



RIO

PUC

Dissertação de Mestrado

Modelagem, Simulação e Análise Tecnico-Econômica Preliminar de uma Célula a Combustível de Óxido Sólido Alimentada por Hidrogênio Verde

Pedro Chatack Dias

Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro
Centro Técnico Científico
Departamento de Engenharia Química e de Materiais

Rio de Janeiro, 26 de Setembro de 2025

Dissertação de Mestrado



Pontifícia
Universidade
Católica do
Rio de Janeiro

Modelagem, Simulação e Análise Técnico-Econômica Preliminar de uma Célula a Combustível de Óxido Sólido Alimentada por Hidrogênio Verde

Pedro Chatack Dias

Orientação: Professor Brunno Ferreira dos Santos

Coorientação: Professor Roberto Bentes de Carvalho

Dissertação apresentada como requisito parcial para obtenção do grau de Mestre pelo Programa de Pós-graduação em Engenharia Química, de Materiais e Processos Ambientais, do Departamento de Engenharia Química e de Materiais da PUC-Rio.

Rio de Janeiro, 26 de Setembro de 2025



Pontifícia
Universidade
Católica do
Rio de Janeiro

Modelagem, Simulação e Análise Técnico-Econômica Preliminar de uma Célula a Combustível de Óxido Sólido Alimentada por Hidrogênio Verde

Pedro Chatack Dias

**Dissertação apresentada como requisito parcial para obtenção
do grau de Mestre pelo Programa de Pós-graduação em Engen-
haria Química, de Materiais e Processos Ambientais da PUC-
Rio. Aprovada pela Comissão Examinadora abaixo:**

Professor Brunno Ferreira dos Santos

Orientador

Departamento de Engenharia Química e de Materiais – PUC-Rio

Professor Roberto Bentes de Carvalho

Co-Orientador

Departamento de Engenharia Química e de Materiais – PUC-Rio

Professor Jorge Antonio Avendano Benavides

Departamento de Engenharia Química e de Materiais – PUC-Rio

Professor Hugo Valença de Araújo

Universidade Estadual da Paraíba – UEPB

Rio de Janeiro, 26 de Setembro de 2025



Pontifícia
Universidade
Católica do
Rio de Janeiro

Todos os direitos reservados. A reprodução, total ou parcial, do trabalho é proibida sem autorização da universidade, da autora e do orientador.

Pedro Chatack Dias

Graduou-se em Engenharia Química na PUC-Rio (Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro) em dezembro de 2022. Tem interesse acadêmico nas áreas de engenharia de processos, geração e transição energética, e segurança de processos. Atuou em projetos de modelagem e simulação de processos energéticos. Profissionalmente, possui experiência na área de planejamento energético e biocombustíveis, além de forte envolvimento em projetos acadêmicos e estudantis.

Ficha Catalográfica

Dias, Pedro Chatack

Modelagem, simulação e análise técnico-econômica preliminar de uma célula a combustível de óxido sólido alimentada por hidrogênio verde / Pedro Chatack Dias ; orientação: Brunno Ferreira dos Santos ; coorientação: Roberto Bestes de Carvalho. – 2025.

160 f. ; 30 cm

Dissertação (mestrado)—Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Departamento de Engenharia Química e de Materiais, 2025.

Inclui bibliografia

1. Engenharia Química e de Materiais – Teses. 2. Hidrogênio verde. 3. Células a combustível de óxido sólido. 4. Eletrólise alcalina da água. 5. Aspen Plus. 6. Simulação de processos. I. Santos, Brunno Ferreira dos. II. Carvalho, Roberto Bestes de. III. Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro. Departamento de Engenharia Química e de Materiais. IV. Título.

CDD: 620.11

AGRADECIMENTOS

Aos meus orientadores Dr. Brunno Ferreira dos Santos e Dr. Robertos Bentes de Carvalho, pela orientação neste trabalho, pelos ensinamentos e pela parceria para a realização deste trabalho.

Ao Dr. Alexander Polasek, Dr. José Geraldo e Dr. Francisco da Costa, pelas assistências, conversas e contribuições para a conclusão deste trabalho.

Ao Dr. Hugo Valença e Dr. Jorge Avendano, pela participação na banca examinadora.

Ao CEPEL e à PUC-Rio, pelos auxílios concedidos, sem os quais este trabalho não poderia ter sido realizado.

Aos meus pais, Adma e Carlos Alberto, meu irmão, Matheus, e minha namorada, Camila, pelo apoio e carinho de sempre.

A todos os amigos e familiares que de uma forma ou de outra me estimularam ou me ajudaram.

A todos os professores, funcionários e colegas do programa de pós-graduação em Engenharia Química da Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, pelo incentivo e pelos ensinamentos.

A todos, muito obrigado!

Obs: O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001.

RESUMO

Dias, Pedro Chatack; dos Santos, Brunno Ferreira. **Modelagem, Simulação e Análise Técnico-Econômica Preliminar de uma Célula a Combustível de Óxido Sólido Alimentada por Hidrogênio Verde**. Rio de Janeiro, 2025. 160p. Dissertação de Mestrado – Departamento de Engenharia Química e de Materiais, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

O aumento contínuo da demanda energética global, impulsionado pelo crescimento populacional, industrialização e melhoria do padrão de vida, tem acentuado os impactos ambientais associados à geração de energia. Nesse contexto, tecnologias limpas e eficientes, como as células a combustível (CaC), ganham destaque. Este trabalho visou o desenvolvimento de modelagem e simulação de uma planta de geração e armazenamento de energia baseada em uma célula a combustível de óxido sólido (SOFC) alimentada por hidrogênio verde, produzido via eletrólise alcalina da água (AWE). As simulações foram realizadas nos *softwares Aspen Plus* e Microsoft Excel, com validação por meio da comparação com dados da literatura. Foram projetadas e avaliadas uma planta piloto, que teve como base a Planta de Hidrogênio Verde da Eletrobrás localizada na UHE de Itumbiara (Goiás), e uma hipotética planta industrial. Em ambas as plantas, foi considerada a operação da AWE a 75 °C e 30 bar e da SOFC a 750 °C e 1 bar. Na planta piloto, observou-se uma eficiência elétrica de 39,6% e térmica de 45,4%, com geração de 3,6 kWh a partir de 15,13 kWh de energia na eletrólise e alimentação de 2,61 L/h de água. Na planta industrial, para geração de 3,6 MWh, são requeridos 55,2 MWh e 9,53 m³/h de água. A análise econômica preliminar foi conduzida apenas para a planta industrial e em um horizonte de 20 anos, ela apontou um CAPEX de R\$ 302,7 milhões, OPEX de R\$ 8,49 milhões/ano e receitas anuais de R\$ 23,3 milhões. A análise de rentabilidade da planta industrial indicou um investimento promissor, com VPL de R\$ 108,2 milhões, ROI de 11,70% e LCOE inferior ao custo da rede elétrica (R\$ 0,60/kWh). No entanto, o longo *Payback* (16 anos e 3 meses) e a TIR de apenas 3% apontam que o projeto ainda pode ser otimizado, já que o retorno atual é inferior ao custo de oportunidade do capital.

Palavras-Chave

Hidrogênio Verde; Células a combustível de óxido sólido; Eletrólise alcalina da água; *Aspen Plus*; Simulação de processos; Análise Econômica.

ABSTRACT

Dias, Pedro Chatack; dos Santos, Brunno Ferreira (Advisor). **Modeling, Simulation, and Preliminary Techno-Economic Analysis of a Solid Oxide Fuel Cell Powered by Green Hydrogen**. Rio de Janeiro, 2025. 160p. Dissertação de Mestrado – Departamento de Engenharia Química e de Materiais, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

The continuous increase in global energy demand, driven by population growth, industrialization, and improved living standards, has intensified the environmental impacts associated with energy generation. In this context, clean and efficient technologies, such as fuel cells (FC), have gained prominence. This work aimed to develop the modeling and simulation of an energy generation and storage plant based on a solid oxide fuel cell (SOFC) powered by green hydrogen, produced via alkaline water electrolysis (AWE). The simulations were performed using *Aspen Plus* and Microsoft Excel, with validation through comparison with data from the literature. A pilot plant, based on Eletrobrás's Green Hydrogen Plant located at the Itumbiara Hydropower Plant (Goiás, Brazil), and a hypothetical industrial-scale plant were designed and evaluated. In both cases, the AWE was considered to operate at 75 °C and 30 bar, while the SOFC operated at 750 °C and 1 bar. In the pilot plant, an electrical efficiency of 39.6% and a thermal efficiency of 45.4% were observed, with a net electricity generation of 3.6 kWh from 15.13 kWh of electrolysis input energy and a water feed of 2.61 L/h. In the industrial plant, to generate 3.6 MWh, 55.2 MWh and 9.53 m³/h of water were required. The preliminary economic analysis was conducted only for the industrial-scale plant, considering a 20-year horizon. The results indicated a CAPEX of R\$ 302.7 million, OPEX of R\$ 8.49 million/year, and annual revenues of R\$ 23.3 million. The profitability analysis showed a promising investment, with an NPV of R\$ 108.2 million, ROI of 11.70%, and an LCOE lower than the grid electricity cost (R\$ 0.60/kWh). However, the long *payback* period (16 years and 3 months) and the IRR of only 3% suggest that the project still requires optimization, since the current return is lower than the capital opportunity cost.

Keywords

Green Hydrogen; Solid Oxide Fuel Cells; Alkaline Water Electrolysis; *Aspen Plus*; Process Simulation; Economic Analysis.

Sumário

1. INTRODUÇÃO	18
1.1 Justificativa	21
1.2 Objetivo	22
1.3 Estrutura do Trabalho	22
2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	24
2.1 Eletrólise da água	24
2.1.1 Termodinâmica da eletrólise da água	26
2.1.2 Tecnologias de eletrólise da água	27
2.1.3 Eletrólise alcalina da água	31
2.1.3.1 Eletroquímica da AWE	33
2.2 Armazenamento de Hidrogênio	35
2.2.1 Hidretos Metálicos	37
2.2.2 Riscos associados ao armazenamento de H ₂	40
2.3 Células a combustível	44
2.3.1 Histórico e Mercado	45
2.3.2 Tipos de Células a Combustível	47
2.3.3 SOFC	52
2.3.3.1 Aplicações e potenciais das SOFC	53
2.3.3.2 Termodinâmica e Eletroquímica de uma SOFC	55
2.3.3.2.1 Sobrepotencial de ativação	56
2.3.3.2.2 Sobrepotencial ôhmico	57
2.3.3.2.3 Sobrepotencial de concentração	58
2.3.3.3 Eficiência	60
2.3.3.2.4 Avaliação de desempenho termo eletroquímico	61
2.4 Análise Econômica Preliminar	61
2.4.1 Custo de capital	63
2.4.1.1 O investimento dentro dos limites da bateria	63
2.4.1.2 O investimento externo	64
2.4.1.3 Custos de engenharia e construção	65
2.4.1.4 Encargos de contingência	65
2.4.1.5 Capital de giro	66
2.4.1.6 Estimativa de custos de capital	66
2.4.2 Custo de Produção	68
2.4.2.1 Custos Variáveis	68
2.4.2.2 Custos Fixos	68

2.4.2.3 Estimativa de custos de produção	69
2.4.3 Lucro	70
2.4.4 Análise da rentabilidade do projeto	70
2.4.4.1 Método do valor presente	71
2.4.4.2 Método da taxa interna de retorno (TIR).....	71
2.4.4.3 Método de tempo de retorno ou recuperação (<i>Payback</i>)	71
2.4.4.4 Retorno sobre investimento (ROI)	72
2.4.4.5 Custo nivelado da energia (LCOE).....	72
2.5 Modelagem e Simulação de Processos	72
2.5.1 Modelagem e Simulação de SOFCs	73
2.5.2 Simulador de processos Aspen Plus	76
3. METODOLOGIA	78
4. RESULTADOS E DISCUSSÃO	82
4.1 Modelagem e Simulação da Eletrólise Alcalina da Água	82
4.2 Modelagem e Simulação da Célula a Combustível de Óxido Sólido	84
4.3 Simulação da Planta Piloto de Hidrogênio Verde	87
4.4 Simulação e Análise Econômica da Planta Industrial	93
5. CONCLUSÃO	100
6. Sugestões para Trabalhos Futuros	101
7. REFERÊNCIAS	102
8. APÊNDICES.....	111
8.1 Apêndice A: Cálculos e dados da simulação da AWE	111
8.2 Apêndice B: Dados da simulação da SOFC	116
8.3 Apêndice C: Cálculos e dados da simulação da Planta piloto	123
8.4 Apêndice D: Cálculos e dados da simulação da Planta industrial.....	144

Lista de Figuras

Figura 1 - Conceitos básicos de eletrólise alcalina da água.	31
Figura 2 - Diagrama de processo de uma usina de eletrólise alcalina da água.	32
Figura 3 - Diagrama PCT.....	39
Figura 4 - Estrutura de uma célula a combustível genérica.	44
Figura 5 - Curva de polarização de uma CaC genérica.	61
Figura 6 - Representação esquemática da planta piloto de Itumbiara.	78
Figura 7 - Fluxograma da metodologia feita no presente trabalho.	79
Figura 8 - Fluxograma do processo da AWE simulado no <i>Aspen Plus</i>	83
Figura 9 - Fluxograma do processo da SOFC simulado no <i>Aspen Plus</i>	85
Figura 10 - Curvas de Polarização do presente trabalho e da literatura.	87
Figura 11 - Curvas de Polarização e densidade de corrente da planta piloto.	88
Figura 12 - Curvas de eficiência elétrica e térmica da planta piloto.	89
Figura 13 - Fluxograma do processo SOFC da Planta Piloto simulada no <i>Aspen Plus</i>	90
Figura 14 - PFD do processo.	91
Figura 15 - DRE da planta industrial.	97
Figura 16 - Fluxo de caixa da planta industrial.	98
Figura A.1 - Dados da corrente de entrada.	113
Figura A.2 - Detalhes da aba “Setup” na parte “Configurations” do bloco de eletrólise.....	113
Figura A.3 - Detalhes da aba “Specifications” do bloco da eletrólise	113
Figura A.4 - Detalhes da aba “Specifications” do trocador de calor.	114
Figura A.5 - Detalhes da aba “Specifications” do separador.	114
Figura B.1 - Dados da corrente de entrada de Hidrogênio.	116
Figura B.2 - Dados da corrente de entrada de Ar.....	116
Figura B.3 - Detalhes da aba “Specifications” dos compressores CP1 e CP2 ...	117
Figura B.4 – Detalhes da aba “Specifications” dos trocadores de calor TC1 e TC2.....	117
Figura B.5 – Detalhes da aba “Specifications” do Anodo.	118
Figura B.6 – Detalhes da aba “Specifications” do Catodo.	118
Figura B.7 – Detalhes da aba “Specifications” do trocador de calor do Catodo.	119
Figura B.8 – Detalhes da aba “Specifications” do combustor.....	119
Figura B.9 – Detalhes da aba “Reactions” do combustor.....	119
Figura B.10 – Detalhes da aba “Specifications” do trocador de calor TC3.	120
Figura C.1 – Dados da corrente de entrada.	125
Figura C.2 – Detalhes da aba “Setup” na parte “Configurations” do bloco de eletrólise.....	125
Figura C.3 - Detalhes da aba “Specifications” do bloco da eletrólise.....	126
Figura C.4 – Detalhes da aba “Specifications” dos trocadores de calor TC 03 e 04.	126
Figura C.5 – Detalhes da aba “Specifications” dos separadores SEP 03 e 04. ..	127
Figura C.6 - Dados da corrente de entrada de Hidrogênio.	127
Figura C.7 – Dados da corrente de entrada de Ar.....	127
Figura C.8 – Detalhes da aba “Specifications” do trocador de calor TC05	128

Figura C.9 – Detalhes da aba “Specifications” dos trocadores de calor TC06 e TC07.	128
Figura C.10 – Detalhes da aba “Specifications” do Anodo.	129
Figura C.11 – Detalhes da aba “Specifications” do Catodo.	129
Figura C.12 – Detalhes da aba “Specifications” do trocador de calor do Catodo.	130
Figura C.13 – Detalhes da aba “Specifications” do combustor	130
Figura C.14 – Detalhes da aba “Reactions” do combustor	130
Figura C.15 – Detalhes da aba “Specifications” do trocador de calor TC08.	131
Figura C.16 – Fluxograma do BME das demais correntes.	131
Figura C.17 – Dados da corrente 1.	132
Figura C.18 – Detalhes da aba “Specifications” da bomba BC 01.	132
Figura C.19 – Dados da corrente 3.	132
Figura C.20 – Dados da corrente 4.	133
Figura C.21 – Dados da corrente 5.	133
Figura C.22 – Detalhes da aba “Specifications” da bomba BC 02.	133
Figura C.23 – Detalhes da aba “Specifications” do trocador de calor TC 01. ...	134
Figura C.24 – Dados da corrente 6.	134
Figura C.25 – Detalhes da aba “Specifications” do trocador de calor TC 03. ...	134
Figura C.26 – Dados da corrente 7.	135
Figura C.27 – Detalhes da aba “Specifications” da bomba BC 03.	135
Figura C.28 – Detalhes da aba “Specifications” do trocador de calor TC 02. ...	135
Figura C.29 – Dados da corrente 8.	136
Figura C.30 – Detalhes da aba “Specifications” do trocador de calor TC 04. ...	136
Figura D.1 – Dados da corrente de entrada de Hidrogênio.	144
Figura D.2 – Dados da corrente de entrada de Ar.	145
Figura D.3 – Detalhes da aba “Specifications” do trocador de calor TC05	145
Figura D.4 – Detalhes da aba “Specifications” dos trocadores de calor TC06 e TC07.	146
Figura D.5 – Detalhes da aba “Specifications” do Anodo.	146
Figura D.6 – Detalhes da aba “Specifications” do Catodo.	146
Figura D.7 – Detalhes da aba “Specifications” do trocador de calor do Catodo.	147
Figura D.8 – Detalhes da aba “Specifications” do combustor	147
Figura D.9 – Detalhes da aba “Reactions” do combustor	147
Figura D.10 – Detalhes da aba “Specifications” do trocador de calor TC08.	148
Figura D.11 – Dados da corrente 1.	148
Figura D.12 – Dados da corrente 3.	149
Figura D.13 – Dados da corrente 4.	149
Figura D.14 – Dados da corrente 5.	149
Figura D.15 – Dados da corrente 6.	150
Figura D.16 – Dados da corrente 7.	150
Figura D.17 – Dados da corrente 8.	150

Lista de Tabelas

Tabela 1 - Características das tecnologias de eletrólise de água.	29
Tabela 2 – Vantagens e desvantagens das tecnologias de eletrólise de água.	30
Tabela 3 - Coeficientes da célula eletrolítica alcalina.	34
Tabela 4 – Aplicações dos diferentes tipos de células a combustível.	49
Tabela 5 - Principais características das diferentes tecnologias de células a combustível parte 1.	50
Tabela 6 - Principais características das diferentes tecnologias de células a combustível parte 2.	50
Tabela 7 - Vantagens e desvantagens dos diferentes tipos de células a combustível.	51
Tabela 8 - Exemplos de simulações de SOFC.	76
Tabela 9 – Condições operacionais da eletrolise alcalina da água.	82
Tabela 10 – Resultados da eletrolise alcalina da água.	82
Tabela 11 – Condições operacionais e de projeto da SOFC.	84
Tabela 12 – Parâmetros de operação e de projeto da Planta Piloto.	87
Tabela 13 – Resultados da AEW da Planta Piloto.	89
Tabela 14 – Coeficientes dos equipamentos para cálculo do CB.	94
Tabela 15 – Fatores utilizados para o cálculo do CE.	94
Tabela 16 – Custos dos Equipamentos.	95
Tabela 17 - Mão de obra da planta industrial.	96
Tabela 18 – Custos variáveis da planta industrial.	96
Tabela 19 – Análises de rentabilidade da planta industrial.	99
Tabela A.1 - Coeficientes do modelo eletroquímica da célula eletrolítica alcalina.	111
Tabela A.2 - Coeficientes da eficiência de Faraday da célula eletrolítica alcalina.	112
Tabela A.3 – Dados das correntes da simulação da eletrólise alcalina da água parte 1.	115
Tabela A.4 – Dados das correntes da simulação da eletrólise alcalina da água parte 2.	115
Tabela B.1 – Dados das correntes da simulação da SOFC parte 1.	120
Tabela B.2 – Dados das correntes da simulação da SOFC parte 2.	121
Tabela B.3 – Dados das correntes da simulação da SOFC parte 3.	121
Tabela B.4 – Dados dos resultados do presente trabalho e da literatura.	122
Tabela C.1 – BME da Planta Piloto parte 1.	137
Tabela C.2 – BME da Planta Piloto parte 2.	138
Tabela C.3 – BME da Planta Piloto parte 3.	139
Tabela C.4 – BME da Planta Piloto parte 4.	140
Tabela C.5 – BME da Planta Piloto parte 5.	141
Tabela C.6 – BME da Planta Piloto parte 6.	142
Tabela C.7 – BME da Planta Piloto parte 7.	143
Tabela D.1 – BME da Planta Industrial parte 1.	151
Tabela D.2 – BME da Planta Industrial parte 2.	152
Tabela D.3 – BME da Planta Industrial parte 3.	153
Tabela D.4 – BME da Planta Industrial parte 4.	154

Tabela D.5 – BME da Planta Industrial parte 5.	155
Tabela D.6 – BME da Planta Industrial parte 6.	156
Tabela D.7 – BME da Planta Industrial parte 7.	157
Tabela D.8 – Dados do rendimento para todos os anos analisados.	158
Tabela D.9 – Dados do DRE para todos os anos analisados.	159
Tabela D.10 – Dados do fluxo de caixa para todos os anos analisados.	160

Lista de Abreviaturas e Siglas

AEM	Eletrólise da água com membrana de troca aniônica
AFC	Células de combustível alcalinas
APU	Unidades de potência auxiliares
AWE	Eletrólise Alcalina da Água
CaC	Célula a Combustível
CAPEX	Investimento de capital fixo
CEPEL	Centro de Pesquisas de Energia Elétrica
CFD	Dinâmica dos fluidos computacionais
CHP	Sistemas combinados de calor e energia
COPV	Vasos de pressão revestidos com compósito
DMFC	Célula a combustível de metanol direto
FRP	Polímero Reforçado com Fibra
GEE	Gases de Efeito Estufa
HER	Reação de evolução do hidrogênio
HHV	Poder calorífico superior
HT-PEMFC	Células de combustível PEM de alta temperatura
ISBL	Dentro dos limites da bateria
LCOE	Custo nivelado da energia
LOHC	Transportadores Orgânicos Líquidos de Hidrogênio
LSM	LaMnO ₃ dopado com Sr
MCFC	Células de combustível de carbonato fundido
MHS	Armazenamento por hidretos metálicos
MOF	Estruturas Metal-Orgânicas
NASA	National Aeronautics and Space Administration
OER	Reação da evolução de oxigênio
OPEX	Custo de produção
ORC	Ciclos Orgânicos de Rankine
OSBL	Limites de bateria externos
P2G	Gasodutos de gás natural
PAFC	Células de combustível de ácido fosfórico
Paten	Programa de Aceleração da Transição Energética
PEM	Membrana de troca de prótons/membrana eletrolítica de polímero
PEMFC	Células de combustível de membrana de troca de prótons
PROH2	Programa de Ciência, Tecnologia e Inovação para a Economia do Hidrogênio
PTFE	Politetrafluoretileno
SOEC	Célula de eletrólise de água de óxido sólido
SOFC	Célula a Combustível de Óxido Sólido
SPFC	Célula de combustível de polímero sólido
TIR	Taxa interna de retorno
TPRD	Dispositivo de Alívio de Pressão Termicamente Ativado
VANT	Veículos aéreos não tripulados
VPL	Valor Presente Líquido
YSZ	Zircônia estabilizada com ítria

Lista de Símbolos

ΔG	Variação da Energia Livre de Gibbs
ΔG^0	Variação da energia livre de Gibbs a T^0 e p^0
ΔH	Variação da Entalpia
ΔH_r	Entalpia de reação
ΔS	Variação da Entropia
A	Constante para o cálculo do j_0
C	Carbono
CAPEX	Custo do capital
C_E	Custo do equipamento
C_f	Custo fixo
CG	Custo do capital de giro
CH ₄	Metano
CO	Monóxido de carbono
CO ₂	Gás carbônico
CRF	Fator de recuperação do capital
C_u	Custo unitário
C_v	Custo variável
D	Dimensionamento
$D_{a(\text{eff})}$	Difusividade gasosa efetiva através do ânodo
$D_{c(\text{eff})}$	Difusividade gasosa efetiva através do catodo
$D_{O_2-N_2}$	Difusividade binária para os componentes O ₂ e N ₂
e ⁻	Elétron
E_{act}	Energia de ativação
EC	Custo de engenharia e construção
EDC	Custo de encargos de contingência
E_{real}	Potencial real da célula a combustível
E_{rev}	Potencial reversível da célula a combustível
F	Constante de Faraday
f	Fugacidade
f_c	Fator relacionado a civil
f_{el}	Fator relacionado a elétrica
f_{er}	Fator relacionado a montagem do equipamento
f_i	Fator relacionado a revestimento e pintura
f_l	Fator relacionado a instrumentação e controle da planta
f_m	Fator relacionado ao material do equipamento
f_p	Fator relacionado a tubulação
f_s	Fator relacionado a estrutura e edifícios
H ₂	Hidrogênio
H ₂ O	Água
i	Corrente elétrica
I	Investimento total de capital
Imp	Custo de impostos sobre propriedades e seguros
ISBL	Investimento dentro dos limites de bateria
j	Densidade de corrente
j_0	Densidade de corrente de troca
j_{as}	Densidade de corrente limitadora do anodo
j_{cs}	Densidade de corrente limitadora do catodo
l	Espessura

LCOE	Custo nivelado da energia
L_{pt}	Lucro pós taxas
L_T	Lucro
M	Metal ou liga metálica
Ma	Custo de manutenção
MH	Hidreto metálico
MM	Massa molar
MO	Custo de mão de obra operacional
n_c	Número de células
n_e	Número de elétrons
N_{ec}	Número de células eletrolíticas
n_{H_2}	Quantidade molar de hidrogênio produzido
n_{H_2O}	Quantidade molar de água convertida
N_{in}	Taxa de fluxo
n_t	Número de anos ou meses
O_2	Oxigênio
OH^-	Íon hidroxilo
OPEX	Custos operacionais
OSBL	Investimento fora dos limites de bateria
Out	Outros custos fixos
p	Pressão
pb	<i>Payback</i>
P_{ch}	Potência Química
PCI	Poder calorífico inferior
P_{ec}	Potência da célula eletrolítica
P_{el}	Potência elétrica
P_t	Quantidade de produto produzido
P_{tm}	Potência térmica
P_u	Preço unitário
Q	Energia térmica
R	Constante universal dos gases
$r_1, r_2, d_1, d_2, s, t_1, t_2, t_3, f_{11}, f_{12}, f_{21}, f_{22}$	Coefficientes de operação da célula eletrolítica
$R_{contato}$	Resistencia de contato
ROI	Retorno sobre investimento
R_T	Receita total
S_{ec}	Área da célula eletrolítica
t	Taxa
T	Temperatura
TIR	Taxa interna de retorno
$U_{\Delta H}$	Potencial de entalpia
U_f	Fator de utilização do combustível
U_{rev}	Potencial reversível da célula eletrolítica
U_{tm}	Potencial termoneutro
V	Volume molar
V^0	Potencial padrão da célula eletrolítica
V_{ec}	Potencial real da célula eletrolítica
VPL	Valor presente líquido
V_t	Volume total de vendas
w_{max}	Máximo trabalho elétrico

W_{net}	Quantidade total de energia produzida
z	Número de cargas transferidas por molécula
α	Coefficiente de transferência
ε	Porosidade
η_{at}	Sobrepotencial de ativação
η_{conc}	Sobrepotencial de concentração
η_{el}	Eficiência Elétrica
η_{F}	Eficiência de Faraday
η_{ohm}	Sobrepotencial ôhmico
η_{tm}	Eficiência Térmica
η_{v}	Eficiência voltaica
ρ	Resistividade
τ	Tortuosidade

1. INTRODUÇÃO

A demanda e o consumo global de energia crescem continuamente devido ao aumento da população, à elevação dos padrões de vida e à expansão industrial em nações em desenvolvimento. No entanto, aproximadamente 80% dessa demanda é atendida por meio de combustíveis fósseis, tais como petróleo, gás natural e carvão, os quais emitem gases de efeito estufa (GEE), como dióxido de carbono (CO_2) e metano (CH_4). Existe uma iniciativa global voltada para a redução das emissões desses gases associados aos combustíveis fósseis, devido ao impacto ambiental significativo que geram, incluindo alterações climáticas, deterioração da camada de ozônio, acidificação e poluição atmosférica [1-4].

Nos últimos anos, diversos métodos renováveis foram desenvolvidos por cientistas, como energia solar, eólica, oceânica e bioenergia, como uma abordagem para lidar com essa questão complexa. Muitos especialistas indicam que a adoção de fontes de energia renovável pode eficazmente aliviar os problemas causados pelos GEE. A utilização de energia renovável apresenta várias vantagens e provoca menos impacto ambiental quando comparada aos combustíveis fósseis [1-4].

No Brasil, desde o início do século XXI, iniciativas vêm sendo lançadas para estimular a transição energética, como o Programa de Ciência, Tecnologia e Inovação para a Economia do Hidrogênio (PROH2) e o Programa de Aceleração da Transição Energética (Paten). O PROH2 tem como objetivo desenvolver tecnologias de armazenamento de energia como baterias e células a combustível, e incentivar projetos demonstrativos que envolvam a produção, armazenamento e utilização do hidrogênio em diferentes aplicações energéticas. Já o Paten visa fomentar o financiamento de projetos de desenvolvimento sustentável, especialmente aqueles relacionados à infraestrutura, à pesquisa tecnológica e ao desenvolvimento de inovação tecnológica [5-6].

O hidrogênio emerge como um dos vetores energéticos mais promissores para a transição energética, embora não seja uma fonte primária de energia, pois sua obtenção depende de outras fontes. Apesar de ser o elemento mais abundante no universo, na Terra ocorre predominantemente em formas químicas combinadas, como na água, em combustíveis fósseis e na biomassa, o que torna necessário o uso de processos específicos para sua produção. Alternativas livres de combustíveis

fósseis incluem fotocatalise, divisão termoquímica da água e eletrólise. Atualmente, 49% do hidrogênio mundial é produzido a partir da reforma a vapor do gás natural, 29% provêm da oxidação parcial de hidrocarbonetos, 18% da gaseificação do carvão e 4% da eletrólise [1-2].

Adicionalmente, ele desempenha um papel crucial como matéria-prima nas indústrias química e petroquímica, possibilitando a produção de amônia e combustíveis sintéticos. Além disso, o hidrogênio oferece a vantagem de ampliar a eficiência dos sistemas de armazenamento, quando comparados às baterias, destacando-se como um portador de energia versátil e promissor [1-2].

