQ

2.2.1 - Histórico :

A técnica de extinção de coque a seco teve seu desenvolvimento inicial na década de 20 pelos irmãos Sulzer na Suíça. Entretanto, aquele processo não permitia a geração uniforme de vapor devido às variações no carregamento de coque, tinha problemas de segurança operacional e era economicamente inferior ao sistema convencional a úmido, *CWQ*.

Uma nova concepção de CDQ, de operação contínua, foi desenvolvida pelo Instituto Giprokoks, na Rússia. As duas primeiras unidades deste tipo foram instaladas em 1965, na Usina de Cherepovets. (CST, 1983a).

2.2.2 - Breve descrição do processo

O processo se inicia com cargas alternadas de coque incandescente (~ 1050 °C), desenformado das baterias de coqueificação. O coque é transportado ainda incandescente até os CDQ's e descarregado na pré-câmara. A seguir, o coque desce por gravidade para a câmara, onde ocorre extinção em regime uniforme através da transferência de energia, numa interação de calor com um gás quase inerte. O gás circulante é resfriado numa caldeira de recuperação, que gera vapor com propriedades uniformes e controladas (Vide Figura 1.4 e A.1).

As fontes de geração de finos, material particulado, se fazem presentes nos instantes do carregamento do coque incandescente e na descarga do coque já extinto, e na circulação do gás de resfriamento através do coque. O gás circulante arrasta os finos que se desprendem do coque no interior da câmara, para so trocadores de calor na caldeira de recuperação.

¹ São considerados finos de coque, todas as variedades de partículas sujeitas a estar em suspensão.

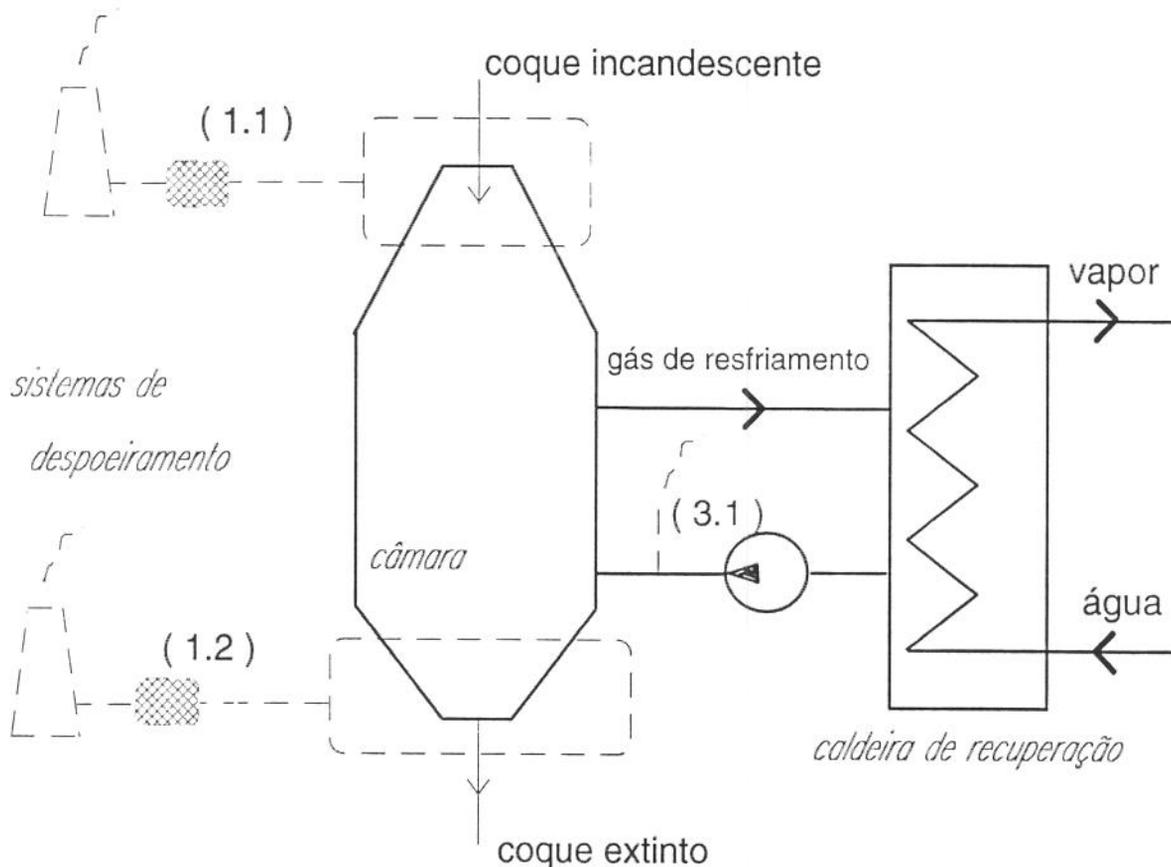


Figura 1.3. Esquema de um CDQ

2.2.3 - Aspectos gerais e ambientais do CDQ da Companhia Siderúrgica de Tubarão

O CDQ opera sob um regime condicionado à produção de coque dos fornos, pela pressão e temperatura do vapor e pela vazão da água de alimentação da caldeira. Uma questão ambiental muito importante é o fato que em alguns casos o aumento da produtividade pode reduzir as emissões específicas, ou seja, a relação entre emissão de particulados por coque apagado pode ser diminuída.

O sistema de extinção de coque da CST é constituído de cinco câmaras. O vapor atualmente produzido pelas cinco câmaras de extinção analisadas tem temperatura de 350 °C e pressão em torno de 21 kgf/cm² (2,06 MPa). Deste vapor, parte é utilizada nas turbinas dos exaustores da área carboquímica, parte no CDQ e a maior parcela segue para o setor de utilidades.

De um modo geral, o gás circulante no interior do CDQ tem composição semelhante à mostrada na Tabela 1.2 (Edgar, 1993). O controle destes teores é feito continuamente e a partir

deles pode-se determinar a perda de coque por combustão conforme é sugerido mais a frente (Equação (1.11)).

É realizado um controle dos teores de H_2 , CO e O_2 do gás circulante para que não ocorra explosão da câmara de circulação de gás (Tabela 1.2). Para isto, injeta-se ar para reduzir os teores dos dois primeiros através da combustão. No caso da pressão interna se elevar, o sistema de alívio (*bleeder*¹) do gás circulante é aberto, e o gás segue para a atmosfera. Logo a seguir é injetado N_2 em outro ponto para se manter a diluição dos gases remanescentes (CST, 1993a). Estudos quanto à composição do gás circulante demonstram que não se deve simplesmente eliminar estes elementos perigosos. (Rod'kin & Korobeinikov, 1984).

Tabela 1.2 . Composição do gás de alívio no bleeder inferior (amostra).

Elemento	CO	H_2	CO_2	O_2	N_2
Teor (%)	11,55	3,51	1,48	0,72	81,74

As principais reações químicas que ocorrem no interior da câmara de circulação conforme CST, 1984b, são as seis abaixo (Equações (1.8)(a.f)). Deve-se lembrar que o N_2 quase não sofre dissociação e permanece estável devido à baixa temperatura. Esta hipótese esta que pode ser confirmada pela teoria de equilíbrio químico.



As reações (1.8)a e (1.8)b ocorrem no local de injeção de ar (logo na saída da câmara de extinção da Figura A.1) e traz dois benefícios : diminui os teores de H_2 e CO através da combustão como uma forma de controle e libera energia térmica para ser aproveitada na caldeira de recuperação logo a seguir no circuito do gás. No retorno do gás pela parte inferior da câmara de extinção, as reações (1.8)c e (1.8)d ocorrem e são inconvenientes, pois consomem coque e energia (reações endotérmicas), mas no entanto são inerentes ao processo.

¹ Nomenclatura usada pelos profissionais da área para o sistema de alívio do gás circulante.(Vide Figura A.1).

Testes de hermeticidade periodicamente realizados nas câmaras previnem grandes infiltrações de ar, atenuando assim as reações (1.8)e e (1.8)f. Deste modo, restam as outras quatro reações que se somadas numa primeira aproximação, permitem obter a reação resultante ¹:



Considerando que o carbono $C_{(s)}$ dos reagentes é fornecido exclusivamente pelo coque.

Através da quantidade de monóxido de carbono, CO, lançado à atmosfera estima-se o carbono, C, gaseificado ou queimado, através da expressão (1.10), obtida considerando o balanço de massa na Equação (1.9).

$$m_C = \frac{12}{28} \cdot m_{CO} \quad (1.10)$$

Devido à dificuldade operacional em se determinar a vazão no *bleeder superior*² (vide Figura A.1), é apresentada uma expressão utilizando somente o teor médio (horário) de CO no *bleeder inferior*³ que permite realizar medições de vazão durante todo o ciclo de operação. Omitindo alguns passos, já se apresenta a forma final da Equação (1.11) considerando também o teor de carbono fixo no coque. Assim,

$$\dot{m}_{Coque} = \frac{12}{22,4} \frac{\bar{\alpha}_{CO}}{C} \dot{Q}_{inf} \quad (1.11)$$

onde,

m_{Coque} massa de coque (kg / h) ;

$\bar{\alpha}_{CO}$ % médio de CO no gás expelido no *bleeder inferior* ;

\dot{Q}_{inf} vazão no *bleeder inferior* (Nm³ / h) ;

C teor de carbono-fixo no coque, %.

A Tabela 1.3 mostra os percentuais de perda de coque por combustão em relação ao quantidade de coque extinto apresentados em CST, 1984b e estimados neste trabalho através da Equação (1.11).

Parte desta perda de coque é **inerente ao processo de apagamento** e pode variar numa faixa de 0,45 a 3,20 % (Rod'kin & Korobeinikov, 1988), sendo importante quantificá-la e avaliar

¹ Esta expressão visa somente sua aplicação prática.

² Sistema de alívio de gases localizado logo após a câmara de extinção.(Vide Figura A.1).

³ Sistema de alívio de gases localizado logo na porção inferior, antes do gás circulante entrar novamente na câmara de extinção.(Vide Figura A.1).

a viabilidade econômica de melhorias. No caso de uma perda total anual devido as reações químicas no atual regime de operação, estima-se uma quantia de 551,700.00 US\$/ano perdida, para o custo industrial apresentado em Sanchas da Cruz, 1994.

Tabela 1.3. Comparação dos resultados para a Equação (1.11)

	Teste A (%)	Teste B (%)	Teste C (%)
CST, 1984b ¹	0,46	0,29	0,18
Eq. (1.9)	0,43	0,29	0,17

Parte desta perda de coque é **inerente ao processo de apagamento** e pode variar numa faixa de 0,45 a 3,20 % (Rod'kin & Korobeinikov, 1988), sendo importante quantificá-la e avaliar a viabilidade econômica de melhorias. No caso de uma perda total anual devido as reações químicas no atual regime de operação, estima-se uma quantia de 551,700.00 US\$/ano perdida, para o custo industrial apresentado em Sanchas da Cruz, 1994.

A partir da planilha de dados CST, 1993e foram elaborados os gráficos a seguir que ilustram alguns aspectos de operação do CDQ de janeiro a setembro de 93.

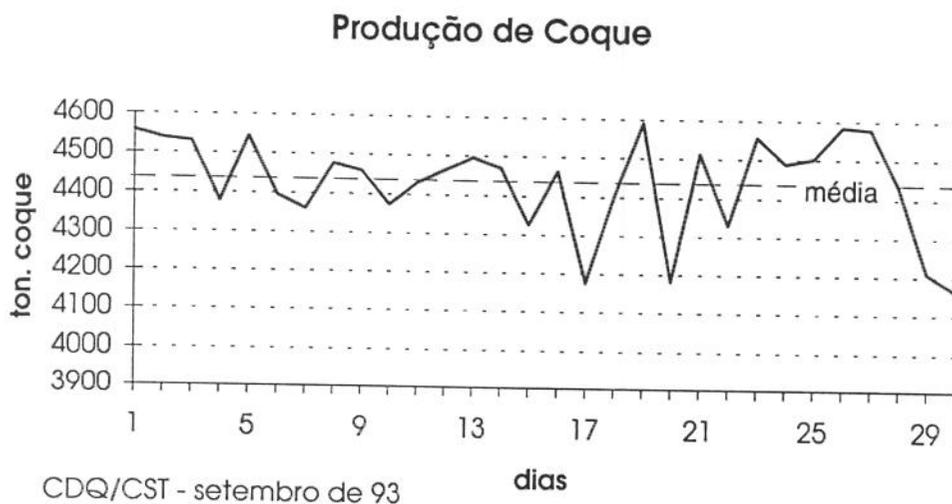


Figura 1.5. Produção de coque em setembro de 93.

Na Figura 1.5 pode ser ver que a produção de coque no mês de setembro/93 sofreu uma variação máxima de 450 ton/dia, que se considerado por câmaras são 90 ton / diaCâmara (24 %). No balanço realizado (média das 5 câmaras) para o dia 23 de setembro observa-se aproximadamente 38 ton / h de fluxo de coque. Em termos percentuais, a variação média seria de 9 %. Com a produção sofrendo variações desta ordem se torna difícil o controle,

¹ Ensaios realizados variando a composição e vazão do gás circulante.

acompanhamento, e o estabelecimento de um balanço de massa e térmico que represente o processo.

O consumo de N_2 oscila tanto quanto o de coque (Figura 1.6), permanece na faixa de 45 a 55 mil Nm^3 /dia ou 1.875 a 2.291 Nm^3/h , numa variação média de 10 %, e máxima chegando a 15 mil Nm^3 /dia.

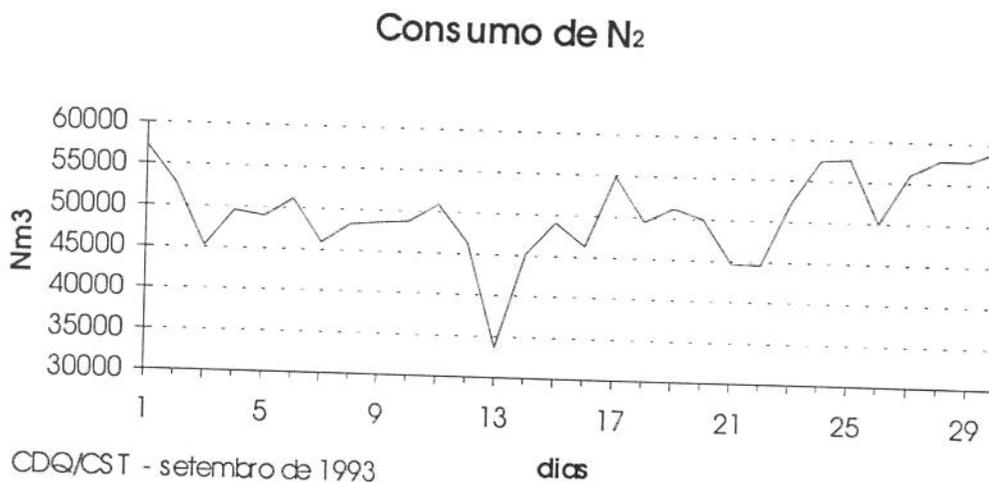


Figura 1.6. Consumo de nitrogênio em setembro de 93.

A Figura 1.7, ilustra como é a distribuição do vapor gerado no CDQ. Observe que parte (15 %) é utilizado nas turbinas de acionamento das bombas da central de água do CDQ.

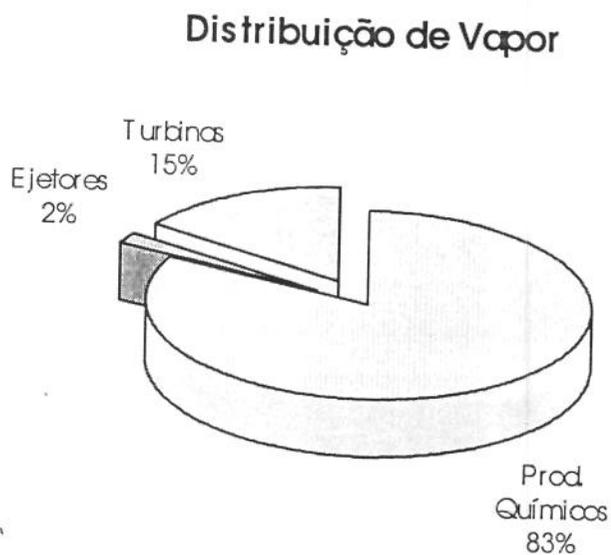


Figura 1.7. Utilização do vapor gerado no CDQ.

Na Figura 1.8 nota-se certa semelhança entre os dois rendimentos, de *coque* e N_2 . A curva de variação de ambos são qualitativamente muito semelhantes demonstrando que são predominantemente influenciados por uma causa comum : o fluxo de coque. Abaixo apresenta-se a definição destes dois parâmetros.

$$\eta_{Coque} = \frac{\text{Vapor produzido}}{\text{Coque extinto}}$$

$$\eta_{N_2} = \frac{N_2 \text{ consumido}}{\text{Coque extinto}} \left[\frac{Nm^3}{ton} \right]$$

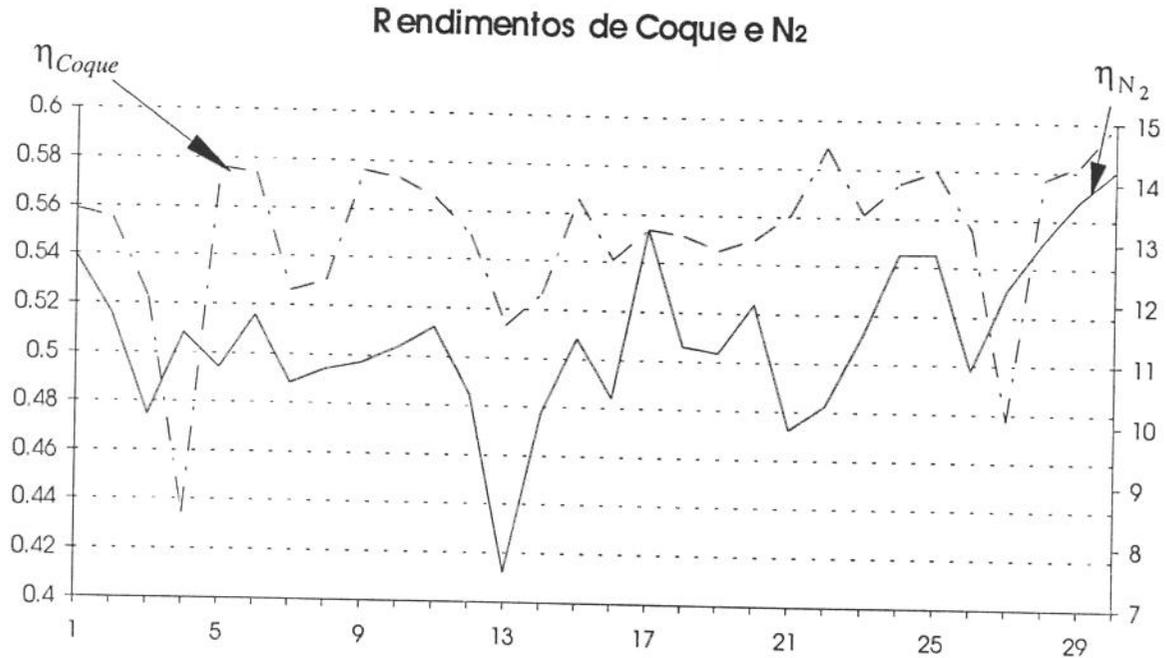


Figura 1.8. Rendimentos de coque e N_2 em setembro de 93.

O monitoramento contínuo de certos itens como concentração dos componentes do gás circulante, consumo de N_2 , temperaturas e pressões, permite construir modelos para análise. Conforme será visto nos balanços de massa e energia, algumas grandezas não são acompanhadas e podem distorcer avaliações.

Algumas observações quanto a conduta ambiental no CDQ são apresentadas abaixo :

- Um estudo aproximado da geração de *finos* pelos CDQ's baseado nos valores de janeiro a setembro de 93 (Sanchas da Cruz, 1993), demonstrou que a produção de finos possui certa uniformidade (Figura 1.9). Aproveitando esses dados obteve-se o percentual médio de finos voltados a venda, CDQ-Venda, ilustrado na Figura 1.10. Os finos vendidos a terceiros fornecem uma receita que deve se atribuir aos sistemas de despoejamento do CDQ.

- A Figura 1.10 também demonstra que há uma atitude de reaproveitamento do pó coletado. As parcelas que seguem para os tanques de decantação (Dec./Pátio 3) e a do pátio (CDQ/Pátio 3) são utilizadas na sinterização e no alto-forno. Tal procedimento gera uma economia significativa, tanto operacionalmente, quanto de manuseio de resíduos sólidos. Sabe-se que de acordo com o resíduo, devem ser considerados custos de manipulação, transporte, locação de áreas de disposição, e outros mais.

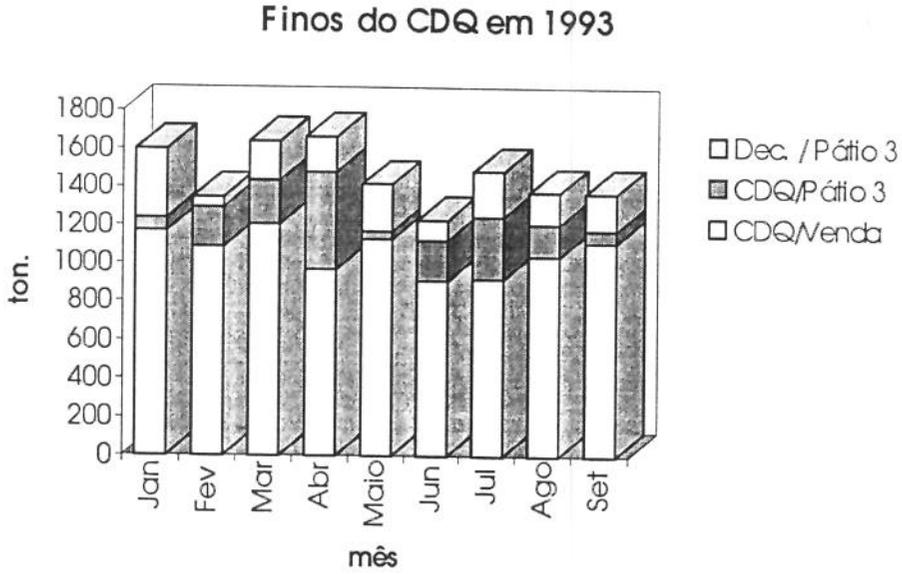


Figura 1.9. Índice de finos coletados no CDQ.

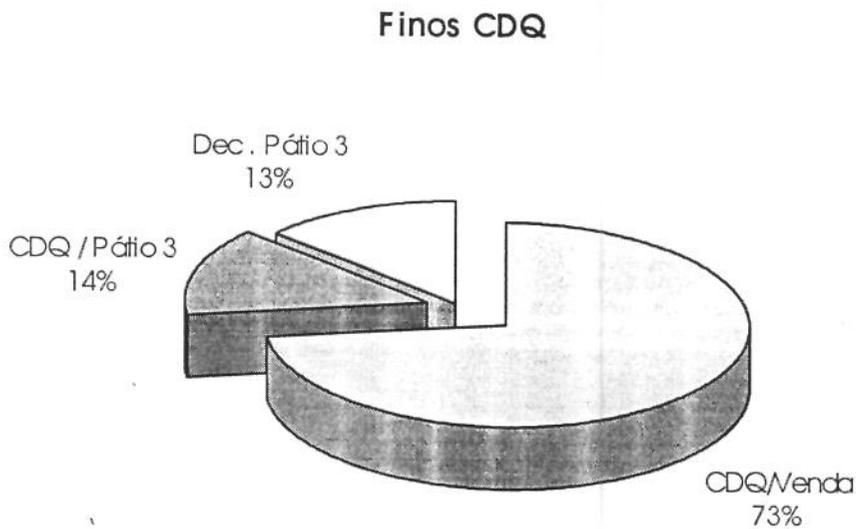


Figura 1.10. Utilização dos finos coletados

Nesta seção foi apresentada uma breve descrição de todo o objeto de estudo. Algumas outras considerações sobre o sistema de apagamento de coque a seco podem ser vistas em Errera & Milanez, 1994b.

Capítulo 2

ANÁLISE TERMODINÂMICA

INTRODUÇÃO

Neste capítulo são apresentados todos os aspectos envolvidos com os fluxos de massa, energia e exergia ; todo o procedimento de coleta e interpretação dos dados, as considerações utilizadas e suas repercussões.

O objetivo deste capítulo é estabelecer todo o cenário físico em que o estudo termoeconômico será elaborado e um estudo térmico completo do CDQ. E, para isto, distribui-se os tópicos nas seguintes seções:

- 1) *Coleta de dados ;*
- 2) *Balanço de massa ;*
- 3) *Balanço de energia (1ª Lei da Termodinâmica) ;*
- 4) *Balanço de exergia (2ª Lei da Termodinâmica) ;*
- 5) *Considerações finais.*

2.1 - Coleta de dados

2.1.1 - Metodologia

Conforme apresentado no primeiro capítulo, o regime de produção mensal sofre variações consideráveis diariamente. Por isso, foi selecionado um dia típico de operação de toda a instalação através da observação das Figuras (1.5 e 1.6) e das médias mensais das principais grandezas. Nestes termos o dia escolhido foi 23 de setembro de 93.

Definido o dia de estudo ou cenário físico e operacional, passou-se à análise horária. As leituras dos parâmetros operacionais considerados relevantes pela CST constam em CST, 1993d. A partir desta planilha, obtiveram-se os fluxos médios horários do coque, água e vapor através do procedimento descrito abaixo.

2.1.1.1 - Procedimento geral

- 1) Média aritmética diária, \bar{f}_k , do fluxo em cada câmara de extinção, para as seis leituras diárias, i :

$$\bar{f}_k = \frac{\sum_i^6 f_{ki}}{6} \quad (2.1)$$

- 2) Média aritmética das cinco câmaras, proporcionando valores representativos de toda a instalação de apagamento de coque :

$$\bar{f} = \frac{\sum_k^5 \bar{f}_k}{5} \quad (2.2)$$

Na planilha CST, 1993d as leituras de vapor e água são medições diretas, entretanto, para o coque constam apenas os números diários de carga e descarga de coque realizados em cada câmara de extinção. Por isso, os fluxos relacionados com o coque são calculados.

2.1.1.2 - Procedimento para estimativa dos fluxos de coque

Os fluxos são estimados considerando-se que cada carga contém 22 toneladas de coque incandescente e descarrega-se 1,675 toneladas em média de coque extinto por vez. (NEU, 1993 ;

CST, 1984b e CST, 1984a)¹. O fluxo de coque carregado no CDQ é então 38.133 ton / h e a produção de coque (descarga) é de 37.200 ton / h, para cada câmara.

Os valores para os fluxos da carga e descarga foram comparados com a média mensal de CST, 1993e e considerados adequados como demonstra a Tabela abaixo.

Tabela 2.1. Média mensal e diária de produção de coque [ton / h]

(23 set)*	(mensal)**
37,200	37,965

* CST, 1993d

** CST, 1993e

Outros fluxos a serem calculados são os de material particulado, ou *finos* de coque, que são retidos nos dispositivos de controle ambiental e os que são lançados à atmosfera.

2.1.1.3 - Procedimento para estimativa da geração de finos

Para estimativa da geração de finos por câmara do CDQ foram utilizados dados de Sanchas da Cruz, 1993c ; CST, 1991 ; NEU, 1991 e 1994 e CST, 1991.

Os valores mostrados em Sanchas da Cruz, 1993c, permitiram obter dois indicativos importantes : média mensal de finos coletados e o índice de venda dos mesmos. Conhecida a quantidade retida e fazendo uso de uma eficiência global de *despoeiramento* (coleta de partículas) de 90 % (CST, 1991), chegou-se a:

$$\dot{m}_{\text{finos}} = 364,4 \text{ kg / h}$$

Em termos percentuais comparados a média de coque incandescente,

$$\frac{\dot{m}_{\text{finos}}}{\dot{m}_{\text{inc}}} = \frac{364,4}{38.133} = 0,9556 \% \quad (2.3)$$

Este índice foi comparado ao ensaio apresentado em CST, 1984b, que indica um índice de 1,13 % de geração de finos pro coque incandescente carregado, e permite concluir que a estimativa realizada é satisfatória.

Determinar somente o índice global de geração de finos não era suficiente, foi necessário determinar as parcelas de cada dispositivo de coleta de partículas (coletor primário, ciclones e despoeiramentos). Após perceber a proximidade dos índices de CST, 1984b e o apresentado na Equação (2.3), foram utilizados os percentuais de cada parcela apresentados naquela referência (Tabela 2.2).

¹ O carregamento de coque incandescente e o descarga de coque extinto ocorrem em bateladas.

Tabela 2.2 Parcelas dos finos retidos (CST, 1984b)

Dispositivos	Percentual (%)
Finos no Ciclone	0,67
Finos no Coletor	0,19
Finos nos Despoeiramentos	0,27
Total	1,13

Ainda era necessário distinguir as contribuições de cada sistema de despoeiramento. Dos 0,27 % apresentado na linha *Finos no despoeiramentos* na Tabela acima, 70 % corresponde ao retido na descarga e 30 % da carga de coque (Morimoto, 1994)¹.

Na coluna *Percentual (%)* da Tabela 2.3, abaixo, pode ser vista a distribuição do total de finos gerados. A contribuição de cada sistema ao índice global de geração de finos obtido na Equação (2.3 e multiplicado pelo fator (0.9556/1.13) é apresentada na coluna *Parcelas (%)*.

Tabela 2.3 Parcelas de finos gerados por dispositivo.

Dispositivos	Parcelas (%)	Percentual (%)
Finos do Ciclone	0,5667	59,30
Finos do Coletor	0,1605	16,80
Finos do Desp. Da Carga	0,0685	7,17
Finos do Desp. Descarga	0,1599	16,73
Total	0,9556	100

Para determinar os fluxos de água e vapor, também foram utilizadas as planilhas de CST, 1993(d & e) além dos diagramas mostrados nas Figuras A.2 e A.3, e se através do procedimento apresentado na introdução desta seção.

2.1.2 - Delimitação dos volumes de controle

São delimitados três volumes de controle :

VC - câmara

VC - caldeira

VC - CDQ

sendo que os *VC's - câmara e caldeira* são complementares e constituem o *VC - CDQ*.

2.1.2.1 - *VC - câmara* :

O volume de controle *câmara* consiste numa região maior que a própria câmara e pré-câmara. Suas fronteiras alcançam no interior do CDQ, o limite onde praticamente não ocorrem mais reações químicas no gás de circulação, a partir de onde ele segue estável para a caldeira de recuperação. (Figuras 2.1 e A.1).

¹ Um novo sistema de captação estará funcionando a partir de dezembro de 1994.