O hidrogênio é categorizado em diversos tons de cores, incluindo azul, cinza, marrom, preto e verde, com base nas tecnologias de produção, fontes de energia e impacto ambiental. O hidrogênio verde é obtido por meio do processo de eletrólise da água, no qual a água é desmembrada em hidrogênio (H_2) e oxigênio (O_2). Embora a eletrólise seja um processo relativamente simples para a produção de hidrogênio, a fonte de energia elétrica empregada para conduzir a reação eletrolítica é um fator crítico devido às suas implicações de custo e ambientais. Essa fonte pode ser proveniente de energias renováveis, como hidráulica, eólica e células solares fotovoltaicas [1-2].

Existem diferentes tecnologias de eletrólise da água, dentre elas tem-se a eletrólise alcalina (AWE) que é uma técnica que opera em temperaturas mais baixas e com uma solução alcalina concentrada. Além disso, os eletrodos de aço inoxidável revestidos com níquel (Ni) e diafragmas à base de amianto/ ZrO_2 são usados como separadores, o transportador de carga iônica é o íon hidroxila (OH^-) com KOH/NaOH e água permeando através da estrutura porosa do diafragma para fornecer a funcionalidade da reação eletroquímica [1].

Outro componente crítico no setor energético do hidrogênio são as tecnologias de armazenamento. O desenvolvimento de soluções de armazenamento confiáveis, seguras e eficientes é um dos requisitos mais imediatos e desafiadores da atualidade, sendo fundamental para atender às demandas atuais e potenciais futuras do mercado de energia de hidrogênio, com soluções robustas e adequadas a cada aplicação. Nesse contexto, os hidretos metálicos destacam-se por sua alta capacidade volumétrica, excelente estabilidade, reversibilidade e segurança

confiável. Hidretos são materiais formados pela combinação de um metal, uma liga ou um material complexo com hidrogênio [7-8].

As células de combustível (CaC) são dispositivos eletroquímicos capazes de transformar a energia contida nas ligações químicas de um combustível em energia elétrica por meio de reações de oxirredução. Existem diversos tipos de células de combustível, variando conforme o tipo de eletrólito utilizado, a faixa de temperatura de operação da célula e o tipo de reações eletroquímicas que nela ocorrem [9-11].

Entre elas têm-se as células de combustível de óxido sólido (SOFC), onde seu grande diferencial é sua alta temperatura de operação, o que faz com que possam receber como combustível tanto o hidrogênio como o gás natural e outros combustíveis. Além disso, são CaC que normalmente têm como eletrólito o óxido de zircônio (ZrO_2) estabilizado com óxido de ítrio (Y_2O_3), como cátodo a manganita de lantânio ($LaMnO_3$) dopado com estrôncio (Sr) e como ânodo o óxido de zircônio (ZrO_2) estabilizado com óxido de ítrio (Y_2O_3) dopado com níquel (Ni) [12].

A engenharia moderna faz uso extensivo de simuladores de processos, ferramentas cruciais que permitem projetar novas instalações, analisar alternativas, prever impactos operacionais e capacitar operadores. Esses programas reproduzem os processos por meio de equações e modelos, possibilitando explorar diferentes cenários e otimizar a tomada de decisão sem os altos custos experimentais. Assim, a simulação se consolida como um recurso estratégico em projetos e otimização de processos, particularmente em sistemas de alta complexidade. No contexto das SOFCs, a simulação é fundamental há anos para seu desenvolvimento, aprimoramento e avaliação, com a literatura apresentando vasta aplicação de *softwares* como *Aspen Plus*, MATLAB, ANSYS, COMSOL, entre outros [13-14].

O *Aspen Plus* é um simulador de processos reconhecido na indústria química e petroquímica, oferecendo ferramentas integradas para otimização, análise de sensibilidade e avaliação econômica de processos. Ele dispõe de uma vasta biblioteca de unidades modulares, que representam as operações unitárias ou equipamentos de processo. Para módulos não presentes na biblioteca padrão, o *software* permite ao usuário implementar equações diretamente ou integrar unidades desenvolvidas em outros programas computacionais através de interfaces de comunicação, expandindo sua capacidade de modelagem [13,15].

1.1 Justificativa

A produção de energia figura entre as principais responsáveis pelas emissões globais de carbono, o que intensifica a necessidade de repensar a matriz energética. Nesse contexto, a busca por fontes de energias renováveis e limpas tem se tornado um tema central no cenário mundial. Com isso, projetos que visam o desenvolvimento e a implementação de tecnologias sustentáveis vêm ganhando cada vez mais relevância [1-4].

Nesse panorama, o hidrogênio verde produzido pela eletrólise da água destaca-se como uma alternativa promissora, especialmente quando associado a tecnologias de armazenamento eficiente dele, como os hidretos metálicos, e a tecnologias de conversão eficientes, como as células a combustível. Entre as tecnologias de eletrolise, a eletrólise alcalina da água surge como uma das rotas mais consolidadas para a produção de hidrogênio em escala. Enquanto entre as CaC, a que tem ganhado grande destaque é a célula a combustível de óxido sólido (SOFC) devido à sua alta eficiência, flexibilidade no uso de combustíveis, baixa emissão de poluentes e capacidade de operar em sistemas híbridos.

No entanto, apesar do avanço tecnológico, ainda existem desafios relacionados à análise integrada de desempenho e viabilidade econômica desses sistemas, especialmente quando considerados em escala industrial. Assim, este estudo se justifica pela contribuição que oferece ao fornecer uma modelagem, simulação e avaliação técnico-econômica preliminar do uso combinado de eletrólise alcalina, hidretos metálicos e célula a combustível de óxido sólido, permitindo identificar oportunidades e limitações para sua aplicação em cenários futuros de geração de energia.

Além disso, este trabalho faz parte do projeto de pesquisa do Centro de Pesquisas de Energia Elétrica (CEPEL) em conjunto com Eletrobrás, onde existe uma planta piloto de hidrogênio verde na usina hidroelétrica de Itumbiara em Goiás. Essa planta piloto resultou do Projeto de P&D ANEEL nº PD-00394-2134/2021 intitulado “Plataforma de desenvolvimento e demonstração de tecnologias do Hidrogênio associada à planta de geração fotovoltaica e de armazenamento de energia na UHE Itumbiara – PD-H2” realizado pelo Itaipu Parquetec e pelo CEPEL para a Eletrobras.

1.2 Objetivo

Este estudo teve como principal objetivo simular e avaliar o comportamento técnico e econômico de uma célula a combustível de óxido sólido alimentada por hidrogênio verde proveniente da eletrólise alcalina da água, utilizando os *softwares Aspen Plus* e Microsoft Excel, a fim de analisar seu desempenho energético e viabilidade de aplicação.

Os objetivos específicos são:

- I. Fazer a simulação do processo de obtenção do hidrogênio a partir da eletrólise alcalina da água no *Aspen Plus*;
- II. Fazer a simulação do processo de geração de energia a partir de uma célula a combustível de óxido de sólido no *Aspen Plus*;
- III. Fazer a simulação de uma planta piloto de geração e armazenamento de energia a partir de uma SOFC, com capacidade de 3,6 kWh, alimentada por hidrogênio verde vindo da eletrólise alcalina da água;
- IV. Fazer a simulação e a análise econômica preliminar de uma planta industrial de produção e armazenamento de energia a partir de uma SOFC, com capacidade de 3,6 MWh, alimentada por hidrogênio verde vindo da eletrólise alcalina da água.

1.3 Estrutura do Trabalho

Este trabalho se encontra dividido em oito capítulos: introdução, revisão bibliográfica, metodologia, resultados, conclusões, sugestões de trabalhos futuros e referências e, por fim, os apêndices. No Capítulo 1, que compreende a introdução ao tema estudado, apresenta uma visão geral do tema investigado, destacando a relevância do estudo e os aspectos que o justificam. São abordados brevemente os conceitos sobre o hidrogênio e o hidrogênio verde, as formas de armazenamento de hidrogênio, o processo de eletrólise da água e suas diferentes tecnologias, o processo de uma célula a combustível e suas diferentes tecnologias e a utilização de simuladores de processos, assim como os objetivos do estudo.

A revisão bibliográfica é apresentada no Capítulo 2, abordando os conceitos e características de eletrólise, armazenamento de hidrogênio, células a combustível, análise econômica e modelagem. Na parte de eletrólise é abordado o que é a eletrólise da água, as diferentes tecnologias desse processo, a eletrólise alcalina da água e sua termodinâmica. Na parte de armazenamento do hidrogênio são

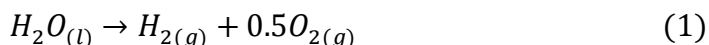
abordadas as tecnologias de armazenamento de hidrogênio, o hidreto metálico e os riscos associados ao armazenamento do hidrogênio. Na parte de células a combustível é abordado o que é uma célula a combustível, seus tipos e o histórico do mercado delas, e a célula a combustível de óxido sólido, onde são abordadas suas aplicações e potências e sua eletroquímica. Na parte de análise econômica é abordado o custo de capital, o custo de produção, fluxo de caixa e indicadores financeiros do processo (VPL, TIR, *payback*, dentre outros). Por fim, na parte de modelagem é abordada modelagem e simulação de SOFC e simulador de processos *Aspen Plus*.

A metodologia aplicada ao presente trabalho está disponível no Capítulo 3, assim como os resultados e discussões pertinentes estão apresentados no Capítulo 4, as conclusões obtidas no Capítulo 5, as sugestões de trabalhos futuros no Capítulo 6 e as referências bibliográficas utilizadas como base para este estudo no Capítulo 7. Por fim, no Capítulo 8, encontram-se os apêndices com cálculos e dados das simulações e da análise econômica preliminar feita nesse estudo.

2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1 Eletrólise da água

A eletrólise da água é uma técnica eletroquímica que utiliza da eletricidade para decompor as moléculas da água, e com isso, a produção de hidrogênio. Nela a corrente elétrica flui entre dois eletrodos separados e imersos em um eletrólito, e deve ser utilizado um diafragma ou separador para evitar a mistura dos gases gerados nos eletrodos. A reação básica da eletrólise da água é mostrada na Equação (1) [1,16].



A eletrólise foi descoberta em 1789 por Jan Rudolph Deiman e Adriaan Paets van Troostwijk, quando eles usaram um gerador eletrostático para descarregar eletricidade através de dois fios de ouro colocados dentro de um tubo cheio de água, causando a evolução de gases. Esse fenômeno foi estudado e posteriormente foram identificados que os gases produzidos no processo eram o hidrogênio e o oxigênio [17-18].

Com o avanço dos estudos sobre a eletroquímica, estabeleceu-se uma relação proporcional entre o consumo de energia elétrica e a quantidade de gases produzidos na eletrólise, essa relação é chamada de lei de Faraday da eletrólise. Assim, o conceito de eletrólise da água foi cientificamente definido e amplamente reconhecido [17-18].

A “era de ouro” para o desenvolvimento da tecnologia de eletrólise de água é considerada o período entre os anos de 1920 e 1970, e isso se dá pelo fato de nesse período terem sido criados a maioria dos projetos tradicionais, e quando houve a industrialização de tecnologias de eletrólise de água. A primeira grande usina de eletrólise da água entrou em funcionamento em 1939 e o primeiro eletrolisador industrial pressurizado foi fabricado pela Zdansky/Lonza em 1948 [17-18].

Nesse período, foi desenvolvida a maioria dos componentes tecnológicos que estão atualmente em uso. Como por exemplos as membranas, que inicialmente eram feitas de amianto, mas como esse material não é muito resistente à corrosão causada por um ambiente altamente alcalino a altas temperaturas e ter efeitos adversos à saúde, ele foi substituído por outros materiais e atualmente polímeros à base de

ácido perfluorossulfônico, éter de arileno ou politetrafluoroetileno têm sido usados como material de separação de gás [17-18].

Outro exemplo de componente desenvolvido nesse período são os eletrodos, eles devem ter boa resistência à corrosão, alta condutividade, alto efeito catalisador e baixo custo. Com isso, inicialmente o aço inoxidável e o chumbo foram apontados como bons materiais para os eletrodos, já que são baratos e têm sobrepotenciais baixos, porém estes não podem tolerar ambientes altamente alcalinos. Além deles, os metais nobres também foram propostos, mas são demasiadamente caros. Então, o níquel foi reconhecido como um material cátodo eletroativo com boa resistência à corrosão em uma solução alcalina, em comparação com outros metais de transição, e rapidamente se tornou popular durante o desenvolvimento de eletrolisadores de água. Com isso, as ligas à base de níquel começaram a ser estudadas e investigadas para o uso em células eletrolíticas [17-18].

Estes desenvolvimentos levaram a comercialização dos eletrolisadores de água. No século XX, houve um aumento na demanda pelo hidrogênio, e isso se deu pela necessidade dele para a produção de fertilizantes à base de amônia, o que foi ajudado pelo baixo custo da hidrelétrica na época. No entanto, a energia de hidrocarbonetos começou a ser aplicada em massa na indústria, a vantagem econômica da eletrólise de água gradualmente desapareceu à medida que a gaseificação do carvão e a reforma de gás natural tornaram-se capazes de produzir hidrogênio em grande escala a custos muito menores. Isto resultou na cessação do progresso da tecnologia de eletrólise de água como meio de produção de hidrogênio [17-18].

No entanto, a crise do petróleo em 1970 provocou um interesse renovado na eletrólise de água em todo o mundo e o hidrogênio foi considerado como o futuro transportador de energia e a chave para resolver o problema do abastecimento de energia sustentável. Com isso, a melhoria da eficiência da eletrólise da água tornou-se um objetivo, e assim foram alcançados novos avanços no nível do sistema celular com o surgimento de eletrólitos pressurizados e eletrolisadores PEM [17-18].

Um dos fatores críticos que afetam a eletrólise é a fonte de energia elétrica utilizada para manter a reação eletrolítica devido ao custo e aos aspectos ambientais. Atualmente, muitos esforços estão sendo realizados para integrar tecnologias de

energia renováveis, como hidráulica, eólica e células solares fotovoltaicas, como fontes de energia na eletrólise da água visando a produção de hidrogênio para diversas aplicações, incluindo o armazenamento de energia, dentre outras. A luz solar é uma fonte de energia limpa crucial e sua disponibilidade na Terra excede significativamente as necessidades energéticas da humanidade. Assim, a combinação da energia solar fotovoltaica com a eletrólise da água representa um caminho sustentável para a produção de hidrogênio [2, 17-18].

2.1.1 Termodinâmica da eletrólise da água

No processo de eletrólise, a quantidade de energia necessária para decompor a água é igual à variação de entalpia do processo (ΔH). O valor de ΔH pode ser calculado como mostra a Equação 2 a seguir, onde ΔG é a variação na energia livre de Gibbs que deve ser aplicada aos eletrodos na forma de energia elétrica e ela representa a quantidade mínima de trabalho reversível necessária para que esta reação ocorra. Já Q é conhecida como energia térmica, que é o resultado da multiplicação da variação de entropia (ΔS) pela temperatura do processo (T) [16,19].

$$\Delta H = \Delta G + Q = \Delta G + T \cdot \Delta S \quad (2)$$

A eletrólise constitui um processo termodinamicamente não espontâneo ($\Delta G > 0$) e endotérmico ($\Delta H > 0$). Em contrapartida, seu processo inverso, observado em células a combustível, manifesta-se de forma espontânea ($\Delta G < 0$) e exotérmica ($\Delta H < 0$). O potencial reversível da célula (U_{rev}) é o potencial mais baixo necessária para que a eletrólise ocorra e é diretamente proporcional ao ΔG como pode ser visto pela equação 3 abaixo [16,19].

$$U_{rev} = \frac{\Delta G}{zF} \quad (3)$$

Aqui, z denota o número de cargas transferidas por molécula de hidrogênio ($z = 2$) e F corresponde à constante de Faraday ($96485 \text{ C} \cdot \text{mol}^{-1}$). Se a energia térmica para o processo for provida eletricamente, como ocorre na maioria dos eletrolisadores em escala industrial, o potencial mínimo necessário para a eletrólise da água é conhecido como potencial termoneutro (U_{tn}). Em um cenário de eletrólise ideal, U_{tn} se iguala ao potencial de entalpia ($U_{\Delta H}$), uma vez que a energia total necessária é idêntica à variação de entalpia. Neste caso, $U_{\Delta H}$ e U_{tn} podem ser calculados a partir da equação 4 expressa a seguir [16].

$$U_{\Delta H} = U_{tn} = \frac{\Delta H}{zF} \quad (4)$$

No entanto, durante um processo real de eletrólise o potencial termoneutro é maior que o potencial de entalpia, isso se deve ao consumo adicional de energia, tanto elétrica quanto térmica, causado pelas irreversibilidades termodinâmicas. Estas estão principalmente relacionadas com o vapor de água contido nas correntes de hidrogênio e oxigênio, com a menor temperatura e pressão da água de alimentação em comparação com os pontos de regulação de funcionamento, e com o fato de o processo não ser realmente adiabático, o que resulta em perdas de calor devido a convecção e radiação [16].

Para que um processo de eletrólise ocorra em condições ambientais padrão (temperatura de 298,15 K e pressão de 1 atm), o trabalho elétrico molar necessário é 237,21 kJ/mol e a entalpia molar necessária é 285,84 kJ/mol. Substituindo esses valores de ΔG e ΔH nas equações (3) e (4), obtêm-se os potenciais reversíveis e termoneutros de uma célula eletrolítica em condições padrão, que são de 1,229 V e 1,481 V, respectivamente [16].

2.1.2 Tecnologias de eletrólise da água

Existem diferentes tecnologias que fazem a eletrólise da água para a produção do hidrogênio, entre elas as que mais se destacam são a eletrólise alcalina da água (AWE), eletrólise da água com membrana de troca aniônica (AEM), membrana de troca de prótons/membrana eletrolítica de polímero (PEM) e célula de eletrólise de água de óxido sólido (SOEC). As principais características e as vantagens e desvantagens entre as células eletrolíticas podem ser vistas nas Tabela 1 e Tabela 2.

A eletrólise alcalina da água, conhecida como AWE (do inglês, *alkaline water electrolysis*), é uma técnica que opera em temperaturas mais baixas e com uma solução alcalina concentrada. Além disso, os eletrodos de aço inoxidável revestidos com níquel (Ni) e diafragmas à base de amianto ou ZrO_2 são usados como separadores, o transportador de carga iônica é o íon hidroxila (OH^-) com KOH/NaOH e água permeando através da estrutura porosa do diafragma para fornecer a funcionalidade da reação eletroquímica [1,20-22].

A tecnologia de eletrólise de água com membrana de troca aniônica, conhecida como AEM (do inglês, *anion exchange membrane water electrolysis*) é

semelhante à eletrólise alcalina da água convencional. No entanto, a principal diferença entre elas é a substituição dos diafragmas convencionais (amianto) por uma membrana de troca aniônica (membranas de troca iônica de amônio quaternário) na eletrólise alcalina da água. Com isso, a eletrólise de água AEM oferece várias vantagens, como catalisadores de metais de transição econômicos sendo usados em vez de catalisadores de metais nobres, água destilada/solução alcalina de baixa concentração (1M KOH) pode ser usada como eletrólito em vez de alta concentração (solução de 5M KOH) [1].

A eletrólise da água PEM (do inglês, *proton exchange membrane ou polymer electrolyte membrane*) é uma tecnologia que opera em temperaturas mais baixas com densidades de corrente mais altas e produz gases, hidrogênio e oxigênio, de alta pureza (99,999%). Isso acontece pelo fato de a cinética da reação de evolução do hidrogênio na eletrólise da água PEM ser mais rápida do que a eletrólise alcalina da água devido à área altamente ativa da superfície metálica dos eletrodos de platina e ao menor pH do eletrólito. Além disso, a eletrólise da água PEM é mais segura do que a eletrólise alcalina da água devido à ausência de eletrólitos cáusticos e ao sistema ser mais compacto [1, 20-22].

O eletrolisador de água de óxido sólido, conhecido como SOEC (do inglês, *solid oxide electrolytic cell*), opera com água na forma de vapor em altas temperaturas, o que pode reduzir drasticamente o consumo de energia para decompor a água em hidrogênio e oxigênio, consequentemente, aumentar a eficiência energética. Além disso, a SOEC oferece duas vantagens principais em comparação com as tecnologias de eletrólise existentes, a primeira é a alta temperatura operacional que resulta em termodinâmica e cinética de reação favoráveis, permitindo eficiências de conversão incomparáveis. A segunda é que a eletrólise da água de óxido sólido pode ser facilmente integrada termicamente com a síntese química a jusante, por exemplo, com a produção de metanol, éter dimetílico e amônia. Além disso, a SOEC não requer o uso de eletrocatalisadores de metais nobres e proporciona alta eficiência de conversão. Entretanto, essa é uma tecnologia que ainda está em desenvolvimento e ainda não tem maturidade comercial [1, 20-22].

Tabela 1 - Características das tecnologias de eletrólise de água.

Células	AWE	AEM	PEM	SOEC
Reação no anodo	$2\text{OH}^- = \text{H}_2\text{O} + 0.5\text{O}_2 + 2\text{e}^-$	$2\text{OH}^- = \text{H}_2\text{O} + 0.5\text{O}_2 + 2\text{e}^-$	$\text{H}_2\text{O} = 2\text{H}^+ + 0.5\text{O}_2 + 2\text{e}^-$	$2\text{O}_2 = 0.5\text{O}_2 + 2\text{e}^-$
Reação no catodo	$\text{H}_2\text{O} + 2\text{e}^- = \text{H}_2 + 2\text{OH}^-$	$\text{H}_2\text{O} + 2\text{e}^- = \text{H}_2 + 2\text{OH}^-$	$2\text{H}^+ + 2\text{e}^- = \text{H}_2$	$\text{H}_2\text{O} + 2\text{e}^- = \text{H}_2 + 0.5\text{O}_2$
Eletrólito	KOH/NaOH (5M)	Suporte de polímero DVB com 1M KOH/NaOH	Eletrólito de polímero sólido (PFSA)	Zircônia estabilizada com ítria (YSZ)
Separador	Asbestos/Zirfon/Ni	Fumatech	Nafion®	Eletrólito sólido YSZ
Eletrodo (lado do hidrogênio)	Aço inoxidável perfurado revestido de níquel	Níquel	Óxido de irídio	Ni/YSZ
Eletrodo (lado do oxigênio)	Aço inoxidável perfurado revestido de níquel	Ligas de níquel ou NiFeCo	Carbono platina	Perovskitas (LSCF, LSM) (La,Sr,Co,FE) (La,Sr,Mn)
Temperatura (°C)	60-90	40-60	50-80	700-1000
Pressão (bar)	<30	<35	<70	<15
Densidade de corrente (A/cm²)	0.2-0.4	0.2-2	0.6-2	0.3-2
Faixa de potencial (V)	1.4-3	1.4-2	1.4-2.5	0.7-1.5
Pureza H ₂ (%)	>99.5	>99.9	>99.9	>99.9
Área da célula (m²)	<4	<0.03	<0.15	<0.06
Taxa de produção (m³/h)	<1400	-	<400	<10
Consumo de energia (kWh/m³)	~5.55	-	~5.40	~3.8
Eficiência (%)	50-78	57-59	50-83 ou 46-60	76-81 ou 89
Vida útil (kh)	60-120	>30	50-80	8-20

Fonte: [1,20-22]

Tabela 2 – Vantagens e desvantagens das tecnologias de eletrólise de água.

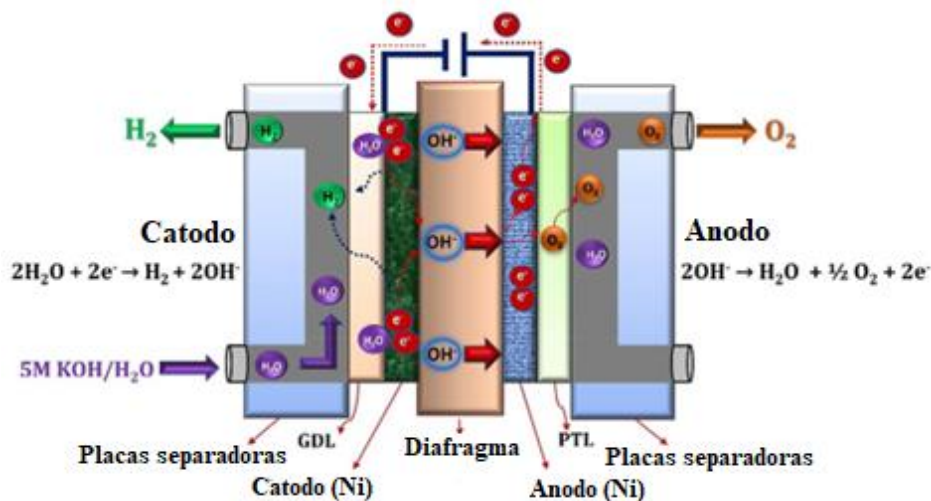
Células	Vantagens	Desvantagens
AWE	• Tecnologia bem estabelecida • Comercializado para aplicações industriais • Eletrocatalisadores isentos de metais nobres • Custo relativamente baixo • Estabilidade de longa duração • Alta durabilidade	• Densidades de corrente limitadas • Cruzamento dos gases • Eletrólito líquido altamente concentrado (5M KOH) • Sistema corrosivo • Menor pureza • Alto consumo de energia
AEM	• Eletrocatalisadores isentos de metais nobres • Eletrólito líquido de baixa concentração (1M KOH).	• Estabilidade limitada • Em desenvolvimento
PEM	• Tecnologia comercializada • Opera com densidades de corrente mais altas • Alta pureza dos gases • Design de sistema compacto • Resposta rápida	• Alto custo de componentes raros • Eletrocatalisadores de metais nobres • Eletrólito ácido • Alta pressão
SOEC	• Alta temperatura de trabalho • Alta eficiência • Pressão baixa • Baixo consumo de energia • Não há necessidade de catalisador de metal nobre	• Estabilidade limitada • Em desenvolvimento • Baixa durabilidade

Fonte: [1,20-22]

2.1.3 Eletrólise alcalina da água

O processo de eletrólise alcalina da água é baseado na técnica de decomposição de água, que utiliza eletricidade para dividir a água em seus dois componentes principais, como mostrado na Figura 1 [1].

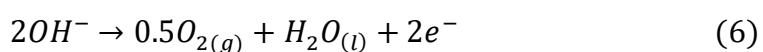
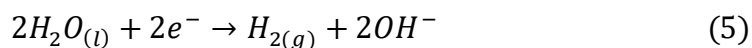
Figura 1 - Conceitos básicos de eletrólise alcalina da água.



Fonte: [1]

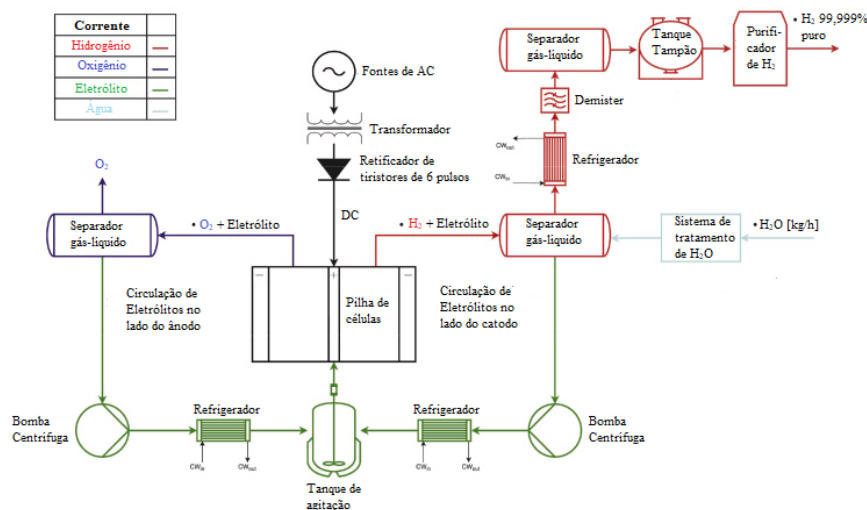
A célula eletrolítica é formada por dois eletrodos, um negativo que é o catodo e o positivo que é o ânodo, que funcionam como camadas de difusão de gás, um diafragma poroso que separa os compartimentos de cátodo e ânodo, e placas separadoras, conhecidas como placas bipolares, que fornecem caminhos para produtos e reagentes e células individuais separadas dentro do sistema [23].

No catodo, são formados o H_2 e o íon hidroxila (OH^-), esses íons são transferidos para o eletrodo positivo através do separador poroso. No anodo, os íons OH^- são transformados em oxigênio (O_2) e moléculas de água por oxidação. O sistema também envolve duas equações de semicélulas nos compartimentos do cátodo e do ânodo, conhecidas como a reação de evolução do hidrogênio (HER, do inglês, *hydrogen evolution reaction*) e a reação da evolução de oxigênio (OER, do inglês, *oxygen evolution reaction*), representadas pelas equações 5 e 6 a seguir [23].



Em uma planta de produção de processo de eletrólise alcalina da água, a fim de se garantir um bom funcionamento, é necessário um conjunto de equipamentos auxiliares, como mostra a Figura 2 a seguir [23-24].

Figura 2 - Diagrama de processo de uma usina de eletrólise alcalina da água.



Fonte: [24]

Analisando a Figura 2, primeiramente temos as fontes de AC, onde a corrente elétrica é convertida em DC pelo transformador, e posteriormente é fornecida à pilha de células eletrolíticas através de um retificador de tiristores de 6 pulsos. Dentro do eletrolisador a eletrólise da água ocorre resultando na produção dos gases hidrogênio e oxigênio. Porém, na saída eles não saem puros e sim em uma mistura com o eletrólito, então, para separar a mistura, os vasos de separação de gás-líquido baseados na gravidade são empregados, criando dois circuitos distintos [23-24].

Após isso, bombas centrífugas são utilizadas a fim de se reciclar o eletrólito, tendo um papel crucial, já que elas não só regulam o fluxo de massa do eletrólito, mas também removem bolhas de gás da superfície do eletrodo e tornam a remoção de calor mais eficaz. Em seguida, as soluções eletrolíticas entram nos refrigeradores, uma junção de trocador de calor com controladores, esses são usados para controlar a temperatura do eletrólito, mantendo a temperatura dele constante, evitando a geração excessiva de calor e permitindo uma operação eficiente. Por fim, antes de serem realimentados nos eletrolisadores, os eletrólitos entram em um tanque de agitação, este que mantém a constância no consumo de água e na produção de gás entre as duas metades das células, assegurando um equilíbrio na entrada do eletrólito em ambos os lados do eletrolisador [23-24].

Já o gás hidrogênio que foi separado do eletrólito, primeiramente é resfriado em um refrigerador, onde qualquer impureza é condensada. Em seguida, a fim de garantir que todo o líquido é removido e para permitir a produção de um fluxo de gás de hidrogênio de alta qualidade, ele passa através de um demister, responsável por remover gotículas de líquido arrastadas, e um segundo separador gás-líquido. Após a desumidificação, o gás hidrogênio é mantido em um tanque tampão. O sistema de purificação de hidrogênio garante a produção de gás hidrogênio seco que é 99,999% puro. Este sistema usa colunas de adsorvente para secagem completa, bem como um desoxidante de paládio para remover impurezas de oxigênio. O gás de hidrogênio comprimido é então preparado para uso após ser purificado [23-24].

2.1.3.1 Eletroquímica da AWE

O potencial real da célula eletrolítica (V_{ec}) é calculado a partir da temperatura de operação (T) em °C, da densidade de potência (j) em A.m⁻² e da pressão de operação (p) em bar, além de coeficientes de operação da célula eletrolítica, como mostra a equação 7 a seguir [24-25].

$$V_{ec} = V^{\circ} + [(r_1 + d_1) + r_2 T + d_2 p]j + s \log \left[\left(t_1 + \frac{t_2}{T} + \frac{t_3}{T^2} \right) j + 1 \right] \quad (7)$$

Onde V° é o potencial padrão da célula eletrolítica de hidrogênio, e os parâmetros r_1 , r_2 , d_1 , d_2 , s , t_1 , t_2 , t_3 são coeficientes de operação da célula eletrolítica. Estes parâmetros podem ser obtidos a partir de dados experimentais, [25] obtiveram eles utilizando técnica de regressão linear a partir dos dados experimentais encontrados pelo mesmo grupo de pesquisa em anos anteriores e presentes em [26] e [27]. Os valores deles podem ser vistos na Tabela 3.

A potência da célula eletrolítica pode ser definida como mostra a equação 8 a seguir, onde N_{ec} é o número de células eletrolíticas e S_{ec} é a área da célula eletrolítica em m² [28].

$$P_{ec} = V_{ec} N_{ec} j S_{ec} \quad (8)$$

Além disso, um parâmetro importante para se avaliar o desempenho da célula eletrolítica é a eficiência de Faraday (n_F), um índice que varia de 0 a 100%. Essa eficiência é definida como a razão entre a quantidade de H₂ ou O₂ efetivamente produzida e a quantidade teórica calculada, assumindo que toda a carga elétrica

aplicada contribui para a formação do produto desejado. A eficiência de Faraday pode ser determinada a partir da Equação 9 [28-29].

$$\eta_F = \left(\frac{j^2}{f_{11} + f_{12}T + j^2} \right) (f_{21} + f_{22}T) \quad (9)$$

Onde f_{11} , f_{12} , f_{21} , f_{22} são coeficientes de operação da célula eletrolítica para a eficiência de Faraday, e seus valores estão representados na Tabela 3 a seguir [27].

Tabela 3 - Coeficientes da célula eletrolítica alcalina.

Coeficiente	Valor	Unidade
r_1	$4,445153 \cdot 10^{-5}$	$\Omega \cdot m^2$
r_2	$6,88874 \cdot 10^{-9}$	$\Omega \cdot m^2 \cdot ^\circ C^{-1}$
d_1	$-3,12996 \cdot 10^{-6}$	$\Omega \cdot m^2$
d_2	$4,47137 \cdot 10^{-7}$	$\Omega \cdot m^2 \cdot bar^{-1}$
s	0,33824	V
t_1	-0,01539	$m^2 \cdot A^{-1}$
t_2	2,00181	$m^2 \cdot ^\circ C \cdot A^{-1}$
t_3	15,24178	$m^2 \cdot ^\circ C \cdot A^{-1}$
f_{11}	478645,74	$A^2 \cdot m^{-4}$
f_{12}	-2953,15	$A^2 \cdot m^{-4} \cdot ^\circ C^{-1}$
f_{21}	1,0396	-
f_{22}	-0,00104	$^\circ C^{-1}$

Fonte: [27]

A partir dos valores do potencial real da célula e da potência da célula, pode-se determinar a quantidade molar de hidrogênio produzido e consequentemente, usando a estequiometria da reação global da célula, a quantidade de água que é convertida, como mostra a equação 10, onde n_e é a quantidade de elétrons que são transferidos no processo de eletrólise e F é a constante de Faraday [28].

$$n_{H_2} = n_{H_2O} = \frac{P_{ec}}{V_{ec} n_e F} \eta_F \quad (10)$$

Ademais, outro parâmetro importante para avaliar o desempenho da célula eletrolítica é a eficiência voltaica, um índice que varia de 0 a 100%, e que mede a

razão entre o potencial termoneutro e o potencial operacional da eletrólise, como mostra a equação 11 a seguir [30].

$$\eta_v = \frac{U_{tn}}{V_{ec}} \quad (11)$$

Onde V_{ec} é o potencial real da célula eletrolítica e é calculado pela equação 7 e U_{tn} é o potencial termoneutro e tem seu valor sendo igual a 1,481 V como mencionado anteriormente.

2.2 Armazenamento de Hidrogênio

A tecnologia de armazenamento de hidrogênio é um componente crítico nas plantas de hidrogênio e um ponto crucial para o crescimento em grande escala da produção e transporte de hidrogênio verde. O armazenamento, juntamente com a produção e o transporte de hidrogênio, é um componente-chave da cadeia de valor do hidrogênio. O desenvolvimento de soluções de armazenamento confiáveis, seguras e eficientes é um dos requisitos mais imediatos e desafiadores da atualidade, sendo fundamental para atender às demandas atuais e potenciais futuras do mercado de energia de hidrogênio, com soluções robustas e adequadas a cada aplicação [7,16,31].

As aplicações de armazenamento de hidrogênio podem ser divididas em dois grupos: aplicações estacionárias e móveis. Os métodos de armazenamento estacionário destinam-se principalmente ao armazenamento no local, no ponto de produção ou uso, e à geração de energia estacionária. As aplicações móveis são utilizadas para transportar o hidrogênio armazenado até ao ponto de armazenamento ou utilização, ou para utilização num veículo [7,16].

Devido à sua baixa densidade energética por volume em comparação com os combustíveis fósseis, o hidrogênio pode exigir reservatórios de armazenamento muito grandes. Para mitigar esse desafio e armazenar uma quantidade adequada de hidrogênio, é comum que pelo menos uma das seguintes características esteja envolvida: alta pressão de armazenamento, baixa temperatura de armazenamento ou o uso de um material capaz de atrair e reter uma grande quantidade de moléculas de hidrogênio. Outras tecnologias incluem a conversão do hidrogênio em substâncias químicas com maior densidade, como amônia, metanol e

transportadores orgânicos líquidos de hidrogênio (LOHC) e posterior reconversão em hidrogênio [7].

Os métodos de armazenamento de hidrogênio são geralmente classificados em duas categorias principais: tecnologias de base física e tecnologias de base material. Os métodos de armazenamento físico incluem gás comprimido, líquido e forma criocomprimida. Estes métodos físicos requerem energia elevada e dispendiosa para armazenamento de hidrogênio, o que é particularmente desfavorável para aplicações móveis [7,16].

As tecnologias a base material são divididas em dois subgrupos, sorção química/quimissorção e sorção física/fississorção. Tanto no armazenamento por sorção química ou física, materiais básicos, frequentemente em pó ou líquidos como transportadores orgânicos de hidrogênio, apresentam baixa eficiência na transferência térmica durante os processos de carga e descarga. Para melhorar o desempenho, esses materiais são pré-processados por métodos como fundição, modelagem e prensagem uniaxial, sendo posteriormente armazenados em contêineres com trocadores de calor integrados e conexões para controle e filtragem do hidrogênio [7].

Na sorção química, as moléculas de hidrogênio são dissociadas em átomos e incorporadas à estrutura química do material. No entanto, ainda existem desafios significativos, como a necessidade de reduzir custos, peso e temperatura de operação, além de melhorar a cinética de carga e descarga e controlar a formação de gases indesejados durante a dessorção. Os hidretos metálicos destacam-se como o grupo mais reconhecido para essa aplicação, mas existem outros como os Transportadores Orgânicos Líquidos de Hidrogênio (LOHCs), que são uma das opções mais promissoras no momento [7].

A sorção física são sistemas de armazenamento baseados em materiais porosos que tem um potencial para alcançar unidades de armazenamento de alta capacidade e confiáveis, devido à sua alta área superficial, baixa energia de ligação do hidrogênio, cinética rápida nos processos de carga e descarga e custo reduzido. Ademais, a absorção física pode mitigar problemas de gerenciamento térmico durante a carga e descarga da unidade de armazenamento. No entanto, enfrentam desafios como peso elevado, necessidade de baixa temperatura e alta pressão, além

de densidade de armazenamento ainda limitada. Atualmente, essas tecnologias são experimentais, com testes realizados apenas em pequena escala e resultados de desempenho ainda insatisfatórios. Entre as tecnologias mais promissoras de sorção físicas tem-se as Estruturas Metal-Orgânicas (MOFs) e os materiais de carbono poroso [7].

2.2.1 Hidretos Metálicos

A técnica de armazenamento por hidretos metálicos (MHS) sobressai em sistemas de armazenamento de hidrogênio em estado sólido devido à sua alta capacidade volumétrica, estabilidade superior, reversibilidade e segurança inerente. Hidretos são formados pela combinação de elementos com hidrogênio e são classificados em iônicos (“salinos”), covalentes (moleculares) e intersticiais (metálicos). Essa categorização baseia-se nos elementos envolvidos e na natureza da ligação. No entanto, uma demarcação nítida é frequentemente dificultada pela compreensão ainda incipiente da natureza dessas ligações [8,32].

Nos hidretos iônicos, o hidrogênio se liga a um elemento eletropositivo, atuando como um íon hidreto (H^-). Esses elementos eletropositivos são, em sua maioria, metais alcalinos ou alcalino-terrosos, embora alguns lantanídeos também possam formar hidretos iônicos. A natureza iônica é mais pronunciada nos elementos mais pesados desses grupos, enquanto os elementos mais leves tendem a apresentar características de ligação covalente [32].

Hidretos covalentes são compostos formados pela ligação do hidrogênio com elementos dos grupos 12 a 17 da tabela periódica e o berílio. Os hidretos resultantes da ligação com o berílio e elementos dos grupos 12 e 13 apresentam estrutura polimérica, sendo os hidretos do grupo 12 frequentemente considerados intermediários entre hidretos poliméricos covalentes e hidretos metálicos. Por outro lado, os hidretos formados com elementos dos grupos 14 a 17 são voláteis [32].

Hidretos intersticiais são compostos formados pela interação do hidrogênio com metais de transição, além de vários lantanídeos e actinídeos. Nesses hidretos, o hidrogênio ocupa interstícios tetraédricos e/ou octaédricos na rede cristalina metálica, estabelecendo ligações metálicas. Apesar de algumas distorções estruturais, a configuração geral da rede metálica permanece essencialmente inalterada [32].

Os hidretos iônicos e covalentes também são conhecidos como hidretos não intersticiais. Normalmente, em comparação com os hidretos intersticiais, esses hidretos são mais estáveis e possuem uma maior capacidade gravimétrica de hidrogênio, o que faz com que a liberação de hidrogênio ocorra em temperaturas mais elevadas. Essas características se devem ao menor peso atômico dos elementos que geralmente formam hidretos não intersticiais e à maior intensidade das ligações iônicas e covalentes em comparação com as ligações metálicas [32].

Hidretos metálicos podem ser compostos por um único elemento, uma liga ou um material complexo. Nos hidretos complexos, um metal de transição, um metal não de transição (geralmente alumínio) ou um não metal (comumente boro) liga-se a um ou mais átomos de hidrogênio, formando um ânion complexo estabilizado por um átomo de metal alcalino ou alcalino-terroso [32].

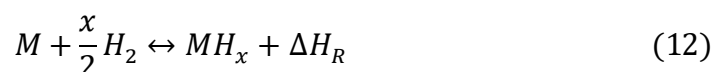
As ligas, são classificadas em três categorias principais: soluções sólidas, compostos intermetálicos e ligas de alta entropia. As soluções sólidas são formadas pela distribuição substitucional ou intersticial de um ou mais solutos na estrutura cristalina de um solvente, sem obedecer a uma proporção estequiométrica. Os compostos intermetálicos, por sua vez, são compostos por dois ou mais elementos em proporção estequiométrica, classificados como elementos A (com tendência a formar hidretos estáveis, como lantânio e lutécio) e elementos B (com tendência a formar hidretos instáveis, como estanho e antimônio). Por fim, as ligas de alta entropia, uma classe relativamente recente de hidretos metálicos, consistem em múltiplos elementos combinados em proporções quase equimolares [32].

Nos hidretos metálicos, o hidrogênio é quimicamente ligado a metais ou ligas. Durante a absorção, o hidrogênio gasoso (H_2) primeiro se dissocia ao interagir com a superfície metálica, e então difunde-se para o interior da estrutura do material. Nesse processo, ocorre uma reação exotérmica, com liberação de calor, que resulta na formação de um hidreto metálico estável. Uma vez concluída a reação, o hidrogênio permanece ligado e armazenado no material sob condições ambientais [33].

A diversidade nas faixas de pressão e temperatura para a ocorrência da reação, assim como nas propriedades físicas dos diversos hidretos metálicos, cria um vasto

leque de aplicações para esses materiais como sistemas de armazenamento de hidrogênio [32].

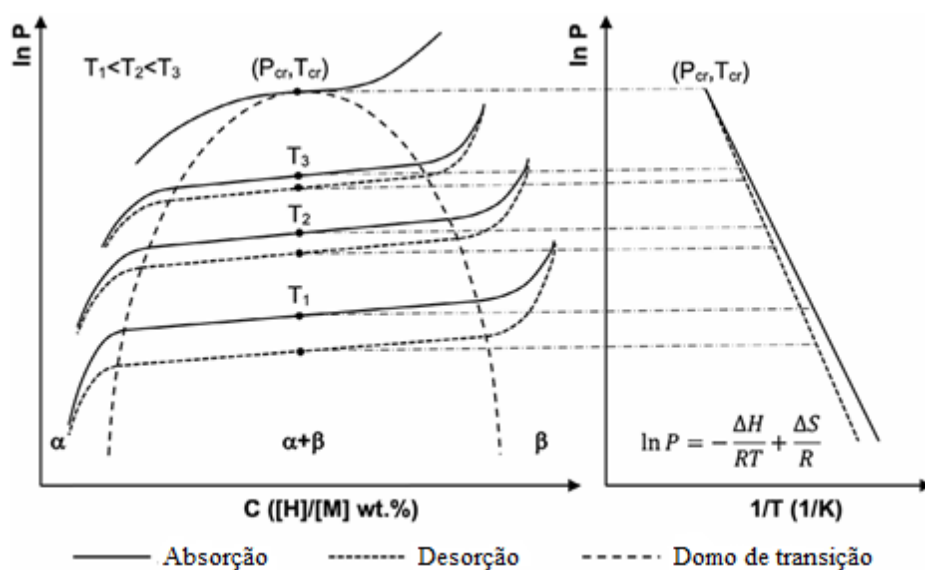
Para que o hidrogênio seja liberado do hidreto metálico, através da desidrogenação, é necessário fornecer calor, caracterizando-se como uma reação endotérmica. A reação global dos hidretos metálicos está descrita na equação 12 a seguir. Onde M representa um metal, x é a quantidade estequiométrica de hidrogênio ligada ao metal e ΔH_R é a entalpia de reação do processo [32-33].



Uma ferramenta utilizada para a caracterização de um hidreto metálico são os diagramas PCT (Pressão-Composição-Temperatura), eles descrevem como a capacidade de absorção e dessorção de hidrogênio por um metal ou liga metálica varia em função da pressão e da temperatura, fornecendo informações fundamentais sobre o comportamento termodinâmico do material [34].

Nestes diagramas o eixo y indica a pressão logarítmica do hidrogênio e o eixo x representa a concentração ou composição de hidrogênio, que pode ser representada como a fração entre a massa de hidrogênio absorvida e a massa da liga metálica (MH), em $[H]/[M]$ % em peso, ou como a razão entre o número de átomos de hidrogênio e o número de átomos da liga metálica, como mostra a Figura 3 [34].

Figura 3 - Diagrama PCT.



Fonte: [8]

Esses diagramas são divididos em três regiões denominadas α , $\alpha + \beta$ (região de platô) e β , e elas são separadas por uma curva de domo de transição (linha pontilhada), com o ponto crítico no topo. A região α é onde o hidrogênio gasoso se dissolve no cristal metálico formando uma solução sólida, e para que uma pequena quantidade de hidrogênio seja absorvida é necessário um aumento significativo da pressão. Já na região de platô, onde as fases α e β coexistem, o hidrogênio é dissolvido tanto no metal quanto no hidreto metálico e ele é absorvido em grandes quantidades com uma pequena variação na pressão. Essa quantidade de hidrogênio absorvida depende diretamente da temperatura, onde quanto menor for a temperatura, maior é a capacidade de absorção de hidrogênio. Por fim, na fase β é formado uma solução sólida no cristal do hidreto metálico, e, assim como na região α , são necessários aumentos consideráveis de pressão para aumentar a limitada capacidade de absorção de hidrogênio [34].

Esses diagramas também mostram várias linhas isotérmicas, e quando a temperatura isotérmica é menor que a temperatura crítica, as três regiões podem ser claramente observadas. No entanto, se a temperatura for igual ou superior ao ponto crítico, a região de platô desaparece. Como ilustrado na Figura 3, para uma mesma temperatura, observa-se tanto a isotérmica de absorção (linha contínua) quanto a de dessorção (linha pontilhada), sendo que a pressão de absorção é ligeiramente maior que a de dessorção, um fenômeno conhecido como histerese. Além disso, quanto mais elevada a temperatura, maior tende a ser essa histerese [34].

Como ilustrado na Figura 3, o ponto central de cada isoterma de absorção e dessorção, juntamente com o ponto crítico, é projetado no diagrama $\ln P$ versus $1/T$, resultando na construção de duas linhas: uma correspondente à absorção (linha contínua) e outra à dessorção (linha tracejada). Essas curvas são conhecidas como linhas de Van't Hoff e se cruzam no ponto crítico. Além disso, conforme indicado na equação presente na figura, a inclinação da reta corresponde à razão entre a entalpia de reação e a constante universal dos gases perfeitos ($\Delta H/R$), enquanto o intercepto representa a razão entre a entropia de reação e essa mesma constante ($\Delta S/R$) [34].

2.2.2 Riscos associados ao armazenamento de H_2

Este subcapítulo foi desenvolvido com base na referência [7], que aborda de forma detalhada os principais riscos associados ao armazenamento de hidrogênio.

Existem diversos fatores que podem comprometer a confiabilidade dos sistemas de armazenamento de hidrogênio. Esses fatores são classificados em duas categorias principais: aqueles relacionados às propriedades dos materiais e aqueles associados às características específicas do hidrogênio.

Dentre os fatores relacionados às propriedades dos materiais têm-se os impactos do hidrogênio nos materiais, formação de bolhas no revestimento, mecanismos de dano em fibras de carbono e exposição ao fogo por vasos de pressão revestidos com compósito (COPVs). Já dentre os fatores relacionados às características específicas do hidrogênio têm-se a variação de temperatura, o processo de compressão, a flutuação da pressão, o vazamento do hidrogênio e a contaminação.

Os impactos do hidrogênio sobre materiais, especialmente aços, são preocupantes devido à fragilização por hidrogênio. Diversos tipos de aço têm sido estudados, mas uma alternativa para mitigar o efeito do hidrogênio no aço utilizado em gasodutos é substituir o material por Polímero Reforçado com Fibra (FRP), os gasodutos de FRP apresentam uma estrutura multicamada, incluindo revestimento interno não permeável, camadas de proteção e reforço de fibra de vidro ou carbono.

Esses gasodutos são mecanicamente robustos, fáceis de instalar e permitem conexões sem soldagem, reduzindo a necessidade de mão de obra e maquinário pesado. A instalação é 30% mais econômica e minimiza problemas na faixa de servidão. Em 2016, o FRP foi incluído no código ASME B31.12 (Código de Tubulações e Gasodutos de Hidrogênio) para serviços de até 170 bar.

A formação de bolhas no revestimento de vasos de pressão ocorre quando, em um vaso de pressão COPV, um revestimento de polímero é montado com um encaixe metálico e envolto por compósitos de fibra de carbono, garantindo a vedação do vaso. Sob altas pressões, o revestimento plástico absorve o gás hidrogênio e, caso a despressurização aconteça de forma muito rápida, o gás acumulado não consegue escapar por difusão, resultando na formação de bolhas. Esse fenômeno está relacionado à permeabilidade do revestimento em diferentes pressões e temperaturas, à espessura do revestimento, à pressão máxima no cilindro, à pressão residual após o esvaziamento e à taxa de esvaziamento. Contudo, é necessário investigar como a formação de bolhas pode impactar o vazamento em

vasos de pressão e estabelecer critérios definitivos para a seleção de materiais e processos de fabricação.

Os mecanismos de dano em fibras de carbono são fundamentais para entender a confiabilidade dos vasos de pressão compósitos, que são estruturas complexas e dependem de vários parâmetros, como a quebra das fibras, delaminação, fissuração da matriz e o impacto da geometria do domo na pressão de ruptura. No entanto, as propriedades dos materiais compósitos variam conforme o procedimento de empilhamento e a densidade das fibras, o que dificulta a obtenção de propriedades exatas. Nesse contexto, abordagens probabilísticas para prever falhas nas fibras têm sido sugeridas como um caminho promissor.

A resistência ao fogo e altas temperaturas em vasos de armazenamento é uma preocupação, especialmente devido à vulnerabilidade de resinas e polímeros a altas temperaturas em comparação com materiais metálicos. A proteção contra incêndios e o entendimento do comportamento dos materiais compósitos em incêndios são essenciais, especialmente em aplicações a bordo. Métodos comuns de proteção incluem o Dispositivo de Alívio de Pressão Termicamente Ativado (TPRD), que esvazia os vasos em caso de altas temperaturas, a aplicação de tinta intumescente para melhorar a resistência ao fogo, e o uso de paredes de contêiner pode reduzir o fluxo de calor radiativo.

A variação de temperatura do hidrogênio dentro dos tanques durante o preenchimento, esvaziamento e manuseio, bem como nas bombas e compressores, é um fator importante na seleção de materiais e design dos vasos de armazenamento. Simulações CFD e medições experimentais foram realizadas, mas a melhor localização para instalar dispositivos de medição ainda não é conhecida, especialmente em aplicações a bordo. Uma abordagem investigada é estimar a temperatura interna do tanque monitorando as temperaturas externas, o que pode ser mais conveniente, mas exige mais dados experimentais para calibrar os sensores. Mudanças de temperatura, a longo prazo, podem reduzir a vida útil dos vasos, a menos que melhorias no design sejam aplicadas.

A potência necessária para compressão e bombeamento do gás hidrogênio é superior à do gás natural nas mesmas taxas de fluxo, devido à menor massa molar do hidrogênio e à densidade de energia do hidrogênio por volume ser um terço da

do gás natural. Como resultado, é exigida uma maior potência de compressão, o que leva a velocidades de ponta mais altas nos compressores, ocasionando maior taxa de degradação e, conseqüentemente, períodos de manutenção mais curtos, maior demanda por lubrificação e outras questões relacionadas à confiabilidade. Isso, a menos que ajustes no design possam compensar esses efeitos.

As flutuações de pressão podem ocorrer tanto nos gasodutos de gás natural existentes (P2G) quanto em gasodutos dedicados à distribuição de hidrogênio, devido à variabilidade na taxa de produção de energia das fontes renováveis e às variações na demanda de hidrogênio (devido à sazonalidade e horários de pico). Essas flutuações podem causar danos significativos à rede de distribuição, o que destaca a necessidade de desenvolver vasos de armazenamento mais duráveis e confiáveis. Além disso, é fundamental realizar estudos para estimar a amplitude das flutuações esperadas, entender seus impactos e projetar cenários de controle adequados.

As moléculas de hidrogênio, por serem muito leves e pequenas, podem permear facilmente materiais e vedações, resultando em taxas de vazamento até três vezes maiores que as do gás natural. Esse desafio é mais crítico em gasodutos, especialmente em longas distâncias com diversas junções e estações de compressão. No gasoduto de gás natural da Alemanha, por exemplo, uma mistura com 17% de hidrogênio apresentou taxa de vazamento de apenas 0,00005%. Em aplicações a bordo, são preferidos materiais compósitos, mais leves que vasos metálicos, com pesquisas voltadas ao comportamento de rachaduras e ciclos na interface com o revestimento. Além disso, vazamentos podem ocorrer em vedações elastoméricas, exigindo sensores de alta precisão, já que o hidrogênio é inodoro e incolor.

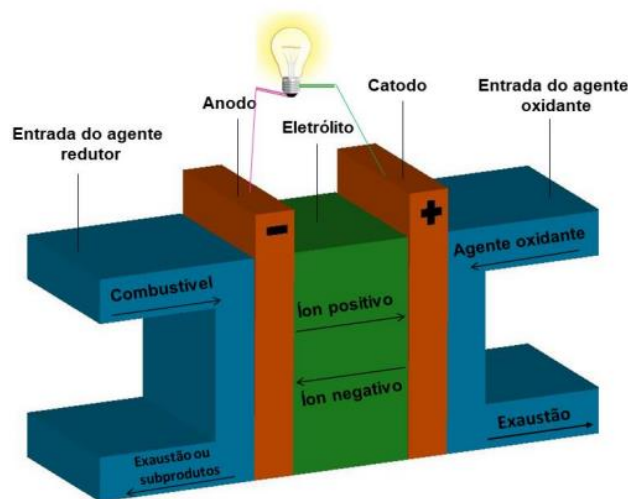
Se os gasodutos de gás natural forem utilizados para transportar hidrogênio, pode ocorrer corrosão nos tubos, contaminando o gás e exigindo purificação para aplicações em células a combustível. Óleos lubrificantes em bombas e compressores também representam fonte de contaminação, sendo necessários projetos sem vazamento ou sem lubrificação. Outro risco está na desgaseificação de água em revestimentos poliméricos de vasos compósitos, o que reforça a necessidade de desidratação prévia e controle de umidade. Embora existam estudos

sobre os efeitos da contaminação no desempenho das células a combustível, ainda não há pesquisas sobre formas de mitigar diretamente essas fontes de impurezas.

2.3 Células a combustível

Células a combustível (CaC) são equipamentos capazes de transformar energia química presente nas ligações químicas de um combustível em energia elétrica através de reações de oxirredução, sem a emissão de poluentes ou produção de ruídos. Elas são compostas principalmente por dois eletrodos, um positivo e um negativo, conhecidos como anodo e catodo, respectivamente, que são separados por um eletrólito, podendo ser sólido ou líquido, como ilustrado na Figura 4 [9,35].

Figura 4 - Estrutura de uma célula a combustível genérica.



Fonte: [9]

O funcionamento de uma CaC baseia-se em reações eletroquímicas que ocorrem em seus eletrodos. No ânodo, há a alimentação do combustível e a liberação dos gases de exaustão ou de subprodutos do processo. No cátodo, ocorre a entrada do agente oxidante, geralmente ar atmosférico ou oxigênio. Já o eletrólito atua como meio condutor iônico, permitindo a difusão do denominado íon de transporte. A direção dessa migração iônica depende do tipo de célula a combustível. Nas células que operam por condução aniônica, o transporte ocorre no sentido cátodo-ânodo. Por outro lado, nas células com condução catiônica, a difusão iônica ocorre no sentido inverso, isto é, do ânodo para o cátodo [10].

O potencial produzido pelas células de combustível é relativamente baixo, variando de 0,5 a 0,9 V. Portanto, é necessário agrupar várias células em série para obter um potencial significativo. Devido à diversidade de tecnologias de células de

combustível disponíveis, é possível encontrar no mercado células que geram desde watts até megawatts de potência por módulo. Tipicamente, essas células apresentam uma eficiência na faixa de 40% a 60%. No entanto, quando são utilizadas em sistemas combinados de calor e energia (CHP), podem alcançar eficiências impressionantes, chegando até 85% [36-37].

Entre as vantagens desta tecnologia, destacam-se a baixa emissão de dióxido de carbono e dióxido de enxofre, bem como uma alta densidade de potência. Um aspecto significativo é que, ao contrário dos sistemas convencionais de geração de energia elétrica baseados em máquinas térmicas, que envolvem várias etapas intermediárias de conversão de energia, as células a combustível realizam a conversão direta da energia química do combustível em energia elétrica, sem a necessidade de combustão. Isso torna o processo de geração de energia mais eficiente quando se utiliza células a combustível. Além disso, é importante observar que as células a combustível não estão sujeitas ao limite de eficiência de Carnot, que restringe a eficiência das máquinas térmicas [10-11,35].

2.3.1 Histórico e Mercado

A célula a combustível teve sua origem com o cientista britânico William R. Grove em 1839, inspirado pela observação da reação de eletrólise da água. Durante um experimento, Grove substituiu a fonte de energia por um amperímetro e notou a ocorrência de uma pequena corrente elétrica fluindo no circuito externo, que estava conectado entre os eletrodos. Embora uma célula a combustível funcional tenha sido demonstrada pelo engenheiro britânico Francis Thomas Bacon na década de 1930, foi somente no final da década de 1950 que essa tecnologia começou a ser mais amplamente apresentada, inicialmente na forma de células alcalinas com uma capacidade de 5 kW [35,38].

Durante a década de 1960, houve o desenvolvimento da primeira célula a combustível do tipo PEMFC, conhecida na época como SPFC (do inglês, *solid polymer fuel cell*). Ela foi desenvolvida para utilização em programas na NASA (*National Aeronautics and Space Administration*), o que foi o que mais impulsionou o desenvolvimento de células a combustível naquele momento. Nos anos 1980, começaram a surgir esforços para tornar as células a combustível tecnicamente e economicamente viáveis para aplicações em terra, com foco especial em aplicações militares e comerciais. Um exemplo notável foi a criação de um conjunto de células

do tipo PEM pela empresa canadense Ballard Power Systems, destinado a um submarino não tripulado. Esse conjunto era composto por 54 células individuais e tinha uma capacidade de 2 kW. Na década seguinte, a mesma empresa construiu o primeiro ônibus movido a células a combustível do tipo PEM [11,35,39].

Em 2020, estima-se que a quantidade de células a combustível sendo utilizadas no mundo foi de cerca de 82.400 unidades, totalizando quase 1320 MW de potência, englobando os três tipos de aplicações básicas de CaCs: portáteis, estacionárias e veiculares. Onde os tipos de células a combustível mais usadas no mundo são a PEMFC e SOFC. Além disso, o continente que mais utiliza as células a combustíveis é a Ásia, e o tipo de aplicação mais utilizada sendo para transportes [40].

As células a combustível portáteis variam em potência de 1W a 20 kW, e são aquelas incorporadas ou transportadas em produtos projetados para serem movimentados, incluindo pequenas unidades de potência auxiliares (APU). A densidade de energia de uma célula de combustível típica é 5 a 10 vezes maior que a das baterias recarregáveis, isso faz com que a célula de combustível seja uma opção mais favorável para dispositivos portáteis. Alguns exemplos de uso são em pequenas APUs ‘móveis’, aplicações militares, carregadores de bateria, câmeras, entre outros. As células a combustível que estão sendo utilizadas como portáteis são PEMFC, DMFC e SOFC [40].

O uso residencial, industrial e comercial são alguns exemplos de aplicações estacionárias de células de combustível. Para geração de energia em larga escala, as mais utilizadas são PAFC, MCFC, SOFC e PEMFC, um exemplo é a PAFC que é amplamente utilizado em hospitais, pois a temperatura de exaustão da água permite sua utilização em processos de esterilização de objetos utilizados no processo. Para uso residencial, as células de combustível têm potências de 1 a 10 kW e as mais comumente utilizadas são a PEMFC e SOFC, elas podem ser usadas tanto em aplicações conectadas à rede, como em uso isolado [41-42].