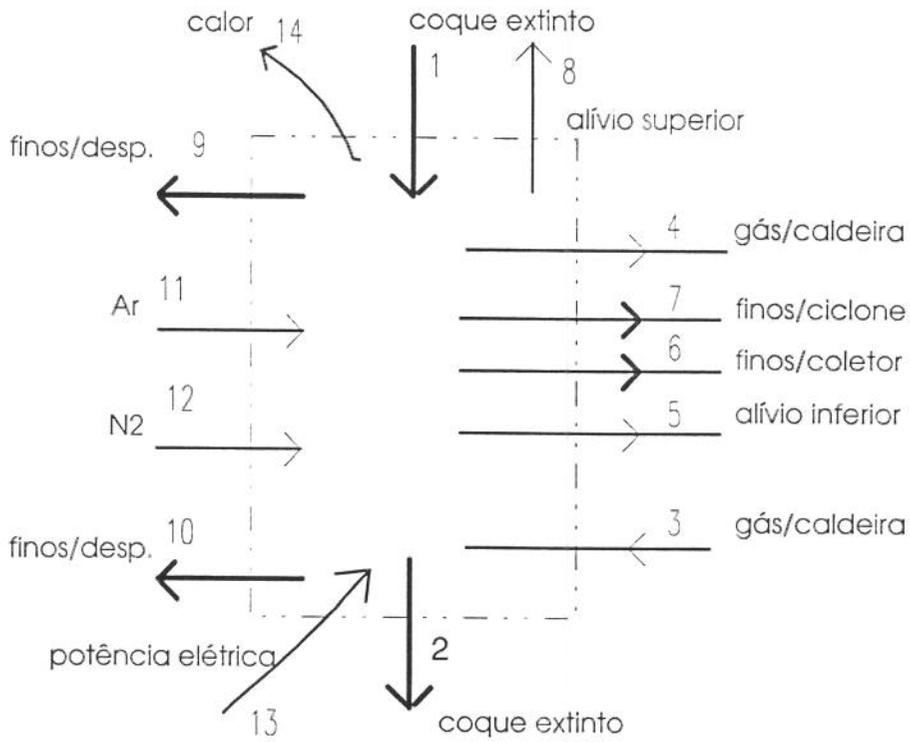


Figura 2.1. VC - Câmara

Os fluxos indicados acima estão descritos na Tabela abaixo.

Tabela 2.4. Fluxos de Energia no VC - Câmara

Nº	Descrição
1	Coque incandescente, \dot{m}_{inc}
2	Coque extinto, \dot{m}_{ext}
3	Gás circulante (g_{in}) vindo do VC - caldeira
4	Gás circulante (g_{out}) ¹ para o VC - caldeira
5	Bleeder inferior ou alívio inferior, \dot{Q}_{inf}
6	Finos retidos no coletor inercial, \dot{m}_{col}
7	Finos arrastados pelo gás circulante e coletados no ciclone, \dot{m}_{cicl}
8	Bleeder superior ou alívio superior, \dot{Q}_{sup}
9	Finos coletados no sistema de desp. da carga de coque, \dot{m}_{car}
10	Finos coletados no sistema de desp. da desc. de coque, \dot{m}_{desc}
11	Ar para a combustão dos gases, \dot{Q}_{ar}
12	N ₂ para diluição do gás circulante, \dot{Q}_{N2}
13	Potência elétrica utilizada pelos sopradores, \dot{W}_{VC}
14	Fluxo de calor para o ambiente, \dot{Q}_{VC}

¹ Deve ser observado que as composições dos gases g_{in} (3) e g_{out} (4) são muito semelhantes e devido a impossibilidade de realizar medidas serão consideradas idênticas.

2.1.2.2 - VC - caldeira :

O Volume de controle *caldeira* corresponde à região delimitada entre a fronteira do interna no VC - *câmara* , até os limites da própria caldeira de recuperação e os ciclones. Um breve esquema é apresentado abaixo :

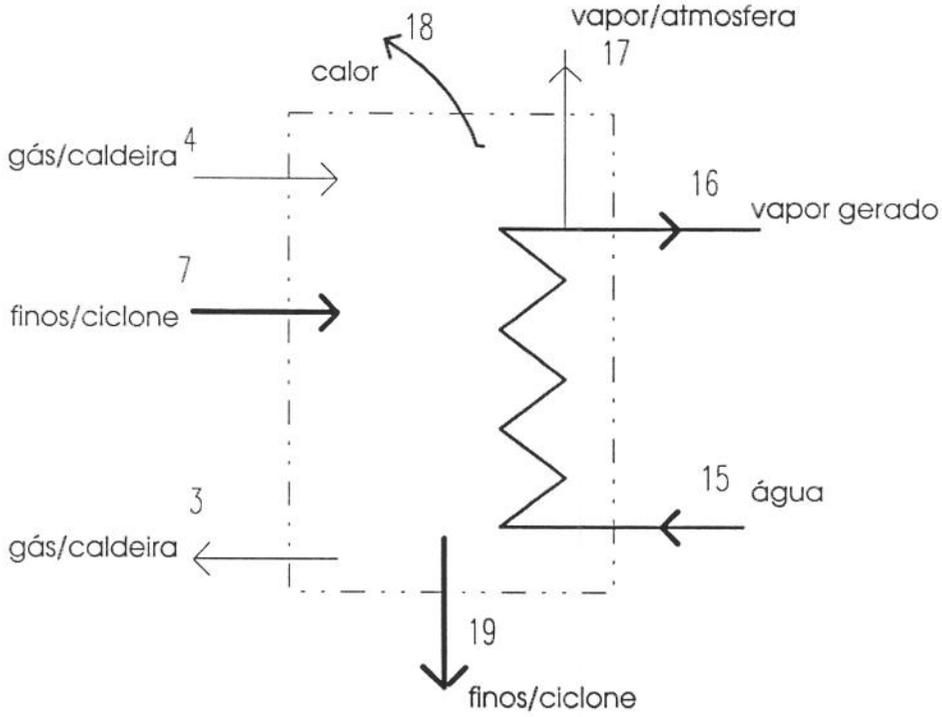


Figura 2.2. VC - Caldeira

Os fluxos são descritos na Tabela abaixo.

Tabela 2.5. Fluxos de energia no VC - Caldeira

Nº	Descrição
3	Gás circulante para o VC - Câmara, g_{in}
4	Gás circulante vindo do VC - Câmara, g_{out}
7	Finos arrastados pelo gás circulante e coletados no ciclone, \dot{m}_{cicl}
15	Água desmineralizada e desaerada para alimentar a caldeira, \dot{m}_a
16	Vapor gerado, \dot{m}_v
17	Vapor lançado à atmosfera, \dot{m}_{sat}
18	Fluxo de calor para o ambiente, \dot{Q}_{VC}
19	Finos coletados no ciclone, \dot{m}_{cicl}

2.1.3 - Considerações sobre os gases

Para conhecer todos os fluxos dos gases no CDQ, são necessários conhecer a vazão e a composição de cada um deles.

A composição média dos gases adotada para este trabalho foi determinada a partir de CST, 1993d. Entretanto, para o sistema de alívio superior (*bleeder superior*), foi utilizada a composição apresentada em CST, 1984b¹.

A vazão do gás circulante é estimada através do balanço de energia aplicado ao VC - caldeira e está dentro da faixa de projeto apresentada em CST, 1993a.

As vazões dos sistemas de alívio podem ser medidas através de um tubo de Pitot na saída dos mesmos. Apesar de ser um procedimento viável, não foi possível realizar tais medidas, mesmo porque, seria necessário um ensaio completo para os vários regimes de operação.

Não sendo possível medir as vazões, optou-se por estabelecer que a vazão no sistema de alívio inferior fosse proporcional a do gás circulante. Esta vazão por sua vez, está vinculada diretamente à produção de vapor na caldeira de recuperação e é determinada através de um balanço (aproximado) de energia no VC-Caldeira,

$$\dot{Q}^* \equiv \left[\frac{\dot{m}_v (h_v - h_a)}{\rho_g (h_{in} - h_{out})} \right]^* \quad (2.4)a$$

$$\dot{Q}^* \equiv 101.136,40 \frac{\text{Nm}^3}{\text{h}}$$

$$\text{e } \dot{Q}_{inf}^* = 2201 \frac{\text{Nm}^3}{\text{h}} \quad (2.4)b$$

onde, ' * ' refere-se às condições operacionais apresentadas em CST, 1984b.

Fazendo uma correlação de proporcionalidade entre as duas vazões, tem-se :

$$\dot{Q}_{inf} = \frac{2201}{101.136,40} \dot{Q} \quad (2.5)$$

A vazão de gás no sistema de alívio superior (*Bleeder superior*) está fortemente ligada ao carregamento de coque. Porém, para uma primeira aproximação, assume-se o mesmo valor de CST, 1984b.

$$\dot{Q}_{sup} = \dot{Q}_{sup}^* = 454,5 \frac{\text{Nm}^3}{\text{h}}$$

Além de determinar as vazões dos gases, também foi necessário estabelecer quais seriam as composições adotadas doravante neste trabalho. Para o gás do sistema do *bleeder inferior*, foi

¹ O sistema deverá passar por mudanças no futuro próximo e recomenda-se realizar novas medições.

utilizado o procedimento apresentado no início desta seção com os dados também de CST, 1993d. Assim,

Tabela 2.6. Composição do gás de alívio no bleeder inferior (determinada)

Elemento	CO	H ₂	CO ₂	O ₂	N ₂	H ₂ O(v)
Teor (%)	14,65	3,98	7,55	0,36	71,9	1,56

Não há acompanhamento da composição dos gases do *bleeder superior* e por isso adotou-se a composição apresentada no ensaio CST, 1984b.

Tabela 2.7. Composição do gás de alívio no Bleeder superior (CST, 1984b)

Elemento	CO	H ₂	CO ₂	O ₂	N ₂	H ₂ O(v)
Teor (%)	20,38	5,25	3,60	0,96	68,5	1,31

Assume-se a hipótese de que pouca dissociação ocorre no gás circulante durante sua passagem através dos trocadores de calor da caldeira de recuperação (Figura A.1). A composição para os fluxos de gás circulante conforme indicada na Figura 2.2 é a mesma do gás de exaustão no *Bleeder Inferior*. (fluxo (5) na Figura 2.1). Estas composições serão adotadas em todo o trabalho.

As propriedades termodinâmicas dos gases foram obtidas das tabelas geralmente encontradas na literatura (e.g. Van Wylen & Sontag, 1976 e Holman, 1988).

Para cálculo das exergias dos gases, utiliza-se o modelo de gás ideal e faz-se uso da metodologia apresentada nos apêndices A.3 e D.3 de Kotas, 1985 com as Equações (2.6), (2.7) e (2.8).

$$\tilde{\epsilon}_{\text{ogás}} = \sum_k x_k \tilde{\epsilon}_{0k} + \mathfrak{R} \cdot T_0 \sum_k x_k \cdot \ln x_k \quad (2.6)$$

$$\tilde{\epsilon}_{\text{gás}}^{im} = (\theta_{\text{gás}} - \theta_0) \sum_k \eta_k \cdot \tilde{c}_{p_k}^e \quad (2.7)$$

onde,

$$\tilde{c}_p^e \equiv \frac{1}{T - T^0} \cdot \left[\int_{T^0}^T \tilde{c}_p \cdot dT - T^0 \cdot \int_{T^0}^T \frac{\tilde{c}_p}{T} dT \right] \quad (2.8)$$

2.1.4 - Coque (propriedades)

A composição química do coque varia muito, entretanto para este estudo seleciona-se uma composição média do utilizado naquele dia considerado representativo, ou seja, para a análise é baseada em Sanchas da Cruz, 1993b (23 de setembro). Assim,

Tabela 2.8. Composição mássica adotada para o coque (Sanchas da Cruz, 1993b)

Carbono	Enxofre	Cinzas
85,1 %	0,64 %	14,26 %

Uma das maiores dificuldades ao analisar processos industriais está em conhecer as propriedades físico-químicas das substâncias envolvidas. Possivelmente, a mais importante seja o calor específico, principalmente se a substância estiver no estado sólido. Para isso, procurou-se co-relações para o calor específico do coque.

Em duas referências foram encontradas expressões empíricas para o calor específico do carvão (Rodriguez, 1983 e Shieh & Fan, 1982) e valores médios isolados para faixas de temperaturas (Perry & Chilton, 1973). Haviam também dados experimentais do próprio coque produzido na CST obtidos utilizando um calorímetro (CST, 1984b), que a princípio não supria as necessidades, pois não havia informações a respeito da composição do coque.

Era necessário conhecer o comportamento do calor específico, c , com a temperatura. Para isso foi desenvolvida uma expressão (Equação (2.9)), aproveitando aqueles valores disponíveis em CST, 1984b e fez-se comparações com as outras fontes. Os resultados obtidos da regressão linear são apresentados abaixo :

$$c(t) = a \cdot t + b \quad (2.9)$$

onde :

$$a = 0,000167 \left[\frac{\text{kcal}}{\text{kg}^\circ\text{C}^2} \text{ ou } \frac{\text{kcal}}{\text{kgK}^2} \right] \quad \text{e} \quad b = 0.18617 \left[\frac{\text{kcal}}{\text{kg}^\circ\text{C}} \right]$$

com um coeficiente de determinação múltipla (R^2) de 98,9 % ;

A Figura 2.3 ilustra o comportamento do calor específico através das expressões encontradas na literatura e da Equação (2.9). No caso de expressões desenvolvidas para o carvão, atribui-se uma quantidade nula de matéria volátil que supostamente foi extraída. Esta aproximação é muito razoável, pois este é o propósito do processo de coqueificação do carvão.

Observando a Figura 2.3 conclui-se que a expressão da Equação (2.9) proposta neste trabalho, é muito satisfatória, pois está em boa concordância com a literatura. Esta análise fornece base suficiente para utilizar o calor específico para expressar as propriedades termodinâmicas do coque.

Como foi visto, o coque é composto também de cinzas e alguma umidade. Para se determinar algumas propriedades termodinâmicas, considera-se que as entalpias das cinzas e da umidade a T_0 e P_0 (Singh *et al.*, 1980), e o efeito da pressão nas propriedades do coque são desprezíveis, o que não ocorre ao mudar-se a temperatura ; a influência das cinzas e da umidade

se tornam relevantes. Como o composto utilizado na expressão anterior já incluía cinzas e umidade, este efeito é também abordado pela expressão desenvolvida para o calor específico. A seguir, apresenta-se o desenvolvimento da expressão para a entalpia :

Por se tratar de um material incompressível, a aproximação $c = \frac{dh}{dt}$ é válida e, integrando para uma entalpia de referência, $h_{ref} = 0 \text{ kJ/kg}$ a temperatura, $t_0 = 25 \text{ }^\circ\text{C}$, tem-se :

$$h(t) = (a \cdot t^2 + b \cdot t + C1) \times 4,187 \text{ [kJ / kg]} \tag{2.10)a}$$

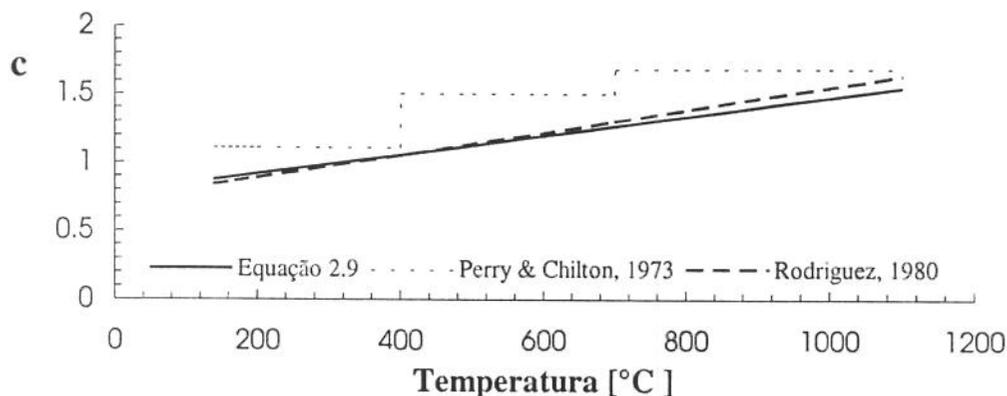


Figura 2.3. Expressões para o calor específico do coque. ¹

onde, $C1 = -4,7586 \text{ [kcal / kg]}$ (2.10)b

Em caso de se integrar para a temperatura absoluta,

$$h_{ref}(T_{ref} = 298,15 \text{ K}) = 0 \tag{2.10)c}$$

o coeficiente b tem outro valor : $b_2 = 0,140496 \left[\frac{\text{kcal}}{\text{kgK}} \right]$

Re-escrevendo a expressão para entalpia, agora,

$$h(T) = (a \cdot T^2 + b_2 \cdot T + C2) \times 4,187 \text{ [kJ / kg K]} \tag{2.10)d}$$

onde $C2 = -56,7341 \text{ [kcal / kg]}$ (2.10)e

Este trabalho não se limita à análise energética, tornando-se necessário determinar as propriedades associadas à exergia. E para tanto, desenvolve-se uma expressão para a variação da entropia em função da temperatura.

Das relações de Maxwell para a Termodinâmica,

$$dU = TdS - pdV \tag{2.11)a}$$

¹ Nem todas composições do carvão foram apresentadas nas referências.

na qual o último termo se anula para as substâncias incompressíveis, então :

$$dU = TdS \quad (2.11)b$$

A variação da energia interna específica, du , pode ser expressa pelo calor específico a volume contante, que para substâncias sólidas é idêntico ao de a pressão constante. Assim,

$$du = cdT \quad (2.12)$$

A entropia é função da pressão e da temperatura das substâncias, mas para as incompressíveis, ela se torna função exclusiva da temperatura.

$$ds = \frac{cdT}{T} \quad (2.13)a$$

Utilizando a 3ª Lei da Termodinâmica e a Equação (2.9) para o calor específico do coque, pode-se expressar sua entropia da seguinte forma :

$$\bar{s}(T) = \bar{s}^o(T_0) + \frac{1}{M_{\text{coque}}} \int_{T_0}^T \frac{(aT+b)}{T} dT \quad (2.13)b$$

$$s(T) - s^o(T_0) = (a \cdot T + b \ln T - C3) \times 4,187 \quad [\text{kJ} / \text{kg K}] \quad (2.13)c$$

$$C3 = 0,8503 \quad [\text{kcal} / \text{kg K}] \quad (2.13)d$$

O objetivo de haver desenvolvido esta expressão, é o de utilizá-la para cálculo da exergia termo-mecânica, ou física, do coque. Desta forma ao aplicarmos esta expressão (Equação (2.13)c) e aquela desenvolvida para a entalpia (Equação (2.10d)), na expressão para o cálculo da exergia física (Equação (2.14)). Obtém se a Equação (2.15)a para coque.

$$\varepsilon^{ph} = (h - h_0) - T_0(s - s_0) \quad (2.14)$$

$$\varepsilon^{ph} = aT^2 + bT - T_0(aT + b \ln T) - C4 \quad \times 4,187 \quad (2.15)a$$

onde ,

$$C4 = aT_0^2 + bT_0 - T_0(aT_0 + b \ln T_0) \quad (2.15)b$$

$$C4 = -196,77 \quad \times 4,187 \quad [\text{kJ} / \text{kg}]$$

Desta forma pode-se determinar qualquer variação na exergia física do coque. O processo em estudo está sujeito a reações químicas e, portanto há destruição de outra componente da exergia total, a química.

Obter não só a exergia, mas qualquer outra propriedade termo-química de substâncias de estrutura complexa, sempre foi uma tarefa difícil. Relações empíricas e valores tabelados são propostos, mas raramente atendem ao específicos casos.

Em consulta à literatura, foram resalta-se : Rodriguez, 1980; Singh et al, 1980 e Shieh & Fan, 1982.

Em Rodriguez, 1983 são apresentadas as expressões desenvolvidas por Szargut & Styrylska em 1964, que propõem correlações entre o poder calorífico inferior, P.C.I., e a exergia química de hidrocarbonetos sólidos, líquidos ou gasosos.

Para combustíveis sólidos sem enxofre e com baixa oxidação, o que melhor corresponde ao coque em estudo, utiliza-se a expressão abaixo:

$$\frac{\epsilon_0}{\text{P.C.I.}} = 1,0438 + 0,0158 \frac{H}{C} + 0,813 \frac{O}{C} + 0,0471 \frac{N}{C} \quad (2.16)$$

que utiliza as relações de massa entre os constituintes e gera um desvio médio de $\pm 0,46 \%$.

Correlações entre P.C.I. e exergia química também podem ser encontradas em Kotas, 1985, lá denominadas ϕ . Apesar de simplificada, a questão agora transfere-se a determinar o P.C.I. da substância, o que nem sempre é uma tarefa simples.

Outra expressão semelhante é sugerida para hidrocarbonetos em Shieh e Fan, 1982. Não há informações suficientes para saber para quais hidrocarbonetos ela é válida. Esta expressão não foi utilizada neste trabalho, entretanto foi possível lá obter a exergia química de um coque "breeze" estudado por Domalshi *et al* em 1978 para ser usado como referência.

$$\epsilon_0 = 8.188,38 \quad [\text{kcal / h}] \quad (2.17)$$

A terceira expressão obtida é sugerida em Singh et al, 1980. Considerada empírica, é recomendada para carvão bruto, alcatrão e carvão, (Equação (2.18)a).

$$\epsilon_0 = 175,60 + 58,04n - 112,37m + 11,88p + 249,17q + 1,065 \ln \left[\frac{0,2035^{\left(1 + \frac{n}{4} - \frac{m}{2} + q\right)}}{0,6003 \cdot 0,7649^{\frac{p}{2}}} \right] \quad [10^3 \text{ Btu / lbmol}] \quad (2.18)a$$

para um composto $\text{CH}_n\text{O}_m\text{N}_p\text{S}_q$ sem menção sobre o desvio médio. Esta expressão foi testada para um coque com 88,9 % de carbono fixo e 0,9 % de enxofre¹ e obteve-se o seguinte valor :

$$\epsilon_0 = 7211,43 \quad [\text{kcal / h}] \quad (2.18)b$$

Pode-se observar que todas as expressões anteriores são genéricas e admitem desvios médios.

¹ Composição mais típica.

Sabendo-se que a exergia química das cinzas em T_0 e P_0 é nula, $\epsilon_0 = 0$ (Singh et al,1980 e Rodriguez, 1983), é proposto utilizar a ponderação por massa dos compostos do coque, da seguinte maneira :

$$\epsilon_0 = \frac{m'_{\text{coque}}}{m_{\text{coque}}} \epsilon_0' \quad (2.19)a$$

onde m'_{coque} é toda a parcela do coque com excessão às cinzas. Para este estudo, esta parcela é formada somente de carbono e enxofre numa mistura homogênea. Calcula-se a exergia química da parte útil do coque do seguinte modo :

$$\tilde{\epsilon}_0 = c\tilde{\epsilon}_c^0 + s\tilde{\epsilon}_s^0 + T_0 \cdot \mathfrak{R} \cdot \sum_i x_i \ln(x_i) \quad (2.19)b$$

onde , $c \rightarrow$ % molar de carbono fixo no coque útil ;

$s \rightarrow$ % molar de enxofre no coque útil ;

$x_i \rightarrow$ concentração molar ;

Se utilizada para o mesmo coque testado na expressão anterior, Equação (2.18), obtém-se:

$$\epsilon_0 = 7.316,85 \text{ [kcal / kg]} \quad (2.19)c$$

A Tabela seguinte apresenta os três valores disponíveis para a exergia química :

Tabela 2.9. Comparação dos valores para exergia química do coque

Fonte	Exergia química do coque
Singh <i>et al</i> ,1980 (ϵ_0^1)	7.211,43
Equação (2.19) (ϵ_0^2)	7.316,85
Shieh & Fan, 1982 (ϵ_0^3)	8.188,38

É difícil afirmar qual dos três valores é o mais adequado para o coque estudado neste trabalho. Os desvios percentuais entre ϵ_0^1 e ϵ_0^2 , e ϵ_0^3 e ϵ_0^2 são :

$$\frac{|\epsilon_0^2 - \epsilon_0^1|}{\epsilon_0^2} = 1,44 \% \quad \text{e} \quad \frac{|\epsilon_0^3 - \epsilon_0^2|}{\epsilon_0^2} = 11,91 \%$$

O valor obtido da Equação (2.19) utiliza o teor de carbono fixo conhecido e fornece um resultado intermediário. Deste modo, optou-se por utilizar esta expressão para o cálculo da exergia química do coque na análise a ser desenvolvida neste trabalho.

Para a composição selecionada (Tabela 2.8), a exergia química do coque é :

$$\epsilon_0 = 6.991,52 \text{ [kcal / kg]} \quad (2.20)$$

(Vide Tabela B.10 -Apêndice B, página 4)

Nota : Num estudo preliminar constatou-se que as incertezas associadas às medições não trariam muito benefício à análise, pois em muitos casos a ordem de grandeza era a mesma das próprias medições.

2.2 - Balanço de massa

O balanço de massa no CDQ pode ser dividido em três partes básicas : coque, água (vapor) e gases. O procedimento básico para processamento dos dados foi descrito na seção anterior e algumas outras considerações serão adicionadas.

2.2.1 - Água e Vapor

O balanço de água é realizado na central de abastecimento de água do CDQ, que atende as cinco câmaras de extinção. O diagrama CST, 1993b (Figura A.2) ilustra todo o circuito de água e os dados foram obtidos da planilha CST, 1993e. Assim tem-se :

$$\dot{m}_{21} + \dot{m}_{23} = \dot{m}_{22} + \dot{m}_{20} + \dot{m}_{24} \quad (2.21)$$

onde os índices equivalem a :

- 20. Água para as caldeiras ($5 \times m_{15}$);
- 21. Água desmineralizada para os desaeradores;
- 22. Água desaerada para seção de produtos químicos;
- 23. Vapor (condensado) a baixa pressão;
- 24. Água para os resfriadores dos coletores de pó;

E, realizando o procedimento geral apresentado nas Equações (2.1) e (2.2), chega-se aos valores apresentados na Tabela abaixo :

Tabela 2.10. Balanço de água no CDQ

	m_{21}	m_{22}	m_{20}	m_{23}	m_{24}
ton / h	115.5	8.6	115.19	16.19	8.75

Analogamente faz se uso do diagrama da central de distribuição do vapor do CDQ, (CST, 1993c -Figura A.3) e obtem-se :

$$\dot{m}_{28} = \dot{m}_{27} + \dot{m}_{26} + \dot{m}_{25} \quad (2.22)$$

onde os índices equivalem a ,

- 25. Vapor para os ejetores ;
- 26. Vapor para a seção de produtos químicos ;
- 27. Vapor condensado a baixa pressão (sopradores) = \dot{m}_{23} ;
- 28. Vapor total produzido ($5 \times m_{16}$);

E chega-se aos seguintes resultados :

Tabela 2.11. Balanço de vapor de água do CDQ

	m_{25}	m_{26}	m_{27}	m_{28}
ton / h	3.0	91.33	16.19	110.52

O desvio relativo no balanço de água-vapor é :

$$\frac{|\Delta m|}{m_{21}} = 0,74 \%$$

2.2.2 - Coque

O balanço de coque consiste dos fluxos da sua carga e descarga, dos despoeiramentos e de reações presentes na câmara de extinção. De acordo com os volumes de controle definidos de acordo com as Figuras 2.1 e 2.2, o balanço fica equacionado da seguinte forma:

$$\dot{m}_i = \dot{m}_e + \dot{m}_{cicl} + \dot{m}_{col} + \dot{m}_r + \dot{m}_{desp} \quad (2.23)$$

onde os índices representam :

i	Coque incandescente ;
e	Coque extinto ;
cicl	Finos dos ciclones ;
col	Finos dos coletores ;
r	Coque de combustão ;
desp	Finos dos sistemas de despoeiramento ;

O balanço de coque apresentado na Tabela 2.12 foi obtido tratando os dados conforme o procedimento descrito na seção 2.1.1.2 deste capítulo

A parcela \dot{m}_r foi estimada através da Equação (1.11). A justificativa de utilizá-la está no acompanhamento a nível operacional por parte da CST.

Tabela 2.12. Coque

<i>Fluxo de massa</i>	kg/h
m_i	38.133
m_e	- 37.200
m_{finos}	- 364,4
m_r	- 149,77
Total	418,83

O desvio no balanço de massa do coque é :

$$\frac{|\Delta \dot{m}|}{\dot{m}_{inc}} \cdot 100 = 1,13 \%$$

O balanço anterior é de maior utilidade operacional que analítica. Desta forma, para o estudo termodinâmico, o valor \dot{m}_r , é determinado através dos balanços de espécies compostas pelo elemento Carbono. Abaixo são apresentados os procedimentos para chegar \dot{m}_r , desta vez incluindo os dois fluxos de gases para o exterior.

No caso de uma vazão horária média para o gás circulante, todo o carbono desprendido do coque escapa ao ambiente externo através dos fluxos de CO e CO₂ nos sistemas de alívio. Assim, sabendo-se que o coque é a única fonte de carbono no sistema, estima-se sua perda média horária considerando seu teor de *carbono-fixado* 85.1% (Tabela 2.8)

Das Tabelas 2.6 e 2.7 tem-se,

Tabela 2.13. Fluxo de Carbono no *bleeder inferior*

Substância	Nm ³ /h *	kmol/h	C [kg/h]
CO	214,97	9,597	115,16
CO ₂	110,77	4,945	59,344
Total carbono m' _c			174,504

* A vazão total do gás de alívio é determinada de acordo com o balanço de energia.

Repetindo o procedimento anterior para o *bleeder superior*, resultam os dados mostrados na Tabela 2.14.

Tabela 2.14. Fluxo de Carbono no *bleeder superior*

Substância	Nm ³ /h	kmol/h	C [kg/h]
CO	92,63	4,135	49,622
CO ₂	16,36	0,730	8,765
Total carbono m'' _c			58,387

Agora estima-se a quantidade de coque envolvida nas reações químicas através da expressão abaixo :

$$\dot{m}_r = \frac{m'_c + m''_c}{0,851} \quad (2.24)$$

$$\dot{m}_r = 273,67 \quad [\text{kg} / \text{h}]$$

De posse deste valor, pode-se reconstruir a Tabela anterior do balanço de coque (Tabela 2.12) e o erro relativo.

Tabela 2.15. Coque

<i>Fluxo de Massa</i>	kg/h
m_i	38.133
m_e	- 37.200
m_{finos}	- 364,4
m_r	- 273,67
Total	294,93

O novo desvio no balanço de massa do coque é :

$$\frac{|\Delta \dot{m}|}{\dot{m}_{inc}} \cdot 100 = 0,77 \%$$

Para os balanços de 1ª e 2ª Leis serão utilizado os valores da Tabela 2.15.

2.2.3 - Gases

São três os fluxos de gases presentes no CDQ : gás de resfriamento (circulante) e dos dois sistemas de alívio denominados *bleeder inferior* e *superior*. Para se determinar a vazão e composição de cada fluxo de gás, também fez-se uso da planilha CST, 1993d , com apoio do ensaio de CST, 1984b. As composições adotadas e as considerações a respeito foram apresentadas na seção anterior.

Conhecidos os teores de cada substância dos gases de alívio, e portanto do gás circulante, resta determinar o fluxo de ar que entra para a combustão e o fluxo de N_2 puro para a diluição no gás circulante.

Observa-se que é possível realizar um balanço do elemento oxigênio, O , no VC - câmara e assim determinar o fluxo de ar, assumindo que este seja sua única fonte.

Deste modo, da Tabela 2.6 apresenta-se a Tabela abaixo :

Tabela 2.16. Fluxo do elemento oxigênio no bleeder inferior

Substâncias	CO	CO ₂	O ₂	H ₂ O	Total
O [kg /h]	153,55	158,24	7,55	16,33	335,68

Da mesma maneira para o sistema de alívio superior,

Tabela 2.17. Fluxo do elemento oxigênio no bleeder superior

Substâncias	CO	CO ₂	O ₂	H ₂ O	Total
O [kg /h]	75,84	46,72	12,48	4,32	139,36

Totalizando,

$$\begin{aligned}\dot{n}_{O_2} &= \frac{335,68 + 139,36}{2} \frac{1}{32} \\ &= 7,4225 \quad [\text{kmol} / \text{h}]\end{aligned}\quad (2.25)$$

Então para o fluxo de ar seco que entra no VC - câmara,

$$\dot{n}_{N_2} = 3,76\dot{n}_{O_2} = 27,91 \quad [\text{kmol} / \text{h}] \quad (2.26)$$

$$\begin{aligned}\dot{n}_{ar} &= \dot{n}_{O_2} + 3,76 \cdot \dot{n}_{N_2} \\ &= 35,33 \quad [\text{kmol} / \text{h}]\end{aligned}\quad (2.27)$$

Estimado o fluxo de ar, pode-se calcular a quantidade de nitrogênio injetado no gás circulante para diluição através do seu balanço.

Através da composição dos gases (Tabelas 2.6 & 2.7) e da Equação (2.26), pode se obter a Tabela abaixo :

Tabela 2.18. Fluxos de nitrogênio no CDQ.

Fonte	Bleeder Inf.	Bleeder Sup.	ar	N ₂ (puro)
N ₂ [kmol / h]	-47,1	-13,9	27,91	33,09

Com Tabela anterior conclui-se o balanço de gases em todo o CDQ.

Depois de realizados todos os cálculos anteriores, verifica-os comparando-se o valor obtido para o nitrogênio puro de injeção (Tabela 2.18), e o obtido da média horária (mensal) extraído da planilha CST, 1993e. E, da mesma forma, para o valor do fluxo de ar calculado e encontrado através de medição em CST, 1984b.

Tabela 2.19. Comparação de N₂ injetado no CDQ [Nm³ / h].

Calculado	Média mensal CST, 1993e
741,25	419,8

Há uma diferença razoável entre os valores estimados e a média mensal. Entretanto, muitos fatores internos ou externos ao sistema influenciam a média, de tal sorte que apenas em alcançar a mesma ordem de grandeza¹, principalmente para o fluxo de ar (Tabela 2.20) permite concluir que a metodologia é satisfatória e que não prejudica uma análise como a que se propõe neste trabalho.

Tabela 2.20. Comparação do fluxo de ar [Nm³ / h].

Calculado	CST, 1984b
791	638

¹ Em processos industriais, principalmente o deste estudo, as paradas e outros tipos de ocorrências operacionais afetam a média mensal, às vezes tornando-a não representativa *fisicamente*.

2.3 - Balanço de Energia

A Equação básica para o balanço de 1ª Lei num VC conforme encontrada na literatura é a seguinte:

$$\dot{H}_R - \dot{H}_P + \dot{Q}_{VC} - \dot{W}_{VC} = 0 \quad (2.28)$$

Esta Equação é aplicada aos dois volumes de controle definidos anteriormente nas Figuras 2.1 e 2.2.

2.3.1 - Balanço para o VC - câmara

Conforme a Figura 2.1, os fluxos de energia associados à entrada de massa no volume de controle *câmara*, são

$$\begin{aligned} \dot{H}_R = & \dot{n}_{coque} (\bar{h}_f^o + \Delta\bar{h})_{1050^\circ C, 1atm} + \dot{n}_r (\bar{h}_f^o + \Delta\bar{h})_{1050^\circ C, 1atm} + \dot{n}_{N_2} (\bar{h}_f^o + \Delta\bar{h})_{T,P} + \\ & \dot{n}_{ar} \left[(\bar{h}_f^o + \Delta\bar{h})_{O_2} + 3,76 (\bar{h}_f^o + \Delta\bar{h})_{N_2} \right]_{25^\circ C, 1atm} + \dot{n}_{gas} (\bar{h}_f^o + \Delta\bar{h})_{T,P} \end{aligned} \quad (2.29)$$

Para os "produtos de combustão" (saídas) do VC - *câmara* :

$$\begin{aligned} \dot{H}_P = & \sum_i^5 \dot{n}_i (\bar{h}_f^o + \Delta\bar{h})_{(T,P)_i} + \dot{n}_{gas} (\bar{h}_f^o + \Delta\bar{h})_{T,P} + \\ & \dot{n}_{inf} (\bar{h}_f^o + \Delta\bar{h})_{T,P} + \dot{n}_{sup} (\bar{h}_f^o + \Delta\bar{h})_{T,P} \end{aligned} \quad (2.30)$$

onde o somatório no lado direito refere-se às cinco correntes de coque, m_2 , m_6 , m_7 , m_9 , m_{10} da Tabela 2.4.

De um modo geral, as paredes dos CDQ's são refratárias e isolantes e as condições convectivas externas não variam muito, o que permitiu adotar o valor apresentado no ensaio CST, 1984b para o fluxo de calor que o volume de controle cede ao ambiente. Então,

$$\dot{Q}_{VC} = 219,38 \quad [\text{kW}]$$

A única interação de trabalho mecânico deste volume de controle com o exterior ocorre através da potência elétrica consumida para acionar os sopradores do gás circulante. Utilizando a vazão do gás circulante calculada pela Equação (2.4) obtém o seguinte resultado:

$$\begin{aligned}\dot{W}_{vc} &= \frac{\Delta p \cdot \dot{Q}}{\eta_b} \\ &= 138,75 \quad [\text{kW}]\end{aligned}\quad (2.31)$$

onde $\Delta p = 6563,9 \text{ Pa}^1$, é perda de carga de projeto apresentada em CST, 1993a e , η_b , eficiência típica para o soprador, neste caso, de 95 % (Peters & Timmerhaus, 1991).

A seguir apresenta-se o desenvolvimento de cada termo das equações anteriores (2.29) e (2.30).

2.3.1.1 - Coque

Os fluxos de energia associados ao coque podem ser sub-divididos conforme a Tabela (2.15). Devido às incertezas de medidas no balanço de massa de coque, foi necessário adotar o seguinte procedimento. Primeiramente, considerou-se somente os fluxos de entalpia referente à diferença de temperatura, a seguir, avaliou-se a energia liberada das reações com coque no interior da câmara de extinção (Equações 1.8).

Na Equação (2.29) (entradas no VC-câmara) duas parcelas de coque estão presentes, uma associada ao coque incandescente (insensível às reações químicas), $\dot{n}_{coque} = \dot{n}_{inc} - \dot{n}_r$, e outra referente a quantia que reage no interior da câmara (Equação (2.24)), portanto:

$$\begin{aligned}\dot{H}_{coque} &= \dot{n}_{coque} (\bar{h}_f^o + \Delta\bar{h})_{1050, 1 \text{ atm}} \\ &= \dot{m}_{coque} (0 + \Delta h)\end{aligned}\quad (2.32)a$$

Fazendo uso da Equação (2.10) para entalpia:

$$\begin{aligned}\dot{H}_{coque} &= \dot{m}_{coque} \cdot h_{inc} \\ &= 16.522,76 \quad [\text{kW}]\end{aligned}\quad (2.32)b$$

As entalpias das cinzas e da umidade são consideradas desprezíveis (Singh *et al*, 1980) e portanto não contribuem energeticamente para o balanço. Da Tabela 2.8 exclui-se de \dot{n}_r a quantidade de cinzas (14.26%) e uma vez que o teor de enxofre é desprezível, o coque consiste basicamente de carbono grafítico. A segunda parcela associada ao coque é, então :

$$\begin{aligned}\dot{H}_r &= \dot{n}_r (\bar{h}_f^o + \Delta\bar{h})_{1050, 1 \text{ atm}} \\ &= \dot{m}'_r (0 + 1.569,44) = 101,53 \quad [\text{kW}]\end{aligned}\quad (2.32)c$$

¹ $\Delta p = 670 \text{ mmH}_2\text{O}$

Os fluxos de energia associados ao coque que saem do VC - câmara podem ser calculados do mesmo modo. Assim apresenta-se todos os fluxos relacionados ao coque neste volume de controle.

Tabela 2.21. Energia associada ao coque.

Local	vazão [kg / h]	Temperatura [°C]	Entalpia [kJ/kg]	Energia [kW]
Carga, m_1	37.900,11	1.050	1.569,44	+16.522,76
Descarga, m_2	37.200	180	143,04	1.478,08
Finos ($m_6 + m_7$)*	277,4	830	1.108,75	85,43
Desp Carga, m_9	26,1	1.050	1.569,44	11,37
Desp Descarga, m_{10}	61	180	143,04	2,42
Reações Químicas	232,89			+101,53
Sub total			+	15.046,99

* Para o VC - câmara, o material particulado que cruza a superfície de controle a 830 °C arrastado pelo gás circulante.

2.3.1.2 - Gás circulante

Primeiramente decompõe-se o gás circulante nas substâncias apresentadas na Tabela 2.6¹. Assim, sua parcela no balanço de energia, tanto como reagentes como produtos se torna,

$$\begin{aligned} \dot{n}_{gás}(\bar{h}_f^o + \Delta\bar{h})_{T,P} = & \dot{n}_{N_2}(\bar{h}_f^o + \Delta\bar{h})_{T,P} + \dot{n}_{CO}(\bar{h}_f^o + \Delta\bar{h})_{T,P} + \\ & \dot{n}_{CO_2}(\bar{h}_f^o + \Delta\bar{h})_{T,P} + \dot{n}_{O_2}(\bar{h}_f^o + \Delta\bar{h})_{T,P} + \\ & \dot{n}_{H_2}(\bar{h}_f^o + \Delta\bar{h})_{T,P} + \dot{n}_{H_2O}(\bar{h}_f^o + \Delta\bar{h})_{T,P} \end{aligned} \quad (2.33)$$

A vazão do gás circulante é determinada conforme procedimento já apresentado (Equação (2.4)). Faz-se uso das tabelas de propriedades termodinâmicas para as substâncias acima nas condições de entrada e saída apresentadas abaixo (CST, 1993d) :

Tabela 2.22. Condições de entrada e saída para o gás ciculante.

67.424,7 Nm ³ / h	P [Pa] *	T [°C]
ENTRADA (m_3)	1.273,59	146
SAÍDA (m_4)	-690,67	750

* 130 e - 70,5 mmH₂O respectivamente.

¹ A composição adotada na saída e entrada do VC - câmara, por ausência de medidores, é a mesma do gás do Bleeder Inferior. Esta hipótese é coerente pois praticamente não há reações químicas ao longo do circuito da caldeira pois os teores de O₂ são muito baixos. (Vide Figura A.1 e Tabela 2.6)

Consideram-se as parcelas de energia cinética e potencial desprezíveis. Em resumo, são apresentadas as tabelas abaixo :

Tabela 2.23. Fluxo de energia associado ao gás circulante (entrada m_3 .)

Elemento	vazão [kmol / h]	Entalpia [kJ/kmol]	Entalpia [kW]
H ₂	119,80	3.514,64	116,96
CO	440,97	-106.994,17	-13.105,92
CO ₂	227,26	-388.707,71	-24.538,03
O ₂	10,84	3.606,98	10,85
N ₂	2.164,22	3.495,74	2.101,54
H ₂ O	46,96	-237.711,54	-3.100,60
Sub total	3.010,04		-38.515,18

Tabela 2.24. Fluxo de energia associado ao gás circulante (saída m_4).

Elemento	vazão [kmol / h]	Entalpia [kJ/kmol]	Entalpia [kW]
H ₂	119,80	21.366,98	711,71
CO	440,97	-88.071,72	-10.788,07
CO ₂	227,26	-358.849,62	-22.653,17
O ₂	10,84	23.517,71	70,79
N ₂	2.164,22	22.458,28	13.501,28
H ₂ O	46,96	-214.879,42	-2.802,78
Sub total	3.010,04		-21.960,24

Assim, tem-se todo o fluxo de energia associado ao gás circulante.

2.3.1.3 - Sistemas de alívio (*bleeders*)

Os sistemas de alívio trabalham de modo a reduzir a pressão interna criada pela combustão dos gases e a pela injeção de N₂ . Não serão consideradas as parcelas relativas a energia cinética dos gases.

As pressões e temperaturas dos fluxos são apresentadas na Tabela abaixo :

Tabela 2.25. Condições de saída para os sistemas de alívio.

	P [atm]	T [oC]
INFERIOR (m_5)	1	146 *
SUPERIOR (m_8)	1	406**

* CST, 1993d

** CST, 1984b

De modo semelhante ao procedimento realizado para o gás circulante, estima-se a vazão expelida pelo *bleeder inferior* pela Equação (2.5) :

$$\dot{Q}_{\text{inf}} = 1.467,34 \quad [\text{Nm}^3 / \text{h}]$$

E o fluxo de energia é apresentado na Tabela abaixo :

Tabela 2.26. Fluxo de energia associado ao *Bleeder Inferior* (m_5)

Elemento	vazão [kmol / h]	Entalpia [kJ/kmol]	Entalpia [kW]
H ₂	2,60	3.514,64	2,55
CO	9,60	-106.994,17	-285,22
CO ₂	4,94	-388.707,71	-534,01
O ₂	0,24	3.606,98	0,24
N ₂	47,10	3.495,74	45,74
H ₂ O	1,02	-237.711,54	-67,48
Sub total	65,51		-838,19

E para o sistema de alívio superior :

Tabela 2.27. Fluxo de energia associado *Bleeder Superior* (m_8)

Local	vazão [kmol / h]	Entalpia [kJ/kmol]	Entalpia [kW]
H ₂	1,06	11.136,01	3,29
CO	4,13	-99.154,93	-113,89
CO ₂	0,73	-376.781,07	-76,45
O ₂	0,19	11.818,12	0,64
N ₂	13,89	11.298,57	43,62
H ₂ O	0,26	-228.410,79	-16,86
Sub total	20,29		-159,65

2.3.1.4 - Totalização

Os fluxos de energia associados ao ar e ao nitrogênio puro, considerados na condição ambiente T_0 e P_0 , são nulos.

Com todos os fluxos calculados e os aplicando na Equação do balanço de energia (Equação (2.28)), pode-se chegar aos resultados na Tabela 2.28.

Tabela 2.28. Balanço de Energia para VC - câmara

Sub totais	Energia [kW]
\dot{H}_R	-21.890,89
\dot{H}_P	-21.380,78
Calor p/ ambiente	-219,38
Potência elétrica do soprador	-138,75
Total	-590,74

2.3.2 - Balanço para VC - caldeira

O volume de controle VC - caldeira se caracteriza pela transferência da energia dos gás circulante à água e desta maneira gerando vapor (Figura 2.2).

A Equação de balanço para este VC é mais simples que o da câmara pois não se encontram reações químicas relevantes no seu interior.

Da mesma maneira que o para o VC - câmara, o fluxo de calor adotado para o ambiente, é aquele apresentado em CST, 1984b.

A Equação da energia fica da seguinte maneira (vide Tabela 2.5) :

$$\begin{aligned} \dot{m}_a h_a - \dot{m}_v h_v - \dot{m}_{sat} h_{sat} + \dot{m}_g (h_{in} - h_{out}) + \\ (\dot{m}_{col} + \dot{m}_{cicl}) h_{col} - \dot{m}_{col} h_{col} - \dot{m}_{cicl} h_{cicl} + \dot{Q}_{VC} = 0 \end{aligned} \quad (2.34)$$

onde,

$$\dot{m}_{sat} = \dot{m}_a - \dot{m}_v \quad (2.35)$$

Pode-se observar que a energia líquida que se transfere do gás circulante ao vapor, é a mesma que o gás recebeu do coque. Permite-se assim, fazer uso das Tabelas 2.26 e 2.27 sobre o gás circulante.

Para a água e vapor os fluxos de entalpia são apresentados na Tabela abaixo :

Tabela 2.29. Energia associada à água.

Local	vazão [kg / h]	Temperatura [°C]	Entalpia [kJ/kg]	Entalpia [kW]
Água Alim.	23.083	103	435,39	2.791,68
Vapor p/ atm	982	218	2.801,38	-764,15
Vapor	22.101	350	3.132,00	-19.227,87
Total			-	17.200,34

Para os finos, dado que a parcela retida no coletor primário \dot{m}_{col} não sofre variação de temperatura pois a superfície de controle foi definida exatamente naquele local, somente a parcela que é coletada no ciclone que contribui para o balanço. Os finos saem para o ciclone a uma temperatura de 146 °C. Este fluxo é obtido através das tabelas 2.3 e 2.15.

Utilizando mais uma vez a Equação (2.10) para a entalpia, tem-se para os *finos* em suspensão :

$$\begin{aligned} \dot{m}_{cicl}(h_{col} - h_{cicl}) &= \frac{216,1(1108,75 - 108,79)}{3600} \\ &= 60,08 \text{ [kW]} \end{aligned} \quad (2.36)$$

O resultado do balanço de energia no VC - *caldeira* pode ser visto na tabela a seguir :

Tabela 2.30. Balanço de Energia para VC - *caldeira*

Sub totais	Energia [kW]
Água / vapor	-17.200,34
Gás Circulante (Tab. 2. 23 e 24)	16.554,94
Calor p/ ambiente ¹	-44,92
Finos (ciclone)	60,08
Total²	-629,89

2.3.3 - Conclusão

Após realizados os balanços para os volumes de controle *câmara* e *caldeira*, pode-se obter o balanço para todo o CDQ. Pela maneira na qual ambos os VC's foram delimitados, complementares, somam-se seus resultados.

Tabela 2.31. Balanço de Energia no VC - *CDQ* [kW]

VC - <i>câmara</i>	-590,74
VC - <i>caldeira</i>	-629,89
VC - <i>CDQ</i>	-1.220,64

Define-se o desvio no balanço de energia em relação ao fluxo total predominante que entra no volume de controle,

¹ (CST, 1984b).

² A potência consumida pelas bombas do circuito de água não foram incluídas pois operam na unidade central. Deste modo, esta potência é representada pelo ganho da água em pressão - entalpia.

$$e = \frac{|\Delta E|}{(\dot{H}_{inc} + \dot{H}_{\acute{a}gua})}$$
$$= 6,28 \%$$

O maior causador deste erro certamente é o coque com todas as considerações realizadas para medir seus fluxos e o alto conteúdo energético a ele relacionado. Acredita-se que as aproximações realizadas através das expressões propostas para a entalpia e as medições relativas aos gases, também venham a distorcer o balanço, embora em menor magnitude.

2.4 - Balanço de Exergia

Foram utilizados todos resultados e considerações apresentados nos balanços de massa e de energia desenvolvidos anteriormente. Toda a discussão sobre como se obteve as exergias química e termo-mecânica de cada substância pode ser vista na *Seção 1* (Equações (2.6) - (2.20)) deste capítulo.

Dados complementares foram colhidos de CST, 1984b, onde encontram-se as temperaturas nas paredes externas das unidades de extinção de coque. Nesta seção, estes dados serão utilizados para diferenciar o fluxo de exergia ao exterior através de interações de calor, da exergia destruída (irreversibilidade gerada) no processo.

Nesta seção também será apresentado o balanço de 2ª Lei para uma unidade de apagamento de coque a úmido- *CWQ* com intuito de compará-los.

2.4.1 - Estado de referência

O *estado de referência* adotado para análise exergética neste trabalho é apresentado abaixo :

$$\begin{aligned} T_0 &= T^0 = 25 \text{ }^\circ\text{C} \\ P_0 &= P^0 = 1 \text{ atm (st.) } 0,101325 \text{ Mpa} \end{aligned}$$

Para os elementos C, O, N e H foram adotadas como substâncias de referências, respectivamente os gases CO_2 , O_2 e N_2 e o vapor de água em suas respectivas concentrações no ar nas condições padrão (Gallo & Milanez, 1990)..

Para a água líquida e o vapor gerado a referência consiste na água em estado de líquido comprimido a P_0 e T_0 .

2.4.2 - Equacionamento

Na literatura a exergia específica total é definida por:

$$\varepsilon = \varepsilon^m + \varepsilon_0 \tag{2.37}$$

onde a Equação (2.14) corresponde a parcela termo-mecânica ou física.

$$\varepsilon^{im} = (h - h_0) - T_0(s - s_0)$$

As parcelas de exergia química para o coque e os gases foram calculadas através das Equações (2.(6 a 8, 15, 19)), respectivamente.

A Equação do balanço exergético para um *volume de controle* :

$$\dot{E}_w = -\frac{d\Xi}{d\tau} + \sum_{l=1}^p (\dot{E}^q)_l + \sum_{j=1}^q (\dot{m}\varepsilon)_j - \sum_{k=1}^r (\dot{m}\varepsilon)_k - T_0 \cdot \dot{S}_{gen} \quad (2.39)$$

onde,

r total de fluxos saindo do volume de controle ;

q total de entradas ;

p interações de calor com o exterior.

A associação de exergia destruída com irreversibilidade gerada, dá-se pela conhecida relação de Gouy-Stodolla :

$$\dot{I} \equiv T_0 \cdot \dot{S}_{gen} \quad (2.40)$$

2.4.3 - Balanço para VC - CDQ

Para se realizar o balanço de exergia no CDQ fez-se uso dos procedimentos apresentados na *Seção I* .

Para melhor expressar o balanço de exergia, foi necessário estabelecer algumas outras considerações relacionadas abaixo :

- O fluxo exergético de coque incandescente é separado em dois: uma parcela que atravessa o volume de controle sem sofrer reações químicas, e outra, que é queimada e se converte em gás. De modo semelhante, para o fluxo de coque extinto e os de *finos*, somente se contabiliza a exergia física¹;
- Não é considerada a parcela química da exergia dos fluxos relacionados à produção de vapor conforme hipótese de estabilidade utilizada anteriormente;
- Para os fluxos de gases ao exterior consideram-se ambas as parcelas da exergia, pois os gases, poderiam ser aproveitados tanto térmica, quanto quimicamente para realizar trabalho.

¹ Ao fim desta seção ficará evidente o porquê desta abordagem.

As planilhas de cálculo dos fluxos de exergia que entram e saem no *VC-CDQ* são apresentados no Apêndice B (Tabelas B10 a B22) e um extrato dos resultados nas duas tabelas a seguir:

Tabela 2.32. Fluxos de entrada de exergia no *VC-CDQ*.

Fluxo	kg/h	T [K]	Exergia [kJ / kg]	Fluxo de Exergia [kW]
Coque Inc. *	37.859,14	1.323,15	1.289,92	13.565,33
N ₂ (puro)	849,52		3.014,64	25,36
Soprador	-	-	-	138,75
Ar (amb.)	1.023,51	298,15	0,00	0,00
Água	22.083,00		34,69	222,40
Coque Comb.*	273,85	1.323,15	30.153,75	2.325,01
Exergia total	(in)			16.276,85

* 37.859,14 + 273,85 ≈ 38.133 kg /h

Tabela 2.33. Fluxos de saída de exergia no *VC-CDQ*.

Fluxo	kg/h	T [K]	Exergia [kJ / kg]	Fluxo de Exergia [kW]
Coque extinto	37.200,00	463,15	66,87	690,99
Ciclone	216,1	418,15	46,35	2,78
Coletor	61,27	1.103,15	865,02	14,72
Carregamento	26,23	1.323,15	1.289,92	9,36
Descarga	60,07	453,15	66,87	1,12
Bleeder Inf.	1.879,82	419,15	3.899,92	2.036,43
Bleeder Sup.	563,23	679,65	8.603,33	1.346,03
Ambiente	-	-	-	29,84
Vapor	22.101,00	623,15	1.073,27	6.588,99
Vapor p/ atm	982,00	491,15	922,86	251,74
Exergia total	(out)			10.972

Dos resultados apresentados nas tabelas anteriores pode-se obter a quantidade de exergia destruída no processo :

$$\begin{aligned} \dot{E}_d &= \dot{I} = \dot{E}_{in} - \dot{E}_{out} \\ &= 5.304,86 \quad [\text{kW}] \end{aligned} \quad (2.41)$$

Ainda dos resultados apresentados nas Tabelas 2.32 & 33, apresenta-se o diagrama de Grassman para representar os fluxos de exergia (e.g. Moran, 1982 e Kotas, 1985). O diagrama

construído para o VC - CDQ no qual eram consideradas as exergias químicas de todas as substâncias, não proporcionava destaque para a irreversibilidade gerada no processo. Isto ocorreu devidos aos grandes fluxos de massa e ao fato das exergias químicas daquelas substâncias serem elevadas, predominado sobre os fluxos associados a parcela física da exergia. Conforme apresentado nos resultados do balanço (Tabela 2.(35 & 36)), somente parte do coque está envolvida com as reações químicas, e grande parte da fluxo atravessa o volume de controle com grande diminuição da exergia termo-mecânica, porém com a parcela química inalterada. Um processo semelhante também ocorre com a água e vapor.

Para então evidenciar a exergia destruída no processo, é proposto um diagrama levemente modificado, baseado nos conceitos de *Fuel* e *Produto* propostos por Valero & Lozano, 1993. A modificação básica é a seguinte :

Somente as parcelas da exergia que participam do processo de extinção foram consideradas. Deste modo, a componente química das exergias da água/vapor e do fluxo de coque extinto não são somadas (não sofrem reações). Deve ser observado que somente para a parcela de coque envolvida com a combustão, foi considerada sua componente química da exergia (Figura 2.4) ;

Deste modo apresenta-se o diagrama dos fluxos de exergia:

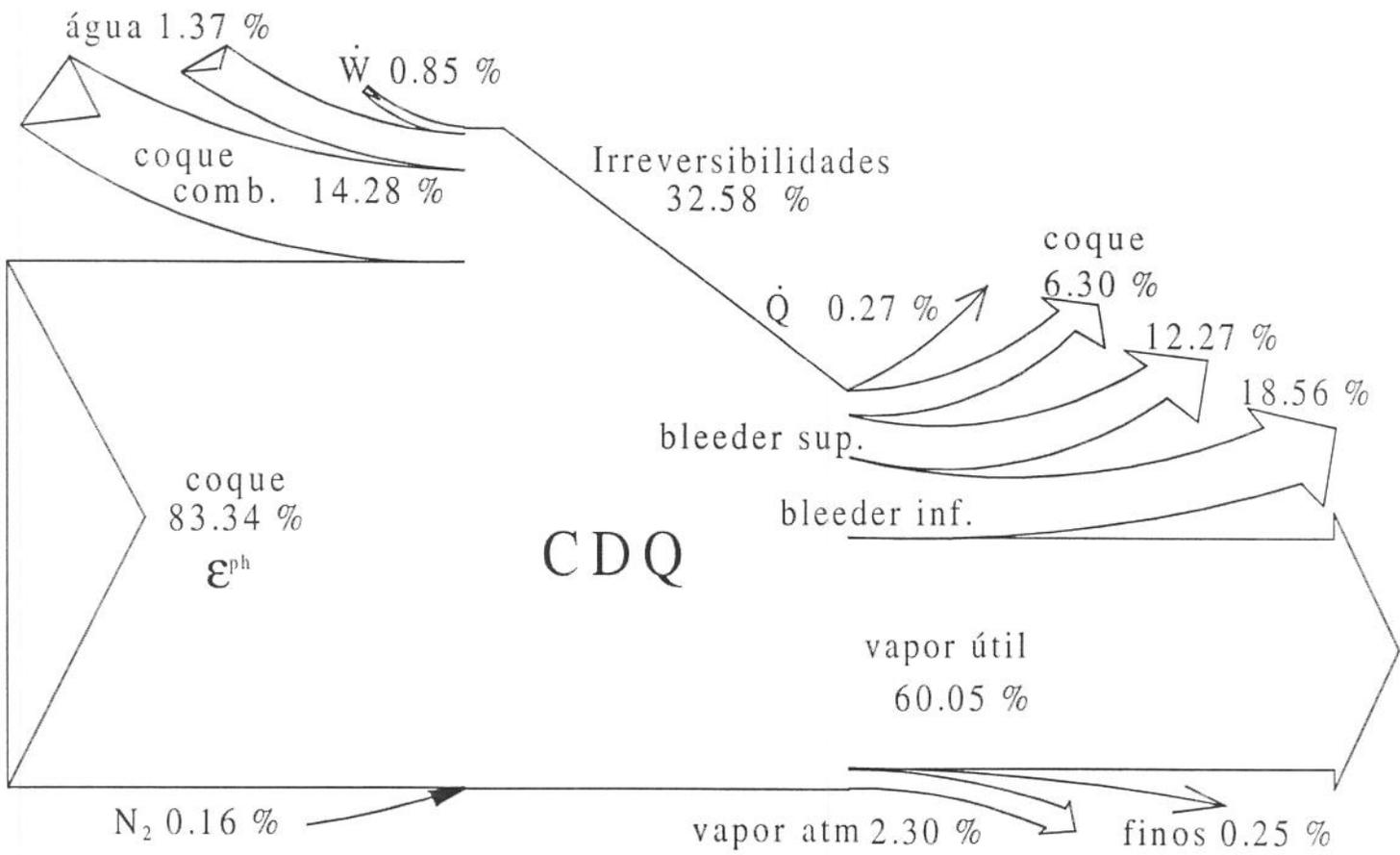


Figura 2.4. Diagrama de Grassman para CDQ.

Recomenda-se expressar a irreversibilidade unitária gerada no sistema, geralmente baseada no principal produto da instalação (Moran, 1982 e Kotas, 1985). Assim,

$$i = \frac{\dot{E}_{in} - \dot{E}_{out}}{\dot{m}_{ext}} \quad (2.42)$$

$$= 513,37 \quad [\text{kJ} / \text{kg coque}]$$

2.4.4 - Balanço para VC - CWQ

Baseado no sistema de extinção a úmido, CWQ, em funcionamento na CST foi elaborado um estudo com finalidade comparativa. A base da análise é o mesmo regime de operação do sistema a seco, a produtividade de 37.200 kg / h de coque extinto.

Conforme foi descrito na primeiro capítulo, este processo requer água adicional para cada batelada de coque extinto, pois uma grande parcela se dissipa na atmosfera na forma de vapor. Admite-se um índice de recirculação de 60 % da água (Sanchas da Cruz, 1993a).

As condições termodinâmicas da água e do vapor gerado são :

Tabela 2.34. Condições para água e vapor no CWQ

	Pressão [atm]	Temperatura [°C]	Entalpia [kJ / kg]	Entropia [kJ / kg °C]
Água (entrada)	3	25	105,2	0,3653
Lama (saída)*	1	100	419,04	1,3069
Vapor (atm)	1	100	2.676,1	7,3549

* Lama = Água + finos de coque = Água de retorno.