As indústrias dos transportes são responsáveis por 17% das emissões globais de gases com efeito de estufa (GEE), o que fez com que elas pretendessem reduzir essas emissões sem comprometer a eficiência dos veículos. As células de combustível oferecem emissões de combustível quase nulas e maior eficiência do

que os motores convencionais de combustão interna. Assim, nos últimos anos as CaCs começaram a ser utilizados em veículos. Nesse caso elas variam em potência de 1 a 300 kW, onde as mais comumente utilizadas são a PEMFC, DMFC e SOFC. Alguns exemplos de uso são em veículos leves de tração como motocicletas, em veículos elétricos leves, em veículos elétricos pesados, na propulsão aérea e na propulsão marítima [40-41].

2.3.2 Tipos de Células a Combustível

Existem diversos tipos de CaC, que variam de acordo com o tipo de eletrólito que utilizam, a temperatura de operação e o combustível empregado. Com base nessas características, destacam-se seis tipos principais de células a combustível que têm sido amplamente estudados e utilizadas: célula a combustível de membrana de troca de prótons (PEMFC), célula a combustível alcalina (AFC), célula a combustível de ácido fosfórico (PAFC), célula a combustível de carbonato fundido (MCFC), célula a combustível de metanol direto (DMFC) e célula a combustível de óxido sólido (SOFC). As informações sobre os diferentes tipos de células a combustível estão organizadas em quatro tabelas. A Tabela 4 apresenta as principais aplicações de cada tecnologia. As Tabelas 5 e 6 reúnem suas características técnicas mais relevantes, enquanto a Tabela 7 sintetiza vantagens e desvantagens, permitindo uma comparação direta entre as alternativas [10-11].

As células a combustível de membrana de troca de prótons, conhecidas como PEMFC (do inglês, *proton exchange membrane fuel cell*) ou simplesmente PEM (do inglês, *polymer electrolyte membrane*), utilizam uma membrana trocadora de prótons como eletrólito, feita de um polímero à base de politetrafluoretileno (PTFE). Ela também é chamada de célula a combustível de eletrólito polimérico sólido (SPEFC, do inglês, *solid polymer electrolyte fuel cell*) ou, de forma mais simples, célula a combustível de polímero sólido (SPFC, do inglês, *solid polymer fuel cell*). Elas, normalmente, operam em baixas temperaturas, 40 a 80 °C dependendo das limitações do polímero utilizado, e os íons que se movem são os íons H^+ . No entanto, há também a operação na faixa de 140 a 200 °C nas chamadas HT-PEMFC (do inglês, *high temperature PEM fuel cells*). Elas oferecem diversas vantagens, como alta densidade de potência, tamanho compacto, capacidade de iniciar rapidamente e operação em baixa temperatura graças ao uso de catalisadores, minimizando as perdas de calor para o ambiente externo. No entanto, são sensíveis

ao monóxido de carbono, onde concentrações acima de 10 ppm podem causar a deterioração do catalisador, que geralmente é composto de platina [35,43-44].

As células a combustível alcalinas, conhecidas como AFC (do inglês, *alkaline fuel cell*), utilizam um eletrólito alcalino, que geralmente é composto de hidróxido de potássio ou hidróxido de sódio. Essas células operam em temperaturas mais baixas devido ao uso de catalisadores como a platina. No caso das AFCs, é o íon hidroxila (OH^-) que se move através do eletrólito. Elas são conhecidas por apresentar alta densidade de potência. No entanto, são sensíveis ao envenenamento do eletrólito pelo dióxido de carbono, que pode ocorrer devido ao contato com o oxigênio [45-46].

As células a combustível de ácido fosfórico, conhecidas como PAFC (do inglês, *phosphoric acid fuel cells*), utilizam ácido fosfórico puro (H_3PO_4) como eletrólito e, semelhante à célula PEM, os íons que se movem são os íons H^+ . Essas células operam em temperaturas mais baixas, devido à presença de catalisadores como a platina. No entanto, como acontece com todas as células que operam em temperaturas mais baixas, elas estão suscetíveis à contaminação por monóxido de carbono e compostos ricos em enxofre. Além disso, enfrentam problemas de corrosão devido à presença de ácido em seu eletrólito. Vale ressaltar que essa célula tem uma densidade de potência significativamente menor, de 10 a 100 vezes menor do que a dos motores a combustão, o que é uma desvantagem importante [42].

As células a combustível de carbonato fundido, conhecidas como MCFC (do inglês, *molten carbonate fuel cells*), utilizam um eletrólito composto por uma mistura de carbonatos de lítio, potássio e sódio, que são fundidos a altas temperaturas. Devido à sua operação em altas temperaturas, essas células não são afetadas pelo envenenamento por monóxido de carbono e têm a flexibilidade de utilizar catalisadores não nobres, como o níquel. Além disso, são capazes de realizar o processo de reforma, o que significa que podem ser alimentadas com gás natural. Nesse processo de reforma, o hidrogênio necessário para as reações internas é gerado [47].

As células a combustível de metanol direto, conhecidas como DMFC (do inglês, *direct methanol fuel cell*) utilizam uma membrana de troca de prótons como eletrólito, semelhante à PEMFC. No entanto, seus eletrodos são projetados de

maneira diferente para utilizar o metanol (CH_3OH) como combustível em vez do hidrogênio puro. Ao contrário da célula PEM, que utiliza apenas platina como catalisador, na DMFC são empregados dois metais como catalisadores, platina e rutênio. Além disso, para alcançar um desempenho comparável ao da PEMFC, uma quantidade maior desses catalisadores é necessária, o que resulta em um aumento do custo [11].

As células a combustível de óxido sólido, conhecidas como SOFC (do inglês, *solid oxide fuel cells*) são caracterizadas por seu eletrólito cerâmico sólido, que é composto por óxidos, normalmente de zircônia estabilizada com ítria (YSZ). Além disso, o material normalmente utilizado no cátodo é a manganita de lantânio dopado com estrôncio, e no ânodo o YSZ dopado com níquel. Nesse tipo de célula, os íons móveis são íons O^{2-} . Uma das principais características das SOFCs é sua operação em altas temperaturas, isso faz com que elas sejam capazes de realizar o processo de reforma internamente, o que permite que sejam alimentadas diretamente com gás natural, eliminando a necessidade de um reformador externo [12,41].

Tabela 4 – Aplicações dos diferentes tipos de células a combustível.

Células	Aplicações
PEMFC	• Energia de reserva • Energia portátil • Pequena geração distribuída • Transporte
AFC	• Submarinos • Militar e espacial • Energia de reserva
PAFC	• Geração distribuída
DMFC	• Dispositivos eletrônicos (laptops e telefones) • Transporte
MCFC	• Unidade de potência auxiliar • Utilidade elétrica • Grande geração distribuída
SOFC	• Unidade de potência auxiliar • Utilidade elétrica • Grande geração distribuída • Transporte

Fonte: [48-49]

Tabela 5 - Principais características das diferentes tecnologias de células a combustível parte 1.

Célula	Catalisador	Eletrólito	Combustível	Íon de transporte
PEMFC	Pt	Membrana de troca iônica polimérica hidratada	H ₂	H ⁺
AFC	Ligas de Pt ou Ni	KOH mobilizado ou imobilizado em matriz porosa de amianto	H ₂	OH ⁻
PAFC	Pt	Ácido fosfórico imobilizado em SiC	H ₂	H ⁺
DMFC	Pt/Ru (1:1)	Membrana de Nafion®	Metanol, etanol	H ⁺
MCFC	Ni/NiO ou ligas	Carbonato fundido em LiAlO ₂	H ₂ , CO, CH ₄ , outros hidrocarbonetos	CO ₃ ²⁻
SOFC	Ni/NiO ou ligas	Ítria estabilizada com zircônia (YSZ)	H ₂ , CO, CH ₄ , outros hidrocarbonetos	O ²⁻

Fonte: [48-50]

Tabela 6 - Principais características das diferentes tecnologias de células a combustível parte 2.

Célula	Temperatura (°C)	Eficiência da Pilha	Eficiência com cogeração	Escala de Potência
PEMFC	40–110	30–50%	70–90%	1 W-500 kW
AFC	40–110	62%	>80%	1-100kW
PAFC	150–210	40%	>85%	50 kW-1 MW
DMFC	60–200	10–25%	80%	100 mW-1 kW
MCFC	600–700	45–55%	>80%	<1 kW-1 MW
SOFC	600–1000	55–60%	<90%	5 kW-3 MW

Fonte: [48-50]

Tabela 7 - Vantagens e desvantagens dos diferentes tipos de células a combustível.

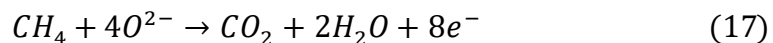
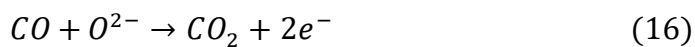
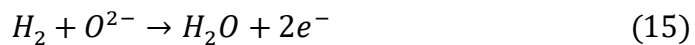
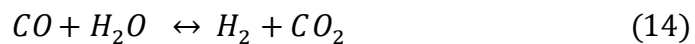
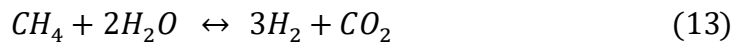
Célula	Vantagem	Desvantagem
PEMFC	• Vasta faixa de potência • Fácil expansão • Tempo de inicialização curto • Alta densidade de potência	• Cinética lenta do oxigênio • Gestão de calor e água • Envenenamento por CO • Requer H₂ de alta pureza
AFC	• Possibilidade de substituição de Pt • Mais barato • Alta atividade • Tempo de inicialização curto • Gerenciamento simples de calor • Pode tolerar uma quantidade muito pequena de CO • Cinética rápida	• Intolerância ao CO₂ • Requer O₂ puro
PAFC	• Pode tolerar 1–2% de CO • Mais barato devido ao menor uso de Pt • Capacidade de ser usado em sistemas CHP • Alta estabilidade • Baixa pressão de vapor • Maior tolerância ao CO₂	• Longo tempo de inicialização • Limitação na seleção de materiais • Baixa condutividade iônica de membrana • Baixa densidade de potência • Intolerante ao CO
DMFC	• Sem emissões de CO₂ • Baixo tempo de inicialização • Alta densidade de energia • O metanol é fácil de obter e armazenar, e é barato • Resistente ao envenenamento por CO	• Cruzamento de Combustível • Caro (usando Ru e Pt) • Envenenamento catódico • O metanol é altamente inflamável e tóxico
MCFC	• Alta eficiência • Variedade de Combustível • Utilizável com turbinas a gás • Barato • Alta atividade • Suporta reformas internas	• Corrosão de ferragens • Baixa densidade de potência • Dissolução catódica • Longo tempo de inicialização • Limitação na seleção de materiais • Eletrólito líquido difícil de manusear
SOFC	• Alta eficiência • Variedade de Combustível • Utilizável com turbinas a gás • Altas densidades de corrente e potência • Catalisadores de metais não nobres • Suporta reformas internas	• Longo tempo de inicialização • Altos custos de fabricação

Fonte: [48]

2.3.3 SOFC

Como todas as células a combustível, as células a combustível de óxido de sólido são formadas por um cátodo, um ânodo e um eletrólito. No caso das SOFCs, o eletrólito é um material cerâmico, geralmente formado por ZrO_2 estabilizada com Y_2O_3 (zircônia estabilizada com ítria (YSZ)), no cátodo frequentemente utiliza-se o $La_xSr_{1-x}MnO_3$ (normalmente $La_{0.8}Sr_{0.2}MnO_3$ —LSM), e no anodo o material mais utilizado é o *cermet*, ou NiO-YSZ (YSZ sobre uma matriz de óxido de níquel) [51].

Conforme mencionado previamente, essas células funcionam a temperaturas elevadas, tipicamente variando de 600 a 1000 °C. Isso confere a elas a capacidade de utilizar uma ampla variedade de combustíveis, incluindo hidrocarbonetos, metano, biogás e monóxido de carbono, além do gás natural. Essa flexibilidade torna essas células independentes da necessidade de hidrogênio puro como fonte de combustível, o que representa uma vantagem distinta em comparação com outras tecnologias de células a combustível. Com isso, diversas reações podem ocorrer no ânodo, como a reação de reforma e a reação entre CO e água, e a oxidação eletroquímica de H_2 , CO e do CH_4 , Equações 13 a 17, respectivamente. Além disso, algumas reações indesejadas também podem ocorrer, como por exemplo o depósito de carbono devido à hidrogenação de CO e a reação de Boudouard, Equações 18 e 19, respectivamente [14,52].



Outra vantagem notável das SOFCs reside na capacidade de configurá-las em sistemas híbridos em conjunto com turbinas a vapor ou a gás. Esses sistemas híbridos são amplamente considerados como uma das tecnologias mais promissoras para atender aos requisitos de geração de energia com alta eficiência e baixas emissões. A operação em temperaturas elevadas, e a consequente utilização do calor de alta qualidade e do combustível residual que é expelido pela SOFC, têm o

potencial de melhorar ainda mais a eficiência do sistema. Após a saída da turbina, os gases podem ser direcionados para uma unidade de recuperação de calor, onde podem ser aproveitados para fins de cogeração ou para o benefício interno da própria instalação. Um sistema que pode ser utilizado após a saída da turbina são os Ciclos Orgânicos de Rankine (ORC, do inglês, *Organic Rankine Cycle*). O ORC opera de maneira semelhante ao ciclo de Rankine a vapor convencional, com a exceção de que, ao usar um fluido de trabalho orgânico, sua temperatura de evaporação é reduzida e, portanto, a energia de entrada de baixa temperatura pode ser aproveitada [53].

No entanto, a operação em altas temperaturas também apresenta desafios, uma vez que pode resultar na degradação dos materiais e, consequentemente, em custos elevados de manutenção que podem comprometer a viabilidade econômica. Além disso, tem sido dada uma atenção considerável ao comportamento termomecânico dos diversos componentes, visando evitar problemas decorrentes das diferenças nos coeficientes de expansão térmica que podem levar a questões de vedação e selagem [12].

Outras preocupações incluem fenômenos indesejados que podem resultar na degradação do desempenho energético e na deterioração física irreversível dos eletrodos, prejudicando o dispositivo. Impurezas presentes nos combustíveis, como compostos de enxofre e outros elementos, podem afetar adversamente o funcionamento do catalisador e a microestrutura. Combustíveis ricos em carbono têm o potencial de provocar a formação de depósitos de carbono na superfície de reação, obstruindo locais eletrocatalíticos porosos e levando a uma rápida e irreversível degradação no desempenho da SOFC [12].

2.3.3.1 Aplicações e potenciais das SOFC

As SOFC têm um amplo espectro de aplicações e potenciais devido às suas características únicas de alta eficiência, baixas emissões e flexibilidade de combustível [38,54].

Uma das aplicações mais comuns das SOFC é na geração estacionária de energia, onde são utilizadas para produzir eletricidade de forma eficiente e limpa. Elas podem ser implementadas em sistemas de cogeração, fornecendo eletricidade e calor útil para aplicações residenciais, comerciais e industriais. Adicionalmente,

essas células podem ser integradas a redes de energia elétrica, servindo tanto como fonte de energia de reserva quanto como complemento à geração convencional [38,54].

As SOFC também têm potencial para revolucionar o setor de transporte, fornecendo uma fonte de energia limpa e eficiente para veículos elétricos. Sua versatilidade é notável, pois podem ser alimentadas por uma ampla gama de combustíveis, incluindo hidrogênio, metanol e gás natural. Essa flexibilidade as torna aplicáveis em diversas modalidades de transporte, desde veículos leves até ônibus e caminhões pesados. Além disso, as SOFC podem ser usadas em sistemas de propulsão marítima, reduzindo as emissões de poluentes em navios e outras embarcações [38,54].

Ademais, devido à sua alta densidade de energia e confiabilidade, as SOFC são amplamente utilizadas em aplicações militares e aeroespaciais. Elas podem ser usadas para fornecer energia elétrica a equipamentos militares remotos, como postos de comando avançados e sistemas de comunicação. Além disso, as SOFC são usadas em veículos aéreos não tripulados (VANTs) e satélites, onde a eficiência energética e a capacidade de operar em ambientes hostis são essenciais [38,54].

As SOFC também têm potencial para aplicações portáteis e de emergência, onde uma fonte confiável de energia é essencial. Elas podem ser usadas em geradores portáteis para fornecer energia elétrica em locais remotos ou em situações emergenciais, como desastres naturais. Além disso, as SOFC podem ser usadas em sistemas de energia de reserva para hospitais, data centers e outras instalações críticas [38,54].

Em resumo, as SOFC têm uma ampla gama de aplicações e potenciais em diferentes setores, desde geração estacionária de energia até transporte sustentável e aplicações militares e aeroespaciais. Com contínuos avanços em materiais, design e fabricação, espera-se que as SOFC desempenhem um papel cada vez mais importante na transição para uma economia de baixo carbono e sustentável. Além disso, os desenvolvimentos em SOFC têm impactado positivamente a progressão tecnológica de uma ampla família de dispositivos que incluem os eletrolisadores SOEC (do inglês, *solid oxide electrolysis cells*) e os reatores SOFC (SOFCR, do inglês, *solid oxide fuel cell reactor*) [38,54].

2.3.3.2 Termodinâmica e Eletroquímica de uma SOFC

O estudo dos princípios operacionais de uma célula a combustível é baseado em considerações termodinâmicas e químicas. É demonstrado que o máximo trabalho elétrico (w_{max}) que pode ser extraído de uma célula, em condições ideais de reversibilidade, é igual à variação de energia livre de Gibbs, este será dependente da temperatura, pressão e concentração dos componentes nas correntes de combustível e agente redutor, conforme mostrado na equação 20 a seguir [55].

$$w_{max} = -\Delta G(T, p) \quad (20)$$

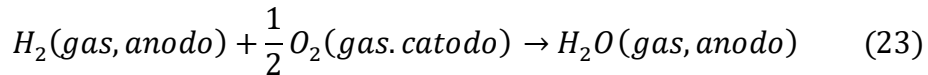
Se o processo de reações eletroquímicas que ocorre na célula a combustível for reversível, não há perdas na célula e toda a energia livre de Gibbs fornecida pela reação é convertida em trabalho elétrico como mostra a equação 21 abaixo, onde n_e é o número de elétrons trocados e E_{rev} é o potencial reversível [55].

$$w_{max} = n_e F E_{rev} \quad (21)$$

Com isso, juntando as equações 20 e 21, tem-se a equação para o cálculo do potencial reversível, como mostra a equação 22 a seguir.

$$E_{rev} = \frac{-\Delta G(T, p)}{n_e F} \quad (22)$$

A reação global que ocorre em uma célula alimentada com hidrogênio é dada pela equação 23.



Assim, a energia livre de Gibbs, por sua vez, pode ser calculada com mostra a equação 24 [9].

$$\Delta G = \Delta G^0 + RT \ln \left(\frac{f_{H_2O}}{f_{H_2} f_{O_2}^{\frac{1}{2}}} \right) \quad (24)$$

Onde ΔG^0 é a variação da energia livre de Gibbs a T^0 e p^0 , normalmente definidos como 298 K e 1 atm, R é a constante universal dos gases perfeitos, T é a temperatura e f é a fugacidade de cada substância na reação global mostrada anteriormente. Entretanto a operação de uma CaC é realizada sob baixas pressões, com isso, as fugacidades podem ser aproximadas às pressões parciais de cada

elemento, fazendo com que a equação 24 pode ser reescrita como mostra a equação 25 [9].

$$\Delta G = \Delta G^0 + RT \ln \left(\frac{p_{H_2O}}{p_{H_2} p_{O_2}^{\frac{1}{2}}} \right) \quad (25)$$

Assim, substituindo a equação 25 na equação 22 tem-se a equação 26 que é a equação de Nernst.

$$E_{rev} = -\frac{\Delta G^0}{n_e F} - \frac{RT}{n_e F} \ln \left(\frac{p_{H_2O}}{p_{H_2} p_{O_2}^{\frac{1}{2}}} \right) \quad (26)$$

Essa equação ainda pode ser simplificada dando a equação 27 a seguir.

$$E_{rev} = E^0 - \frac{RT}{n_e F} \ln \left(\frac{p_{H_2O}}{p_{H_2} p_{O_2}^{\frac{1}{2}}} \right) \quad (27)$$

Onde E^0 pode ser calculado como mostra a equação 28 a seguir [56].

$$E^0 = 1,317 - 2,769 \times 10^{-4} T \quad (28)$$

No entanto, na realidade, existem fenômenos químicos e elétricos que fazem com que o potencial real seja menor que o potencial teórico. Essas perdas são chamadas sobrepotenciais e elas são classificadas em três tipos, que são o sobrepotencial de ativação, ôhmico e de concentração. Com isso, a fórmula para o cálculo do potencial real fica como mostra a equação 29 a seguir [9,12].

$$E_{real} = E_{rev} - \eta_{at} - \eta_{ohm} - \eta_{conc} \quad (29)$$

2.3.3.2.1 Sobrepotencial de ativação

O sobrepotencial por ativação (η_{at}) é causado pela taxa das reações químicas irreversíveis que ocorrem na superfície do eletrodo, podendo ser também influenciado pelas características morfológicas-estruturais do material condutor. A equação que descreve a relação entre a densidade de corrente (j), em A/cm², e o sobrepotencial de ativação, em V, é chamada de equação de Butler-Volmer (Equação 30), representada a seguir [12,57].

$$j = j_0 \left[e^{\alpha \frac{n_e F}{RT} \eta_{at}} - e^{-(1-\alpha) \frac{n_e F}{RT} \eta_{at}} \right] \quad (30)$$

Onde α é uma constante adimensional conhecida como coeficiente de transferência, ela tem seu valor entre 0 e 1 e é referente à porção de energia elétrica aplicada que é utilizada para alterar a reação eletroquímica, e j_0 é conhecido como densidade de corrente de troca. Entretanto, equação é não linear e implícita, ou seja, não permite uma determinação explícita de n_{at} em função da densidade de corrente. Com isso, este sobrepotencial pode ser representado, de forma simplificada, pela equação de Tafel (Equação 31) [58-59].

$$\eta_{at} = \frac{RT}{n_e \alpha F} \ln \left(\frac{j}{j_0} \right) \quad (31)$$

Porém a equação não pode ser calculada para valores de j menores que j_0 , e somente é válida para $j > 4j_0$, então, para contornar esse problema, é utilizado a equação de Tafel modificada (Equação 32) para calcular esse sobrepotencial [58-59].

$$\eta_{at} = \frac{RT}{2\alpha F} \ln \left(\frac{j}{2j_0} + \sqrt{\left(\frac{j}{2j_0} \right)^2 + 1} \right) \quad (32)$$

A equação (32) é válida se o coeficiente de transferência catódica for igual ao coeficiente de transferência anódica. Geralmente é considerado constante e igual a 0,5. Além disso, j_0 é a densidade de corrente de troca e pode ser calculada como mostra a equação 33 a seguir [58-59].

$$j_0 = A e^{-\frac{E_{act}}{RT}} \quad (33)$$

Aqui, E_{act} é a energia de ativação da reação eletroquímica e A é uma constante, seus valores são de 120 kJ/mol e 101,2 kA/cm², respectivamente [60].

2.3.3.2.2 Sobrepotencial ôhmico

O sobrepotencial ôhmico é proveniente da resistência dos materiais ao movimento da carga elétrica. Neste caso, a magnitude da perda de potencial será proporcional à densidade de corrente elétrica e à resistividade dos eletrodos e do eletrólito, como é apresentado na equação 34 [57].

$$\eta_{ohm} = (\rho_e l_e + \rho_c l_c + \rho_a l_a + R_{contato})j \quad (34)$$

Onde l_e , l_c e l_a são, respectivamente, as espessuras do eletrólito, do cátodo e do ânodo, $R_{contato}$ é qualquer resistência de contato possível, e ρ_e , ρ_c e ρ_a são,

respectivamente, as resistividades do eletrólito, do cátodo e do ânodo, e podem ser calculados como mostra as equações 35 a 37 a seguir [57,61].

$$\rho_e = 2,94 \times 10^{-3} e^{\frac{10350}{T}} \quad (35)$$

$$\rho_c = 8,114 \times 10^{-3} e^{\frac{600}{T}} \quad (36)$$

$$\rho_a = 2,98 \times 10^{-3} e^{\frac{-1392}{T}} \quad (37)$$

Entretanto, na maioria dos SOFCs, a principal contribuição para o sobrepotencial ôhmico vem do eletrólito. Isso ocorre porque a resistividade iônica de materiais como a zircônia estabilizada com ítria (YSZ) é significativamente superior às resistividades eletrônicas do LSM (LaMnO_3 dopado com Sr) e do *cermet* (Ni + YSZ), materiais normalmente utilizados no catodo e anodo, respectivamente. Para ilustrar, a resistividade iônica do YSZ a 800 °C é de aproximadamente 50 Ohm·cm, enquanto a resistividade eletrônica do LSM e do *cermet* é de aproximadamente 10^{-2} Ohm·cm e 10^{-4} Ohm·cm, respectivamente [39].

Com isso a equação 34 pode ser rescrita da seguinte forma.

$$\begin{aligned} \eta_{ohm} &= \rho_e l_e j \\ &= 2,94 \times 10^{-3} e^{\frac{10350}{T}} l_e j^{fc} \end{aligned} \quad (38)$$

2.3.3.2.3 Sobrepotencial de concentração

As perdas de concentração ocorrem em valores elevados de densidade de corrente e são fortemente influenciadas pelos fenômenos de difusão de substâncias gasosas em eletrodos porosos, e pelas concentrações das espécies que participam dos processos que ocorrem dentro da célula a combustível. Resultando em dificuldades para o transporte de reagentes e de produtos nas vizinhanças dos sítios reacionais. Essas perdas são calculadas como mostra as equações 39 e 40 a seguir [57].

$$\eta_{conc}^a = -\frac{RT}{2F} \ln \left(1 - \frac{j}{j_{as}} \right) + \frac{RT}{2F} \ln \left(1 + \frac{p_{H_2}^a j}{p_{H_2O}^a j_{as}} \right) \quad (39)$$

$$\eta_{conc}^c = -\frac{RT}{4F} \ln \left(1 - \frac{j}{j_{cs}} \right) \quad (40)$$

Onde $p_{H_2}^a$ é a pressão parcial do hidrogênio no ânodo e $p_{H_2O}^a$ é a pressão parcial da água no ânodo. Além disso, a j_{as} é a densidade de corrente limitadora do

ânodo e a j_{cs} é a densidade de corrente limitadora do cátodo, e elas são calculadas como mostram as equações 41 e 42 abaixo [57].

$$j_{as} = \frac{2Fp_{H_2}^a D_{a(eff)}}{RTl_a} \quad (41)$$

$$j_{cs} = \frac{4Fp_{O_2}^c D_{c(eff)}}{\left(\frac{p - p_{O_2}^c}{p}\right) RTl_c} \quad (42)$$

Onde $D_{a(eff)}$ é a difusividade gasosa efetiva através do ânodo e $D_{c(eff)}$ é a difusividade efetiva através do cátodo. Entretanto, para espessuras e microestruturas comparáveis de cátodo e ânodo, a polarização da concentração anódica é geralmente muito menor do que a polarização da concentração catódica. Isso acontece por duas razões, primeiramente pelo fato da difusividade binária de H_2-H_2O , D_{H-H_2O} , é cerca de quatro a cinco vezes maior que a difusividade binária de O_2-N_2 , $D_{O_2-N_2}$, devido ao menor peso molecular de H_2 em comparação com as outras espécies, e em segundo lugar pelo fato da pressão parcial típica de hidrogênio no combustível ser muito maior do que a pressão parcial típica de oxigênio no oxidante [57].

A difusividade efetiva através do cátodo ($D_{c(eff)}$) pode ser determinada pela equação 43 a seguir [62].

$$D_{c(eff)} = \frac{\varepsilon D_{O_2-N_2}}{\tau} \quad (43)$$

Onde ε e τ são a porosidade e a tortuosidade do catodo, respectivamente, e seus valores são iguais a 0,25 e 3, respectivamente. E $D_{O_2-N_2}$ é a difusividade binária para os componentes O_2 e N_2 , e seu valor pode ser calculado pela equação 44 a seguir [62].

$$D_{O_2-N_2} = \frac{0,0143T^{1,75}}{p \sqrt{\frac{2}{\frac{1}{M_{O_2}} + \frac{1}{M_{N_2}}}} \left(\sqrt[3]{V_{O_2}} + \sqrt[3]{V_{N_2}}\right)^2} \quad (44)$$

Onde M_{O_2} e M_{N_2} são as massas molares do oxigênio e do nitrogênio, respectivamente, em g/kmol, e V_{O_2} e V_{N_2} são os volumes molares do oxigênio e do nitrogênio, respectivamente, em cm^3/mol .

2.3.3.3 Eficiência

A avaliação do desempenho é baseada nas eficiências elétrica e térmica derivadas das operações da SOFC. Elas são calculadas a partir da razão entre a potência, elétrica ou térmica, pelo poder calorífico total do combustível que entra na CaC, como mostram as equações 45 e 46 a seguir [12,63].

$$\eta_{el} = \frac{P_{el}}{P_{ch}} \quad (45)$$

$$\eta_{th} = \frac{P_{th}}{P_{ch}} \quad (46)$$

Onde P_{el} é a potência elétrica, P_{th} é a potência térmica e P_{ch} é a potência química e elas são calculadas como mostram as equações 47 a 49 a seguir [12,63].

$$P_{el} = n_c E_{real} i \quad (47)$$

$$P_{th} = -\frac{n_c i}{n_e F} [\Delta \tilde{h}_{r,f} + (n_e F E_{real})] \quad (48)$$

$$P_{ch} = \frac{1}{U_f} \frac{n_c i}{n_e F} MM_{H_2} PCI_{H_2} + \sum_f n_c N_{in,f} MM_f PCI_f \quad (49)$$

Onde i é a corrente elétrica, n_c é o número de células, $\Delta \tilde{h}_{r,f}$ é a entalpia de reação do combustível alimentado, n_e é o número de elétrons envolvidos no processo eletroquímico, $N_{in,f}$ representa a taxa de fluxo em ml.s^{-1} , PCI representa o poder calorífico inferior do combustível e U_f é o fator de utilização de combustível que é calculado como mostra a equação 50 a seguir [12,63].

$$U_f = \frac{i MM_{H_2}}{2F \dot{m}_{H_2}} \quad (50)$$

Onde $\dot{m}_{H_2}$ é a taxa de fluxo em g.s^{-1} . Com isso, as equações 45 a 50 podem ser juntadas e com isso tem-se as equações 51 e 52 abaixo.