Define-se um volume de controle, VC - CWQ, que está contido na região ao redor do vagão contendo o coque incandescente e as duchas de água (Vide Figura 1.3). Realizando o balanço de 1ª Lei no VC - CWQ,

$$\dot{m}_{coq}(h_{inc} - h_{ext}) = \dot{m}_v(h_v - h_a) + (\dot{m}_a - \dot{m}_v)(h_l - h_a) \quad (2.43)a$$

para ,

$$\dot{m}_v = 0,4\dot{m}_a \quad (2.44)$$

assim,

$$\dot{m}_a = \frac{\dot{m}_{coq}(h_{inc} - h_{ext})}{0,4(h_v - h_a) + 0,6(h_l - h_a)} \quad (2.43)b$$

Algumas considerações são feitas para se poder realizar o balanço de exergia :

- Geração de finos em torno de 60 % do CDQ (Sanchas da Cruz, 1993a);
- Não há qualquer reação química, e portanto combustão com o coque ;
- Não estão sendo considerados os hidrocarbonetos liberados para a atmosfera ;

Com os mesmos procedimentos utilizados no balanço de exergia para o CDQ, obtem-se os resultados apresentados na Tabela 2.35.

Daquela Tabela pode-se obter a quantidade de exergia destruída no processo :

$$\begin{aligned} \dot{E}_d = \dot{I} &= \dot{E}_{in} - \dot{E}_{out} \\ &= 10.267,23 \quad [\text{kW}] \end{aligned} \quad (2.44)a$$

Tabela 2.35. Fluxos de Exergia no VC-CWQ.

Fluxo	kg/h	T [K]	Exergia Física [kJ / kg]	Fluxo de Exergia [kW]
Coque Inc.	37.200,00	1.323,15	1.289,92	13.329,17
Coque Ext.	37.200,00	423,15	49,11	-507,45
Finos	227,65	373,15	24,33	-1,54
Água (lama)	26.167,65	298,15	29,42	-213,85
Água	43.612,76	298,15	0,20	2,42
Vapor p/ atm	17.445,11	373,15	483,20	-2.341,52
Total				10.267,23

Apresenta-se abaixo a irreversibilidade unitária gerada para o CWQ,

$$i = \frac{\dot{E}_{in} - \dot{E}_{out}}{\dot{m}_{ext}} \tag{2.45a}$$

$$= 993,6 \quad [\text{kJ} / \text{kg coque}]$$

Ainda dos resultados apresentados na Tabela 2.35, apresenta-se o diagrama de Grassman.

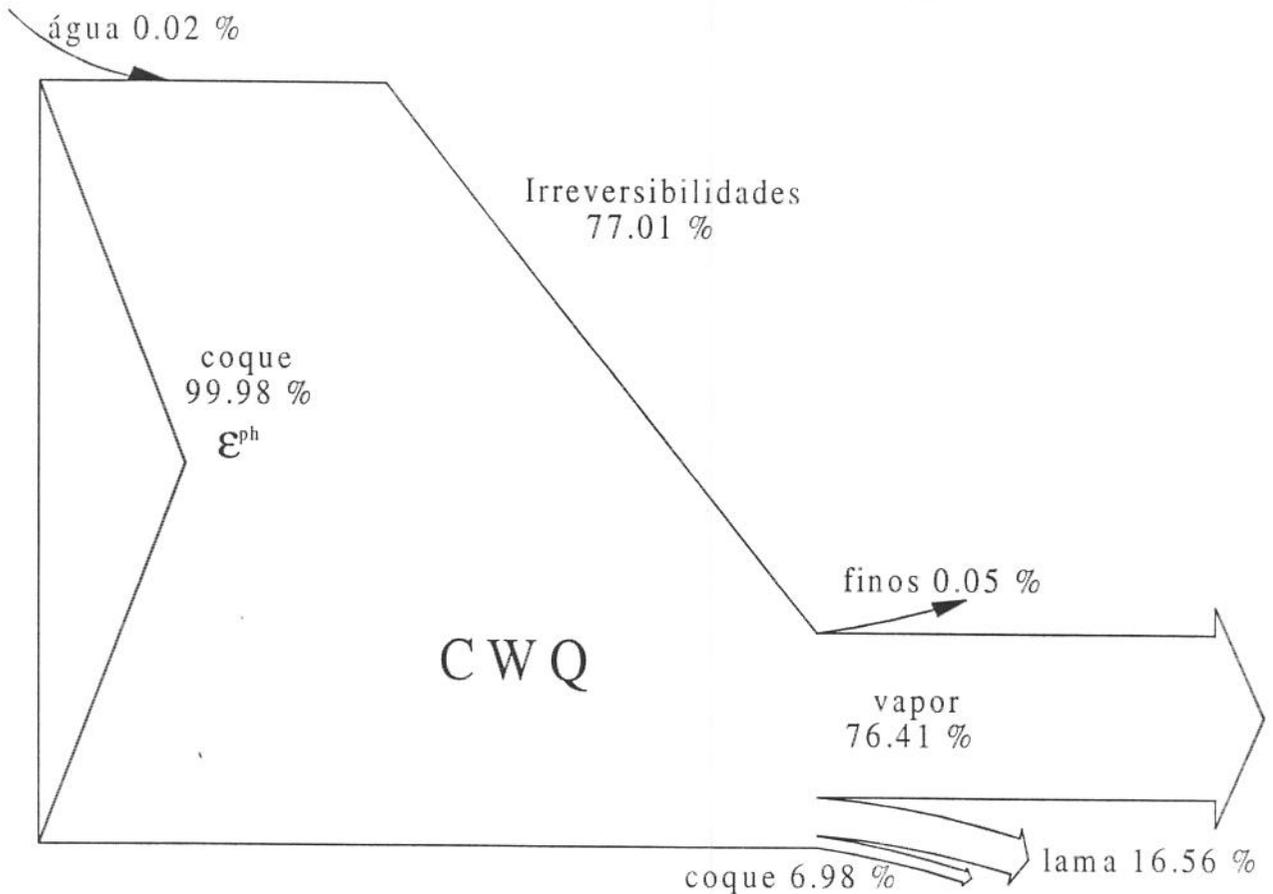


Figura 2.5. Diagrama de Grassman para VC - CWQ.

A rigor, todas as parcelas negativas da última coluna da Tabela 2.35 representam exergia que não é utilizada posteriormente, e portanto destruída. Desta forma, o valor para irreversibilidade gerada referente ao CWQ¹ seria :

$$\begin{aligned}\dot{E}_d &= \dot{I} = \dot{E}_{in} \\ &= 13.329,17 \quad [\text{kW}] \end{aligned} \quad (2.44)\text{b}$$

Apresenta-se abaixo a irreversibilidade unitária gerada para o CWQ,

$$\begin{aligned}i &= \frac{\dot{E}_d}{\dot{m}_{ext}} \\ &= 1.289,92 \quad [\text{kJ} / \text{kg coque}] \end{aligned} \quad (2.45)\text{b}$$

¹ Corresponde em estender a superfície de controle até alcançar as condições de equilíbrio (P_0, T_0).

2.5 - Considerações finais

2.5.3 - Geração de irreversibilidades (CDQ e CWQ)

Na Figura 2.6 compara-se a irreversibilidade gerada em cada um dos processos de extinção de coque.

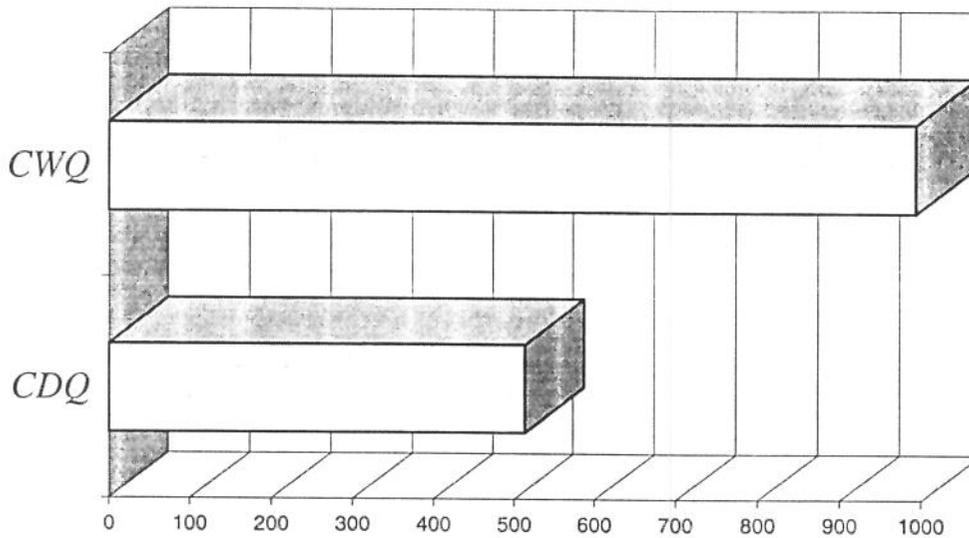


Figura 2.6. Exergia destruída nos dois processos (kJ/kg coque)

Sob o ponto de vista térmico, não era necessário realizar uma análise de Segunda Lei para concluir que o sistema de apagamento a seco, *CDQ*, tem melhor desempenho ao apagar o coque incandescente. Entretanto, neste trabalho não se discute os problemas somente sob a ótica térmica, considera-se os aspectos ecológicos destes sistemas.

Se feita uma avaliação do coeficiente de *custo ecológico* proposto por Szargut (capítulo 3), certamente o *CDQ* teria um coeficiente menor. Ora, se em todo o processo de fabricação do aço ocorressem substituições por processos gerando metade das irreversibilidades, quanto seria "economizado" de exergia ?

Nestes processos siderúrgicos, qualquer ganho percentual, por menor que seja, ao ser contabilizado durante um longo período, um ano, dois, ou mais, representará enormes quantias. Abaixo apresenta-se uma estimativa da quantidade de exergia que se economiza ao realizar a extinção a seco de todo o coque produzido (5×37.200 kg / h) em um ano:

Tabela 2.36. Total de exergia destruída ano(24 h x 365 dias).

Processo	Irrev. Específica	Total GJ / ano
CDQ	513,37	836,46
CWQ	993,6	1.618,92
Total / ano		782,46

A quantidade de exergia destruída anualmente também pode ser vista na forma de potência instantânea [kW]. A diferença economizada é apresentada através da expressão abaixo:

$$\begin{aligned} \dot{N} &= \frac{718,84 \times 10^9}{3600 \times 24 \times 365} && [\text{W}] \\ &= 24,81 && [\text{kW}] \end{aligned} \quad (2.46)$$

Capítulo 3

TERMOECONOMIA COM CONSIDERAÇÕES AMBIENTAIS

Introdução

Ao longo destas três últimas décadas observou-se que somente a elaboração de projetos ou análises termodinâmicas, mesmo já considerando a Segunda Lei da Termodinâmica, não era suficiente para se projetar instalações térmicas. Era necessário ter respostas mais abrangentes e completas, que não sofressem muitas alterações quando analisadas economicamente. Era necessário realizar projetos que desde a sua proposta inicial já previssem seu comportamento econômico.

Termoeconomia, assim foi chamada esta nova metodologia por aqueles analistas que sentiram as necessidades acima mencionadas.

Assim seguiram-se as idéias lançadas pioneramente por Tribus & Evans, 1962 e El-Sayed, 1970, até os dias atuais, com as diversas correntes como de Evans e Frangopoulos e a de Valero e Lozano, consideradas aqui as mais importantes. Não se pode deixar de mencionar as contribuições que Jan Szargut proporcionou em paralelo: muitas idéias partiram de seus trabalhos.

Atualmente os autores das diversas abordagens vêm se encontrando, comparando, sugerindo, na tentativa de unificar a Teoria Termoeconômica¹. Recentemente quatro correntes se encontraram para juntos resolverem um problema teste e comparar a equivalência dos resultados. Este encontro gerou o artigo Valero *et al*, 1994.

Das várias abordagens, uma se chama Exergoeconomia, outra Análise Funcional Termoeconômica, mas todas fazendo uso de alguns conceitos que serão apresentados mais a seguir.

¹ N.A.: Recomenda-se verificar as obras do Profs. Valero e Lozano que devem estar quase atingindo este objetivo restando apenas discussões a cerca da estrutura produtiva, diagramas funcionais, etc..

Após desenvolvidas ferramentas para tratar economia termodinâmica juntas, um outro fator começou também a inviabilizar projetos térmicos: o meio ambiente. Para aqueles que já haviam percebido a importância de realizar análises globais, não foi difícil implementar os aspectos ecológicos. (Frangopoulos, 1992a ; Szargut , 1986 e Valero & Lozano, 1994).

Não foi necessário esperar a Termoeconomia se estruturar da forma de hoje, para se fazer menção ao Meio Ambiente. Szargut, 1978 introduziu a idéia de minimizar o consumo de recursos naturais, principalmente os não-renováveis. Esta idéia foi o embrião do que ele veio a definir como *Coefficiente de Custo Ecológico*, que engloba todas as perdas associadas ao meio ambiente na figura da exergia das substâncias envolvidas nos processos.

O coeficiente de custo ecológico de um dado produto, ρ_m , expressa o consumo total de exergia dos recursos naturais não-renováveis vinculados a toda uma cadeia de produção, partindo da matéria prima até o produto final em estudo. Este coeficiente passou a incluir também os danos materiais e ecológicos dos efluentes do processo a partir de Szargut, 1986.

Para efeito de simplificação, foram assumidas relações lineares, permitindo aplicar técnicas de Programação Linear², PL, para, após realizar o balanço exergetico, otimizar. Para tanto, foi considerado o balanço indicado na Figura 3.1 (Szargut, 1978).

Devido à maneira como a exergia é definida, relativa a um estado de referência no ambiente, ela pode ser utilizada como uma medida da qualidade de um recurso natural. Geralmente pode se considerar *recursos naturais* os componentes do ambiente que diferem dos valores médios ambientais na sua composição química e nos seus parâmetros termodinâmicos.

A exergia química ou física de cada elemento dos efluentes anulada ou não na vizinhança externa em algum tempo. Ambos os casos deverão causar algumas consequências no meio ambiente que de um modo geral, são de degradação. Para os efluentes, a exergia caracteriza-se como uma propriedade diretamente vinculada ao desequilíbrio físico e químico em relação ao *estado de referência* (Gallo & Milanez, 1990) ou ao meio ambiente. (Szargut, 1986).

Ao contrário da energia, que sempre se conserva, a exergia pode ser destruída ou produzida³ (localmente) pelos seres vivos (no caso de combustível, a biomassa utilizada em processos). Mesmo assim, a atividade humana destrói exergia mais rapidamente que a tendência

² A literatura mostra que para análises macroscópicas de sistemas como sugerido por Szargut, a linearização de vários processos e correlações não afetam significativamente os resultados.(e.g. Hillier & Lieberman,1990; Edgar & Himmelblau, 1988; Luenberger, 1984,..).

³ Certamente, assim como a energia a exergia não pode ser gerada. Desta forma, refere-se aqui a propriedade dos seres vivos de produzir *neg-entropia*. Ou seja, de elevar o conteúdo exergetico de uma dada quantia de energia.

do ecossistema de restaurá-la (Szargut, 1986). O que gera um estado de degeneração contínua do meio ambiente.

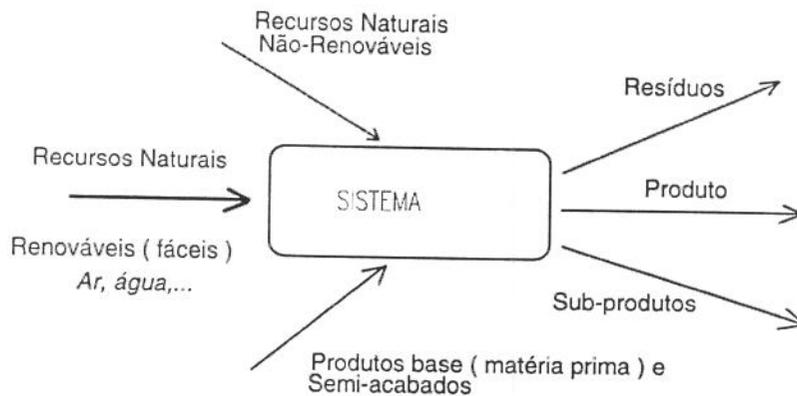


Figura 3.1. Interação do sistema com o exterior

Ao analisar um processo sob a ótica ecológica, deve-se considerar os *custos ecológicos* dos elementos beneficiados ou produzidos. Para exemplificar, considere uma análise exérgica num motor diesel. À exérgia destruída no ciclo do motor, deve-se somar o custo ecológico associado ao refino do petróleo (recurso não-renovável, emissão de efluentes, consumo de eletricidade, etc). Não se pode considerar que um sistema alimentado a gás natural tenha o mesmo "impacto ecológico" que outro a gás proveniente de uma refinaria. O gás natural foi concebido ao longo dos anos pelo próprio ecossistema, sem chuva ácida, dano à flora e fauna e à saúde humana.

Quando se consideram os custos ecológicos dos recursos semi-acabados utilizados num processo, deve-se estabelecer a amplitude da análise (Szargut, 1990), podendo ser: doméstica (país) ou global (mundial).

Na análise doméstica, quando um país adquire produtos já beneficiados, semi-acabados ou recursos não renováveis de outros países, o custo ecológico se torna menor, pois os danos ecológicos foram gerados em outro lugar, sendo assim a análise global a mais coerente. Pode-se citar o caso das exportações brasileiras de placas de aço semi-acabadas, minério de ferro, papel e outros com grande quantidade de energia elétrica agregada (alumínio), até produtos agro-industriais, se considerarmos as áreas devastadas para o plantio.

O custo ecológico pode ser apresentado na forma da Equação 3.1 (Szargut, 1990).

$$\begin{aligned}
 \rho_m = \sum_n \left[a_{nm} + f_{nm} + d_{nm} + \sum_s B_{sm} \cdot x_{ns} \right] \cdot \rho_n \\
 + \sum_s \left[B_{sm} \cdot \left(\sum_k y_{ks} + z_s \right) \right] + \sum_k B_{km}
 \end{aligned}
 \tag{3.1}$$

onde,

- ρ custo ecológico unitário ;
- a_{mn} coeficiente do consumo geral de produtos semi-acabados (nacionais) **n** ou da mão-de-obra dispensada ao processo **m**, por unidade do produto principal ;
- f_{nm} Coeficiente de sub-produção do **n** em relação à unidade **m** (principal) ;
- d_{nm} Coeficiente do consumo de produtos semi-acabados importados substituindo um semi-acabado nacional **n**;
- B_{sm} Exergia dos poluentes **s** por unidade do produto principal **m** produzido;
- x_{sm} Coeficiente de degradação do bem **n** por unidade de exergia dos poluentes **s** ;
- y_{ks} Coeficiente de degradação do recurso natural não-renovável **k** por unidade de exergia dos poluentes **s**;
- Z_s Multiplicador do consumo de exergia para eliminar os resultados da deterioração da saúde humana, por unidade de exergia do poluente **s** ;
- B_{km} Consumo direto de recursos naturais não-renováveis nacionais **k** por unidade **m** (produto).

O coeficiente d_{nm} pode ser expresso por :

$$d_{nm} = X_n \frac{\sum_r D_r a_{rm}}{\sum_n X_n D_n}$$

onde D_r, D_n custo unitário do produto importado **r** por unidade de **m**;

x_n exportação do produto **n** ;

a_{rm} Coeficiente do consumo total do produto importado **r** por unidade **m**.

Lembrando que um sub-produto desse processo pode ser às vezes, um produto final de outro país,

então :

$$f_{nm} = f_{um} z_{nu}$$

f_{um} Coeficiente de "sub-produção de **u** por unidade do produto principal **m** ;

z_{nu} Taxa de substituição (quantidade em unidades do produto principal **n** substituído pelo sub-produto **u**).

Numa maneira conceitual, Szargut abrangeu os aspectos mais importantes. Existe uma dificuldade de implementação dessa abordagem, já que é necessário obter as exergias de uma série de produtos e recursos naturais e suas correlações. Talvez numa análise em macro-escala (país) possa justificar estudos em busca da exergia, da concentração e dos índices de destruição causados pelos efluentes.

A partir destas idéias do *custo ecológico*, chega-se a uma conclusão já comum entre os ecólogos: *toda atividade humana deve devolver ao ecossistema os recursos em sua forma naturalmente encontrada*, ou escrevendo de outra forma : com exergia nula para os efluentes, $Ex_{ef} \approx 0$ na fonte (emissário).

3.1 - Breve descrição de Termoeconomia

Não é objetivo deste trabalho descrever formalmente as diversas correntes desta metodologia, seus teoremas e postulados. Somente serão apresentados alguns aspectos comuns a todas elas.

A grande contribuição, indubitavelmente, da Termoeconomia, é a inserção dos conceitos de Economia, em específico da Microeconomia, com seus custos, preços sombra e os de recursos e produtos na análise térmica convencional. O grande salto ocorreu ao perceber que a exergia funcionaria como *moeda* e indicativo do valor do recurso. Deste modo, se para produzir determinado efeito térmico, um processo requer 100 kWe de exergia como recurso, não importa se este entra na forma de vapor, combustível, ou mesmo eletricidade. O fato de estar explícito em exergia, implica dizer que a entrada poderá ser em 700 kW de vapor, 900 kW de combustível, ou 100 kW de eletricidade, agora medidos em fluxo de energia. Observando a exergia como *moeda*, se torna simples e genérico se comparar custos energéticos, ou melhor, exergéticos. Veja o estudo realizado no capítulo 2, ao final constatou-se que a extinção de coque tem um custo unitário de 513 kJ / kg (Equação (2.42)) de irreversibilidade gerada ou exergia destruída. Isto estabelece um custo que é relevante e permite comparações.

No parágrafo anterior apresentou uma análise ainda dentro da Termodinâmica, utilizando os conceitos econômicos, porém contabilizando-os em exergia. No entanto, numa etapa posterior, associam-se os custos dos recursos estabelecendo a análise econômica. Juntar as duas análises também fornece um resultado interessante: a associação de custos exergéticos com econômicos.

As figuras abaixo apresentam esquemas de duas abordagens diferentes, a Análise Funcional Termoeconômica (T.F.A.) de Frangopoulos e a Termoeconomia (Exergoeconômica) de Valero & Lozano .

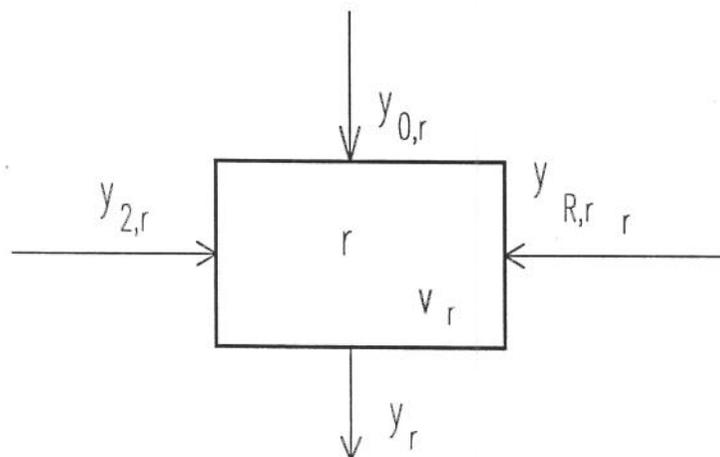


Figura 3.2. Unidade da T.F.A.(Frangopoulos, 1983).

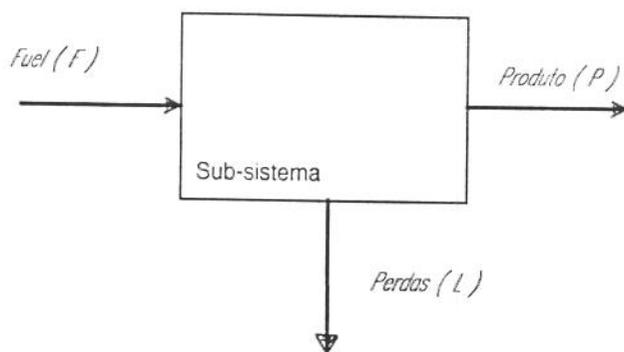


Figura 3.3. Subsistema na Termoeconomia de Valero & Lozano, 1993.

Na Figura 3.2 (T.F.A.), o elemento básico de análise é uma *unidade* de produção, (\mathbf{r}), é não somente um equipamento como se encontra em análises termodinâmicas convencionais. Este elementos são subsistemas que podem ou não coincidirem com equipamentos da instalação. Além disso, há somente uma única saída, um único produto, uma única **função** ($y_{\mathbf{r}}$). Todos os demais fluxos $y_{\mathbf{r},\mathbf{r}}$, são necessários para realizar a tarefa de produzir $y_{\mathbf{r}}$. Estes recursos podem ser externos ao sistema, como também ser uma ramificação de um produto de outra *unidade*, \mathbf{r} , ou sub-sistema..

O esquema sugerido por Valero & Lozano (Figura 3.3) tem características muito semelhantes ao de Frangopoulos. É necessário definir o que é produto (*Produto*) e recurso (*Fuel*), não há ligação direta aos fluxos de energia ou massa que realmente existem no processo real. Apesar da semelhança inicial com a T.F.A., ela segue linhas muitos diferentes em sua formulação procurando manter a linearidade e a forma analítica.

Embora possa parecer abstrato o conceito de recurso, *Fuel*, **função** e *Produto*, a medida que se familiariza com a metodologia, a atribuição do que vem a ser cada um dos *fluxos* do sistema se torna lógica e às vezes necessariamente única.

Fora os detalhes, as metodologias contém essências parecidas. Ambas encerram propondo uma configuração, um projeto e regime de operação ótimos. Para aqueles que se propunham a realizar uma análise global, não poderiam encerrar melhor suas análises.

Tudo em Termoeconomia ainda está em pleno desenvolvimento. Há postulados a serem verificados, técnicas de otimização a serem melhor discutidas, teoremas da economia a serem aplicados, e outros passos mais a serem dados. Difícil dizer qual delas melhor se ajusta a este ou a aquele problema, ou mesmo a mais promissora. Não é objetivo desta dissertação discutir isso, e poder-se-ia apresentar conclusões precipitadas já que algumas estão mais avançadas que as outras nos seu desenvolvimento.

Para o estudo de caso deste trabalho foi escolhida a Análise Funcional Termoeconômica (Frangopoulos, 1983) em sua mais recente versão a *Environomics* (Frangopoulos, 1992 (a & b)) que a seguir será brevemente apresentada.

3.2 - *Environomics*

Introdução

O termo *Environomics* é a forma resumida no idioma inglês de *Environmental Thermo-economic*, ou *Thermo-environomics* e determina a amplitude para qual se utiliza a *Thermo-economic Functional Approach* (Frangopoulos, 1983). Nesta abordagem é realizada uma avaliação global considerando os recursos naturais, meio ambiente e os limites de emissões determinados pelos órgãos governamentais, além de todos os aspectos econômicos e termodinâmicos da abordagem convencional.

Até chegar a abordagem *Environomics*, foi percorrido um longo caminho, iniciado por Evans, 1980. Inicialmente ele desenvolveu a idéia básica de *Thermo-economic Isolation - T.I.* voltado a sistemas térmicos, mas que se limitava a composições simples satisfazendo a certos critérios. A partir daí surgiram considerações que culminaram não só no aperfeiçoamento da *T.I.*, mas numa abordagem nova - *Thermo-economic Functional Analysis - T.F.A.*, em 1983, como tese de doutoramento de seu orientado Christos Frangopoulos (Frangopoulos, 1983). Em 1990, a *T.F.A.* foi aprimorada para *Intelligent Functional Approach - I.F.A.* (Frangopoulos, 1990a).

A *T.F.A.* é baseada na Análise de Segunda Lei da Termodinâmica e na teoria de otimização, e foi desenvolvida para otimizar ou aperfeiçoar sistemas térmicos complexos onde não eram atendidas as condições suficientes para implementação da *T.I.*. Entretanto, a *I.F.A.* pode ser baseada em grandezas outras que a exergia - energia, entalpia, recursos em geral .

O primeiro passo na modelagem é construir o *Diagrama Funcional do Sistema*, que o representa através de *unidades e funções* (ver *Definições*). Após definidos os elementos básicos da estrutura produtiva, formula-se o problema de otimização.

As vantagens principais do método são (Frangopoulos, 1983):

- Estabelece uma base racional para avaliação do desempenho de componentes de sistemas complexos ;
- Pode ser aplicada em sistemas de qualquer porte ou complexidade

Definições

Ao desenvolver a abordagem, Frangopoulos, 1983 designou outros significados para palavras *comuns*. Seguem algumas definições iniciais :

Função ⁴	<i>Referente a qualquer ser vivo, material, ou construção, envolvido com um fim ou propósito definido.</i>
Unidade	<i>Uma parte ou um complexo de um aparato destinado a realizar uma função específica.</i>
Sistema	<i>Um conjunto de unidades interrelacionadas, no qual não haja algum sub conjunto isolado do restante. Para este trabalho o sistema será considerado "aberto", isto é, interagindo com o meio ambiente através de fluxos de recursos, rejeitos e produtos.</i>
Decisão Racional	<i>Uma decisão tomada com base em considerações consistentes da associação de benefícios e penalidades.</i>
Solução Intensiva	<i>Solução do problema de otimização a qual é independente da magnitude da produção. Tem um caráter qualitativo.</i>
Diagrama Funcional	<i>A representação do sistema em termos das unidades e a rede de distribuição das funções.</i>

Descrição

Basicamente o método desenvolvido por Frangopoulos tem como objetivos, determinar a configuração (estrutura), o projeto e o regime de operação ótimos, ou mesmo apenas melhorias em instalações térmicas complexas.

Considera-se o sistema composto de unidades. Para cada uma, é associada uma função, que é apropriadamente quantificada através dos Conceitos da Segunda Lei da Termodinâmica

⁴ N.A.:Doravante o termo função não será apresentado em negrito ou itálico.

para o caso de análises Termoeconômicas, e outras grandezas adequadas para a abordagem *I.F.A.* A função de cada unidade é distribuída para outras e, ou para o exterior.

Ao otimizar o sistema, o objetivo consiste em minimizar custos (econômicos ou físicos), atendendo as restrições evidenciadas no *diagrama funcional*. Na *I.F.A.* os critérios de otimização poderão ser de outra natureza (emissões, produção, disponibilidade ou taxa de utilização, etc.).

A abordagem atual partiu de *Isolamento Termoeconômico*, que tinha como princípio básico:

Qualquer melhoria ou otimização do sistema pode ser obtido melhorando ou otimizando cada componente isoladamente (Evans, 1980).

Observa-se que se um sistema permite ser analisado desta maneira, o trabalho poderia ser segmentado em subsistemas independentes tornando-o mais simples. Em grandes instalações complexas, isso evitaria a necessidade de manipular inúmeras expressões, variáveis e tabelas.

Metodologia

O *Diagrama Funcional*, parte fundamental da análise, é elaborado através de uma *Análise Funcional*. O diagrama é composto de figuras geométricas com linhas e setas interligando-as. As linhas representam a interrelação entre as unidades e entre elas e o ambiente exterior. Neste diagrama cada unidade é expressa de acordo com a Figura 3.2 e da terminologia abaixo:

$r = 1, 2, \dots, R$, unidades do sistema,

$\mathbf{v}_r = (x_{r1}, x_{r2}, \dots, x_{ri}, \dots, x_{rn})^T_r$ vetor coluna com n_r componentes correspondendo as variáveis de decisão (projeto e operação) da unidade r .

$y_{i,r}$ = vetor dos recursos que chegam a unidade r ;

y_r = produto ou função de r ;

$y_{j,m}$ = recursos relacionados ao controle ambiental em m r .

Pode ocorrer que funções de unidades diferentes se juntem antes de serem distribuídas, ou outros casos, nos quais a função de uma unidade é distribuída para mais de uma delas. Essas situações são representadas por *junções* e *ramificações*, respectivamente.

Nem sempre as linhas representam fluxos de massa ou energia, e ainda, nem sempre o fluxo corresponde à direção das setas. Cada unidade possui uma **única** função, e recebe recursos de outras ou do ambiente externo ao sistema. O exemplo abaixo pode esclarecer melhor:

Gases de exaustão de uma caldeira formam um fluxo saindo da câmara de combustão (fornalha), porém o serviço de tiragem dos gases consiste em algo que a unidade caldeira necessita comprar de outrem, portanto é um recurso, e é representado por $y_{r,j}$ apontando para ela. (Frangopoulos, 1983)

Depois de identificar as funções do sistema como um todo e de cada unidade individualmente, e construir o *Diagrama Funcional*, formula-se o problema de otimização.

A função objetivo, a qual se deseja otimizar, pode ser expressa de uma maneira geral assim,

$$\text{Min } F = Z(\bar{z}, \bar{w}) + \Phi(\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}, t)$$

onde $Z(z,w)$ é a parcela relacionada ao custo instalado do sistema e o outro termo, $\Phi(x,y,z,t)$, corresponde as parcelas variáveis com a produção (insumos, especificação do equipamento, receita de vendas, multas, tempo, ...).

Considerações Ambientais

A análise permite incluir os aspectos ambientais e para isso algumas considerações são estabelecidas. São anexados elementos de controle ambiental (rm) às unidades no diagrama funcional como pode ser visto na Figura 3.4.

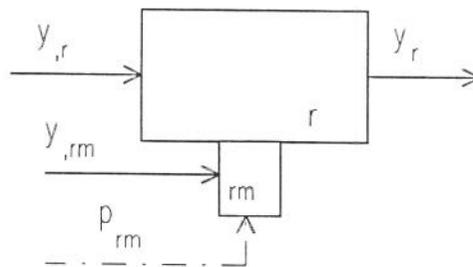


Figura 3.4. Unidade com dispositivo de controle.

onde,

p_{rm} medição do poluente m emitido pela unidade de produção r

Os principais fatores que influenciam o valor de p_{rm} são :

* A função y_r e as características técnicas da unidade r ;

* A capacidade de absorção ou dispersiva do exterior .

Frangopoulos propõe que a cada equipamento de tratamento do efluente, se relacione um grau de redução ou de abatimento do poluente indesejável. E definiu-o como :

$$\delta_{rm} = \frac{P_{rmi} - P_{rm}}{P_{rmi}} \quad (3.2)$$

onde P_{rmi} é a medida de qualquer unidade representativa (concentração, fluxo, temperatura,...) do contaminante na entrada do equipamento e P_{rm} o valor no emissário.

$$\text{Certamente, } P_{rm} = (1 - \delta_{rm}) P_{rmi}$$

Os P_{rm} 's podem ser, por exemplo, fluxo exergéticos do tipo :

$$P_{rm}^q = Ex^q = \left(1 - \frac{T_0}{T}\right) Q$$

$$P_{rm}^{ch} = Ex^{ch} = \left(\sum_k (\mu_{k0} - \mu_k^0) N_k \right)$$

O conceito de exergia tem se mostrada o mais adequado dentro da termodinâmica para sintetizar o *desequilíbrio* com o qual um efluente é lançado no meio ambiente. De sua própria definição, consegue-se apontar "recursos" e "contaminantes" sendo lançados.

Ao tentar utilizar expressões semelhantes às anteriores em sua metodologia, Frangopoulos se deparou com as seguintes dificuldades :

- Necessitam-se de muitos cálculos para obter as exergias químicas ;
- Existem problemas quanto ao estado de referência a ser considerado;
- Os padrões regulamentados são geralmetne em g/KJ, g/kWh, g/Nm³ ,...

Para contornar esses contratemplos, foi proposto por Gaivao e Jaumotte, 1985 a seguinte expressão :

$$P \equiv \frac{\alpha - \alpha_0}{\bar{\alpha} - \alpha_0} A \quad (3.3)a$$

onde :

- α propriedade medida na saída do equipamento ;
- α_0 Estado de referência no meio ambiente;
- $\bar{\alpha}$ limite permitido pela sociedade ;
- A vazão, em volume ou massa, e fluxos em geral .

Alguns exemplos podem ser vistos abaixo :

$$P^q = \frac{T - T_0}{\bar{T} - T_0} Q \tag{3.3b}$$

$$P^{ch} = \frac{\chi - \chi_0}{\bar{\chi} - \chi_0} \chi_m = \frac{c - c_0}{\bar{c} - c_0} c \cdot V \tag{3.3c}$$

Assim, todos serão quantificados uniformemente de acordo com seus efeitos. Devido à sua característica tornou-se conveniente definir ,

$$\frac{\alpha - \alpha_0}{\bar{\alpha} - \alpha_0} \rightarrow \text{fator de dano}$$

Breve esquema da abordagem

Baseado em Frangopoulos, 1983, 1990a e 1992a&b apresenta-se sucintamente a metodologia utilizada neste trabalho.

Frangopoulos propôs toda uma análise chamada por ele próprio de "inteligente", pois proporciona informações adicionais aos resultados quantitativos.

A distribuição do produto da unidade r, y_r , pode ser expressa da seguinte forma :

$$y_r = \sum_{r'=0}^R \left[y_{rr'} + \sum_{m=1}^{M_r} y_{r,r'm} \right] \tag{3.4}$$

Sendo :

- R** n° total de unidades do sistema (planta) ;
- r** índice relativo à unidade ;
- r'** índice relativo a unidade que recebe parcela de y_r ;
- m** índice do efluente a ser tratado ;
- M_{r'}** número de efluentes emitidos pela unidade r ;

Cada função (y) acima é definida por expressões analíticas da seguinte maneira :

$$y_{rr'} = Y_{rr'}(\mathbf{v}_{r'}, y_{r'}) \tag{3.5a}$$

$$y_{rr'm} = Y_{rr'm}(\mathbf{v}_{r'}, \mathbf{v}_{r'm}, y_{r'}) \tag{3.5b}$$

Ou para representar os recursos do exterior,

$$y_{okr} = Y_{okr}(\mathbf{v}_r, y_r) \tag{3.5c}$$

$$y_{okrm} = Y_{okrm}(\mathbf{v}_r, \mathbf{v}_{rm}, y_r) \tag{3.5d}$$

Cada recurso, $y_{r,r}$, que a unidade utiliza deve ser expresso através de parâmetros da unidade, sejam de projeto ou de operação e o produto da mesma. Abaixo um exemplo de um recurso sendo expresso em função de entalpias e do desempenho, η , da unidade :

$$y_{4,3} = \frac{(h_3 - h_4) y_3}{(h_3 - h_2) \eta_3}$$

Consiste num recurso, $y_{4,3}$, que a unidade (4) fornece a (3). Se as temperaturas e pressão no ponto (3) e a eficiência são as variáveis livres que deverão ser escolhidas na análise, o vetor v é composto de (η_3, h_3).

As emissões podem ser definidas de várias maneiras, mas genericamente são apresentadas da seguinte forma :

$$p_{rm} = P_{rm}(v_r, v_{rm}, y_r) \tag{3.6}$$

De modo semelhante, toda a distribuição de recursos (internos ou externos), produtos e emissões e seus respectivos custos e benefícios se associam num balanço econômico. Abaixo já se apresenta a função objetivo do problema de otimização a ser solucionado posteriormente - **Min Custos Anualizados.**

$$\begin{aligned} \text{Min } F = & \sum_{r=1}^R \left[Z_r + \sum_{m=1}^{M_r} Z_{rm} \right] + \sum_{r=1}^R \left\{ \sum_{k=1}^{K_r} \left[\int_t \dot{\Gamma}_{0kr} dt \right] + \sum_{m=1}^{M_r} \sum_{k=1}^{K_{rm}} \left[\int_t \dot{\Gamma}_{0krm} dt \right] \right\} + \\ & + \sum_{r=1}^R \sum_{m=1}^{M_r} \left[\int_t \dot{\Gamma}_{rm} dt \right] - \sum_{r=1}^R \left[\int_t \dot{\Gamma}_{r0} dt \right] \end{aligned} \tag{3.7}$$

onde os símbolos têm os seguintes significados :

- Z Custo de capital anualizado de cada unidade r e rm;
- Z_r, Z_m Vetor de decisões a nível de estrutura da unidade e do sistema despoluidor ;
- Y_r Fluxo absoluto do produto da unidade r ;
- K_r N° de recursos naturais utilizados na unidade r ;
- K_{rm} N° de recursos naturais utilizados no dispositivo rm ;
- Γ_{0kr} Custo de y_{0kr} (recurso natural k consumido na unidade r) ;
- Γ_{0krm} Análogo ao anterior, utilizado na unidade despoluidora rm ;
- Γ_{rm} Multa relativa ao poluente m emitido pela unidade r ;
- Γ_{r0} Valor do bem econômico produzido pela unidade r a ser vendido ao meio exterior.

Com mais as seguintes relações funcionais :

$$Z_r = Z_r(z_r, Y_r) \qquad Z_{rm} = Z_{rm}(z_{rm}, p_{rm}) \tag{3.8)a \& b}$$

para os custos instalados das unidades (r) e dos dispositivos de controle ambiental (rm). Para os recursos e os preços de venda dos produtos,

$$\Gamma_{0kr} = \Gamma_{0kr}(y_{0kr}) \quad \Gamma_{0krm} = \Gamma_{0krm}(y_{0krm}) \quad (3.9)a \ \& \ b$$

$$\Gamma_{rm} = \Gamma_{rm}(p_{rm}) \quad \Gamma_{r0} = \Gamma_{r0}(y_{r0}) \quad (3.9)d \ \& \ c$$

A expressão anterior (Equação (3.7)) está em sua forma geral considerando inclusive a variação temporal dos cenários econômicos e físicos do exterior. Desta forma pode-se prever diferentes escalas de produção ao otimizar o sistema e as variações nos cenários econômicos e ambientais.

Todos os resultados da otimização estão fortemente ligados aos critérios do analista. Assim, espera-se que sejam ponderadas as grandezas econômicas, físicas e ambientais de forma a atender a empresa e a comunidade, mesmo que para isto a comunidade venha a impor um cenário ambiental rígido.

O Lagrangeano da função objetivo (Equação (3.7)) com as restrições (Equação (3.4,5,6,8,9)) fica da seguinte maneira :

$$L = \sum_{r=1}^R \left\{ \left[B_r + \sum_{m=1}^{M_r} (B_{rm} + \lambda_{rm} P_{rm}) - \lambda_r y_r \right] + \sum_{k=1}^{K_r} (\Gamma_{0kr} - \lambda_{0kr} y_{0kr}) + \right. \\ \left. \sum_{m=1}^{M_r} \sum_{k=1}^{K_{rm}} (\Gamma_{0krm} - \lambda_{0kr} y_{0krm}) + \sum_{m=1}^{M_r} (\Gamma_{rm} - \lambda_{rm} P_{rm}) - (\Gamma_{r0} - \lambda_r y_{r0}) \right\} \quad (3.10)$$

nos quais,

$$B_r \equiv Z_r + \sum_{r=1}^{K_r} \lambda_{0kr} Y_{0kr} + \sum_{r'=1}^R \lambda_{r'r} Y_{r'r} \quad (3.11)a$$

$$B_{rm} \equiv Z_{rm} + \sum_{r=1}^{K_r} \lambda_{0krm} Y_{0krm} + \sum_{r'=1}^R \lambda_{r'rm} Y_{r'rm} \quad (3.11)b$$

Aplicando as condições necessárias de primeira ordem (Equação (1.7)) para o desenvolvimento anterior, pode se ter :

$$\nabla_v L(v, y, \lambda) = 0 \quad (3.12)a$$

$$\nabla_y L(v, y, \lambda) = 0 \quad (3.12)b$$

$$\nabla_\lambda L(v, y, \lambda)' = 0 \quad (3.12)c$$

Que levam aos seguintes resultados (Frangopoulos, 1992a):

$$\lambda_{rr'} = \lambda_r \\ \lambda_{r,r'm} = \lambda_r \quad (3.13)$$

$$\frac{\partial}{\partial v} \sum_{r=1}^R \left[B_r + \sum_{m=1}^{M_r} (B_{rm} + \lambda_{rm} P_{rm}) \right] = 0 \quad (3.14)$$

$$\lambda_r = \frac{\partial}{\partial y_r} \left[B_r + \sum_{m=1}^{M_r} (B_{rm} + \lambda_{rm} P_{rm}) \right] \quad (3.15)a$$

$$\lambda_{0kr} = \frac{\partial \Gamma_{0kr}}{\partial y_{0kr}} \quad , \quad \lambda_{0krm} = \frac{\partial \Gamma_{0krm}}{\partial y_{0krm}} \quad (3.16)a \text{ \& b}$$

$$\lambda_{rm} = \frac{\partial \Gamma_{rm}}{\partial p_{rm}} \quad , \quad \frac{\partial \Gamma_{r0}}{\partial y_{r0}} = \lambda_r \quad (3.17)a \text{ \& b}$$

Ainda pode-se expressar a Equação (3.15) da seguinte forma :

$$\lambda_r = \frac{\partial B_r}{\partial y_r} + \frac{\partial}{\partial y_r} \left[\sum_{m=1}^{M_r} (B_{rm} + \lambda_{rm} P_{rm}) \right] \quad (3.15)b$$

Por fim, o custo marginal de cada unidade pode ser separado em duas partes distintas, a parcela ambiental e operacional :

$$\lambda_r = \lambda_r^o + \lambda_r^e \quad (3.15)c$$

onde,

$$\lambda_r^e = \sum_{m=1}^{M_r} \mu_{r,m} \quad \lambda_r^o = \frac{\partial B_r}{\partial y_r} \quad (3.18)$$

para

$$\mu_{r,m} = \frac{\partial}{\partial y_r} [B_{r,m} + \lambda_{r,m} P_{r,m}] \quad (3.19)$$

As equações (3.11) a (3.19), estabelecem a economia interna do sistema. A Equação (3.14) estabelece as expressões de onde irão surgir as decisões ótimas.

Seja o caso de otimizar um sistema genérico em relação ao coeficiente de redução, ou eficiência de coleta, do sistema de controle ambiental (rm). A situação seria a seguinte :

$$\frac{\partial}{\partial \delta_{rm}} (B_{rm} + \lambda_{rm} P_{rm}) = 0 \quad (3.20)$$

A Equação (3.15)a representa um sistema linear, onde os termos geralmente conhecidos são os da transição para o exterior. Os cenários econômico, físico e ambiental em que a instalação se encontra são acoplados ao sistema através das equações (3.5) e (3.6).

Cada análise tem sua própria sequência de cálculo. No capítulo a seguir será apresentada uma cadeia ordenada de equações que devem ser calculadas para alimentar a Equação 3.15 e as rotinas de otimização.

Observa-se que ao construir o *diagrama funcional* do sistema, estará sendo montada uma matriz de incidência. Entretanto, para I.F.A. , esta matriz se reduz a definir as próprias funções e recursos (Equações (3.5) e (3.6)), pois indexando uma única vez aqueles valores através do valor da fonte para a destino, estará estabelecida por toda a resolução. Assim, os índices informam da seguinte maneira :

$$y_{(fonte, destino)}$$

Capítulo 4

ENVIRONOMICS NO CDQ

Introdução

Neste capítulo desenvolve-se o estudo termoeconômico no sistema apresentado no primeiro capítulo, com as características térmicas discutidas no segundo e fazendo uso de toda a metodologia apresentada no terceiro.

Para isto, propõe-se primeiramente o problema de uma forma geral e faz-se considerações sobre os cenários econômico, físico, ambiental e operacional em que será aplicada a metodologia. Por fim, apresenta-se todo o desenvolvimento e os resultados.

O sistema de apagamento de coque a seco, CDQ (Figura 1.4), será decomposto em *unidades* relacionadas através dos fluxos de **energia**. Os aspectos ambientais (sistemas de controle de partículas) serão postos da forma apresentada no terceiro capítulo, através de retângulos anexos às unidades. As emissões são representadas diretamente por fluxos de massa. Toda esta nova representação do sistema pode ser vista na Figura 4.1 referente ao *diagrama funcional*. Um maior detalhamento será visto no desenvolvimento da solução.

Ao implementar a abordagem por completo percebe-se que “...*informações podem ser conseguidas ao longo da modelagem e na Análise Funcional.*” (Frangopoulos, 1990a). Desta forma, a otimização do sistema não será o único benefício. A seguir, poder-se-á ver resultados interessantes tais como os custos marginais associados a cada unidade e aos dispositivos de controle ambiental, parâmetros operacionais e outras informações.

A primeira e mais importante consideração é saber quem é o *decisor*. Isto é fundamental, pois define-se todas as habilidades e deficiências com as quais será construído o modelo. No o caso proposto, o *decisor* desenvolve projetos em Meio Ambiente e não é responsável pelos questões térmicas, operacionais ou econômicas.

Outro aspecto importante ao realizar decisões é que, somente se compara as diferenças entre as alternativas. Isto propicia construir modelos mais simples, excluindo detalhes que não diferem em relação as várias alternativas. Algumas vezes são estas considerações que viabilizam um análise.

4.1 - Diagrama Funcional

O CDQ foi dividido em 4 *unidades* : câmara, corpo, caldeira e uma auxiliar fictícia. A Análise Funcional foi elaborada com base na energia que cada uma delas recebe, "consome" e distribui. As relações entre elas e o meio exterior podem ser melhor entendidas através do diagrama funcional (Figuras 4.1).

Observando o diagrama funcional, pode-se ver que o novo sistema opera basicamente da seguinte forma : a unidade (2) fornece energia ao exterior através do fluxo de vapor e, para isto, requer a energia do gás circulante fornecida pela unidade (3). Esta por sua vez, se utiliza da energia liberada do coque na unidade (1), que tem seu produto dividido em dois fluxos, um para o exterior e o outro para gás de resfriamento ou circulante.

Descrição dos principais fluxos do Diagrama Funcional (Figura 4.1)

Fluxo	Descrição
Y _{0.1}	recurso do exterior (energia associada ao coque incandescente)
Y _{0.3}	recurso do exterior (energia consumida pelo soprador)
Y _{1.0}	produto ao exterior (energia associada ao coque extinto)
Y _{1.3}	parcela do produto da unidade 1 para unidade 3 (gás circulante)
Y _{3.2}	parcela do produto da unidade 3 para unidade 2 (gás circulante - útil)
Y _{3.4}	parcela do produto da unidade 3 para unidade 4 (gás circulante - perdas)
Y _{2.0}	produto ao exterior (energia associada ao vapor produzido)
Y _{2.4}	parcela do produto da unidade 2 para unidade 4 (vapor para atmosfera)
Y _{4.0}	produto ao exterior (perdas total)
Y _{0.k.1.m}	recursos do exterior para as unidades de controle ambiental (k = 1,2,3 e m = 1,2)
Y _{0.1.1.m}	recursos do exterior para o controle ambiental da unidade 3 (m = 2,3)
P _{1.m}	emissões nos sistemas de controle ambiental (m = 1,2)
P _{3.3}	emissão de particulados sem controle através dos Bleeders (m = 1,2)

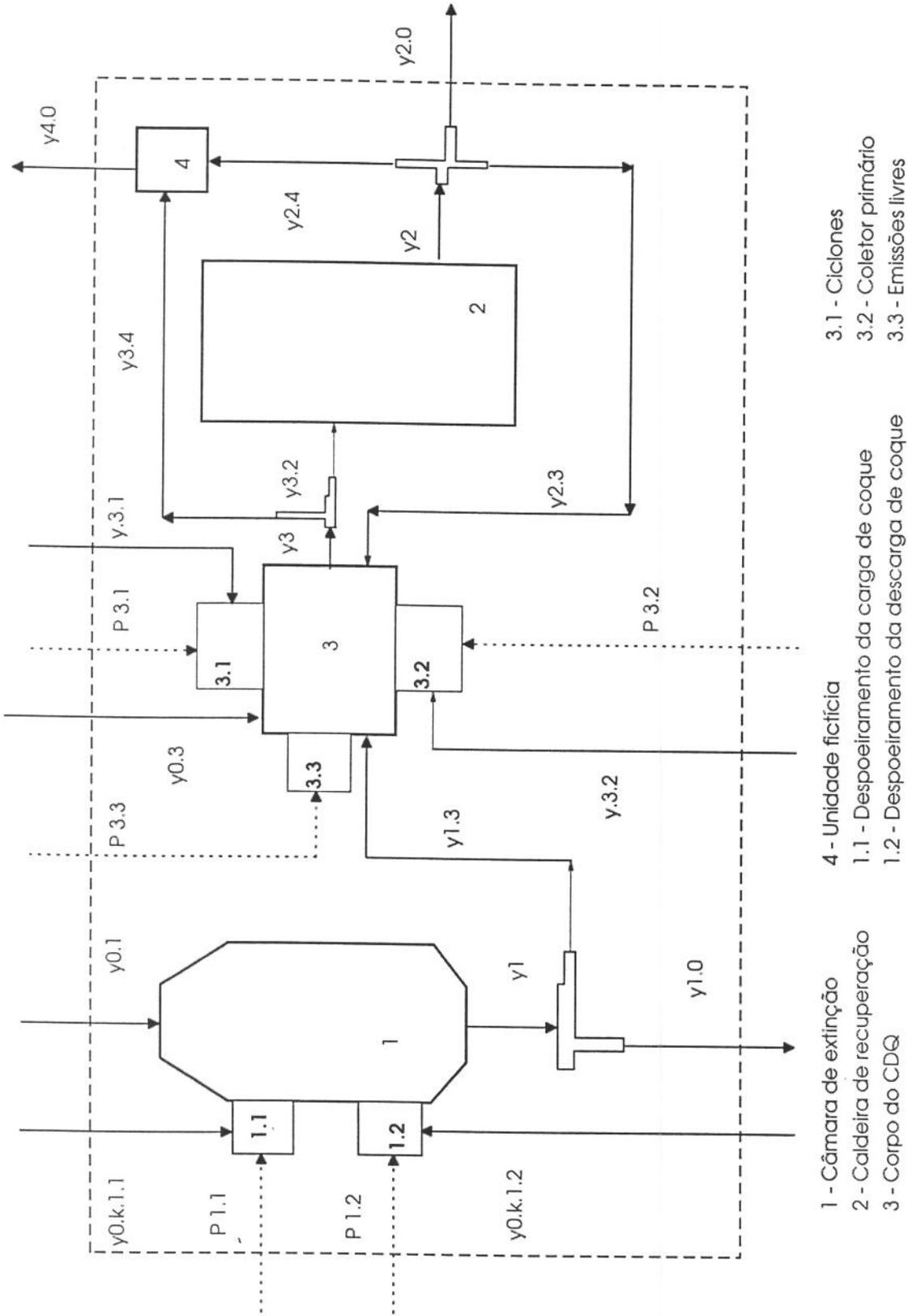


Figura 4.1 - Diagrama Funcional do CDQ

4.2 - Cenários

Físico

Todo o cenário físico pode ser visto no capítulo 2. Alguns fluxos são simplificados outros suprimidos, conforme a ótica e as necessidades do decisor. Afinal, o objetivo é fornecer uma ferramenta de **apoio** a decisão. Todas as simplificações físicas serão traduzidas na forma de eficiências e rendimentos, de maneira a diminuir os eventuais desvios. Algumas considerações particulares são apresentadas durante o desenvolvimento.

Operacional

O cenário operacional básico já foi apresentado no primeiro capítulo. A produção de coque e a demanda de vapor permaneceram constantes. Não se inclui paradas, ou qualquer fenômeno transitório.

Econômico

Este é o cenário mais difícil de se determinar. A interface com o mundo econômico é fundamental e, se estabelecido inadequadamente, pode comprometer toda a análise. Em contrapartida, empenhar-se em obter equações de custos precisas, taxas de atratividade exatas, variações de preços no mercado, poderá demandar tanto tempo e recursos que inviabilizaria o trabalho. A solução encontrada pelo *decisor* deste trabalho foi aproximar ou assumir valores para estabelecer um cenário inicial. Ao final, realiza-se uma análise paramétrica para saber o tanto que sua decisão é sensível a erros, ou mesmo, a uma mera mudança do cenário.

O objeto de estudo, o CDQ, não é fabricado em linha e não há muitos fabricantes para que se estabeleça um mercado de sistemas de apagamento de coque a seco. Em Pacheco *et al*, 1985, se dispunha do custo total de investimento do CDQ. Este montante inicial foi parcelado para as três unidades básicas do modelo (Figura 4.1) da seguinte maneira 30, 40 e 30 % para as unidades 1, 2 e 3, respectivamente. Além disto, foi necessário atualizar estes valores de março de 1985 para março de 1994, utilizando a Equação (1.1) e uma inflação média anual de 3,5 % em US\$.

Na metodologia, deve-se trabalhar com os custos anualizados. Para tanto, fez se uso da Equação (1.13) e uma taxa de atratividade de 18 % a.a.(Frangopoulos, 1983)¹. Os valores para os custos anualizados das unidades para uma vida útil de 15 anos são apresentados na Tabela 4.1.

¹ Este índice não corresponde ao usado na CST e nem altera o conteúdo científico deste trabalho.

Tabela 4.1. Custos anualizados das unidades

Unidade	US\$ / ano
(1) Câmara - Z ₁	377.363,53
(2) Caldeira - Z ₂	503.151,37
(3) Corpo - Z ₃	377.363,53
(4) Fictícia - Z ₄	0
CDQ	1.275.878,43

Para os custos instalados dos sistemas de controle ambiental é utilizada uma expressão empírica (Equação 4.1), sugerida em (Roberts, 1984 ; Tabela 8), que representa uma amostra com 53 equipamentos de controle de emissões de partículas. No entanto, foi constatado que tal equação era inadequada aos sistemas adquiridos pela CST e, portanto, deveria ser modificada. Uma pequena alteração em seu coeficiente de proporcionalidade, a , foi realizada atualizando-a com referência à aquisição dos equipamentos de controle ambiental realizada pela CST (NEU, 1993 ; 1994).

$$Z_{1,m} = a \cdot (Q_{r,m})^{0,96} \cdot \left(\frac{\delta_{1,m}}{1 - \delta_{1,m}} \right)^{0,3} \quad [\text{US\$ / h}] \quad (4.1)$$

onde Q_{rm} corresponde à vazão de efluente determinada em NEU, 1994 e δ_{rm} à eficiência mássica de coleta de partículas no dispositivo rm . O valor de a corrigido é :

$$a = 251,03 \times 10^{-6}$$

Os custos dos recursos utilizados do exterior são apresentados na tabela abaixo :

Tabela 4.2. Custos e preços de recursos e produtos.

Item	Símbolo	Preço [US\$]
Custo do coque [ton] 1	C_{coque}	90
Eletricidade [MWh] 2	C_{el}	28,2475
Ar comprimido [Nm ³] 3	C_{ar}	0,2
Preço do vapor [ton] 4	P_{v}	8,445
Preço do coque [ton] 1	P_{coque}	120
Finos de coque [ton] 1	P_{finos}	100

1 - Sanchas da Cruz, 1994 2 - CPFL, 1991 3 - Peters & Timmerhaus, 1991 4- estimado

As expressões de custos que são utilizadas no modelo são apresentadas na tabela abaixo. Os termos não conhecidos por ora serão definidos posteriormente.

Tabela 4.3. Expressões de custos e receitas para *Environomics*.

Ítem	Γ [US\$ / h]
Custo do coque - $y_{0,1}$	$C_{coque} \cdot \frac{y_{0,1}}{h_{inc}}$
Eletricidade - $y_{0,3}$	$C_{el} \cdot y_{0,1,1,m}$ $C_{el} \cdot y_{0,3}$
Ar comprimido - $y_{0,2,1,m}$	$C_{ar} \cdot y_{0,2,1,m}$
Receita de vapor - $y_{2,0}$	$P_v \cdot \frac{y_{2,0}}{h_v - h_a}$
coque - $y_{1,0}$	$P_{coque} \cdot \frac{y_{1,0}}{h_{ext}}$
Finos de coque vendidos - $y_{0,3,1,m}$	$-P_{finos} \cdot y_{0,3,1,m}$

O cenário econômico se conclui com as expressões da tabela acima.

Ambiental

As considerações ambientais são baseadas em dados de projeto do novo sistema de despeiramento para a carga e descarga do coque nos CDQ's (NEU, 1994).

No diagrama funcional, os dispositivos de controle ambiental foram representados pelos "retângulos" anexos a cada unidade. Os sistemas de despeiramentos para carga (1.1) e descarga (1.2) estão associados à unidade 1 (Câmara). O ciclone (3.1) e o coletor primário (3.2), à unidade 3 (Corpo do CDQ). À unidade 3 também se anexou um terceiro dispositivo de controle ambiental representando as emissões nos *Bleeders* e a capacidade de todo o CDQ de reter as partículas.

Partindo da premissa que já se esteja atendendo aos padrões oficiais de emissão, é sugerido que se associe uma receita potencial perdida associada a vazão mássica de pó lançada à atmosfera da seguinte maneira :

$$\Gamma_{r,m} = P_{finos} \cdot p \quad [\text{US\$ / h}] \quad (4.2)$$

Estabelecidos os cenários da análise, passa-se a descrever cada unidade e suas interrelações com as outras e o exterior.

4.3 - Modelo funcional

A partir deste ponto, irá se descrever cada unidade, seus recursos, as considerações e as equações obtidas conforme a metodologia apresentada no terceiro capítulo* .

* Toda descrição será melhor compreendida se acompanhada da Figura 4.1.

A sequência em que serão descritas as unidades é a mesma a ser implementada nos algoritmos de otimização. Há uma ordem natural de se calcular os produtos e recursos. Inicia-se pela unidade 2.

Unidade 2

A unidade 2 é responsável pela produção de $y_{2,0}$, que corresponde ao vapor gerado na caldeira de recuperação do CDQ. Para realizar tal tarefa, esta unidade também produz $y_{2,4}$, que corresponde ao vapor saturado lançado à atmosfera.

Para melhor identificar os fluxos, define-se χ_2 representando a parcela da água convertida em vapor útil e, seu complemento $(1 - \chi_2)$, a parte lançada à atmosfera. Desta maneira,

$$\chi_2 = \frac{m_v}{m_a} \quad (4.3)$$

Os produtos desta unidade são definidos abaixo (Equações 3.5).

$$y_{2,0} = m_a \cdot \chi_2 (h_v - h_a) \quad (\text{vapor útil produzido}) \quad (4.4)$$

$$y_{2,4} = m_a \cdot (1 - \chi_2) \cdot (h_{sat} - h_a) \quad (\text{vapor p/ atmosfera}) \quad (4.5)$$

e são parcelas de um único produto (Equação 3.4),

$$y_2 = y_{2,0} + y_{2,4} \quad (4.6)$$

Pode se observar que o produto $y_{2,0}$ não é propriamente o vapor, e sim a entalpia líquida correspondente ao seu fluxo.