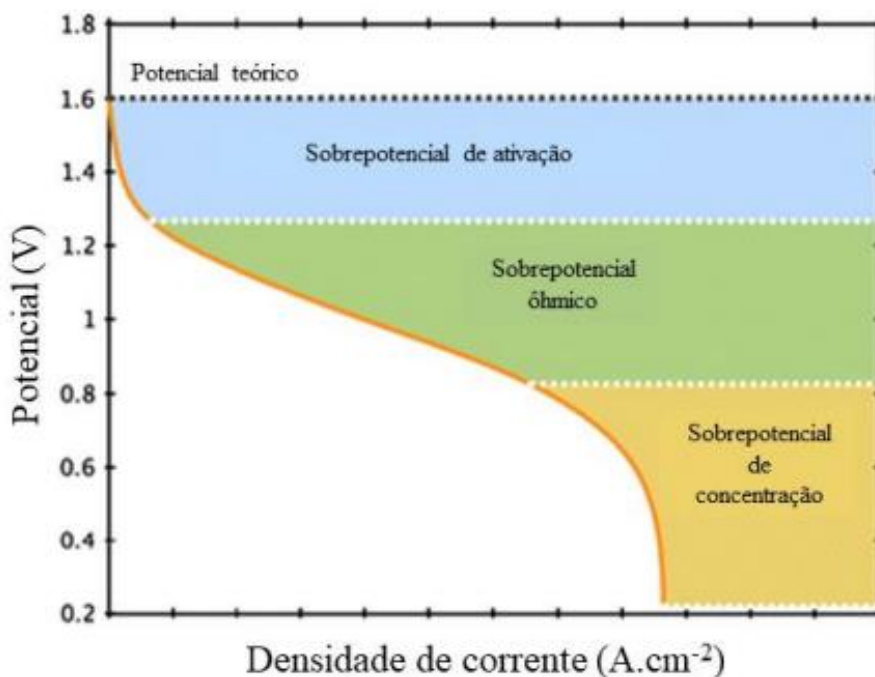
$$\eta_{el} = \frac{n_c E_{real} i}{2 \dot{m}_{H_2} \frac{n_c}{n_e} PCI_{H_2} + \sum_f n_c N_{in,f} MM_f PCI_f} \quad (51)$$

$$\eta_{th} = \frac{-\frac{n_c i}{n_e F} [\Delta \tilde{h}_{r,f} + (n_e F E_{real})]}{2 \dot{m}_{H_2} \frac{n_c}{n_e} PCI_{H_2} + \sum_f n_c N_{in,f} MM_f PCI_f} \quad (52)$$

2.3.3.2.4 Avaliação de desempenho termo eletroquímico

A partir do que foi mencionado anteriormente, três gráficos são construídos com a finalidade de se avaliar as células a combustível. O primeiro deles é a curva de polarização, nela o potencial real (E_{real}) é calculado pela subtração de todas as perdas do potencial teórico. A Figura 5 apresenta como os sobrepotenciais se apresentam em uma curva de polarização característica de uma CaC [9,12].

Figura 5 - Curva de polarização de uma CaC genérica.



Fonte: [1].

O segundo é a curva de densidade de potência, ela é construída pela curva de polarização onde são multiplicadas ponto a ponto as densidades de corrente pela voltagem correspondente. O terceiro é a curva de eficiência onde são representadas as eficiências térmicas e elétricas. Essas duas últimas guardam estreita relação com a curva de polarização [12].

2.4 Análise Econômica Preliminar

Os custos são a base de qualquer projeto, uma vez que são um conjunto de documentos que estabelecem a viabilidade técnica e econômica de um dado empreendimento. A viabilidade técnica demonstra que um produto pode ser produzido a partir de uma determinada matéria prima na quantidade e qualidade esperada. Por outro lado, a análise econômica mostra qual o tamanho do capital a

ser investido para que o empreendimento possa passar de um conceito a uma construção e começar a operar como pretendido [64].

Na engenharia de processos, o estágio inicial do projeto conceitual permite a análise das variáveis de projeto mais vantajosas em termos de rentabilidade. Posteriormente, o esboço elaborado nessa fase inicial oferece uma estimativa inicial de custos, crucial para determinar a viabilidade econômica do projeto [65].

A análise econômica preliminar desempenha um papel essencial na tomada de decisões de investimento durante o estágio inicial do projeto conceitual. Ela determina se o empreendimento apresenta potencial para ser um investimento lucrativo ou se seria mais vantajoso abandoná-lo, realizar mais pesquisas ou avançar para a fase de planta piloto [65-66].

É importante observar-se que uma unidade industrial não é constituída somente pela Área do Processo (ou de produção), ou ISBL (do inglês, *Insite battery limits*), constituída pelos equipamentos que são responsáveis diretamente pelo processo de produção, como reatores, sistemas de separação e purificação, e equipamentos voltados à troca térmica [64].

Existem outras divisões do complexo industrial, como a Área de Utilidades, que engloba operações como geração de vapor, resfriamento e tratamento de água, gestão de efluentes, entre outras, fornecendo suporte essencial à Área de Produção para que o processo opere. Paralelamente, os Sistemas Auxiliares e de Segurança asseguram a operação segura do processo, garantindo sua continuidade mesmo diante de eventuais contratempos operacionais, sendo essenciais para o pleno funcionamento do sistema. Esses sistemas são referidos pela sigla OSBL (do inglês, *Offsite battery limits*) [64].

A avaliação econômica preliminar de um processo ocorre em diversas etapas. Estas são [71]:

1. Preparando um diagrama de fluxo de processo;
2. Cálculo de fluxo de massa e energia;
3. Dimensionamento dos principais equipamentos;
4. Estimativa do custo de capital;

5. Estimativa do custo de produção;
6. Estimativa do lucro;
7. Análises de rentabilidade.

2.4.1 Custo de capital

O investimento de capital fixo, também referido como CAPEX (do inglês, *Capital Expenditure*), representa o custo global envolvido no projeto, construção e instalação de uma planta, incluindo as modificações necessárias para adequar o local à instalação da planta. O investimento em capital fixo é composto por [66-67]:

1. O investimento no ISBL – o custo da própria planta;
2. As modificações e melhorias que devem ser feitas na infraestrutura do local, conhecido como investimentos no OSBL;
3. Custos de engenharia e construção;
4. Encargos de contingência;
5. Capital de giro.

2.4.1.1 O investimento dentro dos limites da bateria

O termo "limite de bateria" refere-se a uma fronteira geográfica que delimita a área específica de produção dentro de um processo fabril. Essa área compreende os equipamentos e estruturas destinados à transformação das matérias-primas em produtos acabados, excluindo instalações como caldeiras, áreas de armazenamento, controle de poluição e infraestrutura local. Em alguns casos, o termo também pode ser usado para indicar o limite de responsabilidade em um projeto específico, especialmente em iniciativas de modernização [67].

O custo da planta ISBL abrange tanto a aquisição quanto a instalação de todos os equipamentos de processo que compõem a nova unidade fabril. Este custo é subdividido em custos diretos e indiretos de campo [66].

Os custos diretos de campo englobam os principais equipamentos de processo, como reatores e trocadores de calor, abrangendo sua fabricação e testes. Incluem também itens a granel, como tubulações e fiação, e as obras civis, que envolvem desde fundações até edifícios. Por fim, a mão de obra necessária para instalação e supervisão também faz parte dessa categoria [66].

Os custos indiretos de campo englobam as despesas de construção, como aluguéis de equipamentos e estruturas temporárias, além de serviços básicos temporários e oficinas. Incluem também despesas e serviços de campo, como alimentação, custos com especialistas, horas extras e gastos com condições climáticas adversas. O seguro de construção e os benefícios/encargos trabalhistas (como Segurança Social e acidentes de trabalho) também fazem parte. Por fim, diversos itens indiretos compõem essa categoria, como honorários de agentes, custos legais, taxas de importação e impostos locais [66].

2.4.1.2 O investimento externo

O custo externo ou investimento OSBL inclui os custos das melhorias necessárias na infraestrutura local para acomodar a instalação de uma nova planta ou a expansão da capacidade de uma já existente [66].

Os investimentos externos podem abranger diversas infraestruturas e serviços. Isso inclui subestações e equipamentos elétricos (transformadores, linhas de energia), instalações de geração de energia (usinas, geradores), e sistemas de vapor e condensado (caldeiras, redes). Também contemplam infraestruturas de resfriamento (torres, bombas) e redes de água, como desmineralização e tratamento de efluentes. A lista se estende a plantas de separação de ar para nitrogênio, sistemas de ar instrumental, pontes tubulares e linhas de alimentação. No âmbito de logística e armazenamento, incluem fazendas de tanques, instalações de carregamento e armazéns. Finalmente, abrangem edificações de suporte como laboratórios, escritórios e salas de controle, além de oficinas, serviços de emergência (combate a incêndio, instalações médicas) e segurança do local (cercas, portarias) [66].

Os investimentos externos frequentemente envolvem negociações com empresas de serviços públicos, como fornecedores de eletricidade ou água. Podem ser objeto de análise tão rigorosa quanto ou até mais do que os investimentos do ISBL, devido ao impacto que têm na comunidade local por meio do uso e descarte de recursos, tráfego, entre outros [66].

Os custos externos são geralmente estimados como uma proporção dos custos do ISBL nas fases iniciais do projeto. Esses custos podem variar entre 10% e 100% dos custos do ISBL, dependendo da extensão do projeto e de seu impacto na infraestrutura local. Em projetos petroquímicos típicos, os custos externos

geralmente representam entre 20% e 50% do custo do ISBL, sendo comum utilizar 40% como uma estimativa inicial caso os detalhes locais não sejam conhecidos [66].

2.4.1.3 Custos de engenharia e construção

Os custos de engenharia, também conhecidos como custos de escritório central ou encargos do empreiteiro, compreendem as despesas relacionadas ao design detalhado e a outros serviços de engenharia cruciais para a execução do projeto. Isso inclui a engenharia de projeto detalhado de equipamentos de processo, sistemas de tubulação, sistemas de controle e externos, bem como o layout da planta, desenho, engenharia de custos, modelos em escala e engenharia civil [66].

Além disso, esses custos abrangem a aquisição dos principais itens fabris e a granel, a fiscalização e os serviços de construção. Também são incluídos encargos administrativos, como supervisão de engenharia, gerenciamento de projetos, expedição, inspeção, despesas de viagem e moradia, e despesas gerais de escritório doméstico, além da colagem e do lucro do contratante [66].

Os custos de engenharia são mais precisamente estimados individualmente, levando em consideração o escopo específico do projeto, uma vez que não são diretamente proporcionais ao seu tamanho. Uma regra prática para estimar esses custos é 30% dos custos totais de ISBL mais OSBL para projetos de menor escala e 10% dos custos totais de ISBL mais OSBL para projetos de maior escala [66].

2.4.1.4 Encargos de contingência

Os encargos de contingência são despesas adicionais incluídas no orçamento de um projeto para gerenciar possíveis variações nas estimativas de custo. Como todas as estimativas estão sujeitas a incertezas, o custo final de instalação de muitos itens só é conhecido após a conclusão total [66].

Além de cobrir imprecisões nas estimativas, esses encargos também servem para lidar com mudanças no escopo do projeto, flutuações de preços de materiais (como aço, cobre e catalisadores), variações cambiais, disputas trabalhistas, problemas com subcontratados e outras questões inesperadas que possam surgir [66].

Será necessário empregar uma taxa de contingência mínima de 10% dos custos do ISBL mais OSBL em todos os projetos. Em casos em que a tecnologia é

incerta, serão aplicadas taxas de contingência mais elevadas, podendo chegar a até 50% [66].

2.4.1.5 Capital de giro

O capital de giro representa os fundos adicionais necessários, além dos custos de construção da fábrica, para iniciar as operações até que a receita seja gerada. Geralmente, ele abrange o valor do estoque de matérias-primas (equivalente ao custo de entrega de 2 semanas) e o valor do estoque de produtos e subprodutos (estimado como custo de produção de 2 semanas) [66-67].

Além disso, o capital de giro inclui o dinheiro disponível (custo de produção de 1 semana), as contas a receber (custo de produção de 1 mês) e o crédito para contas a pagar (custo de entrega de 1 mês). Por fim, o estoque de peças de reposição, estimado entre 1% à 2% dos custos ISBL mais OSBL, também faz parte dessa categoria [66-67].

O capital de giro pode oscilar de 5% dos custos do ISBL mais OSBL para um processo simples, com produção de um único produto e pouco ou nenhum armazenamento de produto final, até 30% para um processo que engloba uma ampla gama de tipos de produtos em um mercado sofisticado, como fibras sintéticas. Para instalações petroquímicas, um valor padrão gira em torno de 15% dos custos do ISBL mais OSBL [66].

2.4.1.6 Estimativa de custos de capital

O custo do capital é igual a somatória dos custos do ISBL, OSBL, investimentos de engenharia e construção, encargos de contingência e capital de giro, como mostra a equação 53 a seguir:

$$CAPEX = ISBL + OSBL + EC + EDC + CG \quad (53)$$

Onde EC é o custo de engenharia e construção, EDC são os custos com encargos de contingência e CG é o capital de giro. Porém, como mencionado anteriormente, todos os custos são calculados pelo custo do ISBL e do OSBL, com isso a equação 53 pode ser simplificada da seguinte forma.

$$CAPEX = ISBL + OSBL + (\%_{EC} + \%_{EDC} + \%_{CG})(ISBL + OSBL) \quad (54)$$

Onde o $\%_{EC}$, $\%_{EDC}$ e $\%_{CG}$ são o percentual do ISBL mais OSBL usados para calcular o custo de engenharia e construção, os custos com encargos de

contingência e custo com o capital de giro, respectivamente. Além disso, o OSBL pode ser calculado pelo custo do ISBL, com isso a equação 54 pode ser simplificada como mostra a equação 55 abaixo.

$$CAPEX = ISBL[(1 + \%_{EC} + \%_{EDC} + \%_{CG})(1 + \%_{OSBL})] \quad (55)$$

Onde o $\%_{OSBL}$ é o percentual do ISBL usado para calcular o custo do OSBL. O custo do ISBL é calculado a partir do somatório do custo dos equipamentos utilizados no projeto e de fatores de instalação, como mostra a equação 56 a seguir.

$$ISBL = \sum_{i=1}^n C_{Ei}[(1 + f_p)f_m + (f_{er} + f_{el} + f_i + f_c + f_s + f_l)] \quad (56)$$

Onde f_p , f_m , f_{er} , f_{el} , f_i , f_c , f_s e f_l são os fatores relacionados a tubulação, material do equipamento, montagem de equipamento, elétrica, revestimento e pintura, civil, estruturas e edifícios, e instrumentação e controle da planta, respectivamente. E C_{Ei} é o custo do equipamento, seu valor pode ser determinado a partir de um valor já conhecido, mas com um dimensionamento diferente, como mostra a equação 57 a seguir [66-67].

$$C_E = C_B \left(\frac{D_E}{D_B} \right)^M \quad (57)$$

Onde C_E é o custo do equipamento com na dimensão D_E , C_B é o custo do equipamento com na dimensão D_B , M é uma constante que depende do processo e que pode variar seu valor de 0,4 a 0,9 sendo 0,6 o valor normalmente utilizado, e D_E e D_B são as dimensões dos equipamentos e elas variam com o tipo de equipamento, como por exemplo para trocadores de calor ela é a área de troca térmica [67].

Alguns equipamentos como bombas centrífugas e compressores podem ter seus valores de custo conhecidos calculados a partir da equação 58 a seguir [68].

$$C_B = a + bD_B^n \quad (58)$$

Onde a , b e n são constantes que variam de acordo com o tipo de equipamento. Essa fórmula calcula o custo conhecido do equipamento, já que ela só pode ser utilizada para uma dada faixa de dimensionamento [67].

2.4.2 Custo de Produção

Para avaliar a viabilidade financeira de um processo, a administração precisa considerar tanto os requisitos totais de capital quanto o custo de produção de um produto. O custo de produção, às vezes chamado de custo de fabricação ou operacional, é frequentemente referido como OPEX (do inglês, *Operational Expenditure*) [65,68].

A determinação dos custos operacionais é uma das fases mais cruciais e minuciosas do projeto. A sua estrutura depende de todas as outras etapas e, ao mesmo tempo, exerce influência sobre muitas dessas partes. Esses custos são fundamentalmente categorizados em custos fixos e variáveis [64].

Os custos fixos são aqueles que permanecem constantes independentemente do volume de produção da unidade em determinado momento. Por outro lado, os custos variáveis estão diretamente relacionados ao nível de produção que a unidade alcança dentro de um período específico [64].

Além dessas duas categorias de custos, existem os custos unitários, que representam os custos associados à produção de uma única unidade do produto, e o custo marginal, que se refere aos custos adicionais necessários para produzir uma unidade adicional do produto em diferentes níveis de produção [64].

2.4.2.1 Custos Variáveis

Os custos variáveis de produção são aqueles que flutuam proporcionalmente à produção ou à taxa de operação de uma planta. Esta categoria abrange os custos com matérias-primas consumidas no processo e os serviços públicos, como combustível, vapor, água de resfriamento e eletricidade [66].

Também incluem consumíveis como solventes, catalisadores e aditivos que exigem reposição contínua ou frequente, além das despesas com o descarte de efluentes e os custos de embalagem e envio do produto final, como tambores e frete [66].

2.4.2.2 Custos Fixos

Os custos fixos de produção são despesas que permanecem constantes, independentemente do nível de produção ou da taxa de operação da fábrica. Eles incluem a mão de obra operacional, que abrange o pessoal direto para produção e manutenção, e o indireto para instalações e serviços. A supervisão é geralmente

estimada como 25% da mão de obra operacional, e as despesas salariais diretas representam de 40% a 60% da soma da mão de obra operacional com a supervisão [66].

Essa categoria também engloba a manutenção, que cobre materiais e mão de obra, estimada entre 3% e 5% do investimento ISBL, variando conforme a confiabilidade esperada da planta. Enquanto os impostos sobre propriedades e seguros tipicamente correspondem a 1% a 2% do ISBL. As despesas gerais da fábrica cobrem funções corporativas como RH e P&D, sendo normalmente 65% do total da mão de obra [66].

Além disso, incluem encargos ambientais, aluguel de terrenos, taxas de licença e royalties que não foram capitalizados, encargos de capital (pagamentos de juros sobre dívidas) e, em alguns casos, custos de vendas e marketing, que variam amplamente conforme o tipo de produto [66].

2.4.2.3 Estimativa de custos de produção

Os custos de produção (OPEX) são a soma dos custos fixos (C_F) e variáveis (C_V), como mostra a Equação 59. Onde os custos variáveis são obtidos multiplicando-se custo unitário do produto (C_U) pela unidade de produtos produzidos (P_T), como mostra a equação 60 a seguir [64].

$$OPEX = C_F + C_V \quad (59)$$

$$C_V = P_T C_U \quad (60)$$

Onde os valores de preço unitário do produto geralmente são pegos da literatura, mas nem sempre é uma tarefa fácil achar valores confiáveis [66].

Os custos fixos são o somatório de todo o custo fixo, como mostra a equação 61 abaixo.

$$C_F = MO + Ma + Imp + Out \quad (61)$$

Onde MO é o custo de mão de obra operacional, Ma é o custo de manutenção, Imp é o custo de impostos sobre propriedades e seguros, e Out é referente a outros custos como aluguel de terrenos e encargos ambientais.

Com isso, como os custos fixos variam a partir dos custos de ISBL e MO, a equação 61 pode ser simplificada e os custos fixos podem ser estimados como mostra a equação 62 a seguir.

$$C_F = MO + ISBL[\%_{Ma} + \%_{Imp}] + Out \quad (62)$$

Onde $\%_{Ma}$ é o percentual do ISBL usado para calcular o Ma e $\%_{Imp}$ é o percentual do ISBL usado para calcular o Imp.

Na maioria das fábricas, os operadores trabalham em turnos e são designados para diferentes posições. Geralmente, cada turno requer pelo menos três posições, incluindo um operador na sala de controle, outro fora dela, e um na área de tanques ou outra área de entrega e recepção de materiais. Contudo, o número de posições pode variar de acordo com a complexidade da fábrica. Por exemplo, instalações de manuseio de sólidos podem exigir mais posições, enquanto plantas de processamento de gás podem precisar apenas de duas [66].

2.4.3 Lucro

O lucro (L_T) é definido como a diferença entre a receita total (R_T) e os custos totais (C_T). Ele pode ser calculado como mostra a equação 63 a seguir [64].

$$L_T = R_T - C_T \quad (63)$$

Os custos totais anuais são os custos operacionais (OPEX). A receita total (R_T) refere-se à soma do capital gerado com base no volume total de vendas (V_T) (unidade do produto, quilo, litro, etc.), onde cada produto é atribuído ao seu preço unitário (P_U) correspondente (R\$/unidade do produto vendido) conforme a Equação 64 [64].

$$R_T = P_U V_T \quad (64)$$

O Lucro pós taxas (L_{PT}) é obtido quando se reduz do lucro as taxas, como mostra a equação 65 a seguir [64].

$$L_{PT} = L_T - Taxas \quad (65)$$

2.4.4 Análise da rentabilidade do projeto

Depois de calcular os custos de capital e operacionais de um projeto, é necessário realizar análises de rentabilidade. Essas análises avaliam o retorno do investimento com base nas receitas e nos custos envolvidos, mediante estimativas ou determinações de indicadores de retorno e de rentabilidade [64,69].

Os principais métodos de análise de rentabilidade são: método da taxa mínima de atratividade, método do valor anual, método do valor presente, método da taxa

interna de retorno (TIR), método de tempo de retorno ou recuperação (*Payback*) [69].

2.4.4.1 Método do valor presente

O método do valor presente calcula qual é o valor presente obtido a partir da série de valores constantes que corresponde ao lucro do investimento. Esse valor presente é comparado ao investimento inicial, resultando no Valor Presente Líquido (VPL). A VPL pode ser calculada pela equação 66 a seguir [69].

$$VPL = L_n \left[\frac{(1 + t)^{n_t} - 1}{t(1 + t)^{n_t}} \right] - C \quad (66)$$

Onde L_n é o lucro anual ou mensal, t é a taxa anual ou mensal, n_t é o número de anos ou meses e C é o custo de capital. Esse método indica que o investimento só é viável economicamente se o valor do VPL calculado for positivo [69].

2.4.4.2 Método da taxa interna de retorno (TIR)

O emprego da taxa interna de retorno (TIR) de um projeto, trata-se da taxa de juros para qual o valor presente das receitas iguala-se ao valor dos desembolsos. Isso quer dizer que a taxa interna de retorno é aquela que torna nulo o valor presente do projeto. A equação 67 abaixo é a fórmula utilizada para se calcular a TIR [69-70].

$$C = L_n \left[\frac{(1 + TIR)^{n_t} - 1}{TIR(1 + TIR)^{n_t}} \right] \quad (67)$$

Onde C é o custo de capital, L_n é o lucro em anos ou meses, n_t o número de anos ou meses e TIR é a taxa interna de retorno.

2.4.4.3 Método de tempo de retorno ou recuperação (*Payback*)

O método de tempo de retorno ou recuperação (*Payback*) define o tempo necessário para recuperação do capital, ou seja, é quando o lucro líquido por ano, multiplicado por certo número de anos é igual ao investimento. A equação 68 abaixo é a fórmula utilizada para se calcular o *Payback* [69].

$$C - L_n \left[\frac{(1 + t)^{pb} - 1}{t(1 + t)^{pb}} \right] = 0 \quad (68)$$

Onde C é o custo de capital, L_n é o lucro em anos ou meses, pb é o *Payback* em anos ou meses e t é a taxa anual ou mensal.

2.4.4.4 Retorno sobre investimento (ROI)

O retorno sobre o investimento (ROI) é definido como a relação entre o lucro anual de uma empresa e o investimento de capital. A definição mais comumente utilizada é a razão entre o lucro anual após impostos (LPT) e o investimento total de capital (I), conforme mostrado na Equação 69 abaixo [64].

$$ROI = \frac{L_{PT}}{I} \quad (69)$$

2.4.4.5 Custo nivelado da energia (LCOE)

O custo nivelado da energia (LCOE, do inglês, *levelized cost of electricity*) é a razão entre custo total da planta pela quantidade total de energia produzida em um determinado período, como mostra a equação 70 a seguir [71].

$$LCOE = \frac{CRF \times CAPEX + \sum_1^{n_t} OPEX}{W_{net}} \quad (70)$$

Onde W_{net} é o total de energia produzida em n_t anos e CRF é o fator de recuperação de capital e pode ser determinado pela equação 71 a seguir [71].

$$CRF = \frac{i(1+t)^{n_t}}{(1+t)^{n_t} - 1} \quad (71)$$

Onde n_t é a vida útil da planta e t é a taxa de juros anual [71].

2.5 Modelagem e Simulação de Processos

A modelagem e simulação de processos desempenham um papel fundamental na indústria moderna, permitindo o desenvolvimento, otimização e análise de sistemas complexos [72].

A modelagem de processos refere-se à criação de representações matemáticas ou computacionais de sistemas físicos ou químicos, enquanto a simulação envolve a execução e resolução desses modelos para prever o comportamento do sistema ao longo do tempo. Essas técnicas são amplamente utilizadas em diversas áreas, incluindo engenharia química, engenharia de petróleo, engenharia de produção, entre outras [73].

Os principais objetivos da modelagem e simulação de processos incluem [72-74]:

- Entender o comportamento dinâmico de sistemas complexos.
- Otimizar o desempenho de processos industriais.

- Reduzir custos e tempo de desenvolvimento.
- Avaliar o impacto de mudanças operacionais ou de projeto.
- Prever e prevenir falhas e acidentes.
- Suportar a tomada de decisões e o planejamento estratégico.

A metodologia de modelagem e simulação envolve várias etapas, incluindo [73]:

1. Formulação do problema: Definição dos objetivos, escopo e parâmetros do modelo.
2. Coleta de dados: Levantamento de informações relevantes sobre o sistema em estudo.
3. Seleção de modelos: Escolha do tipo de modelo mais apropriado para representar o sistema.
4. Desenvolvimento do modelo: Construção e implementação do modelo utilizando ferramentas de *software* específicas.
5. Validação e verificação: Teste e avaliação do modelo para garantir sua precisão e confiabilidade.
6. Análise de resultados: Interpretação dos resultados da simulação e extração de conclusões.
7. Documentação: Registro de todas as etapas do processo de modelagem e simulação.

A modelagem e simulação de processos têm uma ampla gama de aplicações em diferentes setores industriais, tais como [72,74]:

- Projeto de plantas químicas e petroquímicas.
- Controle de processos industriais.
- Otimização de operações de produção.
- Previsão de demanda e planejamento de capacidade.
- Análise de risco e segurança operacional.
- Desenvolvimento de novos produtos e materiais.

2.5.1 Modelagem e Simulação de SOFCs

Estudos experimentais dos sistemas baseados em SOFCs, uma vez que a célula a combustível pode ser integrada com reformadores externos, turbinas,

trocadores de calor, bombas entre outras, contribuem significativamente para o desenvolvimento de uma compreensão sobre o processo e seu comportamento. No entanto, o projeto e a execução de experimentos envolvendo sistemas tão complexos é muitas vezes caro e demorado. Com isso, modelagem e simulações são os métodos mais utilizados para investigar sistemas de SOFC, uma vez que são eficazes e a um custo e tempo significantemente menores [75-76].

A modelagem precisa de SOFCs é altamente dependente da compreensão dos fenômenos multi-físico-químicos que ocorrem dentro da célula. Esta é uma tarefa muito desafiadora, uma vez que as equações de massa, impulso, energia, transferência de carga, transmissão de espécies e eletroquímica devem ser resolvidas simultaneamente na zona de fluidos, interligações sólidas e no meio poroso e interfaces [77].

A fluidodinâmica computacional ou dinâmica dos fluidos computacional (CFD, do inglês, *Computational Fluid Dynamics*) é conhecida como uma das ferramentas mais potentes para prever o desempenho de novos projetos antes mesmo de serem fabricados, bem como a caracterização visual do campo de fluxo, permitindo que os cientistas evitem experimentações caras. Muitos benefícios são relatados na literatura para a implementação de técnicas de CFD, tais como: avaliação de revisões geométricas em um tempo muito menor em comparação com testes de laboratório, redução de problemas de escala, capacidade de estudar os fenômenos que ocorrem em condições perigosas, e análise da causa raiz em vez de apenas os efeitos [77].

O trabalho de modelagem em SOFC e sistema pode ser simplesmente dividido em modelos de estado estável e transitórios a partir do aspecto de se os comportamentos dinâmicos são considerados ou não, e varia de zero-dimensional (0D) ao tridimensional (3D) de acordo com a perspectiva espacial dos modelos. Os modelos 3D e bidimensional (2D) de SOFC são geralmente usados na análise da estrutura celular, contando para a transferência de massa e calor detalhados, enquanto os modelos 0D e 1D têm vantagens na análise do desempenho termodinâmico, um estudo fundamental de eletroquímica e controle de processos com modelagem orientada para o controle [14].

Os modelos 0D são os mais simples, eles consideram a pilha SOFC como uma caixa preta, sem considerar o tamanho do modelo e a distribuição de parâmetros cruciais no espaço, apenas as mudanças entre a entrada e a saída são tidas em conta. Eles são amplamente utilizados para simulação de nível de sistema, para a análise de estado estável as leis de conservação simplesmente expressam um equilíbrio de massa / energia entre o fluxo e a saída em cada componente, e as reações químicas são consideradas em equilíbrio [14,78].

Os modelos 1D consideram a mudança das propriedades ao longo de uma das dimensões, como comprimento ou extensão. Existem dois tipos de métodos para a modelagem 1D, o primeiro tem a coordenada dominante sendo ao longo da direção de comprimento do canal de fluxo de gás, canais de combustível/ar, anodo/cátodo, eletrólito e interconectados são tratados como uma série de camadas. Este tipo de modelos é focado principalmente no fluxo de gás e transferência de calor. A segunda tem a coordenada disponível sendo ao longo da direção de espessura do núcleo da SOFC (PEN, do inglês, *positive-electrolyte-negative*). Devido à espessura pequena, este tipo de modelos é geralmente focado na eletroquímica e na transferência de massa/carga no PEN, ou seja, são isotérmicos sem ter em conta a transferência térmica [77-78].

Os modelos 2D consideram a mudança das propriedades ao longo de duas das dimensões, negligenciando uma das propriedades ao se comparar com os modelos 3D que geralmente é a propriedade que tem um papel menor no desempenho da célula. Os cálculos nesses modelos usam amplamente tecnologias CFD, onde para os modelos de estado estável, além da distribuição de parâmetros-chave, as técnicas de redução de modelo, tais como modelagem quasi-2D, e análise de sensibilidade são geralmente contidas. No aspecto dos modelos dinâmicos, os casos transitórios, incluindo variação de carga, desligamento, mudanças de passo de potencial de pilha e velocidades de fluxo de combustível / ar, bem como das temperaturas de entrada são normalmente incluídos [77-78].

Os modelos 3D são os mais complexos, já que consideram a mudança das propriedades ao longo de três das dimensões, por exemplo, axial, radial e tangencial ou altura, largura e comprimento. Eles, assim como os modelos 2D, são normalmente baseados na tecnologia numérica da simulação de CFD. Neles são

levados em consideração os efeitos das estruturas celulares (basicamente planar e tubular) e os diferentes padrões de fluxo (básicamente contra-, co- e fluxo cruzado). Além disso, os modelos transitórios consideram ainda os comportamentos de variação de tempo de alguns parâmetros cruciais, como por exemplo a temperatura, pressão, concentração e densidade de corrente [77-78].

A Tabela 8 a seguir mostra exemplos de simulações de SOFC, onde nela é informado a simulação, o modelo, o *software* utilizado e a referência.

Tabela 8 - Exemplos de simulações de SOFC.