Para realizar esta tarefa, a unidade 2 consome o recurso $y_{3,2}$ proveniente da unidade 3. O recurso para 2 é uma ramificação do produto da unidade 3 e pode ser expresso da seguinte maneira (Equação 3.5a):

$$y_{3,2} = \frac{y_2}{\eta_2} \quad (\text{Energia fornecida pelo gás circulante}) \quad (4.7)$$

η_2 - eficiência funcional da caldeira.

Afim de construir um simulador, incorporam-se as leituras com suas incertezas na eficiência térmica. Deste modo, define-se com os valores da Tabela 2.30:

$$\eta_2 = \frac{\Delta H_{vapor}}{\Delta H_{gás}} \cong 1,04 \cong 1 \quad (4.8)$$

¹ Discussão no Apêndice D.

O custo instalado da unidade 2 pode ser visto na Tabela 4.1 e a ganho por produzir vapor na Tabela 4.3.

Para se montar o sistema de equações esquematizado na Equação (3.15), aplica-se as equações (4.4) a (4,7) na Equação (3.11)a, e tem-se :

$$B_2 = Z_2 + \lambda_3 \cdot \frac{y_2}{\eta_2} \quad (4.9)$$

Como não foi associado qualquer aspecto ambiental à caldeira, o custo marginal da produção do vapor, definido através da Equação (3.15)b, é :

$$\lambda_2 = \frac{\partial}{\partial y_2} \left[Z_2 + \lambda_3 \cdot \frac{y_2}{\eta_2} \right] \quad (4.10)$$

Unidade 3

A *unidade* (3) representa toda a estrutura (corpo) do CDQ, os sopradores e partes auxiliares. Sua função básica é alimentar a unidade (2) (caldeira) com energia através da circulação do gás de resfriamento do coque, representado por $y_{1,3}$.

Há apenas um recurso externo sendo utilizado pela unidade 3 para produzir y_3 e considerados três sistemas de controle ambiental, o coletor primário (3.2), os ciclones (3.1) e o sistema de alívio inferior (3.3). Deste modo $K_3 = 1$ e $M_3 = 3$.

Da Equação (3.5) e da Figura 4.1 pode-se obter :

$$y_3 = y_{3,2} + y_{3,4} \quad (4.11)$$

$$\text{onde, } y_{3,2} = \frac{y_2}{\eta_2} \quad (\text{Equação 4.7})$$

$$y_{3,4} = \dot{E}_{\text{finos}} + \dot{Q}_{\text{amb}} \quad (\text{perdas para o exterior}) \quad (4.12)$$

sendo,

$$\begin{aligned} \dot{Q} &= 227.250 \text{ kcal / h} & \text{ou} & \quad \dot{Q} = 264,3 \text{ kW} \\ \dot{E}_{\text{finos}} &= 79.746 \text{ kcal / h} & \text{ou} & \quad \dot{E}_{\text{finos}} = 92,74 \text{ kW} \end{aligned}$$

O fator χ_3 representa a parcela de y_3 que segue para a caldeira, $y_{3,2}$, e pode ser expresso da seguinte maneira :

$$\chi_3 \equiv \frac{y_{3,2}}{y_3} \quad (4.13)$$

¹ Tabela B.23

Para expressar o recurso utilizado do exterior, foi necessário determinar a perda de carga no circuito do gás de resfriamento, sua vazão e a eficiência global do soprador. Deste modo, foi associado um coeficiente c_b , que ao multiplicar a função da unidade 3, $y_{3,2}$, expressa diretamente a potência elétrica necessária para circular o gás. Logo, o recurso potência elétrica, $y_{0,3}$, pode ser expresso da seguinte forma :

$$y_{0,3} = y_{0,1,3} = \chi_3 \cdot y_3 \cdot c_b \quad [\text{kW}] \quad (4.14)$$

onde,

$$c_b = \frac{\Delta p \cdot 10^{-3}}{\Delta h_g \cdot 3600 \eta_b} \quad \left[\text{kW} \frac{\text{h}}{\text{kcal}} \right] \quad (4.15)$$

para

$$\Delta p = 6563,88 \text{ Pa} \quad (\text{CST, 1993a}) \quad e,$$

$$\eta_b = 0,95 \quad (\text{Peters \& Timmerhaus, 1991}).$$

$$\Delta h_g = \frac{\Delta H_g}{Q_g} = 211,1097 \quad [\text{kcal} / \text{Nm}^3] \quad (\text{Tabela 2.23 \& 24}).$$

O outro e principal recurso utilizado é a energia retirada do coque, fornecida pela câmara de extinção (1). Da mesma maneira, foi atribuído uma eficiência à unidade 3 que engloba algum efeito da simplificação utilizada (modelo) e erros das medidas de campo. Então,

$$\eta_{1,3} = \eta_3 = \frac{\Delta H_g}{\Delta H_{\text{coque}}} = 1,10 \quad ^2 \quad (4.16)$$

$$y_{1,3} = \left(1 - \chi_3 \cdot c_b \frac{3600}{J} \right) \frac{y_3}{\eta_{1,3}} \quad (\text{gás circulante}) \quad (4.17)a$$

onde $J = 4,187 \text{ J} / \text{cal}$.

O custo instalado para esta unidade também está indicado na Tabela 4.1 e a despesa com o recurso $y_{0,3}$ pode ser vista na Tabela 4.3.

Aplicando a Equação (4.14) na (3.16)a obtém-se o custo marginal do recurso $y_{0,3}$.

$$\lambda_{0,1,3} = \lambda_{0,3} = \frac{\partial \Gamma_{0,1,3}}{\partial y_{0,1,3}} \quad (4.18)$$

Com a Equação (3.11)a, pode se ter outra equação do sistema de equações :

¹ Este coeficiente foi introduzido para facilitar a apresentação das equações e não contém qualquer significado físico específico.

² O valor esperado era menor que a unidade (100%), entretanto, para conciliar erros de leitura de campo, e propiciar um modelo realista, segundo as condições do observador, ou seja, os instrumentos de medida.

$$B_3 = Z_3 + \lambda_1 \left(1 - \chi_3 \cdot c_b \frac{3600}{J} \right) \cdot \frac{y_3}{\eta_3} + \lambda_{0.3} \cdot y_3 \cdot \chi_3 \cdot c_b \quad (4.19)$$

Foram definidos no diagrama funcional três dispositivos de controle ambiental na unidade (3). Entretanto, as emissões para atmosfera do coletor primário e dos ciclones são nulas. Deve-se considerar seus desempenhos, pois eles afetam diretamente as emissões no *Bleeder* inferior (3.3). Desta maneira, para efeito de estimativa, calcula-se a quantidade de material particulado não retido pelos ciclones ($m = 1$) e pelo coletor primário ($m = 2$) através da expressão abaixo.

$$p_{3,m} = (1 - \delta_{3,m}) \text{Finos} \cdot \dot{m}_{inc} \quad (4.20)a$$

onde, *Finos* e δ estão apresentados na tabela abaixo :

Tabela 4.4. Valores para *Finos*

Descrição	<i>Finos</i> [%]	<i>Eficiência</i> , δ [%]*
Ciclone (3.1) - <i>Cicl</i>	0,5667	99
Coletor Primário (3.2) - <i>Col</i>	0,1605	25
<i>Bleeder</i> Inferior (3.3)	—	15

* CST, 1993a

Os índices de geração de finos (Tabela 2.3 e 4.4) estão associados ao fluxo de coque. No entanto conforme requer a Equação (3.6), foi necessário correlacionar a função da *unidade* (3), y_3 , com os aqueles índices obtidos, *Col* e *Cicl*.

As *unidades* 1 e 3, estão associadas através do fluxo (energia retirada do coque). A expressão abaixo apresenta os termos η_1 e χ_1 que serão posteriormente definido nas equações (4.28) e (4.32), respectivamente. Assim, utiliza-se as equações (4.16) e (4.31)a para expressar-se $p_{3,m}$ em função de y_3 :

$$p_{3,m} = (1 - \delta_{3,m}) \cdot \frac{\text{Finos} \cdot \left(1 - \chi_3 \cdot c_b \frac{3600}{J} \right) y_3}{\eta_1 \cdot \eta_3 \cdot h_{inc} (1 - \chi_1)} \quad (4.20)b$$

As emissões do *Bleeder* inferior consistem das partículas que o ciclone não conseguiu coletar. Todavia, observa-se que nem toda esta quantia segue para atmosfera, pois o circuito do gás também tem uma capacidade, mesmo que muito pequena, de reter o pó. Desta maneira, as emissões em (3.3) são expressas por :

$$p_{3,3} = (1 - \delta_{3,3}) \cdot p_{3,1} \quad (4.21)a$$

ou,

$$p_{3,3} = (1 - \delta_{3,3})(1 - \delta_{3,1}) \cdot \frac{Cicl \cdot \left(1 - \chi_3 \cdot c_b \frac{3600}{J}\right) y_3}{\eta_1 \cdot \eta_3 \cdot h_{inc} (1 - \chi_1)} \quad (4.21)b$$

Os sistemas de controle ambiental da *unidade* 3 não utilizam recursos para realizar suas funções, entretanto, os *finos* coletados no coletor primário e nos ciclones são vendidos a uma taxa de 72,8 % da massa retida (Figura 1.10). Deste modo, os *recursos utilizados* nestes dispositivos, $y_{0,1,3,m}$, para (3.1) e (3.2) são expressos através de :

$$y_{0,1,3,m} = \delta_{3,m} \cdot \frac{Finos \cdot \left(1 - \chi_3 \cdot c_b \frac{3600}{J}\right) y_3}{\eta_1 \cdot \eta_3 \cdot h_{inc} (1 - \chi_1)} \cdot Venda \quad (4.22)$$

E para o *bleeder*, (3.3), $y_{0,1,3,3} = 0$.

Os custos instalados dos três dispositivos estão incluídos em Z_3 , portanto $Z_{3,1}$, $Z_{3,2}$ e $Z_{3,3}$ são nulos.

As despesas dos recursos para (3.1) e (3.2), baseados na Equação (3.11)b da Tabela 4.3, são apresentadas abaixo.

$$B_{3,m} = \lambda_{0,1,3,m} \cdot y_{0,1,3,m} \quad (4.23)$$

Os custos marginais destes recursos são obtidos da Equação (3.16)b com as expressões apresentadas na Tabela 4.3.

$$\lambda_{0,1,3,1} = \frac{\partial \Gamma_{0,13,1}}{\partial y_{0,13,1}} \quad \lambda_{0,1,3,2} = \frac{\partial \Gamma_{0,13,2}}{\partial y_{0,13,2}} \quad (4.24)a \ \& \ b$$

Conforme apresentado na Equação (4.2) as emissões são consideradas como *finos* de coque perdidos, e somente se manifestam no *Bleeder* (3.3). Então, o custo marginal por poluir, conforme apresentado na Equação (3.17)a, fica da seguinte forma :

$$\lambda_{3,3} = P_{finos} \quad (4.24)c$$

Por fim, o custo marginal do produto y_3 , expresso através da Equação (3.15), pode ser visto abaixo:

$$\lambda_3 = \frac{\partial}{\partial y_3} \left[B_3 + \sum_{m=1}^3 (B_{3,m} + \lambda_{3,m} P_{3,m}) \right] \quad (4.25)$$

Unidade 1

A *unidade* 1 representa a câmara e a pré-câmara - o percurso do coque. Sua função é separar a energia recebida do coque incandescente (1050 °C) em duas partes : uma associada ao coque extinto (180 °C) e outra ao gás circulante.

Há apenas um recurso externo sendo utilizado pela unidade 1 para produzir y_1 , e considerados dois sistemas de controle ambiental : ambos os sistemas de despoeiramentos (NEU,1993;1994). Deste modo $K_1 = 1$ e $M_1 = 2$.

A unidade 1 distribui seu produto da seguinte maneira : parte para o ambiente (1.0) e parcela para os gases de resfriamento de coque (1.3), sendo assim :

$$y_1 = y_{1.0} + y_{1.3} \quad (4.26)$$

E utiliza para isso, um recurso que depende da eficiência do processo,

$$y_{0,1} = \frac{y_1}{\eta_1} \quad (4.27)a$$

O recurso $y_{0,1}$ representa a energia (entalpia) associada ao coque incandescente e está relacionado com a *função* da unidade através de uma eficiência, η_1 . Esta eficiência compensa as simplificações realizadas, relativas aos fluxos de energia perdidos pelos sistemas de alívio, e é definida da seguinte maneira :

$$\eta_1 = 1 - \frac{\dot{Q}_{amb} + \dot{H}_{inf} + \dot{H}_{sup}}{\dot{H}_{inc}} \quad * \quad (4.28)$$

Também foi atribuído um *rendimento de coque*, ε_1 . Este coeficiente associa as perdas de coque através da combustão com o gás de resfriamento e do arraste de finos pelo mesmo, as parcelas coletadas nos dois sistemas de despoeiramentos e, por fim, o próprio erro no balanço de massa (~1%) (Tabela 2.15). Este rendimento também tem um caráter também operacional, pois tem sido um parâmetro indicador utilizado pelos operadores do CDQ e expresso através da razão entre os fluxos de coque observados na entrada (incandescente) e saída (extinto) da câmara (Equação 4.25a).

$$\varepsilon_1 = \frac{m_{ext}}{m_{inc}} \quad (4.29)a$$

Para expressar os fluxos de produto desta unidade, primeiramente apresenta-se a parcela que segue para o corpo do CDQ (unidade 3) através do gás circulante. Esta parcela depende diretamente do regime (fluxo) do gás de resfriamento (*Ver diagrama funcional na Figura 4.1*).

Visando manter a conservatividade do modelo (1ª Lei da Termodinâmica), a vazão de coque deve estar relacionada com as parcelas, $y_{1.0}$ e $y_{1.3}$. Então, para as propriedades termodinâmicas definidas, ou medidas, do coque na entrada e saída da câmara, determina-se o regime de operação da unidade 1.

* Discussão no Apêndice D.

Pode-se expressar $y_{1,0}$ da seguinte maneira :

$$y_{1,0} = \dot{m}_{ext} \cdot h_{ext} \quad (4.30)a$$

Das equações (4.22) , (4.23)a e (4.26), pode-se expressar o recurso $y_{0,1}$ do seguinte modo:

$$y_{0,1} = \dot{m}_{inc} \cdot h_{inc} = \frac{y_{1,3} + \dot{m}_{inc} \cdot \varepsilon_1 \cdot h_{ext}}{\eta_1} \quad (4.27)b$$

Deseja-se obter a vazão de coque incandescente, entretanto o rendimento de coque, ε_1 , foi definido pela razão entre as vazões. Para superar este impasse, foi determinando um rendimento típico baseado no balanço de massa, apresentado anteriormente na Tabela 2.15. Assim,

$$\varepsilon_1 = \frac{37,200}{38,133} = 0,97553 \quad (4.29)b$$

Então, arranjando os termos da Equação (4.26)b, determina-se a vazão de coque incandescente necessária para o fluxo de energia requerido à unidade 1 pela 3. Esta expressão é apresentada abaixo

$$\dot{m}_{inc} = \frac{y_{1,3}}{(\eta_1 \cdot h_{inc} - \varepsilon_1 \cdot h_{ext})} \quad (4.31)a$$

De maneira análoga, fazendo uso das Equações (4.30)a e (4.29), pode-se determinar a parcela do produto da unidade 1 que segue para o exterior :

$$y_{1,0} = \frac{\varepsilon_1 \cdot h_{ext} \cdot y_{1,3}}{(\eta_1 \cdot h_{inc} - \varepsilon_1 \cdot h_{ext})} \quad (\text{coque extinto}) \quad (4.30)b$$

Dos resultados anteriores, é proposto um parâmetro que represente as características principais do funcionamento da unidade 1, denominado χ_1 , e definido através da relação entre as energias (entalpias) associadas ao coque e os indicadores operacionais, ε_1 e η_1 .

$$\chi_1 = \frac{y_{1,0}}{y_1} = \frac{\varepsilon_1 \cdot h_{ext}}{\eta_1 \cdot h_{inc}} \quad (4.31)$$

Utilizando a expressão precedente, os produtos da unidade 1 podem ser expressos da seguinte maneira :

$$y_{1,0} = \chi_1 \cdot y_1 \quad (4.30)c$$

e

$$y_{1,3} = (1 - \chi_1) \cdot y_1 \quad (4.33)$$

Sob o ponto de vista da resolução do problema, torna-se conveniente expressar y_1 e $y_{1,0}$ através de $y_{1,3}$, pois é este último que determina o regime de operação da unidade 1 (o coque

extinto é consequência da energia retirada pelo gás circulante). Assim, o produto que segue para o ambiente, $y_{1,0}$, é :

$$y_{1,0} = \frac{\chi_1}{(1-\chi_1)} y_{1,3} \tag{4.30d}$$

O custo marginal do recurso $y_{0,1}$ utilizado por esta unidade é determinado através da Equação (3.16)a e da Tabela 4.3, e é apresentado abaixo :

$$\lambda_{0,1,1} = \frac{\partial \Gamma_{0,1,1}}{\partial y_{0,1,1}} = \frac{C_{coque}}{h_{inc}} \tag{4.34}$$

Por fim apresenta-se a Equação (3.11)a para esta unidade agrupando-se os recursos econômicos no indicador definido pela equação abaixo :

$$B_1 = Z_1 + \lambda_{0,1,1} \cdot \frac{y_1}{\eta_1} \tag{4.35}$$

A próxima etapa é desenvolver as questões referentes ao controle ambiental. À unidade 1 estão associados dois dispositivos de despoeiramentos denominados (1.1) e (1.2) indicados no *diagrama funcional* apresetado na Figura 4.1.

O dispositivo 1.1 consiste no complexo coifa-tubulação-filtros de manga-exaustores-chaminé , (NEU, 1994 ; Theodore & Buornicore, 1988) responsável pela coleta dos finos que se desprendem do coque incandescente durante seu carregamento na pré-câmara (Figura A.1). Analogamente, o sistema 1.2, com estrutura semelhante, é responsável pela coleta dos finos na descarga do coque extinto (parte inferior da câmara).

A emissão de ambos pode ser expressa segundo o regime de operação (fluxo de coque), a eficiência global de abatimento (δ) de cada um, e os respectivos índices locais de geração de finos, **Carga e Desc**.

Este índices são apresentados na tabela abaixo para síntese e seus valores foram extraídos da Tabela 2.3.

Tabela 4.5. Índice de geração de Finos para a unidade 1.*

Finos	Carga	Desc
Geração de finos (%)	0,0685	0,1599

A expressão para as emissões, comum em ambos os dispositivos, é apresentada abaixo com *Finos* indicando os índices mencionados na tabela anterior.

* Errera & Milanez, 1994

$$p_{1,m} = (1 - \delta_{1,m}) \cdot \text{Finos} \cdot m_{inc} \tag{4.36a}$$

Uma expressão para o fluxo de coque incandescente foi apresentada anteriormente (Equação 4.28a). Pode-se demonstrar que após os cálculos referentes ao proceso, a expressão abaixo também poderá ser utilizada para representar o fluxo de coque incadescente :

$$m_{inc} = \frac{y_1}{\eta_1 \cdot h_{inc}} \tag{4.31b}$$

Desta maneira, a Equação (4.36)a torna-se :

$$p_{1,m} = (1 - \delta_{1,m}) \cdot \text{Finos} \cdot \frac{y_1}{h_{inc} \cdot \eta_1} \tag{4.35b}$$

Os recursos utilizados em ambos os dispositivos estão apresentados resumidamente na tabela abaixo :

Tabela 4.6. Recursos nos dispositivos de controle ambiental (Errera & Milanez, 1994)

Descrição	recurso	Desp. Carga de coque 1.1	Desp. descarga de coque 1.2
Potência dos exaustores [kW]	$y_{0.1.1.m}$	52	101.3
Ar comprimido [Nm ³ /h]	$y_{0.2.1.m}$	115	385
Finos vendidos [kg / h]	$y_{0.3.1.m}$	$\delta_{1,m} \cdot \text{Finos} \cdot m_{inc} \cdot \text{Venda}^*$	

onde $Venda = 72.8 \%$ (Figura 1.10)

Os custos marginais associados a y_1 são dados pela Equação (3.16)b e são apresentados abaixo:

$$\lambda_{0.1.1.m} = \frac{\partial \Gamma_{0.1.1.m}}{\partial y_{0.1.1.m}} = C_{el} \quad \lambda_{0.2.1.m} = \frac{\partial \Gamma_{0.1.1.m}}{\partial y_{0.2.1.m}} = C_{ar} \tag{4.37)a \& b}$$

$$\lambda_{0.3.1.m} = \frac{\partial \Gamma_{0.1.1.m}}{\partial y_{0.3.1.m}} = -P_{finos} \tag{4.37)c}$$

Contabilizando os recursos utilizados para a coleta do material particulado do efluente em (1.1) e aplicando na Equação (3.11)b obtém-se :

$$B_{1.1} = Z_{1.1} + \lambda_{0.1.1.1} \cdot y_{0.1.1.1} + \lambda_{0.2.1.1} \cdot y_{0.2.1.1} + \lambda_{0.3.1.1} \cdot y_{0.3.1.1} \tag{4.38}$$

Os termos $y_{0.3.1.m}$ estão associados à receita obtida da venda dos finos. Para que entrem de forma consistente no custeio, estes termos têm *custos negativos* e contribuem para abater as despesas totais de cada dispositivo.

De maneira análoga, pode-se chegar a

$$B_{1.2} = Z_{1.2} + \lambda_{0.1.1.2} \cdot y_{0.1.1.2} + \lambda_{0.2.1.2} \cdot y_{0.2.1.2} + \lambda_{0.3.1.2} \cdot y_{0.3.1.2} \tag{4.39}$$

Os custos marginais relativos às emissões p_{rm} 's são dados abaixo (Equação 4.2):

$$\lambda_{1,m} = \frac{\partial \Gamma_{1,m}}{\partial p_{1,m}} = P_{\text{finos}} \quad (4.40)$$

Conhecidas as expressões anteriores faz-se novamente uso da Equação (3.15)b e obtem-se:

$$\lambda_1 = \frac{\partial}{\partial y_1} \left[B_1 + \sum_{m=1}^2 (B_{1,m} + \lambda_{1,m} P_{1,m}) \right] \quad (4.41)$$

Unidade 4

A unidade (4) apenas auxilia a enfatizar o vapor que é lançado para atmosfera e a energia perdida através dos finos e por transferência de calor.

O produto desta unidade é a perda para o ambiente $y_{4,0}$. Desta maneira, a Equação (3.4) se torna :

$$y_4 = y_{4,0} \quad (4.42)$$

Para esta unidade, os recursos se configuram nas perdas das unidades 3 e 2. Ambos são apresentados abaixo :

$$y_{2,4} = m_a \cdot (1 - \chi_2) \cdot (h_{\text{sat}} - h_a) \quad (4.43)$$

$$y_{3,2} = m_a \cdot \chi_2 \cdot (h_7 - h_{6a}) = m_g \cdot (\Delta h_g) \quad (4.44)$$

É importante correlacionar os fluxos e, para isso, define-se

$$\chi_4 = \frac{y_{2,4}}{y_{2,4} + y_{3,4}} \quad (4.45)$$

Mesmo representando as perdas e sendo fictícia, pode-se associar um custo marginal ao produto y_4 (Equação 3.15b). Assim,

$$\lambda_4 = \frac{\partial}{\partial y_4} \left[(\chi_4 \cdot \lambda_2 + (1 - \chi_4) \cdot \lambda_3) y_4 \right] \quad (4.46)$$

Sistema de Equações

Ao juntar as equações (4.10) , (4.25), (4.41) e (4.46) forma-se um sistema linear para calcular os custos marginais do produto de cada unidade, λ_T . Constrói-se uma matriz de incidência determinando assim as relações entre as unidades (matriz **A**) e o exterior (vetor **b**). Este sistema de equações pode ser escrito da seguinte maneira :

$$A_{4 \times 4} \lambda_{4 \times 1} = b_{4 \times 1} \quad \text{ou,} \quad \alpha_{ij} \lambda_i = \beta_j \quad (4.47)$$

Decompondo os termos pode-se ter :

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \alpha_{23} & 0 \\ \alpha_{31} & 0 & 1 & 0 \\ 0 & \alpha_{42} & \alpha_{43} & 1 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \\ \lambda_3 \\ \lambda_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \beta_3 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (4.48)$$

Para a *unidade 1* pode-se expressar os custos marginais relativos a tudo envolvido com o controle da poluição como sugere a Equação (3.18) e obtém-se

$$\lambda_1^e = \frac{1}{\eta_1 \cdot h_{inc}} \left\{ \begin{array}{l} \text{Carga} \left[(1 - \delta_{1,1}) \lambda_{1,1} + \delta_{1,1} \cdot \text{Venda} \cdot \lambda_{0,3,1,1} \right] + \\ \text{Desc} \left[(1 - \delta_{1,2}) \lambda_{1,2} + \delta_{1,2} \cdot \text{Venda} \cdot \lambda_{0,3,1,2} \right] \end{array} \right\} \quad (4.49)$$

O coeficiente independente do sistema, β_1 , apresentado acima na Equação (4.48) para a unidade 1 fica do seguinte modo :

$$\beta_1 = \frac{\lambda_{0,1}}{\eta_1} + \lambda_1^e \quad (4.50)$$

Para a *unidade 2*, utilizando a Equação (4.10), tem-se

$$\alpha_{23} = -\frac{1}{\eta_2} \quad (4.51)$$

e o coeficiente independente fica da seguinte forma,

$$\beta_2 = 0 \quad (4.52)$$

Para *unidade 3* faz-se uso da Equação (4.19) :

$$\alpha_{31} = -\left(1 - \chi_3 \cdot c_b \frac{3600}{J}\right) \frac{1}{\eta_3} \quad (4.53)$$

Analogamente, os custos marginais relativos aos finos de coque coletado no ciclone e no coletor primário, ficam da seguinte forma:

$$\lambda_3^e = \frac{\left(1 - \chi_3 \cdot c_b \frac{3600}{J}\right)}{\eta_1 \cdot \eta_3 \cdot (1 - \chi_1) \cdot h_{inc}} \cdot \left[\begin{array}{l} (\lambda_{0,1,3,1} \cdot \delta_{3,1} \cdot \text{Cicl} + \lambda_{0,1,3,2} \cdot \delta_{3,2} \cdot \text{Col}) \cdot \text{Venda} + \\ (1 - \delta_{3,1}) \cdot (1 - \delta_{3,3}) \cdot \text{Cicl} \cdot \lambda_{3,3} \end{array} \right] \quad (4.54)$$

assim,

$$\beta_3 = \lambda_{0,3} \cdot c_b \cdot \chi_3 + \lambda_3^e \quad (4.55)$$

e finalmente para a *unidade 4*,

$$\begin{aligned}\alpha_{42} &= -\chi_4 \\ \alpha_{43} &= -(1 - \chi_4) \\ \beta_4 &= 0\end{aligned}\tag{4.56}$$

Como se pode observar, ao elaborar o *diagrama funcional* e definir as *funções* constrói-se o próprio modelo.

O sistema de equações está definido aplicando as equações (4.50)..(4.52), (4.55) e (4.56) em (4.48)

Este sistema de equações, juntamente com todo o desenvolvimento apresentado, demonstra a *economia interna* do sistema através de recursos físicos e econômicos.

Otimização

Realiza-se a otimização do sistema em relação às duas eficiências globais de abatimento (δ) dos dispositivos de despoejamento da *unidade* 1, (1.1) e (1.2). A função objetivo consiste no custo anualizado de controle ambiental das partículas, parcela da Equação (3.7).

Todo o modelo de otimização foi apresentado no terceiro capítulo.

Da Equação (3.14), o problema se reduz a um sistema de equações com dois graus de liberdade, representado pela equação abaixo :

$$\frac{\partial L}{\partial \delta_{1,m}} = 0\tag{4.57}$$

Com as devidas simplificações algébricas, a Equação (4.56) pode ser escrita da seguinte forma:

$$a \cdot Q^{0,96} \cdot \left\{ \frac{0,3 \cdot \delta_{1,m}^{0,7}}{(1 - \delta_{1,m})^{0,3}} + \frac{0,3 \cdot \delta_{1,m}^{0,3}}{(1 - \delta_{1,m})^{1,3}} \right\} + Finos \cdot \frac{y_1}{\eta_1 \cdot h_1} \cdot \{ \lambda_{0,3,1,m} \cdot Venda - \lambda_{1,m} \} = 0\tag{4.58}$$

onde *Finos* representa os índices *Carga* e *Desc* anteriormente definidos.

Na formulação do problema de otimização não foram consideradas as restrições de canalização, ou inequações. Todas estas restrições são implementadas diretamente no algoritmo de busca como limites de intervalos.

No anexo C, apresentam-se os resultados da análise funcional para os cenários estabelecidos anteriormente.

Resultados

Elaborado todo o modelo e o algoritmo de otimização, realizaram-se análises paramétricas sobre os parâmetros referentes aos aspectos ambientais - o preço de venda dos finos coletados.

Deve-se observar na Figura 4.2 que ao se elevar o preço de venda dos finos de coque, os ganhos incentivam o decisor a optar por sistemas mais eficientes, o que vem a ser um resultado muito consistente.

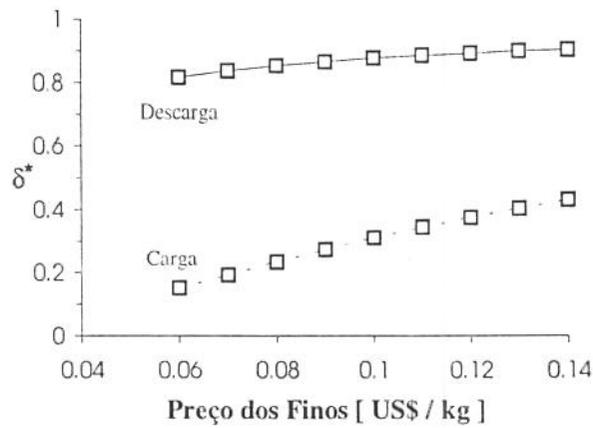


Figura 4.2. Eficiências ótimas para os despoeiramentos

Baseado na Figura 4.2, percebe-se que somente os ganhos por reciclagem podem não ser suficientes para se chegar a decisões favoráveis ao Meio Ambiente. O mais importante foi perceber que a ferramenta em estudo é sensível às considerações desta natureza. Cabe lembrar que uma boa decisão começa ao estabelecer adequadamente os benefícios e as penalizações.

No anexo C apresentam-se figuras ilustrando a convergência numérica¹.

Decisão

A questão de qual equipamento é o adequado ainda permanece. Neste momento o decisor utiliza a Figura 4.2 para dirigir sua decisão.

Para o sistema de despeiramento da descarga ($m = 2$) o decisor pode se sentir seguro e optar pela eficiência relativa ao preço dos finos de US\$100.00/ton, em observância que sua variação no mercado muito pouco altera seu ponto de otimalidade.

Para o sistema de despoeiramento da carga de coque incandescente, o decisor se encontra no seguinte dilema. Se dimensiona pela preço médio do finos no passado, corre o risco de deixar de ganhar caso aumente o seu valor, por outro lado, se o preço dos finos diminui, estará perdendo pois comprou equipamento além do necessário economicamente. Entretanto de um modo geral, se decidir considerando o preço dos finos em torno de US\$ 100.00/ton não deverá afetar o desempenho econômico de seu equipamento. Neste momento é que a experiência técnica do decisor, seu bom-senso de engenharia, se torna indispensável.

¹ Discussões sobre o comportamento numérico da solução fogem do escopo principal deste trabalho e por isto serão omitidas

Comentários Finais

Para melhor conhecer a ferramenta, foi realizado um ensaio sobre hipotéticas políticas ambientais estabelecidas matematicamente da seguinte forma :

$$Penal = Cm(p)^{ex} \tag{4.59}$$

Ao utilizar esta expressão em substituição a Equação (4.2) no modelo anterior, configura-se um novo cenário ambiental, agora penalizando economicamente a fonte causadora da emissão. Cada combinação dos coeficientes, Cm e ex , na Equação (4.58) estabelece uma política ou diretriz ambiental diferente.

Com o mesmo modelo utilizado nas seções precedentes, apresenta-se os pontos ótimos das eficiências globais de abatimento dos sistemas de despoeiramentos, $\delta^*_{1.m}$, para cada uma das diretrizes ambientais definidas pela Equação (4.59) na Figura 4.3.

O ensaio foi sobre um conjunto de 27 (9 x 3) cenários diferentes definidos de acordo com a Tabela 4.7.

Tabela 4.7 . Cenários Ambientais

Política/Diretriz	A	B	C
expoente, ex	1	1,5	2
Coefficiente Cm	0,06 a 0,14 US\$ / kg ex		

Na análise funcional realizada (Anexo C), foi utilizada a diretriz A com $Cm = 0,1$.

A figura abaixo ilustra como ocorre a penalização conforme as três políticas, A, B e C com coeficiente Cm fixo em 0,1.

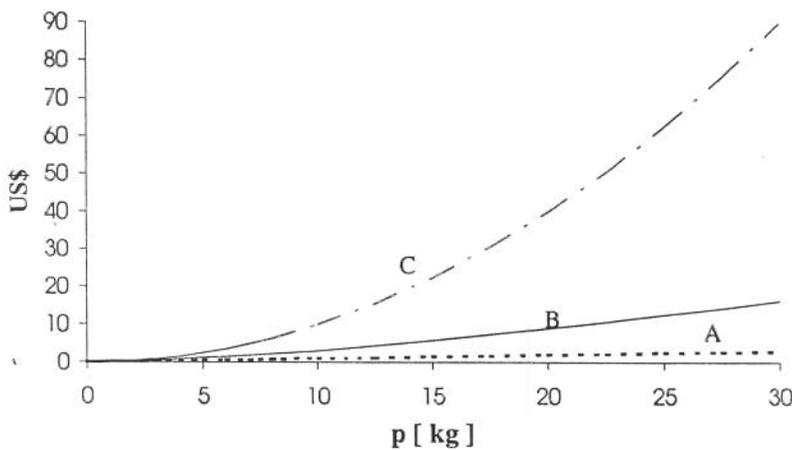


Figura 4.3. Representação gráfica de três diretrizes ambientais

Após realizar a otimização para cada um dos 27 cenários ambientais, elabora-se o seguinte gráfico :

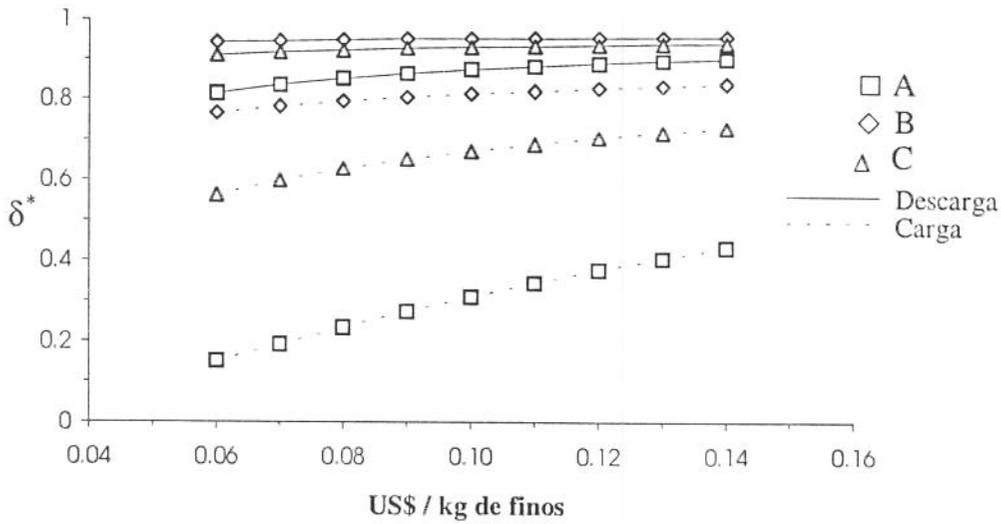


Figura 4.4. Decisões para vários cenários ambientais.

Pode se observar na figura anterior a tendência crescente do ponto ótimo de coleta de finos, $\delta^*_{1,m}$, com o preço dos mesmos. Estes resultados ilustram o compromisso entre a penalização por poluir e investimentos no seu controle. Na Figura 4.4 também pode se ver a sensibilidade das decisões ótimas em vários cenários ambientais.

Atualmente, a ferramenta maior da sociedade ainda é a penalização por poluir. No entanto, as indústrias podem se antecipar estabelecendo diretrizes e privilegiando de alguma forma as unidades de produção que reduzirem suas emissões.

Ainda na Figura 4.4, percebe-se que para a política **C** (Tabela 4.7), as decisões não sofrem muita influência e logo se saturam (assintótica). A política **A**, a mais branda, demonstra certa dificuldade em atingir patamares ambientalmente razoáveis. Outro fator preponderante na elasticidade destas curvas é quantidade de *finos* envolvida.

Para o sistema de despoejamento da descarga de coque, no qual ocorre a maior geração de *finos*, as curvas para as três políticas, são muito próximas e semelhantes, mostrando a importância da emissão total em massa e que as decisões não podem ser baseadas somente na emissão específica.

CONCLUSÕES

Dentro dos objetivos propostos inicialmente, pode se chegar às seguintes conclusões :

Análise Termodinâmica :

Na análise termodinâmica completa, foram observados pontos interessantes como :

- ☑ A importância de se conhecer o comportamento do calor específico com a temperatura, conforme ressalta Bejan, 1988 (p. 176) a respeito dos legados do *calórico* e da *calorimetria*;
- ☑ No balanço de exergia, foi constatada a relevância de se estender a visão ecológica ao processo em si sem se restringir às emissões;
- ☑ Um bom compromisso entre hipóteses simplificadoras e leituras de campo viabiliza a análise térmica sem degenerá-la;
- ☑ A modificação proposta no Diagrama de Grassman se mostrou muito adequada, pois atenua distorções como as que haveriam neste caso;

Termoeconomia com considerações ambientais no CDQ

A busca de uma ferramenta que considerasse os aspectos ecológicos em análises termoeconômicas fez com que se esclarecessem pontos comuns entre duas abordagens e suas origens. Através do conceito de *custo ecológico* (Szargut, 1986) abre-se novos caminhos, mesmo que mais no campo filosófico, para comparar os processos térmicos e o trânsito de recursos naturais pelo mundo.

As outras conclusões sobre termoeconomia estão relacionadas abaixo:

- ☑ O desempenho da abordagem num caso real foi muito satisfatório; permitiu conhecer parâmetros indicadores como χ_1 e χ_2 (Equações 4.32 e 4.6). O modelo pode ser utilizado como um simulador computacional, ou mesmo

implementado em planilhas de dados e, por fim, forneceu resultados consistentes na otimização realizada. Obter todos os resultados através da visão convencional do sistema de apagamento a seco seria mais complicado e limitado.

- ☑ A maior limitação desta, como certamente de qualquer outra metodologia aplicada em casos reais, é a obtenção dos cenários econômicos, físicos, operacionais e ambientais adequados. Expressões de custos, temperaturas, composições químicas, vazões, faixas de operação, emissões e capacidade dispersiva do meio podem degenerar as decisões de tal modo a tornar a decisão empírica melhor.

Até chegar às conclusões acima, percorreu-se um caminho de considerações e resultados relevantes como esta lista abaixo :

- ✓ Estudo termodinâmico completo em um sistema de apagamento de coque a seco ;
- ✓ Expressões para propriedades termodinâmicas do coque;
- ✓ Modificação no diagrama de Grassman;
- ✓ Implementação de uma abordagem moderna num caso real;
- ✓ Discussões sobre incentivos (diretrizes) ou penalizações (política) ambientais;
- ✓ Contribuições de ordem operacional, como a Equação (1.11).
- ✓ Apresentação aos conceitos básicos de Termoeconomia e considerações ecológicas da Segunda Lei da Termodinâmica;

Delimitar um trabalho tão abrangente como este não é uma tarefa fácil ; muitos detalhes poderiam ser acrescentados enriquecendo ambas as análises termodinâmicas e funcional. Outros caminhos e enfoques poderiam ser seguidos, no entanto ficam como continuação e sugestão para futuros trabalhos. Os próximos passos seriam os seguintes :

- ☞ Estabelecer um ciclo térmico para o gás de resfriamento.
- ☞ Sobre este ciclo, realizar análise termodinâmica com modelagem do escoamento na câmara de circulação e nos trocadores de calor da caldeira de recuperação;

- ☞ Subdividir a unidade 2 (caldeira) em suas partes principais, economizadores, evaporadores e superaquecedores ;
- ☞ Ainda no ciclo, fazer uso da metodologia proposta em Valero e Lozano, 1993 e compará-la com a Análise Termoeconômica Funcional de Frangopoulos, 1983;
- ☞ Realizar otimização multi-objetivo (Minimizar Custos, emssões e irreversibilidades) ;
- ☞ Desenvolver e analisar a viabilidade do aproveitamento da energia e exergia dos gases de exaustão (*bleeders*) ;
- ☞ Determinação da composição química ideal do gás circulante em função de seu aproveitamento energético e da perda de coque por combustão ;
- ☞ Estender a análise para toda a usina siderúrgica;
- ☞ Estimar os ganhos em *marketing* ao adotar diretrizes favoráveis ao Meio Ambiente através da Econometria e implementar na metodologia ;
- ☞ Determinar as temperaturas e pressões de entrada e saída, e as vazões de vapor e coque ótimas;
- ☞ No campo da decisão, sabe-se que cada sistema tem sua elasticidade a melhorias. Algumas estabilizam rapidamente e qualquer investimento extra, nada acrescenta no seu desempenho econômico ou termodinâmico. Fenômeno semelhante pode ser observado na Figura 4.4, ilustrando funções do tipo:

$$A = A_r(1 - e^{-e^j}) \quad (\text{Valero \& Lozano, 1994b ; Vol 1 ; p.127})$$

Aplicar estes conceitos nas análises termoeconômicas com considerações ambientais auxilia a determinar políticas que não sejam superestimadas, inviabilizando projetos industriais; nem brandas prejudicando o Meio Ambiente.



APÊNDICE A

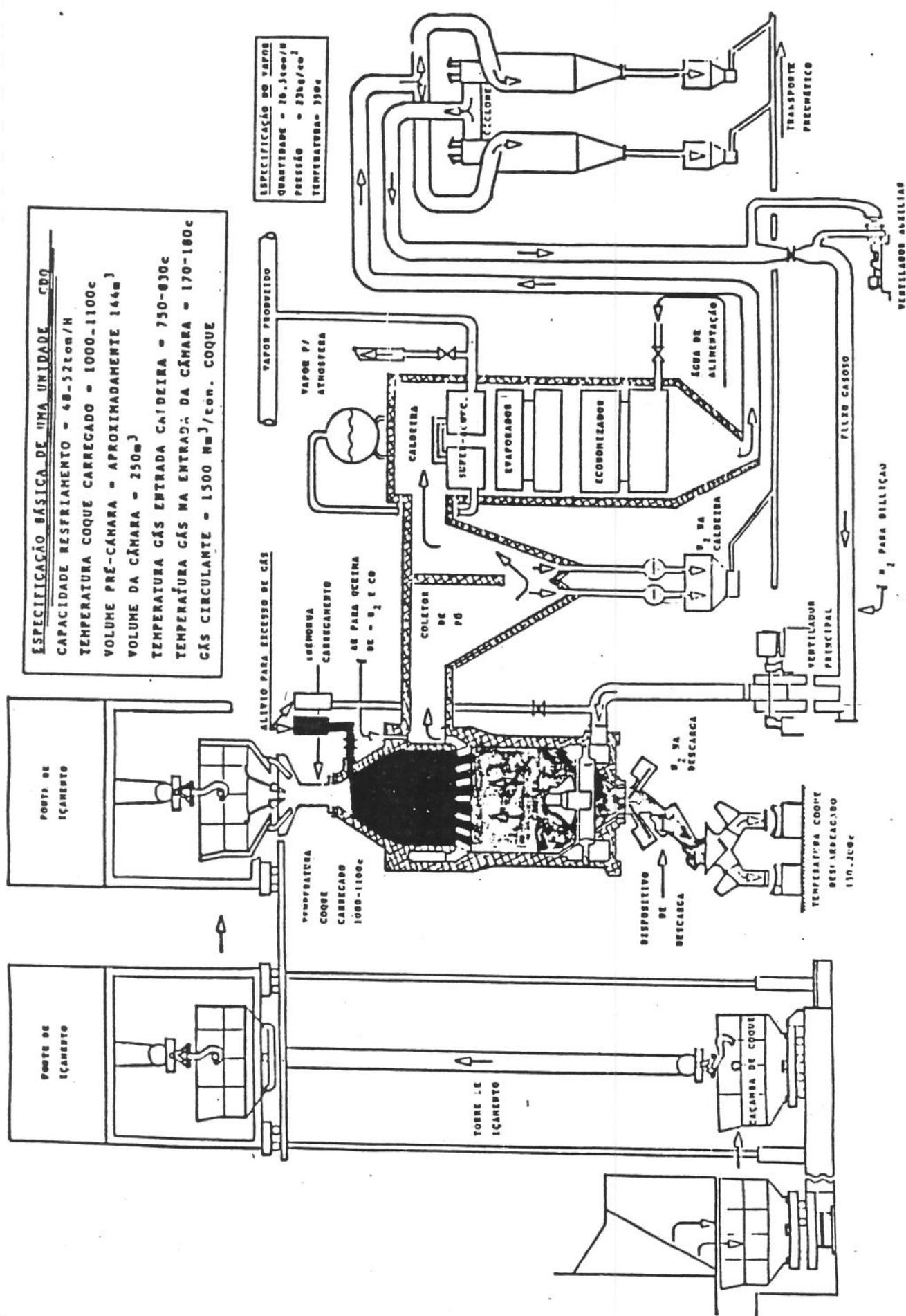


Figura A.1 - Esquema geral do CDQ. (Fonte : Coqueria / CST.).

42

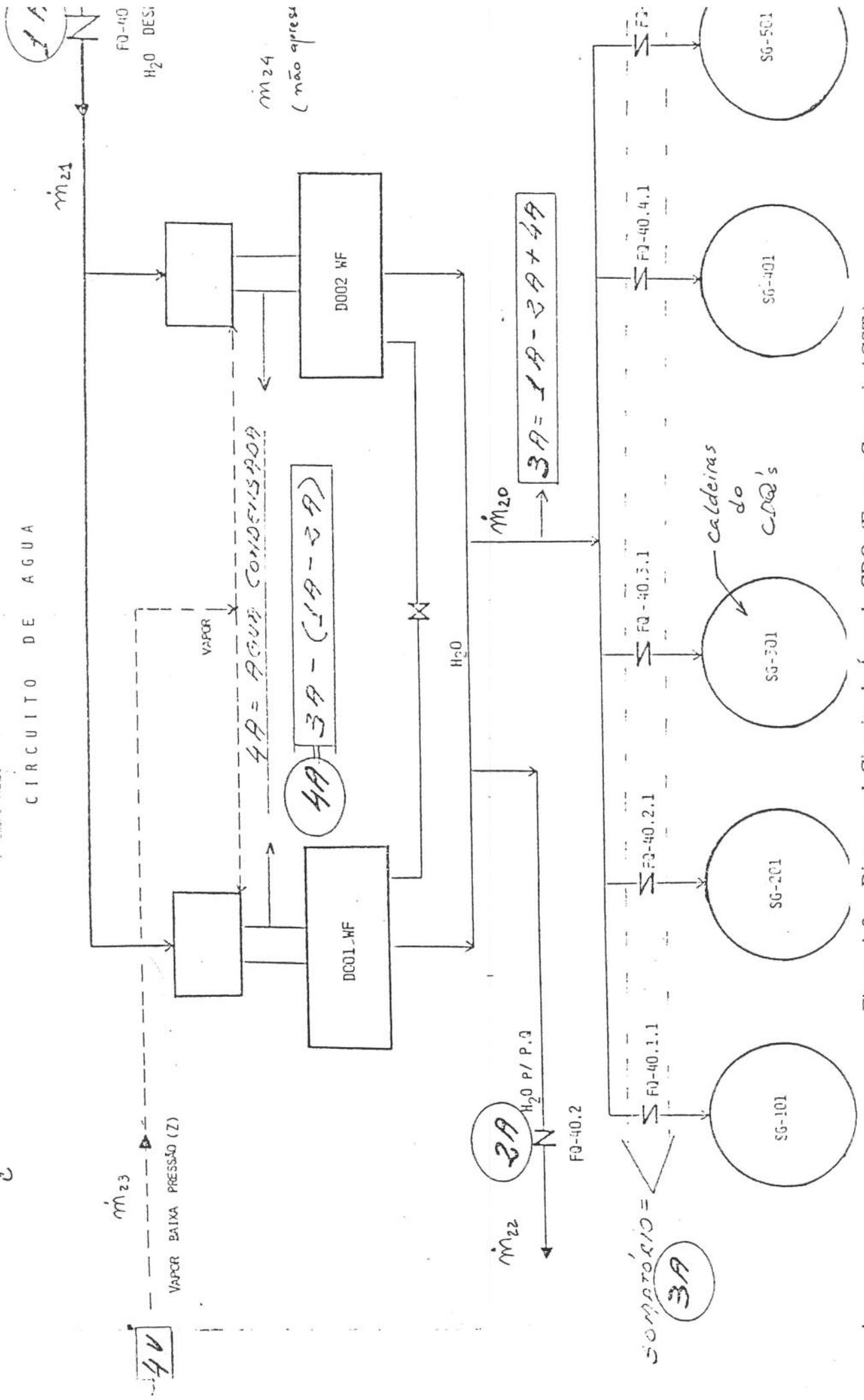


Figura A.2 - Diagrama do Circuito de Água do CDQ. (Fonte : Coquearia / CST.)

CA3

CIRCUITO DE VAPOR

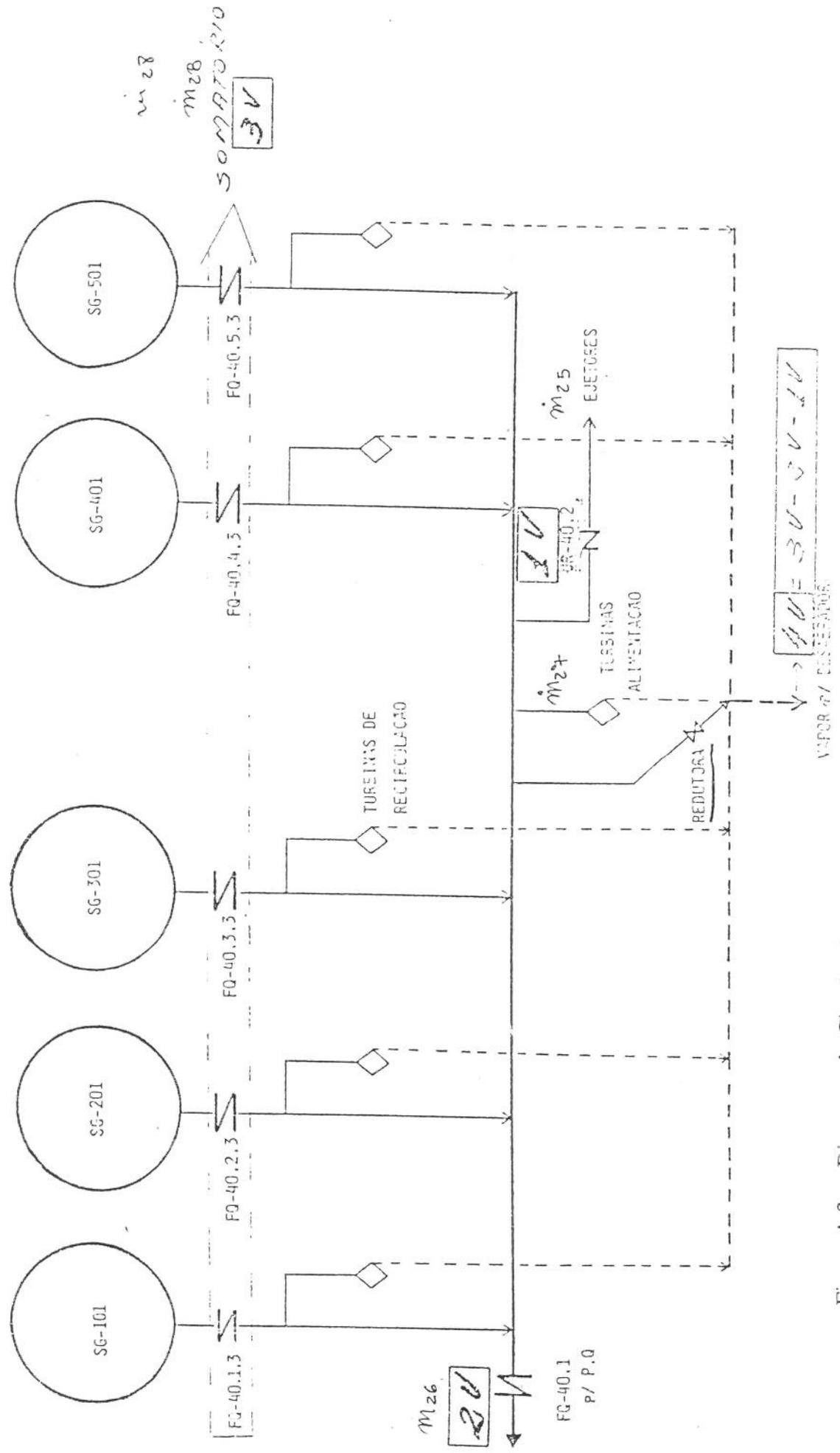


Figura A.3 - Diagrama do Circuito de Vapor do CDQ. (Fonte : Coqueria / CST).

APÊNDICE B

Cálculos para o balanço de gases no CDQ

Tabela B.1 - Bleeder Inferior

Substâncias	CO	CO ₂	O ₂	H ₂ O	TOTAL
kmol / h	9.597	4.945	0.236	1.021	*
kg / h	268.716	217.58	7.552	18.378	512.226
kg / h O	153.552	158.24	7.552	16.336	335.68

Tabela B.2 - Bleeder Superior

Substâncias	CO	CO ₂	O ₂	H ₂ O	TOTAL
kmol / h	4.74	1.46	0.39	0.27	*
kg / h	132.72	64.24	12.48	4.86	214.3
kg / h O	75.84	46.72	12.48	4.32	139.36

Total O₂ = 237.52 kg / h
 7.4225 kmol / h

Total N₂ = 27.9086 kmol /h
 781.4408 kg / h

Ar = 35.3311 kmol / h
 791.4166

Tabela B.3 - Nitrogênio Puro

Fonte	Bleed. Inf	Bleed. Sup	ar	N ₂ (puro)
kmol / h N ₂	-47.1	-13.9	27.9086	33.0914

Balanzo de Energia para os gases.

26 ago 94 (revisão)

Tabela B.4 - Entalpia de formação dos elementos (kJ / kmol)

H2	CO	CO2	O2	N2	H2O
0	-110530	-393520	0	0	-241.820.00

Fonte : Holmam, 1988.

Tabela B.5 - Fluxo de Energia gás circulante (entrada no VC - Câmara)

Q circ = 67424.87 (Nm3/h)

146 oC (419 K)			h-h0	h	Fluxo
Subst.	x %	kmol / h	kJ/kmol	kJ/kmol	kW
H2	3.98	119.7996	3514.64	3514.64	116.96
CO	14.65	440.9707	3535.83	-106994.17	-13,105.92
CO2	7.55	227.2579	4812.29	-388707.71	-24,538.03
O2	0.36	10.83614	3606.98	3606.98	10.86
N2	71.9	2164.218	3495.74	3495.74	2,101.54
H2O	1.56	46.95661	4108.46	-237711.54	-3,100.59
Total		3010.039	*	*	-38,515.18

Tabela B.6 - Fluxo de Energia gás circulante (saída do VC - Câmara)

Q circ = 67424.87 (Nm3/h)

750 oC (1023,15 K)			h-h0	h	Fluxo
Subst.	x %	kmol / h	kJ/kmol	kJ/kmol	kW
H2	3.98	119.7996	21386.98	21386.98	711.71
CO	14.65	440.9707	22458.28	-88071.72	-10,788.07
CO2	7.55	227.2579	34670.38	-358849.62	-22,653.17
O2	0.36	10.83614	23517.71	23517.71	70.79
N2	71.9	2164.218	22458.28	22458.28	13,501.28
H2O	1.56	46.95661	26940.58	-214879.42	-2,802.78
Total		3010.039	*	*	-21,960.24

Fluxo líquido do gás circulante = -16554.9382 (kW)

Fluxo de Energia nos sistemas de alívio

Tabela B.7 - Fluxo de Energia Bleeder Inferior

Q inf = 1467.347 (Nm3/h)

750 oC (1023,15 K)			h-h0	h	Fluxo
Subst.	x %	kmol / h	kJ/kmol	kJ/kmol	kW
H2	3.98	2.60716	3514.64	3514.64	2.55
CO	14.65	9.596708	3535.83	-106994.17	-285.22
CO2	7.55	4.945744	4812.29	-388707.71	-534.01
O2	0.36	0.235824	3606.98	3606.98	0.24
N2	71.9	47.0992	3495.74	3495.74	45.74
H2O	1.56	1.021902	4108.46	-237711.54	-67.48
Total		65.50654	*	*	-838.19

Tabela B.8 - Fluxo de Energia Bleeder Superior

Q inf = 454.5 (Nm3/h)

406 C (679,15 K)			h-h0	h	Fluxo
Subst.	x %	kmol / h	kJ/kmol	kJ/kmol	kW
H2	5.25	1.065234	11136.01	11136.01	3.30
CO	20.38	4.135138	11375.07	-99154.93	-113.89
CO2	3.6	0.730446	16738.93	-376781.07	-76.45
O2	0.96	0.194786	11818.12	11818.12	0.64
N2	68.5	13.89877	11298.57	11298.57	43.62
H2O	1.31	0.265801	13409.21	-228410.79	-16.86
Total		20.29018	*	*	-159.65

Fluxo total de energia dos bleeders = -997.846399 (kW)

Tabela B.9 - Calor específico do Gás Circulante

Subst.	x %	x*M (kg/kmol)	entrada saída	
			x*h	x*h
H2	3.98	7.96	13988.27	85120.18
CO	14.65	410.2	-1567465	-1290251
CO2	7.55	332.2	-2934743	-2709315
O2	0.36	11.52	1298.513	8466.376
N2	71.9	2013.2	251343.7	1614750
H2O	1.56	28.08	-370830	-335212
Total		28.0316	-46064.1	-26264.4

$C_{p_med} = 32.78091$ kJ / kmol
 1.169427 kJ / kg
 7.829212 kcal / kg
 0.349518 kcal / Nm³

Vazão do gás circulante

$Q = 67424.87$ (Nm³ / h)

$Q_{inf} = 1467.347$ (Nm³ / h)

Balanco Exergetico do CDQ

Nota : O balanço exergetico apresentado na tabela abaixo foi elaborado sem as considerações apresentadas no texto e por isto não corresponde ao balanço apresentado nas tabelas 2.32 e 2.33. Ainda, aqui pode-se observar como ele ficaria se fosse realizado da maneira usual. A diferença é relevante.