Simulação	Modelo	<i>Software</i>	Referência
SOFC Tubular	3D	ANSYS	[79]
SOFC Planar	3D	COMSOL	[80]
SOFC célula de botão	3D	FLUENT	[81]
SOFC Tubular	2D	COMSOL	[82]
SOFC célula de botão	2D	FLUENT	[83]
SOFC Planar	2D	MATLAB	[84]
SOFC célula de botão	1D	PEN	[85]
SOFC Tubular	1D	channel	[86]
SOFC Planar	1D	channel	[87]
SOFC	0D	-	[88]
SOFC Planar	0D	-	[89]
SOFC Planar	0D	-	[90]

Fonte: [79-90]

2.5.2 Simulador de processos Aspen Plus

Aspen Plus é um *software* de simulação de processos desenvolvido pela *Aspen Technology*, amplamente utilizado em indústrias químicas, petroquímicas e de energia. O *Aspen Plus* permite aos engenheiros simular, otimizar e analisar diversos processos químicos. Esse *software* comercial de simulação de processos químicos é o mais conhecido na área industrial e acadêmica com ferramentas integradas de otimização, análise de sensibilidade e avaliação econômica de processos [15].

Nesse *software*, a base do desenvolvimento das simulações realizadas segue como referência o fluxograma do processo que é inserido pelo usuário. Ele é um simulador sequencial modular e orientado a equações e com as informações que são inseridas, é capaz de resolver uma série de cálculos que envolvem desde o balanço material tão como as propriedades termodinâmicas extensivas, as relações termodinâmicas entre as substâncias que são inseridas, a estequiometria das reações e dados cinéticos, limitações físicas que são impostas pelo usuário e a relação transiente de transferência de calor, massa e quantidade de movimento [28].

O *Aspen Plus* oferece ao usuário a capacidade de otimizar a capacidade de processamento e as condições operacionais, garantindo a precisão do modelo com as melhores propriedades físicas. Ele permite monitorar questões de segurança e operação na fábrica, identificar oportunidades de economia de energia e reduzir as emissões de GEE. Além disso, a ferramenta possibilita realizar avaliações econômicas para gerar economias na concepção do processo, melhorar o design e o desempenho do equipamento, e trabalhar de forma mais colaborativa com a integração a produtos adjacentes. Por fim, o *Aspen Plus* ajuda a reduzir custos e aprimorar a qualidade do produto e o rendimento em processos que envolvem sólidos [15].

A simulação de um processo no *Aspen Plus* é representada por um fluxograma de processos “flowsheet” que trata de um diagrama sistemático que representa de forma simples e ordenada as correntes de processo, os equipamentos utilizados, permitindo a construção do diagrama da planta de processo desejado. Utilizando as ferramentas disponíveis no simulador é possível inserir, deletar, conectar, recircular, mudar objetos de posição, verificar e editar suas propriedades [13].

No *Aspen Plus* quando se inicia uma nova simulação deve-se inserir um pacote termodinâmico, que contém as informações sobre os componentes e as equações termodinâmicas que serão utilizadas nos cálculos para um fluxograma particular. Dependendo do que é requerido em um fluxograma específico, o pacote termodinâmico também pode conter outras informações, como parâmetros para caracterização de petróleo ou parâmetros cinéticos [13].

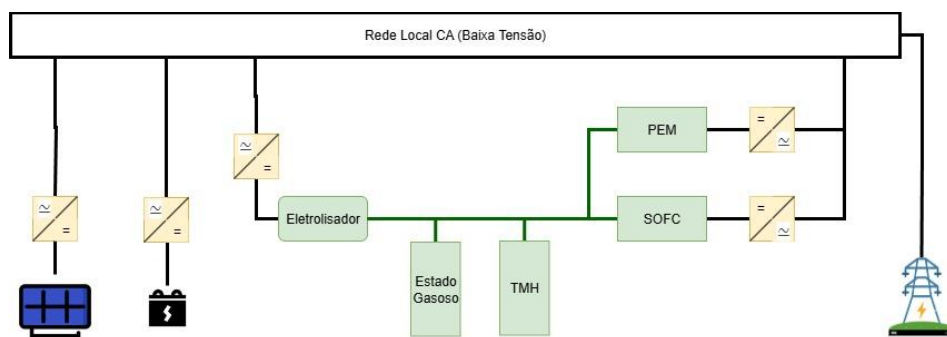
3. METODOLOGIA

Como mencionado anteriormente, o presente estudo faz parte do projeto de pesquisa do CEPEL em conjunto com Eletrobrás, onde existe uma planta piloto de hidrogênio verde na usina hidroelétrica de Itumbiara em Goiás.

Essa planta faz a produção de hidrogênio a partir de uma eletrólise alcalina da água. Ela é composta de uma usina fotovoltaica de 800 kW (em solo), um banco de baterias de 300 kW/600 kWh, um eletrolisador de 270 kW/50 Nm³ do tipo PEM e um tanque de hidrogênio em estado gasoso com capacidade de armazenamento de 800 Nm³ a 27,5 bar.

Nela será acoplada uma célula a combustível de óxido sólido de 3,6 kW e um armazenamento do hidrogênio por meio de tanques de hidretos metálicos (TMH) com capacidade de 45 kg. Um dos objetivos do presente trabalho foi fazer a simulação e modelagem da parte dessa planta piloto referente a SOFC com o armazenamento em hidreto metálico. A Figura 6 traz uma representação esquemática dessa planta de Itumbiara.

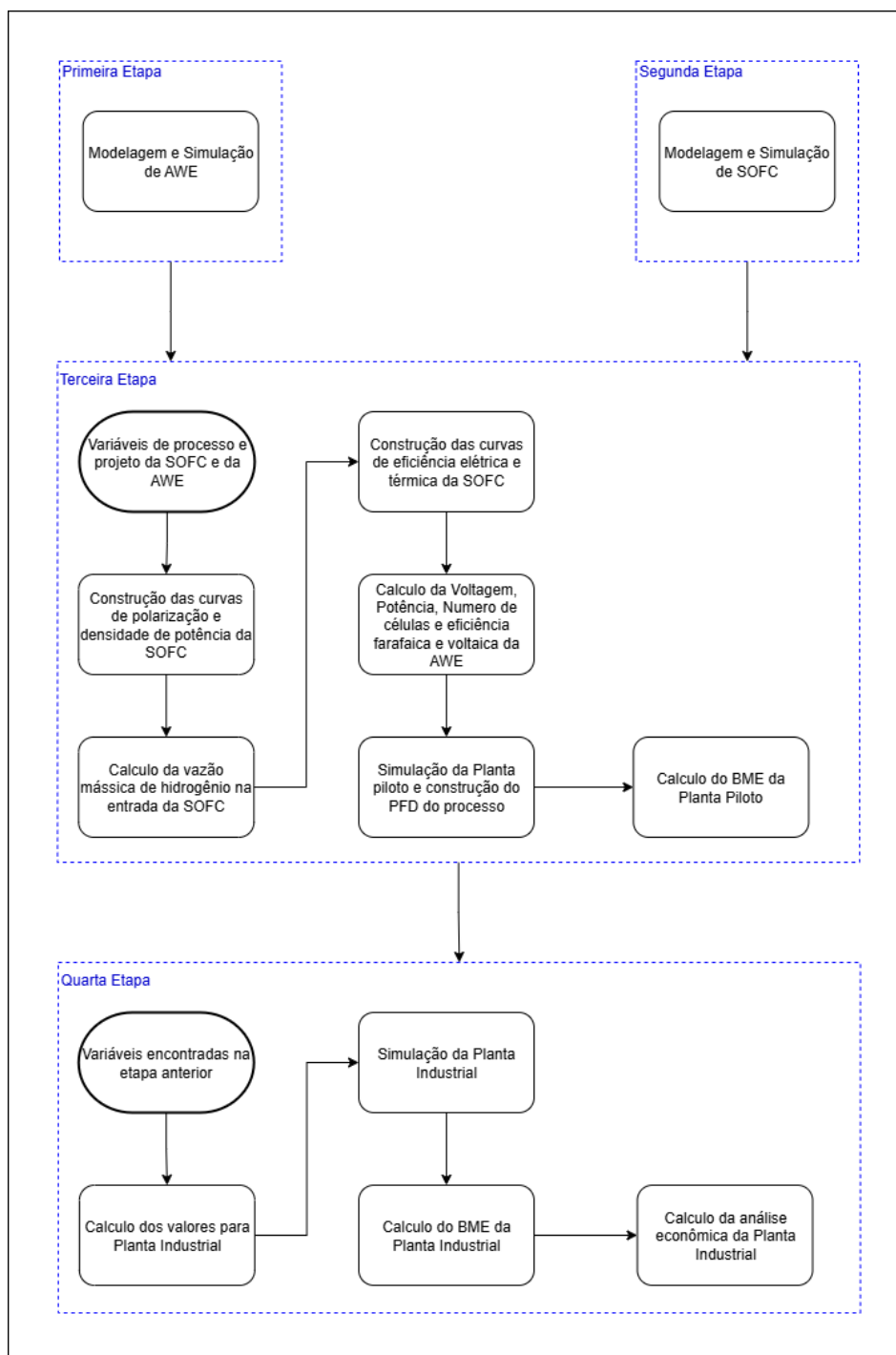
Figura 6 - Representação esquemática da planta piloto de Itumbiara.



Fonte: Arquivo pessoal do autor.

Assim, esta dissertação teve como principal objetivo simular e avaliar o comportamento técnico e econômico de uma SOFC alimentada por hidrogênio verde proveniente da AWE. Para isso, ela foi dividida em quatro etapas como mostra a Figura 7 a seguir.

Figura 7 - Fluxograma da metodologia feita no presente trabalho.



Fonte: Arquivo pessoal do autor.

A primeira etapa do presente trabalho foi a modelagem e simulação de uma eletrólise alcalina da água para a produção de hidrogênio verde utilizando-se os softwares Aspen Plus 14.0 e Microsoft Excel, versão para Microsoft 365. Nesse modelo, a eletrólise foi alimentada com água e recebeu energia proveniente de células solares fotovoltaicas.

Para a realização da simulação, foram calculados os valores de potencial e potência da célula eletrolítica, da quantidade de células, das eficiências voltaicas e faradaicas e da quantidade de hidrogênio produzido. Com esses valores, a simulação foi realizada e os resultados foram comparados com a literatura a fim de averiguar o modelo utilizado e a simulação feita no presente trabalho.

Em seguida, a segunda etapa foi a modelagem e simulação de uma célula a combustível de óxido sólido alimentada por hidrogênio e ar atmosférico, utilizando-se os softwares Aspen Plus 14.0 e Microsoft Excel, versão para Microsoft 365. Nessa etapa, foi construída a curva de polarização e, assim como na etapa anterior, ela foi comparada com a literatura a fim de verificar o modelo usado no presente trabalho.

Depois, a terceira foi a simulação de uma planta piloto de produção de energia a partir de uma SOFC alimentada por hidrogênio verde vindo da eletrólise alcalina da água e utilizando hidretos metálicos para fazer o armazenamento do hidrogênio, ou seja, essa etapa foi feita uma junção das duas etapas anteriores em um único processo mais a presença do hidreto metálico para o armazenamento do processo.

Para essa planta piloto foi fixado o valor de geração de energia em 3,6 kWh, com isso, primeiramente foram construídas as curvas de polarização, densidade de potência e eficiências elétricas e térmicas. A partir disso, foi determinada a quantidade de hidrogênio necessária para a SOFC e com isso foram calculados os valores de potencial e potência da célula eletrolítica, da quantidade de células e das eficiências voltaicas e faradaicas.

Com isso, foi utilizado o software Aspen Plus 14.0 para realizar a simulação do processo, o software draw.io, versão 28.1.2, para a construção do Diagrama de fluxo do processo (PFD, do inglês, process flow diagram) e o software Microsoft Excel, versão para Microsoft 365, juntamente com os resultados da simulação feita no Aspen Plus 14.0, para fazer o balanço de massa e energia do processo.

Por fim, a quarta etapa foi a simulação de uma hipotética planta industrial de produção de energia a partir de uma SOFC alimentada por hidrogênio verde vindo da eletrólise alcalina da água. Esse processo é semelhante ao da planta piloto, mas com uma geração de energia muito maior que foi de 3,6 MWh, e com o

armazenamento de hidrogênio sendo utilizado com a finalidade de a planta operar durante vinte e quatro horas e sete dias da semana.

Nessa etapa, foram utilizados os valores encontrados na etapa anterior, mas levando-os para a abordagem da planta industrial mencionada anteriormente. Com isso, foi reutilizado o PFD construído no software draw.io, versão 28.1.2, e foi feita a simulação utilizando o software Aspen Plus 14.0, e o balanço de massa e energia utilizando o software Microsoft Excel, versão para Microsoft 365.

A partir disso, foi realizada uma avaliação econômica preliminar dessa planta industrial, em que foram calculados os CAPEX, OPEX, Lucro e análises de rentabilidade, que incluem VPL, TIR, Payback, ROI e LCOE. Nessa etapa, foi utilizado o software Aspen Plus 14.0 para os dimensionamentos dos equipamentos e o Microsoft Excel, versão para Microsoft 365, para fazer a análise econômica.

A fim de complementar as informações apresentadas nos resultados e assegurar a reprodutibilidade deste estudo, todos os cálculos feitos, bem como os dados utilizados nas simulações das quatro etapas analisadas, encontram-se organizados nos Apêndices.

4. RESULTADOS E DISCUSSÃO

4.1 Modelagem e Simulação da Eletrólise Alcalina da Água

A análise da produção de H_2 a partir da eletrólise alcalina da água foi realizada nas condições apresentadas na Tabela 9, selecionadas com base nas referências [25] e [28].

Tabela 9 – Condições operacionais da eletrolise alcalina da água.

T	75 °C	j	4200 A.m ⁻²
p	7 bar	A _{ec}	0,1 m ²
N _{ec}	12		

Fonte: [25,28].

Com isso, utilizando-se das equações mencionadas no capítulo 2.1, foi possível determinar o potencial da eletrólise, a potência da eletrólise, a quantidade de hidrogênio produzida, a vazão mássica de água alimentada, a eficiência de Faraday e a eficiência voltaica. Os resultados são mostrados na Tabela 10 a seguir e os cálculos realizados são apresentados no Apêndice A.

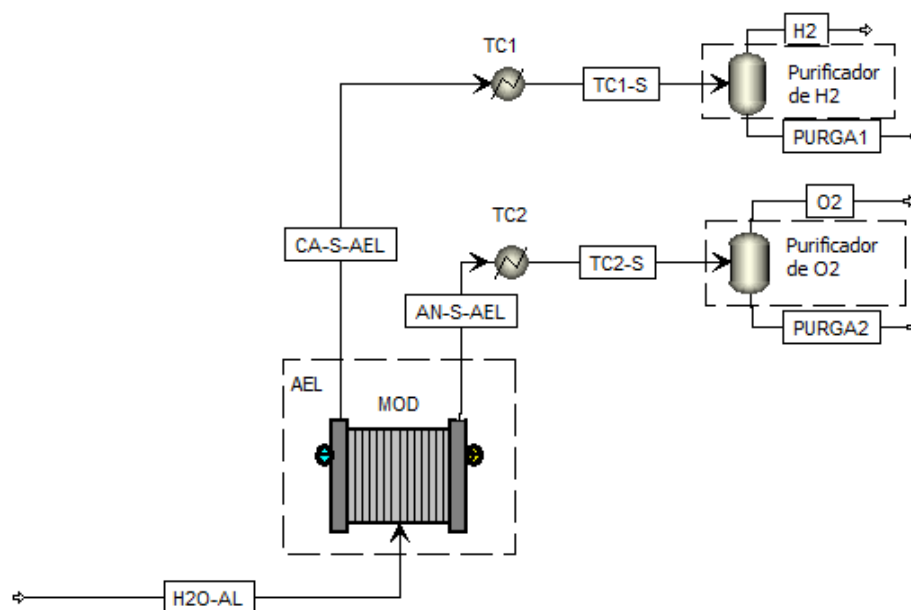
Tabela 10 – Resultados da eletrolise alcalina da água.

V _{ec}	2,02 V	η _F	0,9478
P _{ec}	10180,42 W	η _{volt}	0,7332
n _{H2O}	0,0248 mol/s	m _{H2O}	1,6054 kg/h

Fonte: Arquivo pessoal do autor.

Com essas informações, foi possível realizar a simulação da eletrolise alcalina da água utilizando o *Aspen Plus*. A Figura 8 a seguir mostra o fluxograma feito nesse *software* para representar esse processo. As especificações de cada um dos equipamentos utilizados e da corrente de entrada estão apresentadas no Apêndice A.

Figura 8 - Fluxograma do processo da AWE simulado no *Aspen Plus*.



Fonte: Arquivo pessoal do autor.

Analisando a Figura 8, a alimentação se inicia pela corrente “H2O-AL” composta por H₂O e KOH. Essa corrente adentra ao bloco da eletrólise, onde foi escolhido a eletrólise alcalina da água e o escopo de módulo. Esse escopo já inclui os separadores que fazem o reciclo do eletrólito como é mostrado na Figura 2 mostrada na página 32. Além disso, ele também é alimentado por uma corrente elétrica. Desse bloco saem duas correntes: “CA-S-AEL” uma corrente majoritariamente de H₂ e “AN-S-AEL” uma corrente majoritariamente de O₂.

Cada uma dessas duas correntes é alimentada em um bloco de trocador de calor, onde as correntes são resfriadas de 75 °C para 25°C e nas saídas tem-se as correntes “TC1-S” e “TC2-S”. Após isso, cada uma dessas correntes adentra um bloco de separação que tem como objetivo fazer a separação dos gases produzidos da água não reagida e com isso ter correntes mais puras desses gases, nessas separações foi utilizado um flash à 25 °C e 1 bar. Da separação da corrente “TC1-S” saem as correntes “H2-PROD” uma corrente majoritariamente de H₂ e “PURGA 1” uma corrente majoritariamente de H₂O, e da separação da corrente “TC2-S” saem as correntes “O2-PROD” uma corrente majoritariamente de O₂ e “PURGA 2” uma corrente majoritariamente de H₂O.

Os dados da simulação são apresentados no Apêndice A, onde as Tabelas A.3 e A.4 mostram detalhadamente cada uma das correntes do processo. A partir disso

é possível perceber que foi obtido um resultado na corrente de “H₂-PROD” de um hidrogênio produzido com 96,81 % de pureza. A simulação da eletrólise alcalina da água foi realizada na literatura por [25] e [28], eles obtiveram um percentual de pureza nas suas correntes de hidrogênio produzido de 96,87% e 99,52%, porém eles utilizaram uma metodologia diferente, onde [25] no bloco da eletrólise utilizou o escopo de Stack e fez a separação para o reciclo do eletrólito utilizando flashes adiabáticos, e [28] utilizou um reator estequiométrico do *Aspen Plus* (RSTOIC) e um separador para representar a célula eletrolítica e também fez a separação para o reciclo do eletrólito utilizando flashes adiabáticos.

Além disso, o presente trabalho calculou a vazão de hidrogênio produzida e obteve o valor de 0,0248 mol/s como mostra a Tabela 10, o cálculo pode ser visto no Apêndice A, e a simulação feita no *Aspen Plus* teve como resultado uma vazão de hidrogênio de 0,0249 mol/s, o que é quase o mesmo valor do teórico. Com isso, juntamente com a comparação com a literatura, é possível dizer que os resultados indicam um êxito na simulação da eletrólise alcalina da água.

4.2 Modelagem e Simulação da Célula a Combustível de Óxido Sólido

A análise da geração de energia a partir da célula a combustível de óxido sólido foi realizada nas condições mostradas na Tabela 11, definidas a partir das referências [58] e [59].

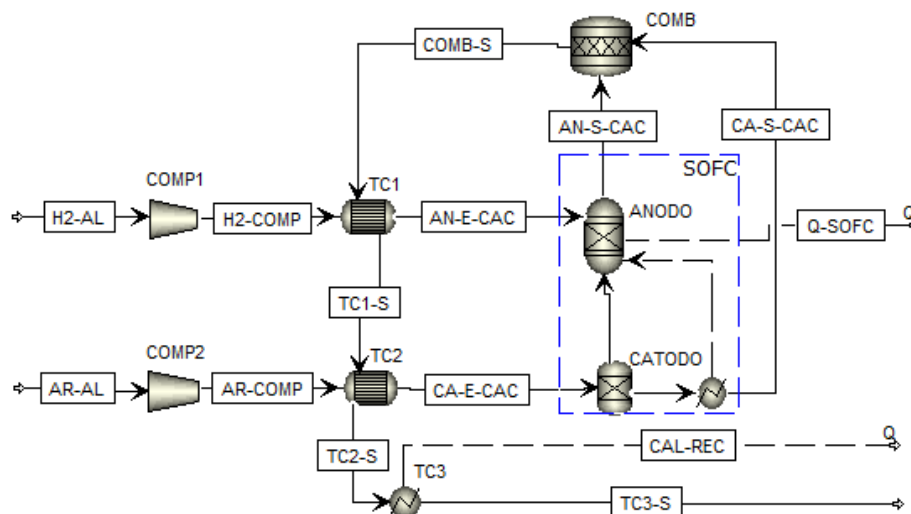
Tabela 11 – Condições operacionais e de projeto da SOFC.

T	800 °C	X _{H2}	0,97
p	1,8 bar	X _{H2O}	0,1
A _{fc}	6,1412 cm ²	X _{O2}	0,21
l _e	0,001 cm	l _c	0,0024

Fonte: Arquivo pessoal do autor.

Com essas informações, foi possível realizar a simulação da SOFC utilizando o *Aspen Plus*. A Figura 9 a seguir mostra o fluxograma feito nesse *software* para representar esse processo. As especificações de cada um dos equipamentos utilizados estão apresentadas no apêndice B.

Figura 9 - Fluxograma do processo da SOFC simulado no *Aspen Plus*.



Fonte: Arquivo pessoal do autor.

A estrutura da simulação é baseada em [61], nela ambas as correntes alimentadas, “H2-AL” e “AR-AL”, passam primeiro por um compressor (COMP) para levar a pressão delas até a de processo da célula. As correntes que saem desses compressores, “H2-COMP” e “AR-COMP”, passam por um trocador de calor (PH) a fim de levar as suas temperaturas até a temperatura desejada para a entrada da célula. Então, as correntes que saem dos trocadores de calor, “AN-E-CAC” e “CA-E-CAC”, são alimentadas na SOFC. Na saída da CaC, ambas as correntes, “AN-S-CAC” e “CA-S-CAC” são alimentadas no combustor (COMB) a fim de fazer a combustão do hidrogênio não reagido, as correntes que saem do combustor passam pelos trocadores de calor usados para elevar a temperatura das correntes “H2-COMP” e “AR-COMP” a fim de se fazer um reaproveitamento energético. Por fim, há um aquecedor que recupera energia na forma de calor.

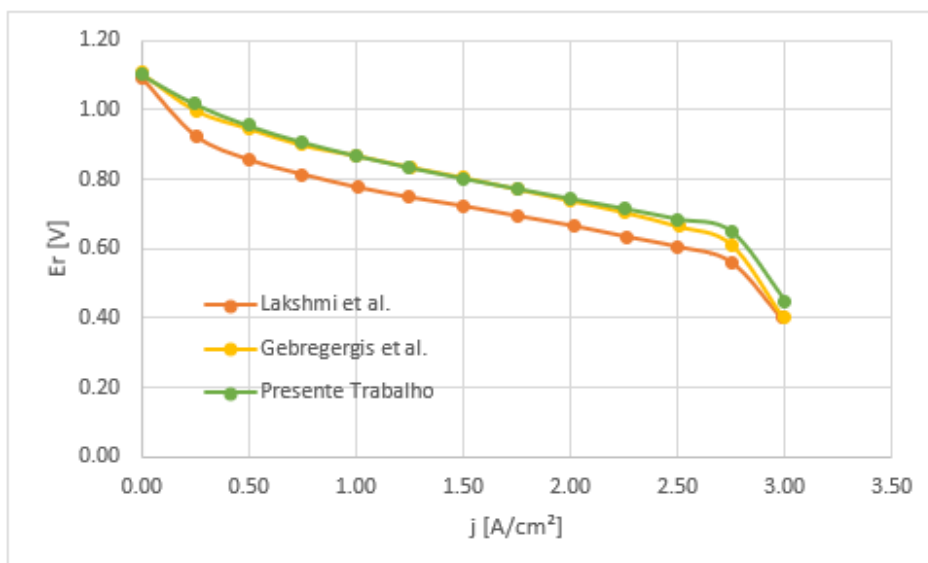
Para fazer a simulação da SOFC foi utilizado uma combinação de três equipamentos: o reator RGibbs, um separador e um aquecedor. A combinação desses equipamentos representa a SOFC para a geração de energia como para a saída dos gases. O reator RGibbs utilizado representa o Anodo e isso acontece uma vez que é nele que acontecem as reações químicas. Já o catodo é representado pelo separador pelo fato de nem todo oxigênio alimentado reage com o hidrogênio, uma vez que o ar entra em excesso. E o aquecedor tem como finalidade aumentar a temperatura dos gases que não reagem com o hidrogênio já que a célula a combustível opera a uma temperatura maior que a de entrada deles.

Além disso, neste modelo o eletrólito não é mostrado explicitamente por razões de simplicidade. No entanto, uma vez que a resistência e os processos de difusão dos eletrólitos são cruciais para a resistividade e as perdas de concentração, o efeito do eletrólito está implicitamente incluído nos parâmetros de perda. Os dados da simulação são apresentados no Apêndice B, onde a Tabela B.1, a Tabela B.2 e a Tabela B.3 mostram detalhadamente cada uma das correntes do processo.

Para fazer a análise da SOFC foi construída uma curva de polarização, para isso foi utilizado o *software* Excel e foram utilizadas as informações da Tabela 11 e as fórmulas mencionadas no capítulo 2.3.

A simulação da SOFC foi realizada na literatura por [58] e [59], e os resultados encontrados por eles juntamente com o encontrado pelo presente trabalho estão representados na Figura 10 a seguir, onde para extrair os resultados da literatura foi utilizado a ferramenta WebPlotDigitizer [91], os dados obtidos pelo presente trabalho e os da literatura são apresentados na Tabela B.4 do Apêndice B.

Entretanto, em [58] o *software* utilizado foi o MATLAB e em [59] o PSpice, e em ambos os casos o modelo empregado foi diferente do proposto no presente trabalho. Em [58], a principal diferença está na fórmula utilizada para determinar o sobrepotencial ôhmico, além da equação empregada para calcular a densidade de corrente limitadora do cátodo que é aplicada na equação que define o sobrepotencial de concentração. Já em [59], a diferença está na equação empregada para calcular o sobrepotencial de ativação e, novamente, na consideração da densidade de corrente limitadora do cátodo utilizada para determinar o sobrepotencial de concentração. Além disso, em [59], o sobrepotencial ôhmico não foi considerado.

Figura 10 - Curvas de Polarização do presente trabalho e da literatura.

Fonte: Arquivo pessoal do autor.

Analisando a curva de polarização obtida pelo presente trabalho, é possível observar que ela é bem semelhante às encontradas na literatura, o que indica que os *softwares Aspen Plus* e Excel funcionam bem juntos para simular SOFCs. Além disso, [59] utilizou resultados experimentais corroborando que os *softwares* utilizados funcionaram bem na simulação.

4.3 Simulação da Planta Piloto de Hidrogênio Verde

A simulação da Planta piloto de uma planta de geração de energia a partir de uma SOFC alimentada por hidrogênio verde produzido em uma eletrólise alcalina da água, foi realizada nas condições mostradas na Tabela 12, que teve como base a Planta de Hidrogênio Verde da Eletrobrás localizada na UHE de Itumbiara (Goiás).

Tabela 12 – Parâmetros de operação e de projeto da Planta Piloto.

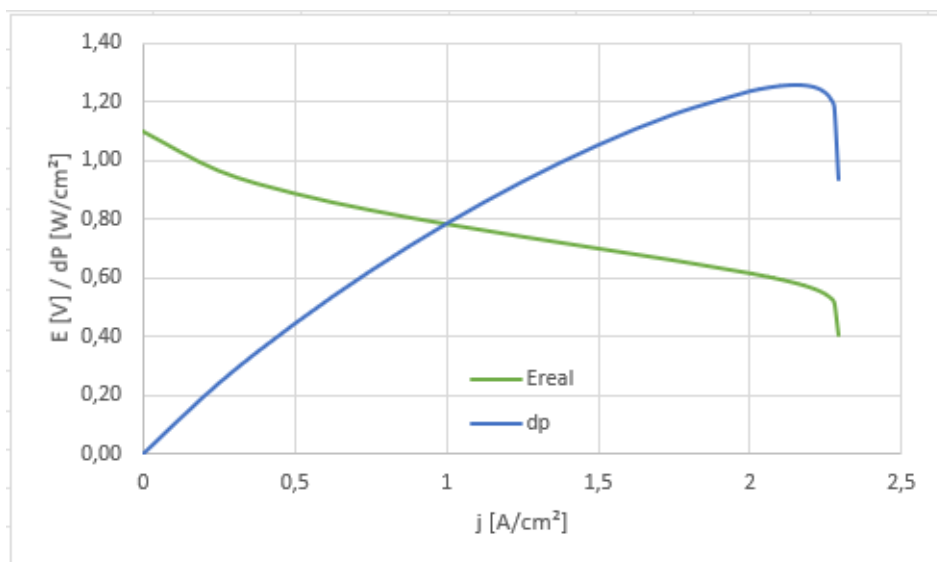
T (SOFC)	750 °C	I _a (SOFC)	0,03 cm
p (SOFC)	1 bar	T (AWE)	75 °C
A _{fc} (SOFC)	96 cm²	p (AWE)	30 bar
I _c (SOFC)	0,003 cm	j (AWE)	3000 A/cm²
I _e (SOFC)	0,001 cm	A _{ec} (AWE)	0,24 m²

Fonte: Arquivo pessoal do autor.

Nesse projeto, o hidrogênio produzido na AWE é armazenado em tanques de hidretos metálicos, que posteriormente são feitas a liberação do hidrogênio para sua utilização para geração de energia pelas SOFC.

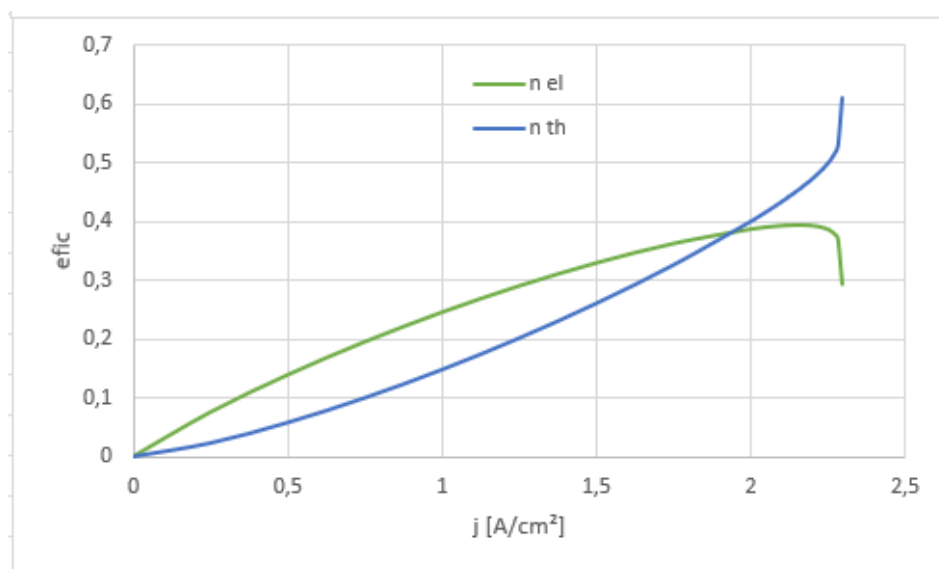
Como o objetivo desse projeto piloto é a geração de uma potência da SOFC de 3,6 kW, primeiramente foram construídas as curvas de polarização e densidade de potência utilizando as equações presentes no capítulo 2.3, como mostra a Figura 11.

Figura 11 - Curvas de Polarização e densidade de corrente da planta piloto.



Fonte: Arquivo pessoal do autor.

A partir da curva de densidade de potência, foi determinada a densidade de corrente que obteve o maior valor de densidade de potência, já que esta leva ao maior valor de eficiência, e seu valor foi de 2,15 A/cm². Com isso, foi calculado a quantidade de H₂ reagido em g/s e o seu valor foi de 0,00216 g/s, os cálculos realizados são apresentados no apêndice C. A partir disso foram construídas as curvas de eficiência térmica e elétrica, como mostra a Figura 12 a seguir.

Figura 12 - Curvas de eficiência elétrica e térmica da planta piloto.

Fonte: Arquivo pessoal do autor.

Analizando a Figura 12, o valor da eficiência elétrica e térmica para uma densidade de corrente de 2,15 A/cm² é de 39,6% e 45,4%, respectivamente. Valores bons e condizentes com o que é reportado na literatura.

Após isso, foram calculados a quantidade de moles reagidos na SOFC e os valores de potencial, potência, número de células e eficiência voltaica e faradaica da AWE. Os resultados estão apresentados na Tabela 13 a seguir e os cálculos no Apêndice C.

Tabela 13 – Resultados da AEW da Planta Piloto.

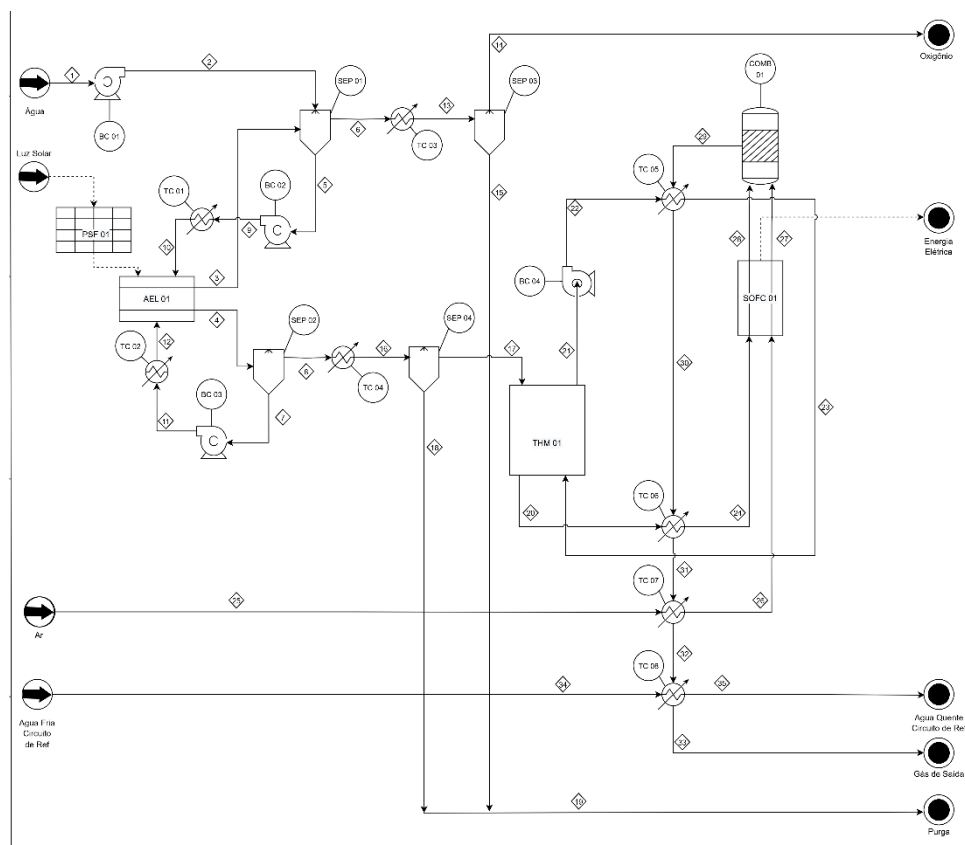
V	1,95 V	n_f	0,9349
P	15,13 kW	n_{volt}	0,7601
N_{ec}	11		

Fonte: Arquivo pessoal do autor.

Esses resultados indicaram que, para gerar 3,6 kW na SOFC, são necessários 14,14 kW na eletrólise. Contudo, na planta real de Itumbiara, o eletrolisador possui potência de 270 kW, de modo que o hidrogênio excedente pode ser aproveitado em outros componentes da planta, conforme mostra a Figura 6.

Com essas informações, foi possível realizar a simulação da Planta Piloto utilizando o *Aspen Plus*. O fluxograma da AWE utilizado foi o mesmo da Figura 7 analisada anteriormente, mas com especificações diferentes. Já o da SOFC foi feito

Figura 14 - PFD do processo.



Fonte: Arquivo pessoal do autor.

Analisando a Figura 14, a alimentação acontece pela corrente 1 que é bombeada pela bomba centrífuga BC 01 através da corrente 2 para o separador SP 01. Nele as correntes de entrada são separadas nas correntes 5 e 6, essa última é bombeada pela bomba centrífuga BC 02 através da corrente 9 para o trocador de calor TC 01, onde a corrente sofre uma pequena redução na sua temperatura, e em seguida entra na eletrólise alcalina da água através da corrente 10.

Na eletrólise há o processo de quebra da água e produção de oxigênio e hidrogênio, que saem pelas correntes 3 e 4 respectivamente. A corrente 3 adentra o separador SP01 onde há a separação do eletrólito para que haja seu reciclo, na saída tem-se a corrente 5 com o eletrólito e a 6 que contém majoritariamente oxigênio, essa entra no trocador de calor TC 03 para que haja uma redução na sua temperatura para 25 °C, na saída dele tem-se a corrente 13 que adentra o separador SP 03 que tem o fito de purificar o oxigênio que vai para atmosfera através da corrente 14, e a água vai para purga através das correntes 15 e 19.

Como mencionado anteriormente, saem da eletrólise as correntes 3 e 4, onde a 4 é uma composta majoritariamente de hidrogênio. Ela adentra o separador SP 02 que tem a finalidade de separar o eletrólito para fazer seu reciclo, dele saem as correntes 7 e 8, sendo 7 a que contém o eletrólito e é bombeada pela bomba centrífuga BC 03 através da corrente 11 para o trocador de calor TC 02, onde a corrente sofre uma pequena redução na sua temperatura, e em seguida entra na eletrólise alcalina da água através da corrente 11. Já a corrente 7, que contém majoritariamente o hidrogênio, entra no trocador de calor TC 04 para que haja uma redução na sua temperatura para 25 °C, na saída dele tem-se a corrente 16 que adentra o separador SP 04, que tem o fito de purificar o hidrogênio que vai para o tanque de hidretos metálicos TMH 01 através da corrente 17, e a água vai para purga através das correntes 18 e 19.

Na saída do Tanque de hidretos metálicos TMH 01 tem-se a corrente 20, ao mesmo tempo tem-se a alimentação de ar no processo através da corrente 25. As correntes 25 e 20 passam um trocador de calor, TC 06 e TC 07, respectivamente, a fim de levar as suas temperaturas até a temperatura desejada para a entrada da SOFC. Então, as correntes que saem dos trocadores de calor, 26 e 24, respectivamente, são alimentadas na SOFC. Na saída da CaC, ambas as correntes, 27 e 28, são alimentadas no combustor, COMB 01, a fim de fazer a combustão do hidrogênio não reagido, a corrente que sai do combustor passa pelo trocador de calor TC 05 onde ela troca calor com a corrente 22 composta por água que veio através da bomba BC 04 da corrente 21 que é usada para controle térmico nos tanques de hidreto metálico, na saída do TC 05 tem-se as correntes 23 e 30, a primeira é a corrente de água que será reciclada para os tanques de hidreto para o controle térmico neles. Já a corrente 30 passa pelos trocadores de calor usados para elevar a temperatura das correntes 25 e 20 a fim de se fazer um reaproveitamento energético. Por fim, há um trocador de calor TC 08 que recupera energia na forma de calor, pela troca de calor entre as correntes 32 e 34.

Para uma melhor análise do processo, foi feito um balanço de massa e energia do processo, os resultados obtidos estão presentes no Apêndice C. Esse balanço mostrou que para gerar uma potência de 3,6 kW na SOFC a partir de 15,13 kW de potência na eletrólise, é necessária uma alimentação de 2,61 L/h de água que gera uma corrente de 0,28 kg/h com 99,9% de hidrogênio.

4.4 Simulação e Análise Econômica da Planta Industrial

A simulação da Planta Industrial de geração de energia a partir de uma SOFC alimentada por hidrogênio verde produzido em uma eletrólise alcalina da água, foi realizada nas mesmas condições da planta piloto, mas aqui a potência de geração de energia foi de 3,6 MWh. Além disso, diferente da planta piloto onde o processo foi considerado 100% contínuo, aqui a eletrólise acontece somente quando há sol, já que a energia usada para o processo da eletrólise alcalina da água foi exclusivamente a energia solar.

Então, para garantir o funcionamento ininterrupto da SOFC, o hidrogênio gerado é armazenado em tanques de hidreto metálico, que atuam como sistema de buffer. Assim, a célula a combustível não está ligada diretamente ao eletrolisador, mas sim ao sistema de armazenamento, o que permite sua operação contínua durante 24 horas por dia. Nesta configuração, não foram consideradas baterias para armazenamento elétrico, visto que o papel de regular a intermitência da energia solar é desempenhado pelos tanques de hidrogênio.

Com isso, foram reutilizados os valores encontrados na planta piloto, mas trazendo a capacidade da SOFC e a configuração para a desejada na planta industrial, para isso foi feito um cálculo de dois fatores multiplicadores, um para a capacidade e outro para a configuração, esse cálculo é apresentado no Apêndice D.

Com essas informações, foi possível realizar a simulação da Planta Industrial utilizando o *Aspen Plus*. Os fluxogramas feitos nesse *software* para representar esse processo, foram os mesmos utilizados na planta piloto, mas com especificações diferentes. As especificações de cada um dos equipamentos utilizados estão presentes no Apêndice D.

Assim como os fluxogramas, o Diagrama de fluxo de processos (PFD, do inglês, *Process Flow Diagram*) utilizado na planta industrial foi o mesmo da planta piloto, mostrado na Figura 13. Então, para uma melhor análise do processo, foi feito um balanço de massa e energia do processo, os resultados obtidos estão presentes no Apêndice D.

Esse balanço mostrou que para gerar uma potência de 3,6 MW na SOFC a partir de 55,21 MW de potência na eletrólise, é necessária uma alimentação de 9,53 m³/h de água que gera uma corrente de 1012,73 kg/h com 99,9% de hidrogênio.

A partir dessas informações, o presente trabalho fez uma análise econômica dessa Planta Industrial. Primeiramente foi realizado o cálculo do ISBL, e para isso foi utilizado a Fórmula 58. Onde, para o cálculo do C_B dos equipamentos, como as bombas, separadores, trocadores de calor e do combustor, foi utilizado a equação 60 para calcular o valor de C_B , a Tabela 14 a seguir mostra os valores de a , b e n utilizados.

Tabela 14 – Coeficientes dos equipamentos para cálculo do C_B .

Equipamento	a	b	n
Separador	17400	79	0,85
Bombas centrifugas	8000	240	0,9
Trocador de calor	28000	54	1,2
Combustor	61500	32500	0,8

Fonte: Arquivo pessoal do autor.

Para os demais equipamentos, que são as placas solares, os inversores, os eletrolisadores alcalinos, as células a combustível de óxido sólido e os tanques de hidreto metálico, os custos C_B utilizados foram valores da literatura tirados de [93-96]. Então, foi utilizada a fórmula 59 para calcular os custos dos equipamentos. Onde os fatores relacionados a tubulação, montagem de equipamento, elétrica, revestimento e pintura, civil, estruturas e edifícios, e instrumentação e controle da planta, utilizados são mostrados na Tabela 15 a seguir.

Tabela 15 – Fatores utilizados para o cálculo do C_E .

f_p	0,8	f_c	0,3
f_{er}	0,3	f_s	0,2
f_{el}	0,2	f_i	0,1
f_i	0,3		

Fonte: [70].

Para o dimensionamento dos equipamentos, os valores foram retirados diretamente da simulação no *Aspen Plus*. Além disso, os valores dos fatores de material do equipamento foram tirados de [66].

Com isso, o ISBL foi calculado a partir da soma dos custos dos equipamentos que estão representados na Tabela 16 a seguir, multiplicando pelo fator de localização que, no caso do Brasil, é de 1,14, assim seu valor foi de R\$ 179.024.921,79.

Tabela 16 – Custos dos Equipamentos.

Eq	C _B	D _B	D _E	f _m	C _E
SEP 1	9779182,24	125000,00	2449,03	1,30	923746,80
SEP 2	9779182,24	125000,00	821,73	1,30	479727,47
SEP 3	9779182,24	125000,00	813,65	1,30	476889,94
SEP 4	9779182,24	125000,00	137,47	1,30	164087,04
BC 1	102549,85	63,00	2,65	1,00	15306,97
BC 2	102549,85	63,00	4,09	1,30	19873,61
BC 3	102549,85	63,00	1,45	1,30	10689,07
BC 4	102549,85	63,00	10,04	1,00	34063,63
TC1	692974,96	500,00	326,31	1,30	531799,59
TC2	692974,96	500,00	137,09	1,30	319905,78
TC3	692974,96	500,00	53,82	1,30	190161,12
TC4	692974,96	500,00	115,83	1,30	270168,93
TC5	692974,96	500,00	1,95	1,70	24868,63
TC6	692974,96	500,00	2,36	1,70	27832,07
TC7	692974,96	500,00	51,00	1,70	168126,54
TC8	692974,96	500,00	0,77	1,30	17521,79
COMB 1	4586338,04	50,00	46,46	1,70	4388403,56
Placas Solares	51300000,00	50,00	55,21	0,00	54446180,21
Inversor AWE	4118,36	0,44	55,21	0,00	75135,68
AWE	3900000,00	20,00	55,21	1,00	7172633,88
MH	83448,00	610,00	67068,1	1,00	1399999,28
SOFC	1084724,86	0,44	3,60	1,00	3845839,71
Inversor SOFC	4118,36	0,44	3,60	0,00	14601,44

Fonte: Arquivo pessoal do autor.

Em seguida, foi feita uma estimativa de CAPEX a partir do valor do ISBL calculado e utilizando a equação 57, onde os valores do %OSBL, %EDC, %EC e %CG utilizados foram de 30%, 10%, 10% e 10%, respectivamente, e com isso o valor estimado do CAPEX foi de R\$ 302.696.403,59.

Para fins de comparação, a referência [97] apresenta os valores de custo de capital para diferentes tecnologias de geração de energia em diversas regiões do mundo. No caso do Brasil, o autor estima um custo de US\$ 2.979/kW para usinas hidrelétricas com capacidade igual ou superior a 5 MW, o que representa um investimento de aproximadamente R\$ 85 milhões para uma usina de 5 MW. Já para usinas termelétricas, o custo estimado é de US\$ 2.664/kW, resultando em um valor aproximado de R\$ 76 milhões para a mesma capacidade. Ambos os valores são significativamente inferiores aos encontrados no presente trabalho, mesmo considerando capacidades superiores à analisada neste estudo.

Então, foi calculado o valor estimado do OPEX, a partir dos valores estimados do custo fixo e do custo variável, e para isso foram utilizadas as equações 64 e 62.

No custo fixo o valor mão de obra utilizado foi de R\$ 574.600,00, como mostra a Tabela 17, aqui foram considerados um operador e um assistente por turno e um supervisor trabalhando em período diurno. Além disso, só foram considerados os custos de manutenção e dos impostos, assim os valores de %Ma e %Imp utilizados foram de 3% e 1%, respectivamente, o que levou a um custo fixo estimado em R\$ 7.739.011,92.

Tabela 17 - Mão de obra da planta industrial.

Pessoal	Salário	Com encargos	Quantidade	Valor Anual
Supervisor	R\$ 8.000,00	R\$ 13.600,00	1	R\$ 176.800,0
Operador	R\$ 4.000,00	R\$ 6.800,00	3	R\$ 265.200,0
Assistente	R\$ 2.000,00	R\$ 3.400,00	3	R\$ 132.600,0

Fonte: Arquivo pessoal do autor.

No custo variável foram considerados os gastos referentes a água que entra no processo, a energia necessária para o processo e para a planta e o eletrólito utilizado na AWE, onde foi considerado uma troca anual do eletrólito, a Tabela 18 a seguir mostra os valores utilizados e os resultados encontrados.

Tabela 18 – Custos variáveis da planta industrial.

Consumo	Preço	Gasto	Valor Anual
Energia	0,9 R\$/kWh	25,85 kWh	R\$ 202.984,22
Água	10 R\$/m ³	6,19 m ³ /h	R\$ 534.967,24
KOH	3,65 R\$/kg	4789,9 kg/ano	R\$ 17.473,50

Fonte: Arquivo pessoal do autor.

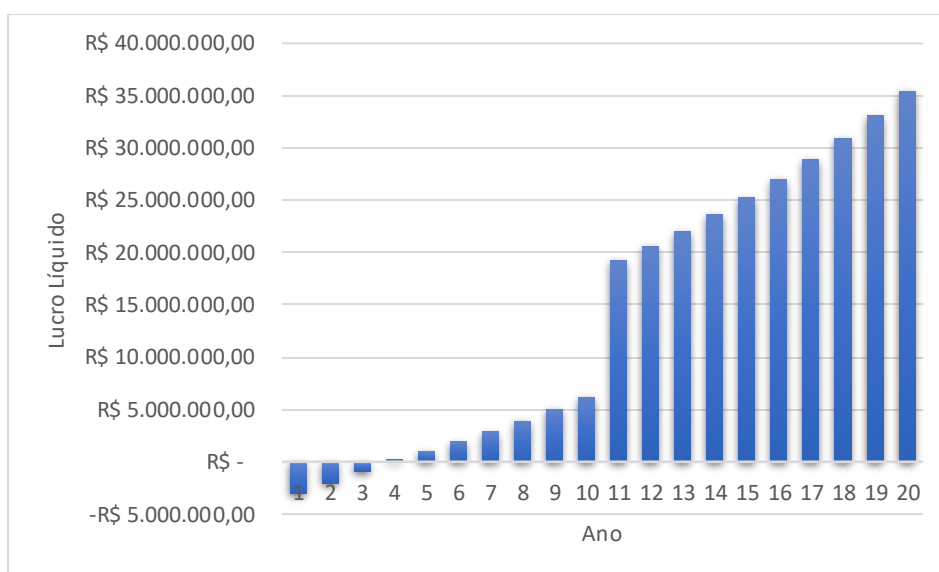
Com isso, o valor estimado do OPEX foi calculado pela soma do custo fixo com o custo variável e o valor estimado foi de R\$ 8.492.436,88.

Em seguida, foi feito o cálculo do rendimento da planta, onde para isso foi considerado um preço de 0,75 R\$/kWh, e assim foi determinado o valor de rendimento de R\$ 23.328.000,00, o cálculo feito está presente no apêndice D.

A partir dessas informações, foi construído uma Demonstração de Resultados do Exercício (DRE) do Lucro após o imposto de renda. Para isso foram utilizados os valores de imposto de renda, correção anual e tempo de depreciação e os valores utilizados foram de 34%, 7% e 10 anos, respectivamente.

Com isso, o DRE foi construído e o resultado dele é apresentado na Figura 15 a seguir. A tabela com os dados do DRE e o cálculo feito nele estão presentes no apêndice D.

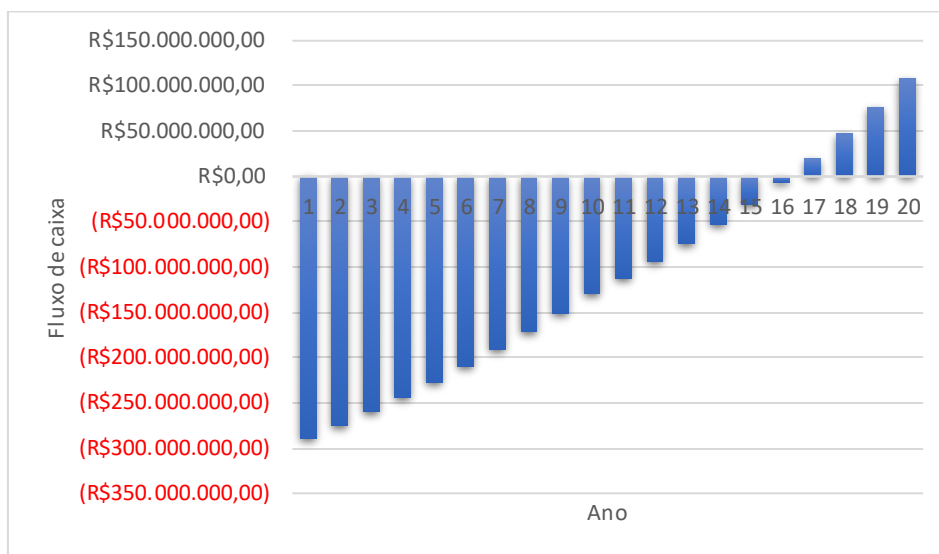
Figura 15 - DRE da planta industrial.



Fonte: Arquivo pessoal do autor.

Analisando a Figura 15, é possível perceber que há um lucro bruto negativo nos três primeiros anos, e o quarto com valor quase nulo. Já do décimo para o decimo primeiro ano há um aumento considerável do lucro, e isso se dá pelo fato da depreciação que acontece nos 10 primeiros anos.

Em seguida, foram calculados os fluxos de caixa do processo e os resultados são apresentados na Figura 16 a seguir. A tabela com os dados do Fluxo de Caixa e o cálculo feito nele estão presentes no apêndice D.

Figura 16 - Fluxo de caixa da planta industrial.

Fonte: Arquivo pessoal do autor.

Analisando a Figura 16, é possível perceber que, mesmo com um rendimento alto, essa planta somente gerará lucro a partir do decimo sétimo ano. Além disso, ao final da amostragem de 20 anos, que é aproximadamente o tempo de vida útil das principais tecnologias, o lucro gerado foi superior a cem milhões de reais, fazendo com que possam ser trocadas as principais tecnologias sem que haja alguma perda.

Com esse resultado do Fluxo de Caixa, foram calculadas algumas análises de rentabilidade, entre elas o Valor Presente Líquido (VPL), o *Payback*, a Taxa Interna de Retorno (TIR), o Retorno sobre Investimento (ROI) e o custo nivelado da energia (LCOE), e os valores encontrados estão mostrados na Tabela 19 a seguir. Onde foi utilizado a taxa anual igual a 12 %. Todos os cálculos feitos para determinar essas análises de rentabilidade foram feitos diretamente no Excel.

Tabela 19 – Análises de rentabilidade da planta industrial.

VPL	R\$ 108.241.722,93	ROI	11,70%
<i>Payback</i>	16 anos e 3 meses	LCOE	0,597 R\$/kWh
TIR	3%		0,105 \$/kWh

Fonte: Arquivo pessoal do autor.

Esses valores indicam que a proposta de planta industrial é um investimento promissor, uma vez que o VPL e o ROI são positivos, o *Payback* é menor que o tempo de amostragem e LCOE é menor que o custo da energia elétrica da rede que é de 0,9 R\$/kWh. Porém a TIR é menor que a taxa anual que é igual a 12 %, o que indica que o projeto não seria viável por oferecer um retorno menor que o custo de oportunidade do capital.

5. CONCLUSÃO

A partir da análise dos resultados obtidos, pode-se verificar que o objetivo principal deste trabalho foi alcançado. Foram apresentados modelos para a eletrolise alcalina da água e para a célula a combustível de óxido sólidos que obtiveram ótimos resultados quando comparados com resultados encontrados na literatura.

Além disso, foi realizada a simulação de uma planta piloto para a geração de energia a partir de uma célula a combustível alimentada por hidrogênio verde vindo de uma eletrolise alcalina da água e utilizando hidretos metálicos para o armazenamento do hidrogênio. Nessa planta, foram observadas eficiências elétricas e térmicas da SOFC de 39,6% e 45,4%, respectivamente, e que para uma geração de 3,6 kWh é necessária uma potência de 15,13 kW de energia na AWE. Entretanto, na planta real de Itumbiara, o eletrolisador possui uma potência de 270 kW, de modo que o hidrogênio excedente pode ser aproveitado em outros componentes da planta. Além disso, o balanço de massa e energia do processo mostrou que para gerar 3,6 kWh, é necessária uma alimentação de 2,61 L/h de água que gera uma corrente de 0,28 kg/h com 99,9% de hidrogênio.

Por fim, foi realizada a simulação e análise econômica de uma planta industrial para a geração de energia a partir de uma célula a combustível alimentada por hidrogênio verde vindo de uma eletrolise alcalina da água e utilizando hidretos metálicos para o armazenamento do hidrogênio. Aqui foi observado que para uma geração de 3,6 MW é necessária uma potência de 55,21 MW e uma alimentação de 9,53 m³/h. Além disso, a análise econômica mostrou um CAPEX de R\$ 302.696.403,59, um OPEX de R\$ 8.492.436,88 e um rendimento de R\$ 23.328.000,00, e as análises de rentabilidade mostraram um VPL de R\$ 108.241.722,93, um *Payback* de 16 anos e 3 meses, um TIR de 3%, ROI de 11,70% e um LCOE de 0,60 R\$/kWh ou 0,105 \$/kWh. Esses valores indicam que a abordagem feita para a planta piloto é um investimento promissor, uma vez que o VPL e o ROI são positivos e o LCOE é menor que o custo da rede elétrica, mas o alto valor do *Payback* mostra que ela ainda pode melhorar e a TIR ser menor que a taxa anual mostra que ele não seria viável por oferecer um retorno menor que o custo de oportunidade do capital.

6. Sugestões para Trabalhos Futuros

Durante o desenvolvimento deste trabalho diversas questões foram estudadas e analisadas, porém ainda há outras possibilidades que merecem ser abordadas em trabalhos futuros, tais como:

- A utilização de um tipo de eletrólise como a SOEC, que trabalha em parâmetros bem semelhantes à da SOFC, e isso poderia gerar melhores resultados.
- A utilização de sistemas híbridos ligados a SOFC, aqui poderiam ser usados os rejeitos térmicos que saem da célula para gerar energia em um sistema como por exemplo o sistema ORC.
- A utilização de um sistema diferente para o armazenamento do hidrogênio, como Transportadores Orgânicos Líquidos de Hidrogênio (LOHCs).
- O estudo de técnicas de controle avançadas usando simulação dinâmica.
- A aplicação de modelos de inteligência artificial para otimização do desempenho dos sistemas estudados, incluindo previsão de falhas e controle operacional mais eficiente.

7. REFERÊNCIAS

- 1 KUMAR, S. Shiva; LIM, Hankwon. An overview of water electrolysis technologies for green hydrogen production. **Energy reports**, v. 8, p. 13793-13813, 2022.
- 2 DE FÁTIMA PALHARES, Dayana D.'Arc; VIEIRA, Luiz Gustavo Martins; DAMASCENO, João Jorge Ribeiro. Hydrogen production by a low-cost electrolyzer developed through the combination of alkaline water electrolysis and solar energy use. **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 43, n. 9, p. 4265-4275, 2018.
- 3 CARTAXO, Marco et al. Hydrogen Production via Wastewater Electrolysis—An Integrated Approach Review. In: **The Proceedings of the International Conference on Smart City Applications**. Cham: Springer International Publishing, 2021. p. 671-680.
- 4 CHANG, Alex CC et al. Biomass gasification for hydrogen production. **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 36, n. 21, p. 14252-14260, 2011.
- 5 EPE. Plano Decenal de Expansão de Energia 2031. Empresa de Pesquisa Energética, Rio de Janeiro. 2022.
- 6 BRASIL. *Lei nº 15.103, de 22 de janeiro de 2025. Institui o Programa de Aceleração da Transição Energética (Paten); altera as Leis n.ºs 13.988, de 14 de abril de 2020; 11.484, de 31 de maio de 2007; 9.991, de 24 de julho de 2000; e 9.478, de 6 de agosto de 1997.* Diário Oficial da União: seção 1, Brasília, DF, 23 jan. 2025. Disponível em: https://www.planalto.gov.br/ccivil_03/_Ato2023-2026/2025/Lei/L15103.htm. Acesso em: 27 ago. 2025.
- 7 MORADI, Ramin; GROTH, Katrina M. Hydrogen storage and delivery: Review of the state of the art technologies and risk and reliability analysis. **International journal of hydrogen energy**, v. 44, n. 23, p. 12254-12269, 2019.
- 8 JAHANBIN, Aminhossein; ABDOLMALEKI, Leila; BERARDI, Umberto. Techno-economic feasibility of integrating hybrid-battery hydrogen energy storage in academic buildings. **Energy Conversion and Management**, v. 309, p. 118445, 2024.

- 9 SILVA, Eduardo da Rosa. Síntese e caracterização de estruturas anódicas com condutividade elétrica mista, iônica e eletrônica, para célula a combustível de óxido sólido. 2020.
- 10 GUAITOLINI, Stefani Vanussi Melo et al. A review of fuel cell and energy cogeneration technologies. In: 2018 9th International renewable energy congress (IREC). IEEE, 2018. p. 1-6.
- 11 BARBIR, Frano. **PEM fuel cells: theory and practice**. Academic press, 2012.
- 12 CORIGLIANO, Orlando; PAGNOTTA, Leonardo; FRAGIACOMO, Petronilla. On the technology of solid oxide fuel cell (SOFC) energy systems for stationary power generation: A review. **Sustainability**, v. 14, n. 22, p. 15276, 2022.
- 13 COSTA, Nayara Eloy Granato et al. Simulação e análise de uma unidade de geração de hidrogênio em refinarias de petróleo. 2018.
- 14 BAO, Cheng et al. Macroscopic modeling of solid oxide fuel cell (SOFC) and model-based control of SOFC and gas turbine hybrid system. **Progress in Energy and Combustion Science**, v. 66, p. 83-140, 2018.
- 15 ASPENTECH. **Jump Start: Getting Started with Aspen Plus**. 2015
- 16 SEBBAHI, Seddiq et al. Assessment of the three most developed water electrolysis technologies: alkaline water electrolysis, proton exchange membrane and solid-oxide electrolysis. **Materials Today: Proceedings**, v. 66, p. 140-145, 2022.
- 17 ZENG, Kai; ZHANG, Dongke. Recent progress in alkaline water electrolysis for hydrogen production and applications. **Progress in energy and combustion science**, v. 36, n. 3, p. 307-326, 2010.
- 18 SANTOS, Diogo MF; SEQUEIRA, César AC; FIGUEIREDO, José L. Hydrogen production by alkaline water electrolysis. **Química Nova**, v. 36, p. 1176-1193, 2013.
- 19 TENHUMBERG, Nils; BÜKER, Karsten. Ecological and economic evaluation of hydrogen production by different water electrolysis technologies. **Chemie Ingenieur Technik**, v. 92, n. 10, p. 1586-1595, 2020.
- 20 LI, Haiyao et al. Research progress of hydrogen production technology and related catalysts by electrolysis of water. **Molecules**, v. 28, n. 13, p. 5010, 2023.