(Moran, 1982 ; Singh et al, 1980 ;Rodriguez, 1980 & Kotas, 1985)

Unidade Exergia : kW

$$Cp[K] = a.T + b$$

	% C =	85.1		% S =	0.64
	a =	0.000167		b =	0.140496
	T0 =	298.15			
	Cte2 =	-196.7770764		(calcular a ex tm)	
	R_u =	8.31			J = 4.187

Tabela B.10 - Fluxos de exergia no CDQ

Item	kg / h	T [K]	ex ch	ex tm	ex total	Ex total
Coque Incand.	37859.142	1323.15	29273.524	1289.92	30,563.44	321,418.24
Coque Extinto	37200	453.15	29273.524	66.87	29,340.39	-303,184.07
Ciclone	216.1	418.15	29273.524	46.35	29,319.88	-1,760.01
Coletor	61.27	1103.15	29273.524	865.02	30,138.54	-512.94
Carregamento	26.13	1323.15	29273.524	1289.92	30,563.44	-221.84
Descarga	60.07	453.15	29273.524	66.87	29,340.39	-489.58
Bleeder Inf.	1879.8238	419.15	1812.4989	2087.42	3,899.92	-2,036.43
Bleeder Sup.	563.23477	679.65	2521.6785	6081.64732	8,603.33	-1,346.03
N2 puro	30.2799	298.15	3014.64	0	3,014.64	25.36
Soprador	-	-	-	-	-	138.75
Perdas Ambiente	-	-	-	-	-	-29.84
Coque Combustivel	273.85822	1323.15	29273.524	1289.92	30,563.44	2,325.01
Vapor	22101	623.15	13063.44	1073.27	14,136.71	-86,787.62
Agua	23083	376.15	13063.44	34.69	13,098.13	83,984.46
Vapor p/ Atm	982	491.15	13063.44	922.86	13,986.30	-3,815.15
Total de exergia destruida						7,708.31

Exergia Quimica do Coque =	6893.68 (seco)	[kcal / kg]
Ref.: [Singh et al, 1982]	s (kmoles) =	0.01996 => 0.00281716
	C (kmoles) =	7.08517 => 1
m coque =	85.74 [kg Coque util / 100 kg Coque Total]	
M coque util =	12.101329 [kg / kgmol Coque Util]	

Exergia Destruida [kJ/kgCoque] = 745.96555 (Vide Equação (2.42))

Exergia Quimica dos gases

Q[Nm3/h]= 1467

T [K] = 419.15

Tabela B.11 - Exergia Química dos gases do Bleeder Inferior

Efluente	x [%]	Qi [Nm3/h]	ex_0 (1)	x*ex_0	x*LN(x)
H2	3.98	58.3866	238490	9491.902	-0.12831076
N2	71.9	1054.773	720	517.68	-0.23719373
O2	0.36	5.2812	3970	14.292	-0.02025656
CO	14.65	214.9155	275430	40350.495	-0.28138692
CO2	7.55	110.7585	20140	1520.57	-0.19506351
H2O	1.56	22.8852	11710	182.676	-0.06490356
Total	100.00			52077.62	-0.00927115

ex_0 [kcal/kg] = 432.88724

(1) - Tab. A.3 Kotas [kJ/kmol]

n mist.= 65.453896 kmol/h

Tabela B.12 - Exergia Física dos gases do Bleeder Inferior

Efluente	x [%]	Cp_ex (2)	n kmol/h	x * Cp_e
H2	3.98	4.72	2.6050651	18.7856
N2	71.9	4.8	47.061351	345.12
O2	0.36	4.79	0.235634	1.7244
CO	14.65	4.8	9.5889957	70.32
CO2	7.55	6.77	4.9417691	51.1135
H2O	1.56	5.38	1.0210808	8.3928
Total	100.00	-	65.453896	495.46

0.9844 (ajuste xk)

(2) - Tab. D.3 Kotas [kJ/kmol K]

ex_ph [kcal/kg] = 498.54701

m [kg/h] = 1879.82383

Exergia Total = 1750932.3 [kcal / h]

Tabela B.13 - Fluxo mássico

M [kg/kmol]	x*M [kg/kmol]
2.02	0.08
28.95	20.82
32.00	0.12
28.01	4.10
44.01	3.32
18.02	0.28
-	28.72

Tabela B.14 - Parcela de Coque queimado (Bleeder Inferior)

Parcela	Nm3/h	kmol/h	kg/h C
CO	214.9155	9.5944	115.229248
CO2	110.7585	4.9446	59.38435647
Total			174.6136045

Coque reagido [kg / h] = 205.186374

Exergia Química dos gases

Q[Nm3/h]= 454.5
T [K] = 679.65

Tabela B.15 - Exergia Química dos gases do Bleeder Superior

Efluente	x [%]	Qi [Nm3/h]	ex_0 (1)	x*ex_0	x*LN(x)
H2	5.250308	23.86264986	238490	12521.4595	-0.15472046
N2	68.500729	311.3358133	720	493.205249	-0.25915593
O2	0.957293	4.350896685	3970	38.0045321	-0.04450279
CO	20.379485	92.62475933	275430	56131.2155	-0.32416453
CO2	3.602185	16.37193083	20140	725.480059	-0.11972329
H2O	1.31	5.95395	11710	153.401	-0.05679037
Total	100.00			70062.77	-0.00959057

ex_0 [kcal/kg] = 602.26379

(1) - Tab. A.3 Kotas [kJ/kmol]

n mist.= 20.278661 kmol/h

Tabela B.16 - Exergia Física dos gases do Bleeder Superior

Efluente	x [%]	Cp_ex (2)	n kmol/h	x * Cp_e
H2	5.250308	3.88	1.0646922	20.371195
N2	68.500729	4.4	13.891031	301.403208
O2	0.957293	4.38	0.1941262	4.19294334
CO	20.379485	4.4	4.1326867	89.669734
CO2	3.602185	5.71	0.7304749	20.5684764
H2O	1.31	5.01	0.2656505	6.5631
Total	100.00	-	20.278661	442.77 (kJ/kmol)

0.9869 (ajuste xk)

(2) - Tab. D.3 Kotas [kJ/kmol K]

ex_ph [kcal/kg] = 1452.5071

m [kg/h] = 563.234768

Exergia Total = 1157318.4 [kcal / h]

Tabela B.17 - Fluxo mássico

M [kg/kmol]	x * M
2.02	0.11
28.95	19.83
32.00	0.31
28.01	5.71
44.01	1.59
18.02	0.24
-	27.77

Tabela B.18 - Parcela de Coque queimado (Bleeder Superior)

Parcela	Nm3/h	kmol/h	kg/h C
CO	92.6247593	4.1350	49.66175712
CO2	16.3719308	0.7309	8.777986125
Total			58.43974325

Coque reagido [kg /h] = 68.6718487

Total de coque reagido = 273.858223 [kg / h]

Fluxo de N2 puro no CDQ

Tabela B.19 - Balanço de N2 no CDQ

Local	Nm3/h	n kmol/h
Bleeder Sup.	-311.3358	-13.8910
Bleeder Inf.	-1054.773	-47.0614
Ar p/ Comb.	869.7	30.6725
N2 puro	496.40881	30.2799

Exergia do N2 : T=298.15K P=1 atm
 [kcal / kmol] { calcular a exergia do N2 }

Exergia química do coque

Equação (2.19)b

Ex_C = 8176.5 [kcal / kg] (Kotas, 1985)
 Ex_S = 4364.4 [kcal / kg]

Elemento	m [kg]	M [kg / kmol]	n [kmol]	x _i	x * Ln x
Carbono	85.1	12	7.0916667	0.99718772	-0.00280832
Enxofre	0.64	32	0.02	0.00281228	-0.01651866
	85.74		7.1116667		-0.01932698

R = 1.986 [kcal / kg K]

Coque útil [kg] = 85.74

Ex_coque_u = 8154.3353
 Ex_coque = 6991.5271 [kcal / kg]

Diagrama de Grassman

(Tabelas 2.32 e 2.33)

Tabela B.21 - Entradas de Exergia

item	Exergia [kW]	%
Coque Inc.	13,565.33	83.341224
N2 puro	25.36	0.155782
Soprador	138.75	0.8524375
Coque Comb.	2,325.01	14.284172
Água alim.	222.40	1.3663842
Ex_in	16,276.85	100.00

Tabela B.22 - Sairas de Exergia

item	Exergia [kW]	%
Coque Extinto	690.99	6.2977646
Ciclone	2.78	0.0253595
Coletor	14.72	0.1341796
Carrreg.	9.36	0.0853323
Descarg.	1.12	0.0101695
Bleeder Inf.	2,036.43	18.560266
Bleeder Sup.	1,346.03	12.267829
Ambiente	29.84	0.2719902
Vapor	6,588.99	60.052762
Vapor p/ atm	251.74	2.2943475
Ex_out	10,972.00	100

Irrev = 5,304.86 kW *Equação 2.42*Irrev = 7,708.31 kW *Tabela B.10*

513.37 [kW / kg coque]

745.97 [kW / kg coque]

Fluxo de Exergia através de Iterações de Calor

Tabela B23 - Exergia Associada ao fluxo de Calor

Local	t [C]	T [K]	Q [kcal / h]	Ex [kcal / h]
Tampa Carreg. (1)	130	403.15	5560	1448.10
Parte Conica (1)	75	348.15	18330	2632.49
Lateral Camara (1)	53	326.15	26390	2265.58
Face Vertical (2)	42	315.15	33010	1780.64
Face p/ cima (2)	42	315.15	5610	302.62
Face p/ cima (3)	60	333.15	15940	1674.62
Face incl. (3)	70	343.15	22360	2932.25
Face Lateral (3)	60	333.15	32550	3419.63
Face p/ baixo (3)	70	343.15	7380	967.80
Ciclone	43	316.15	16500	939.43
Duto	43	316.15	15640	890.46
Parte Inf. Camara	101	374.15	14650	2975.81
Coletor de po' (4)	160	433.15	8680	2705.30
Duto (4)	80	353.15	4650	724.20
Media	73.5	346.65	16232.14	2271.05
Total	-	-	227250	25658.92

(1) - Camara de extincao

(2) - Caldeira de Recuperacao Exergia = 29.84275024 [kW]

(3) - Coletor Primario

(4) - Bleeder Superior T ref = 298.15

Considerando a superfície de controle suficientemente grande de sorte que lá a temperatura seja a do ambiente, tem-se :

Exergia = 0 [kW]

O que significa que esse montante seria transferido para as irrversibilidades.

Balanco Exergetico do CWQ

Nota : O balanço exergetico apresentado na tabela abaixo foi elaborado sem as considerações apresentadas no texto e por isto não corresponde ao balanço apresentado nas tabela 2.35. Ainda, aqui pode-se observar como ele ficaria se fosse realizado da maneira usual. A diferença é relevante.

(Moran, 1982 ; Rodriguez, 1980 & Kotas, 1985)

Unidade Exergia : kW

	J = 4.187		% S = 0.64
Cp [K] = a.T + b	% C = 85.1	a = 0.000167	T0 = 298.15
			b = 0.140496

C2 = -196.7770764

Tabela B.24 - Fluxos de exergia no CWQ

Item	kg / h	T [K]	ex ch	ex tm	ex total	Ex total
Coque Incand.	37,200.00	1,323.15	29,273.52	1,289.92	30,563.44	315,822.23
Coque Extinto	37,200.00	423.15	29,273.52	49.11	29,322.63	-303,000.53
Finos	227.65	373.15	29,273.52	24.33	29,297.86	-1,852.68
Agua (Lama)	26,173.06	298.15	13,063.44	29.42	13,092.86	-95,188.96
Agua	43,621.76	298.15	13,063.44	0.20	13,063.64	158,294.20
Vapor p/ Atm	17,448.70	373.15	13,063.44	483.20	13,546.64	-65,658.72
Total de exergia destruida						8,415.54

Exergia Quimica do Coque =	6,893.68 (seco)	[Kcal / kg]
Ref.: [Singh et al, 1982]	s (kmoles) =	0.02 => 0.00
	C (kmoles) =	7.09 => 1.00
m coque =	85.74 [kg Coque util / 100 kg Coque Total]	
M coque util =	12.10 [kg / kgmol Coque Util]	

Exergia Destruida [kJ/kgCoque] = 814.407009 (Vide Equação (2.44))

Diagrama Grassman

(Tabelas 2.35)

Tabela B.25 - Entradas de Exergia

item	Exergia [kcal /h]	%
Coque Inc.	13,329.15	99.98154293
Água alim.	2.46	0.018457068
Ex_in	13,331.61	100.00

Tabela B.26 - Saídas de Exergia

item	Exergia [kcal /h]	%
Coque Extinto	507.45	16.55666395
Descarg.	1.54	0.050205603
Lama	213.92	6.979576514
Vapor p/ atm	2,342.02	76.41355393
Ex_out	3,064.93	100

Irrev =	8,827,336.63 kcal / h	10266.683 [k W]	Tabela B.24
Irrev =	7,235,715.48 kcal / h	8415.5391 [k W]	~ Equação 2.44b
	237.2939953 kcal / kg	993.54996 kJ / kg	
	194.5084808 kcal / kg	814.40701 kJ / kg	

APÊNDICE C

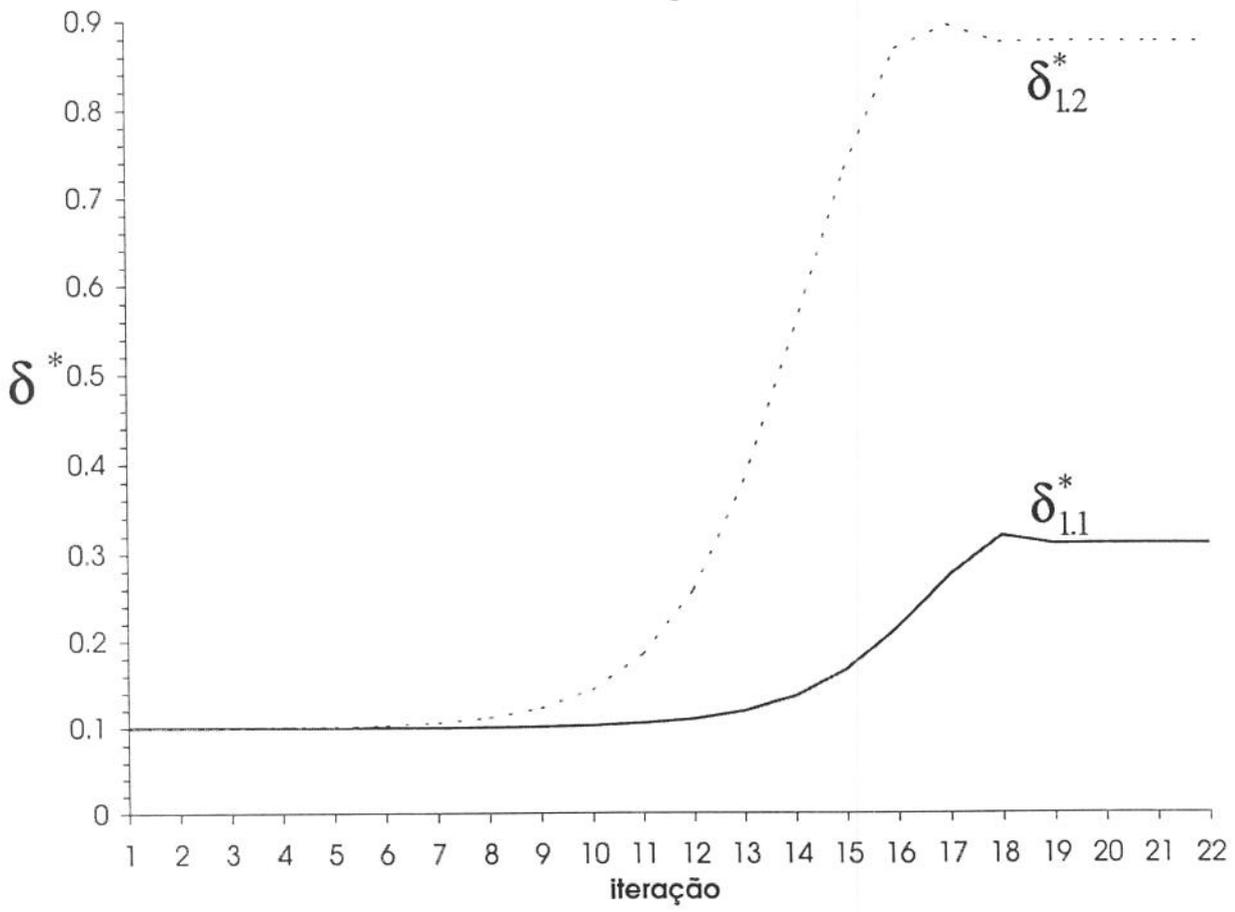
Resultados da análise funcional (ENVIRON.PAS)

Base horária

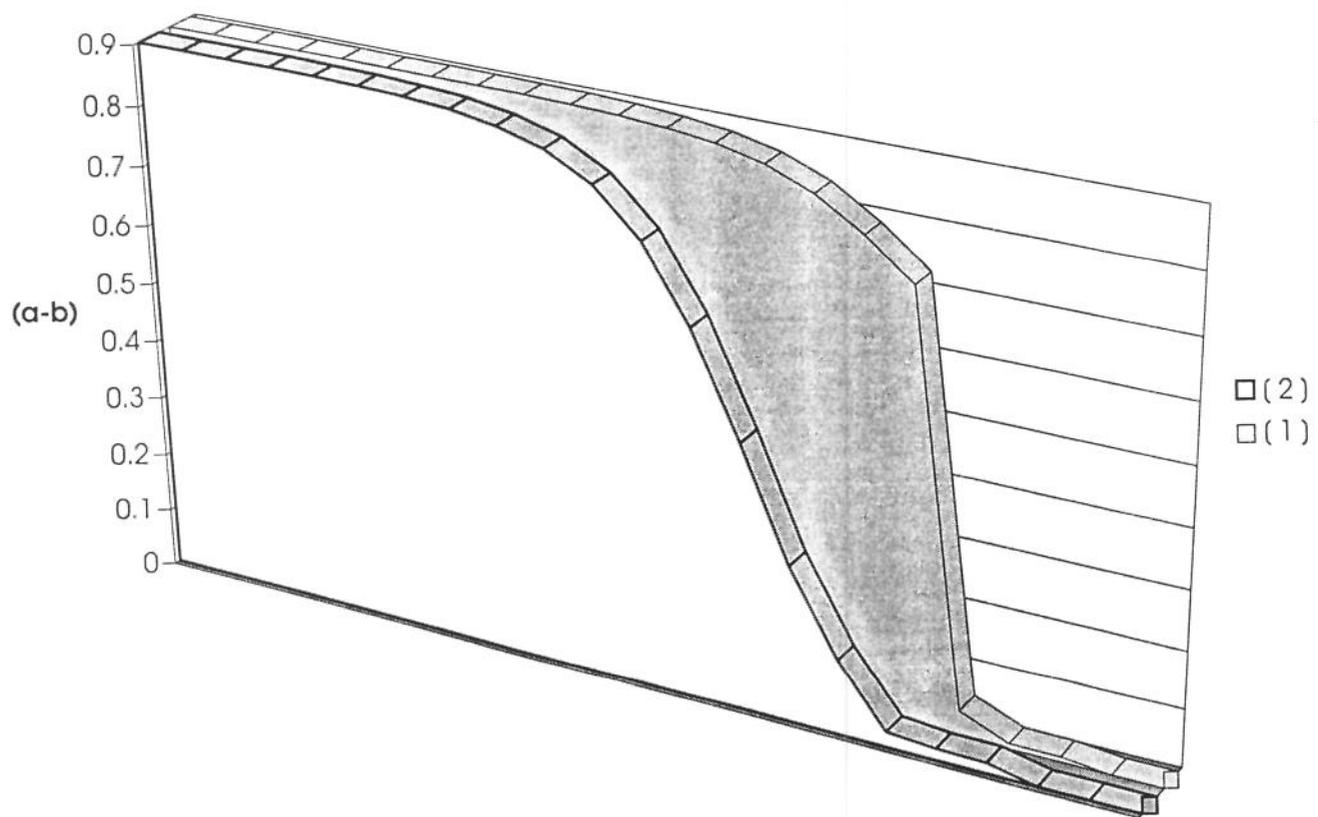
Unidade (1) - Câmara de Apagamento do Coque	
Função y (kcal /h)	14,409,451.868
Parcela do coque extinto y10 (kcal /h)	1,294,090.873
Parcela para a unidade (3) y13 (kcal /h)	13,115,360.995
Chi 3	0.979
Recursos do exterior y01 (kcal /h)	14,555,001.887
Fluxo de coque incandescente (kg / h)	38,830.175
Emissão do Carregamento de Coque p11 (kg / h)	18.326
Emissão da Descarga do Coque p12 (kg / h)	7.595
Coefficiente de Abatimento para p11 (%)	31.101
Coefficiente de Abatimento para p12 (%)	87.768
Despoeiramento da Carga de Coque Finos Vendidos (kg/h)	6.022
Despoeiramento da Descarga de Coque Finos vendidos (kg/h)	39.672
-- Valores econômicos -- (US\$ / h)	
Custo Instalado Z	43.435
Custo Instalado do desp da Carga (Z11)	7.372
Custo Instalado do desp da Descarga (Z12)	3.920
Custo do recurso y011 (Coque Incandescente)	3,494.716
Custo por poluir com p11	1.833
Custo por poluir com p12	0.760
Receita pela venda dos finos no desp do carreg	0.602
Receita pela venda dos finos no desp do desc	3.967
Custo marginal devido a emissão p11 (US\$ / kg)	0.100
Custo marginal devido a emissão p22 (US\$ / kg)	0.100
Receita da venda do coque extinto (US\$ / h)	4,545.614

<u>Unidade (2) - Caldeira de Recuperação</u>	
Função y (kcal /h)	14,788,893.684
Parcela do Vapor produzido y20 (kcal /h)	14,234,036.358
Parcela para a unidade (4) y24 (kcal /h)	554,857.326
Chi 2	0.957
Recurso recebido de (3) y32 (kcal /h)	14,234,050.399
-- Valores econômicos -- (US\$ / h)	
Custo Instalado Z	57.913
Receita da venda do Vapor (US\$ / h)	186,654.411
<u>Unidade (3) - Corpo do CDQ - Câmara de Circ do Gas</u>	
Função y (kcal /h)	14,541,046.399
Parcela para a unidade (2) y32 (Kcal /h)	14,234,050.399
Parcela para a unidade (4) y34 (kcal /h)	306,996.000
Recursos da unidade (1) y13 (kcal /h)	13,115,360.995
Recursos do exterior y013 (kcal /h)	111,263.925
Vazão de gás circulante (Nm3 / h)	67,424.900
Emissao do Bleeder Inferior p33 (kg / h)	1.885
Coefficiente de Abatimento para p31 (%)	99.000
Coefficiente de Abatimento para p32 (%)	25.000
Coefficiente de Abatimento para p33 (%)	15.000
Finos vendidos do ciclone (kg/h)	159.818
Finos vendidos do coletor (kg/h)	11.430
-- Valores econômicos -- (US\$ / h)	
Custo Instalado Z	43.435
Eletricidade para Soprador	6.244
Receita pela venda dos finos no desp do ciclone	15.982
Receita pela venda dos finos no desp do coletor	1.143
Custo por poluir com p33	0.188
Custo marginal devido a emissão p33 (US\$ / kg)	0.100
<u>Unidade (4) - Auxiliar</u>	
Função y (kcal /h)	861,853.326
Receita perdida da emissão do Vapor (US\$ / h)	11,301.694

Convergência



Intervalo



APÊNDICE D

Rendimentos Termoeconômicos (funcionais)*

Na Equação (4.8) percebe-se que o rendimento termoeconômico da unidade (2), η_2 , era 1,04 (104 %) e foi arredondado para 1 e na Equação (4.16), o rendimento termoeconômico da unidade (3), η_3 , é 1,10 (110 %).

Deve ficar claro não está se afirmando que “foi gerada energia” no interior do volume de controle do CDQ.

Geralmente o conceito de rendimento é introduzido numa análise termodinâmica quando se conhece (assume-se com precisão) o que está sendo usado como recurso (combustível, etc..) e o efeito útil (produto) do sistema. Pode se relacioná-los através do rendimento, que sim, neste caso, será necessariamente menor que 100 %.

Por outro lado, erros e imprecisões nas medições podem proporcionar rendimentos abaixo ou acima do real. E, se o recurso for superestimado, ou o produto subestimado, o rendimento poderá superar os 100 %. Sem, no entanto, estar violando nenhuma lei física.

Certamente, se as medições não estão suficientemente precisas, há de se realizar novo levantamento de dados. Entretanto, isto abre outras questões, agora de engenharia : é possível melhorá-lo ? Há tempo útil ? Qual será o custo ?

Foi respondendo às perguntas acima que decidiu-se manter os rendimentos citados “acima de 99,99 %”. As incertezas na medição dos fluxos de coque (*vide* Tabela 2.15), na temperatura do coque incandescente e extinto, na estimativa da vazão do gás circulante (Equação 2.4) e da vazão do gás expelido no *Bleeder Superior* (Tabela B.15 e p. 34), proporcionaram o erro no balanço de energia de 6,28 % (Tabela 2.31) que é da mesma ordem de grandeza do acréscimo de 10 % em η_3 .

Feitas estas considerações pode-se ter um modelo no qual a relação *recurso-produto* fosse a mais próxima daquela observada em campo.

* O autor agradece a Profa. Dra. Silvia Azucena N. de Perez, membro da banca examinadora, que levantou a necessidade de melhor discutir este tópico.

BIBLIOGRAFIA

- Agroskin, A. A.; Gileman, V.B (1980): *Termofísica dos Combustíveis Sólidos* (em russo / Trad. Dr. Electo Lora Silva), Niedra, Moscou.
- Bannwart , A. C.; Rossi, L. F. S. (1994): Maximum Heat Recovery in a Brazilian Oil Refinery using a Transportation Problem Formulation. Em "A Future for Energy", Florence World Energy Research Symposium. Florence, Italy. FLOWERS '94(jul). (ASME). p.1017-1025.
- Bazaraa, Mokhtar S.; Shetty, C.M. (1979): *Nonlinear Programming - Theory and Algorithms*. John Wiley & Sons, Nova Iorque. 558 páginas.
- Bejan, Adrian (1988): *Advanced Engineering Thermodynamics*. (Wiley-Interscience Publication.) John Wiley & Sons. Singapura. 493 páginas.
- Burden, R. L.; Faires, D. J (1988): *Numerical Analysis*. 4a ed. PWS-KENT, Boston, Ma. 659 páginas.
- Callen, Herbert B. (1985): *Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics*. 2a. ed. John Wiley & Sons, EUA. 493 páginas.
- Calvert, Seymour; Englund, Harold M (Eds.) (1984): *Handbook of Air Pollution Technology*. John Wiley & Sons, New York. 1066 páginas.
- Carvalho, J.L.R.; Assis, PS; Figueira, R.M.; Camilo, R.D.; Campos, VF (Eds.) (1977): *Dados Termodinâmicos para Metalurgistas*. UFMG, Belo Horizonte. 392 páginas.
- Chadwick, M. J.; Highton, N.H.; Lindman N. (Eds.) (1987): *Environmental Impacts of Coal Mining and Utilization*. (A study by The Beijer Institute, The United Nations Environmental Program, The USSR Academy of Sciences, The National Energy Administration (Sweden). Pergamon Press, Grã-Bretanha, 812 páginas.
- Chapra, S. C.; Canale, R. P. (1990): *Numerical Methods for Engineers*. 2a. ed. (Applied Mathematics Series). McGraw-Hill. Singapura. 821 páginas.
- Chiang, A. C. (1982): *Matemática para Economistas*. (Ed. USP). McGraw-Hill, São Paulo. 684 páginas.
- CPFL (1991): Relatório Interno FET.
- CST (1983a): Controle dos Produtos Carregados no CDQ. (Advice Sheet n. 126).
- CST (1983b): Processo C.D.Q. na Coqueria da CST. Serra, ES.
- CST (1984a) :Balanço Térmico no CDQ (Advice Sheet n. 151).
- CST (1984b): Rendimento de Coque (Advice Sheet n. 153).
- CST (1991): Resultados gerais de amostragem de material particulado no lavador de carga e descarga do CDQ.(Seção de Meio Ambiente).

- Morimoto, Tsutomu (1994) : Parcelas dos finos coletados nos sistemas de despoeiramentos (comunicação pessoal). CST Serra, ES.
- NEU (1993) : Relatório Técnico da Instalação dos Novos Sistemas de Despoeiramentos no CDQ.
- Pacheco, F. S. ; Kelher, C. L. ; Morimoto, T. (1985) : Importância do Sistema de Apagamento a Seco do Coque na Economia de Energia e seu Impacto no Meio Ambiente. Anais do 4o. Congresso Brasileiro de Utilidades (ABM).
- Perry, R. H. ; Chilton, C. H. (Eds.) (1973) : Chemical Engineers' Handbook. 5a. ed. McGraw-Hill, Inc. Nova Iorque.
- Peters, M. S.; Timmerhaus, K. D. (1991) : *Plant Design and Economics for Chemical Engineers*. 4a. ed. McGraw-Hill International Editions, Singapura. 910 páginas.
- Roberts, J. (1984) : Air Quality Management. Capítulo 37 em *Handbook of Air Pollution Control Technology*. (Eds.: Calvert, S. ; Englund, H. M.) . John Wiley & Sons.
- Rod'kin, A. P. ; Korobeinikov, E. B. (1984) : Composition of the Circulating and Discharged Gasses Loss of a Dry Coke Quenching Device. *Koks i Khimya (Coke and Chemistry)*. Allerton Press, Inc., n. ?, p. 28-32.
- Rod'kin, A. P. ; Korobeinikov, E. B. (1988) : Selection of Methods for Determination of Burning Loss of Coke in CDQU. *Ibid.* n.10, 26-27.
- Rodriguez, S. J. L. (1983) : Calculation of Available-Energy Quantities. Capítulo 3 em *Thermodynamics : Second Law Analysis*. (Ed: Gaggioli, R.).(ACS).p.39-53
- Ruggiero, M. A. G.; Lopes, V. L. da R. L. (1988) : *Cálculo Numérico ; Aspectos Teóricos e Computacionais*. McGraw-Hill, Ltda., São Paulo. 295 páginas.
- Sanchas da Cruz, Samuel (1993a) : Índice de apagamento de coque no CDQ . (Comunicação pessoal). CST. Serra, ES.
- S. da Cruz, S. (1993b) : Propriedades do Coque processado em setembro de 93 na Coqueria da CST. (Comunicação pessoal). CST. Serra, ES.
- S. da Cruz, S. (1993c) : Tabela de produção de pós no CDQ / CST. (Comunicação pessoal). CST. Serra, ES.
- S. da Cruz, S. (1994) : Custos do coque e carvão e preços de finos. (Comunicação pessoal). CST. Serra, ES.
- Shieh, J. H. ; Fan, L. T. (1982) : Estimation of Energy (Enthalpy) and Exergy (Availability) Contents in Structurally Complicated Materials. *Energy Resources*. Vol.6(1/2), p.1-45.
- Singh, S. P. ; Weil,, S. A.; Babu, S.P. (1980) : Thermodynamic Analysis of Coal Gaseification Process. *Energy*, vol. 5, p.905-914.
- Smith, J. M. ; Van Ness, H. C. (1959) : *Introdução a Termodinâmica da Engenharia Química*. 3a. ed.. Guanabara Dois, Rio de Janeiro. 593 páginas.

- Szargut, J. (1980) : International Progress in Second Law Analysis. *Energy*. Vol. 5(8-9), p.709-718.
- Szargut, J. (1986) : Application of Exergy for the Calculation of Ecological Cost. *Bulletin of Polish Academy of Sciences - Technical Series* 34, p.475-480.
- Szargut, J. (1990) : Ecological Aspects of Exergy Analysis. Workshop on Second Law of Thermodynamics. Erciyes U. - T.I.B.T.T.D., 5-1;5-5.
- Sargut, J. ; Morris, D. R. ; Stewart,, F. F. (1988) : Ecological Applications of Exergy. Capítulo 9 em *Exergy Analysis of Thermal, Chemical and Metallurgical Processes*. Hemisphere, Nova Iorque.
- Theodore, L. ; Buournicore, A. J. (1988) : Air Pollution Control Equipment. Vol. I - Particulates. CRC Press, Inc. 171 páginas.
- Tribus, M. ; Evans, R. B. (1962) : A Contribution to the Theory of Thermoeconomics. UCLA / report 62.
- Turner, J, H. ; Mackenna, J. D. (1984) : Control of Particles by Filters. Capítulo 11 em *Handbook of Air Pollution Technology*. (Eds.: Calvert, S. ; Englund, H. M.) . John Wiley & Sons.
- Valero, A. ; Lozano, M. A. ; Serra, L ; Torres, C. (1994) : Application of the Exergetic Cost Theory to CGAM Problem. *Energy*, vol. 17.
- Valero, A. ; Lozano, M. A. ; Serra, L ;Tsatsaronis, G. Pisa, J. ; Frangopoulos, C.A. ; Von Spakovsky, M. R. (1994) : CGAM Problem : Definition and Conventional Solution. *Ibid.* 19(3), p.279-286.
- Valero, A. ; Serra, L ; Lozano, M. A. (1993) : Structural Theory of Thermoeconomics. *ASME*.(ASME Winter Annual Meeting, New Orleans, USA), p.10.
- Van Wylen, G. J. ; Sonntag R. (1976) : *Fundamentos da Termodinâmica Clássica*. 2a. ed. Edgard Blucher, São Paulo. 566 páginas.
- Varian, H. R. (1984) : Microeconomic Analysis. 2a. ed. W. W. Norton & Co., Nova Iorque. 347 páginas.
- Vatavuk, W. M. (1984) : Control Costs. Capítulo 14 em *Handbook of Air Pollution Technology*. (Eds.: Calvert, S. ; Englund, H. M.) . John Wiley & Sons.