- 21 GRIGORIEV, Sergey A. et al. Current status, research trends, and challenges in water electrolysis science and technology. **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 45, n. 49, p. 26036-26058, 2020.
- 22 VIDAS, Leonardo; CASTRO, Rui. Recent developments on hydrogen production technologies: state-of-the-art review with a focus on green-electrolysis. **Applied Sciences**, v. 11, n. 23, p. 11363, 2021.
- 23 DAOUDI, Camilia; BOUNAHMIDI, Tijani. Overview of alkaline water electrolysis modeling. **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 49, p. 646-667, 2024.
- 24 SAKAS, Georgios et al. Dynamic energy and mass balance model for an industrial alkaline water electrolyzer plant process. **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 47, n. 7, p. 4328-4345, 2022.
- 25 SÁNCHEZ, Mónica et al. Aspen Plus model of an alkaline electrolysis system for hydrogen production. **International journal of hydrogen energy**, v. 45, n. 7, p. 3916-3929, 2020.
- 26 AMORES, Ernesto; RODRÍGUEZ, Jesús; CARRERAS, Christian. Influence of operation parameters in the modeling of alkaline water electrolyzers for hydrogen production. **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 39, n. 25, p. 13063-13078, 2014.
- 27 SÁNCHEZDELGADO, Mónica et al. Semi-empirical model and experimental validation for the performance evaluation of a 15 kW alkaline water electrolyzer. 2018.
- 28 PINTO, Pedro Henrique Cavalcante. Avaliação da produção de H₂ a partir da reforma a seco do metano e eletrólise da água. 2022.
- 29 LI, Wei et al. Low-temperature water electrolysis: fundamentals, progress, and new strategies. **Materials Advances**, v. 3, n. 14, p. 5598-5644, 2022.
- 30 HARRISON, Kevin W. et al. Hydrogen production: fundamentals and case study summaries. **Hydrog. fuel cells**, p. 207-226, 2010.
- 31 RAMESH, A. Sai et al. Artificial intelligence driven hydrogen and battery technologies—A review. **Fuel**, v. 337, p. 126862, 2023.
- 32 SCARPATI, Gabriele et al. A comprehensive review on metal hydrides-based hydrogen storage systems for mobile applications. **Journal of Energy Storage**, v. 102, p. 113934, 2024.

- 33 DRAWER, Chris; LANGE, Jelto; KALTSCHMITT, Martin. Metal hydrides for hydrogen storage—Identification and evaluation of stationary and transportation applications. **Journal of energy storage**, v. 77, p. 109988, 2024.
- 34 GE, Y. T. Characterisation of pressure-concentration-temperature profiles for metal hydride hydrogen storage alloys with model development. **Energy Storage**, v. 6, n. 1, p. e504, 2024.
- 35 LOPES, F. D. C. **Modelagem de empilhamentos de células a combustível PEM por redes neurais**. 2013. Tese de Doutorado. Tese (Doutorado)-Programa de Pós Graduação em Engenharia Elétrica, Coppe, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro.
- 36 RAJASEKAR, N. et al. Comparative study of PEM fuel cell parameter extraction using Genetic Algorithm. **Ain Shams Engineering Journal**, v. 6, n. 4, p. 1187-1194, 2015.
- 37 HATTI, Mustapha. Neural network power controller for PEM fuel cells systems. In: **2007 IEEE International Conference on Mechatronics**. IEEE, 2007. p. 1-6.
- 38 LARMINIE, James; DICKS, Andrew; MCDONALD, Maurice S. **Fuel cell systems explained**. Chichester, UK: J. Wiley, 2003.
- 39 PRATER, Keith. The renaissance of the solid polymer fuel cell. **Journal of power sources**, v. 29, n. 1, p. 239-250, 1990.
- 40 HART, David; JONES, Stuart; LEWIS, Jonathan. The fuel cell industry review 2020. 2020.
- 41 RAVICHANDRAN, Thareny et al. Review on the development of fuel cells and its future prospects. **Jurnal Teknologi (Sciences & Engineering)**, v. 83, n. 3, p. 75-84, 2021.
- 42 SAMMES, Nigel; BOVE, Roberto; STAHL, Knut. Phosphoric acid fuel cells: Fundamentals and applications. **Current opinion in solid state and materials science**, v. 8, n. 5, p. 372-378, 2004.
- 43 LEE, Sang Cheol; KWON, Oung; LEE, Dong-Ha. Fuel cell simulation: Steady-state and dynamic case. In: **2012 7th International Conference on Computer Science & Education (ICCSE)**. IEEE, 2012. p. 974-979.
- 44 WEIß, Alexandra et al. Distribution of relaxation times analysis of high-temperature PEM fuel cell impedance spectra. **Electrochimica Acta**, v. 230, p. 391-398, 2017.

- 45 BRUNTON, James et al. Design of a single alkaline fuel cell test bed. In: **2010 9th International Conference on Environment and Electrical Engineering**. IEEE, 2010. p. 53-56.
- 46 COOK, Brian. Introduction to fuel cells and hydrogen technology. **Engineering science and education journal**, v. 11, n. 6, p. 205-216, 2002.
- 47 IM HUIYONG, K. et al. Modeling and control system design of an MCFC system. In: **2011 International Symposium on Advanced Control of Industrial Processes (ADCONIP)**. IEEE, 2011. p. 84-89.
- 48 ABDELKAREEM, Mohammad Ali et al. Environmental aspects of fuel cells: A review. **Science of The Total Environment**, v. 752, p. 141803, 2021.
- 49 ZHANG, Xing. Current status of stationary fuel cells for coal power generation. **Clean Energy**, v. 2, n. 2, p. 126-139, 2018.
- 50 INCI, Mustafa; TÜRKSOY, Ömer. Review of fuel cells to grid interface: Configurations, technical challenges and trends. **journal of cleaner Production**, v. 213, p. 1353-1370, 2019.
- 51 JUNG, Guo-Bin et al. Study of reversible solid oxide fuel cell with different oxygen electrode materials. **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 41, n. 46, p. 21802-21811, 2016.
- 52 MALIK, Vansh et al. Comparative study and analysis between Solid Oxide Fuel Cells (SOFC) and Proton Exchange Membrane (PEM) fuel cell—A review. **Materials Today: Proceedings**, v. 47, p. 2270-2275, 2021.
- 53 EMADI, Mohammad Ali et al. Working-fluid selection and thermoeconomic optimisation of a combined cycle cogeneration dual-loop organic Rankine cycle (ORC) system for solid oxide fuel cell (SOFC) waste-heat recovery. **Applied Energy**, v. 261, p. 114384, 2020.
- 54 SINGHAL, Subhash C. Solid oxide fuel cells for stationary, mobile, and military applications. **Solid State Ionics**, v. 152, p. 405-410, 2002.
- 55 RUIZ-MORALES, Juan Carlos et al. Engineering of materials for solid oxide fuel cells and other energy and environmental applications. **Energy & Environmental Science**, v. 3, n. 11, p. 1670-1681, 2010.
- 56 LI, Jiqiang et al. The Impact of Flow-Thermal Characteristics in Ship-Board Solid Oxide Fuel Cells. **Journal of Marine Science and Engineering**, v. 12, n. 10, p. 1779, 2024.

- 57 SINGHAL, Subhash C.; KENDALL, Kevin (Ed.). **High-temperature solid oxide fuel cells: fundamentals, design and applications**. Elsevier, 2003.
- 58 LAKSHMI, T. V. V. S.; GEETHANJALI, P.; KRISHNA, Prasad S. Mathematical modelling of solid oxide fuel cell using Matlab/Simulink. In: **2013 Annual International Conference on Emerging Research Areas and 2013 International Conference on Microelectronics, Communications and Renewable Energy**. IEEE, 2013. p. 1-5.
- 59 GEBREGERGIS, Abraham et al. Solid oxide fuel cell modeling. **IEEE Transactions on Industrial Electronics**, v. 56, n. 1, p. 139-148, 2008.
- 60 BENDAIKHA-TOUAFEK, Wahiba; TOUAFEK, Khaled; SERIR, Lazhar. OPERATION OF TOTAL ENERGY SYSTEM BASED ON SOFC FUEL CELL.
- 61 PAZMIÑO, Gonzalo A. Almeida; JUNG, Seunghun. Thermodynamic modeling of sulfuric acid decomposer integrated with 1 MW tubular SOFC stack for sulfur-based thermochemical hydrogen production. **Energy Conversion and Management**, v. 247, p. 114735, 2021.
- 62 BAEK, Seung Man et al. Three-dimensional micro/macroscale simulation of planar, anode-supported, intermediate-temperature solid oxide fuel cells: I. Model development for hydrogen fueled operation. **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 44, n. 29, p. 15456-15481, 2019.
- 63 ZHANG, Li et al. Comparative study of solid oxide fuel cell combined heat and power system with Multi-Stage Exhaust Chemical Energy Recycling: Modeling, experiment and optimization. **Energy Conversion and Management**, v. 139, p. 79-88, 2017.
- 64 VAZZOLER, Alex. **Introdução ao estudo das viabilidades técnica e econômica de processos químicos: Estimativas de custos para projetos conceituais e anteprojetos**. Alex Vazzoler, 2017.
- 65 RUEDA-DURAN, Cesar-Augusto; ORTIZ-SANCHEZ, Mariana; CARDONA-ALZATE, Carlos Ariel. Detailed economic assessment of polylactic acid production by using glucose platform: Sugarcane bagasse, coffee cut stems, and plantain peels as possible raw materials. **Biomass Conversion and Biorefinery**, v. 12, n. 10, p. 4419-4434, 2022.

- 66 TOWLER, Gavin; SINNOTT, Ray. **Chemical engineering design: principles, practice and economics of plant and process design.** Butterworth-Heinemann, 2021.
- 67 SMITH, Robin. **Chemical process: design and integration.** John Wiley & Sons, 2005.
- 68 SILLA, Harry. **Chemical process engineering: design and economics.** CRC Press, 2003.
- 69 RYBA, Andréa; LENZI, Ervin Kaminski; LENZI, Marcelo Kaminski. Elementos de engenharia econômica. **Editora Intersaberes. São Paulo–SP,** 2012.
- 70 DAFONSECA, José Wladimir Freitas. **Análise E Decisão de Investimentos.** IESDE BRASIL SA.
- 71 AREFDEHGHANI, Sajjad et al. Techno-economic assessment of decentralized low-carbon power plants based on solid oxide fuel cell equipped with calcium looping carbon capture. **Energy**, v. 313, p. 133720, 2024.
- 72 SEBORG, Dale E. et al. **Process dynamics and control.** John Wiley & Sons, 2016.
- 73 LUYBEN, William L. **Process modeling, simulation and control for chemical engineers.** McGraw-Hill Higher Education, 1989.
- 74 TIMMERHAUS, Klaus Dieter; WEST, Ronald Emmett. **Plant design and economics for chemical engineers.** McGraw-Hill, 2004.
- 75 KASHMIRI, Sataish Asghar; TAHIR, Muhammad Wasim; AFZAL, Umer. Combustion modeling and simulation of recycled anode-off-gas from solid oxide fuel cell. **Energies**, v. 13, n. 19, p. 5186, 2020.
- 76 WILSON, Joshua A. et al. Hybrid solid oxide fuel cell/gas turbine model development for electric aviation. **Energies**, v. 15, n. 8, p. 2885, 2022.
- 77 GHORBANI, Babak; VIJAYARAGHAVAN, Krishna. A review study on software-based modeling of hydrogen-fueled solid oxide fuel cells. **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 44, n. 26, p. 13700-13727, 2019.
- 78 SUTHER, Torgeir; FUNG, A.; KOKSAL, M. Simulation of a solid oxide fuel cell-gas turbine system using Aspenplus. In: **Proceedings of the 3rd International Energy, Exergy and Environment Symposium.** 2009.

- 79 BESSETTE, Norman F.; WEPFER, William J.; WINNICK, Jack. A mathematical model of a solid oxide fuel cell. **Journal of the Electrochemical Society**, v. 142, n. 11, p. 3792, 1995.
- 80 LIU, Shixue; KONG, Wei; LIN, Zijing. Three-dimensional modeling of planar solid oxide fuel cells and the rib design optimization. **Journal of Power Sources**, v. 194, n. 2, p. 854-863, 2009.
- 81 AUTISSIER, Nordahl et al. CFD simulation tool for solid oxide fuel cells. **Journal of Power Sources**, v. 131, n. 1-2, p. 313-319, 2004.
- 82 SUWANWARANGKUL, R. et al. Mechanistic modelling of a cathode-supported tubular solid oxide fuel cell. **Journal of Power Sources**, v. 154, n. 1, p. 74-85, 2006.
- 83 JANARDHANAN, Vinod M.; DEUTSCHMANN, Olaf. CFD analysis of a solid oxide fuel cell with internal reforming: Coupled interactions of transport, heterogeneous catalysis and electrochemical processes. **Journal of Power Sources**, v. 162, n. 2, p. 1192-1202, 2006.
- 84 LI, Jun et al. Two-dimensional dynamic simulation of a direct internal reforming solid oxide fuel cell. **Journal of Power Sources**, v. 171, n. 2, p. 585-600, 2007.
- 85 ZHU, Huayang; KEE, Robert J. Modeling electrochemical impedance spectra in SOFC button cells with internal methane reforming. **Journal of The Electrochemical Society**, v. 153, n. 9, p. A1765, 2006.
- 86 JIANG, Wei et al. Parameter setting and analysis of a dynamic tubular SOFC model. **Journal of Power Sources**, v. 162, n. 1, p. 316-326, 2006.
- 87 CHEDDIE, Denver F.; MUNROE, Norman DH. A dynamic 1D model of a solid oxide fuel cell for real time simulation. **Journal of Power Sources**, v. 171, n. 2, p. 634-643, 2007.
- 88 PADULLES, Joel; AULT, Graham W.; MCDONALD, Jim R. An integrated SOFC plant dynamic model for power systems simulation. **Journal of Power sources**, v. 86, n. 1-2, p. 495-500, 2000.
- 89 SORRENTINO, Marco; PIANESE, Cesare; GUEZENNEC, Yann G. A hierarchical modeling approach to the simulation and control of planar solid oxide fuel cells. **Journal of Power Sources**, v. 180, n. 1, p. 380-392, 2008.

- 90 XI, Handa; SUN, Jing; TSOURAPAS, Vasilios. A control oriented low order dynamic model for planar SOFC using minimum Gibbs free energy method. **Journal of Power Sources**, v. 165, n. 1, p. 253-266, 2007.
- 91 ROHATGI, Ankit. *WebPlotDigitizer*. Disponível em: <https://automeris.io/wpd/>. Acesso em: 17 jul. 2025.
- 92 CHABANE, Djafar et al. Coupling a metal hydride tank with a PEMFC for vehicular applications: A simulations framework. **International Journal of Energy Research**, v. 45, n. 11, p. 16511-16523, 2021.
- 93 HERMAWAN, Erwan et al. Solar cell manufacturing cost analysis and its impact to solar power electricity price in Indonesia. **International Journal of Energy Economics and Policy**, v. 13, n. 6, p. 244-258, 2023.
- 94 KRISHNAN, Subramani et al. Present and future cost of alkaline and PEM electrolyser stacks. **International journal of hydrogen energy**, v. 48, n. 83, p. 32313-32330, 2023.
- 95 AKRAMI, Ehsan et al. Thermodynamic and exergo-economic analyses of an innovative semi self-feeding energy system synchronized with waste-to-energy technology. **Sustainable Energy Technologies and Assessments**, v. 40, p. 100759, 2020.
- 96 KRANE, Patrick et al. Techno-economic analysis of metal-hydride energy storage to enable year-round load-shifting for residential heat pumps. **Energy and Buildings**, v. 256, p. 111700, 2022.
- 97 INTERNATIONAL ENERGY AGENCY. *Projected Costs of Generating Electricity*. Paris: IEA, 2019.

8. APÊNDICES

8.1 Apêndice A: Cálculos e dados da simulação da AWE

Este apêndice reúne cálculos e dados da simulação da eletrólise alcalina da água (AWE). Nele são apresentadas figuras com os dados da simulação e tabelas com os resultados do balanço de massa e energia.

Para o cálculo do potencial da célula, utiliza-se a Equação 7.

$$V_{ec} = V^{\circ} + [(r_1 + d_1) + r_2 T + d_2 p]j + s \log \left[\left(t_1 + \frac{t_2}{T} + \frac{t_3}{T^2} \right) j + 1 \right] \quad (7)$$

Para isso, utilizam-se os parâmetros da Tabela A.1.

Tabela A.1 - Coeficientes do modelo eletroquímica da célula eletrolítica alcalina.

Coeficiente	Valor	Unidade
r_1	$4,445153 \cdot 10^{-5}$	$\Omega \cdot m^2$
r_2	$6,888740 \cdot 10^{-9}$	$\Omega \cdot m^2 \cdot ^{\circ}C^{-1}$
d_1	$-3,129960 \cdot 10^{-6}$	$\Omega \cdot m^2$
d_2	$4,471370 \cdot 10^{-7}$	$\Omega \cdot m^2 \cdot bar^{-1}$
s	0,338240	V
t_1	-0,015390	$m^2 \cdot A^{-1}$
t_2	2,001810	$m^2 \cdot ^{\circ}C \cdot A^{-1}$
t_3	15,241780	$m^2 \cdot ^{\circ}C \cdot A^{-1}$

Fonte: [28]

Com isso, têm-se:

$$V_{EC} = 1,23 + [(4,445153 \cdot 10^{-5} - 3,12996 \cdot 10^{-6}) + 6,88874 \cdot 10^{-9} \cdot 75 + 4,47137 \cdot 10^{-7} \cdot 7] \cdot 4200 + 0,33824 \cdot \log \left[\left(-0,01539 + \frac{2,00181}{75} + \frac{15,24178}{75^2} \right) \cdot 4200 + 1 \right] = 2,0202 \text{ V}$$

A potência da célula pode ser determinada pela Equação 8.

$$P_{ec} = V_{ec} N_{ec} j A_{ec} \quad (8)$$

Com isso, têm-se:

$$P = 2,0202 \cdot 12,4200 \cdot 0,1 = 10181,81 \text{ W}$$

Para o cálculo da eficiência de Faraday, utiliza-se a Equação 9.

$$\eta_F = \left(\frac{j^2}{f_{11} + f_{12} T + j^2} \right) (f_{21} + f_{22} T) \quad (9)$$

Para isso, utilizam-se os parâmetros da Tabela A.2.

Tabela A.2 - Coeficientes da eficiência de Faraday da célula eletrolítica alcalina.

Coeficiente	Valor	Unidade
f ₁₁	478645,74000	A ² .m ⁻⁴
f ₁₂	-2953,15000	A ² .m ⁻⁴ .°C ⁻¹
f ₂₁	1,03960	-
f ₂₂	-0,00104	°C ⁻¹

Fonte: Arquivo pessoal do autor

Com isso, têm-se:

$$\eta_F = \left(\frac{4200^2}{478645,74 - 2953,15 \cdot 75 + 4200^2} \right) (1,0396 - 0,00104 \cdot 75) = 0,9478$$

Para o cálculo do número de mols de H₂ produzido da quantidade de água que é convertida, utiliza-se a Equação 10.

$$n_{H_2} = n_{H_2O} = \frac{P_{ec}}{V_{ec} n_e F} \eta_F \quad (10)$$

Como n_e = 2, tem-se:

$$n_{H_2} = n_{H_2O} = \left(\frac{10181,81 \cdot 0,9478}{2,0202 \cdot 2 \cdot 96485} \right) = 0,0248 \frac{mol}{s}$$

Com isso, foi calculado a vazão mássica a partir do número de mols de H₂O convertida, como mostra o cálculo abaixo.

$$m_{H_2O} = n_{H_2O} M_{H_2O} = 0,0248 \cdot 18 = 0,4464 \frac{g}{s} = 1,6054 \frac{kg}{h}$$

Para o cálculo da eficiência voltaica, utiliza-se a Equação 11:

$$\eta_v = \frac{U_{tn}}{V_{ec}} \quad (11)$$

Como V_{th} = 1,481 V, tem-se:

$$\eta_{volt} = \frac{1,481}{2,0202} = 0,7332$$

A seguir, as figuras A.1 a A.5 com os dados utilizados na simulação da eletrólise alcalina da água:

Figura A.1 - Dados da corrente de entrada.

Specifications

Flash Type: **Temperature** **Pressure**

State variables:

- Temperature: 25 C
- Pressure: 30 bar
- Vapor fraction: [empty]
- Total flow basis: **Mass**
- Total flow rate: 1,605 kg/hr
- Solvent: [empty]

Reference Temperature:

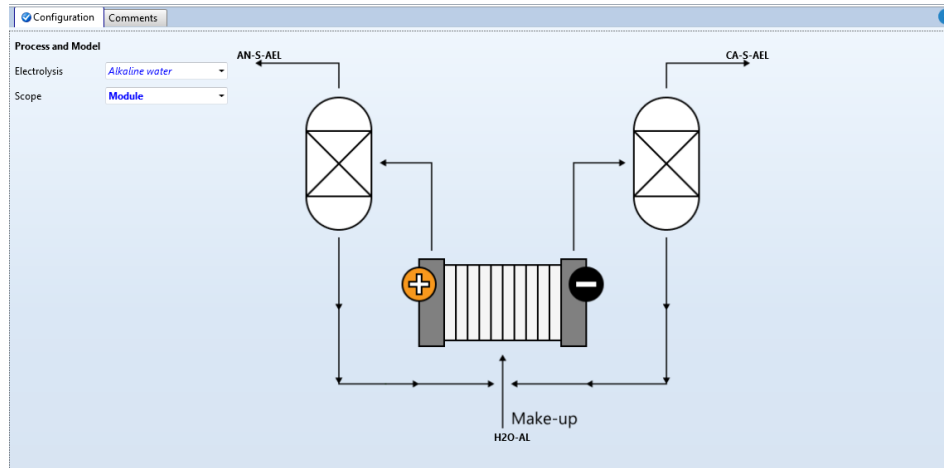
- Volume flow reference temperature: C
- Component concentration reference temperature: C

Composition: **Mole-Frac**

Component	Value
H2O	1
H2	
O2	
KOH	
H3O+	
K+	
OH-	
N2	
Total	1

Fonte: Arquivo pessoal do autor

Figura A.2 - Detalhes da aba “Setup” na parte “Configurations” do bloco de eletrólise



Fonte: Arquivo pessoal do autor

Figura A.3 - Detalhes da aba “Specifications” do bloco da eletrólise

Specifications

Process and Model:

- Electrolysis: **Alkaline water**
- Scope: **Alkaline electrolysis cell.**

Reactions:

- Anode: $2OH^- = 0.5O_2 + H_2O + 2e^-$
- Cathode: $2H_2O + 2e^- = H_2 + 2OH^-$
- Overall: $H_2O = H_2 + 0.5O_2$

Operating Conditions:

- Total power: 10,18 kW
- Number of stacks: 1
- Number of cells per stack: 12
- Total duty: [empty] cal/sec
- Anode pressure: -0,3 bar

Calculation Methods:

- Efficiency based: **Voltage efficiency**
- Efficiency: 0,7332

Module Specifications:

- Basis: **Mole**
- Calculate makeup water: ☒

Product Composition:

Component	AN-S-AEL	CA-S-AEL
Hydrogen	0	0,96
Oxygen	0,96	0

Product Flow:

- Calculate product flows from specified power or current: ☒
- Specify cathode product flow: [empty] kmol/hr
- Specify anode product flow: [empty] kmol/hr

Other specifications:

- Total current: [empty] amp
- Anode to feed ratio: 0,5
- Faraday efficiency: 0,9478
- Temperature: 75 C
- Cathode pressure: -0,3 bar

Fonte: Arquivo pessoal do autor

Figura A.4 - Detalhes da aba “Specifications” do trocador de calor.

Flash specifications

Flash Type: Temperature, Pressure

Temperature: 25 C

Temperature change: C

Degrees of superheating: C

Degrees of subcooling: C

Pressure: 1 bar

Duty: cal/sec

Vapor fraction:

Pressure drop correlation parameter:

☐ Always calculate pressure drop correlation parameter

Valid phases: Vapor-Liquid

Fonte: Arquivo pessoal do autor

Figura A.5 - Detalhes da aba “Specifications” do separador.

Flash specifications

Flash Type: Temperature, Pressure

Temperature: 25 C

Pressure: 1 bar

Duty: cal/sec

Vapor fraction:

Valid phases: Vapor-Liquid

Fonte: Arquivo pessoal do autor

Na Figura A.3, foi determinado a composição das correntes de anodo e catodo contendo 0,96 de oxigênio e hidrogênio, respectivamente. Aqui esse valor é um valor usualmente utilizado na literatura e o maior valor possível encontrado após testes feitos pelo presente autor.

A seguir, tabelas A.3 e A.4 com os dados do balanço de massa e energia da simulação da eletrólise alcalina da água feita no *Aspen Plus*. Nela é possível ver que a quantidade de água que entra no sistema é superior a calculada, e isso acontece, pois, a água deve entrar em excesso no sistema e esse valor é determinado diretamente pelo *Aspen Plus*, a partir das informações de potência, número de células e eficiências voltaica e faradaica.

Tabela A.3 – Dados das correntes da simulação da eletrólise alcalina da água parte 1.

Corrente	H2O-AL	CA-S-AEL	AN-S-AEL	TC1-S	TC2-S
Temperatura (°C)	25	75	75	25	25
Pressão (bar)	7	6,7	6,7	6,7	6,7
Fluxo molar (kmol.h ⁻¹)	0,0952	0,0933	0,0467	0,0933	0,0467
Frações Molares					
H ₂ O	1,0000	0,0400	0,0400	0,0400	0,0400
H ₂	0,0000	0,9600	0,0000	0,9600	0,0000
O ₂	0,0000	0,0000	0,9600	0,0000	0,9600
Fluxo mássico (kg.h ⁻¹)	1,7146	0,2478	1,4668	0,2478	1,4668

Fonte: Arquivo pessoal do autor

Tabela A.4 – Dados das correntes da simulação da eletrólise alcalina da água parte 2.

Corrente	H2	PURGA1	O2	PURGA2
Temperatura (°C)	25	25	25	25
Pressão (bar)	1	1	1	1
Fluxo molar (kmol.h ⁻¹)	0,0925	0,0008	0,0463	0,0004
Frações Molares				
H ₂ O	0,0319	1,0000	0,0321	1,0000
H ₂	0,9681	0,0000	0,0000	0,0000
O ₂	0,0000	0,0000	0,9679	0,0000
Fluxo mássico (kg.h ⁻¹)	0,2338	0,0140	1,4599	0,0069

Fonte: Arquivo pessoal do autor

8.2 Apêndice B: Dados da simulação da SOFC

Neste apêndice estão organizados os dados referentes à simulação da célula a combustível de óxido sólido (SOFC). Nele são apresentadas figuras com os dados usados na simulação e tabelas com os valores do balanço de massa e energia e resultados do presente trabalho e da literatura.

Figura B.1 - Dados da corrente de entrada de Hidrogênio.

The screenshot shows the 'Specifications' tab for a 'Mixed' stream. The 'Flash Type' is set to 'Temperature' and 'Pressure'. Under 'State variables', Temperature is 25 C, Pressure is 1 bar, Vapor fraction is empty, Total flow basis is 'Volume', and Total flow rate is 0,031 l/min. The 'Reference Temperature' section has empty fields for volume flow and component concentration reference temperatures. The 'Composition' section is set to 'Mole-Frac' and shows a table with H2 at 1, O2, H2O, and N2 all at 0. The 'Total' value is 1.

Component	Value
H2	1
O2	
H2O	
N2	

Total: 1

Fonte: Arquivo pessoal do autor

Figura B.2 - Dados da corrente de entrada de Ar.

The screenshot shows the 'Specifications' tab for a 'Mixed' stream. The 'Flash Type' is set to 'Temperature' and 'Pressure'. Under 'State variables', Temperature is 25 C, Pressure is 1 bar, Vapor fraction is empty, Total flow basis is 'Mole', and Total flow rate is 0,0002 kmol/hr. The 'Reference Temperature' section has empty fields for volume flow and component concentration reference temperatures. The 'Composition' section is set to 'Mole-Frac' and shows a table with H2 at 0, O2 at 0,21, H2O at 0, and N2 at 0,79. The 'Total' value is 1.

Component	Value
H2	
O2	0,21
H2O	
N2	0,79

Total: 1

Fonte: Arquivo pessoal do autor

Figura B.3 - Detalhes da aba “Specifications” dos compressores CP1 e CP2

The screenshot shows the 'Specifications' tab for compressors. The 'Model and type' section has 'Compressor' selected and 'Type' set to 'Isentropic'. The 'Outlet specification' section has 'Discharge pressure' selected with a value of '1,8 bar'. The 'Efficiencies' section has 'Isentropic' selected.

Fonte: Arquivo pessoal do autor

Figura B.4 – Detalhes da aba “Specifications” dos trocadores de calor TC1 e TC2.

The screenshot shows the 'Specifications' tab for heat exchangers. The 'Model fidelity' section has 'Shortcut' selected. The 'Hot fluid' section has 'Shell' selected. The 'Shortcut flow direction' section has 'Countercurrent' selected. The 'Calculation mode' is set to 'Design'. The 'Exchanger specification' section has 'Cold stream outlet temperature' selected with a value of '500 C'. The 'Exchanger area' is set to 'sqm' and 'Constant UA' is set to 'cal/sec-K'. The 'Minimum temperature approach' is set to '1 C'. There are buttons for 'Size Exchanger', 'Specify Geometry', and 'Results'.

Fonte: Arquivo pessoal do autor

Figura B.5 – Detalhes da aba “Specifications” do Anodo.

Calculation option
Calculate phase equilibrium and chemical equilibrium

Operating conditions
 Pressure: 1,8 bar
☒ Temperature: 800 C
☐ Heat Duty: cal/sec

Phases
 Maximum number of fluid phases: [up/down arrows]
☒ Include vapor phase
☐ Include solid solutions (Alloys)
 Maximum number of solid solution phases: 0 [up/down arrows]
☐ Merge all CISOLID species into the first CISOLID substream

Fonte: Arquivo pessoal do autor

Figura B.6 – Detalhes da aba “Specifications” do Catodo.

Outlet stream conditions
 Outlet stream: O2-REQ
 Substream: MIXED

Component ID	Specification	Basis	Value	Units
H2	<i>Split fraction</i>			
O2	Flow	Mole	3,75e-05	kmol/hr
H2O	<i>Split fraction</i>			
N2	Flow	Mole	0	kmol/hr

Fonte: Arquivo pessoal do autor

Figura B.7 – Detalhes da aba “Specifications” do trocador de calor do Catodo.

Flash specifications

Flash Type: Temperature, Pressure

Temperature: 800 C

Temperature change: C

Degrees of superheating: C

Degrees of subcooling: C

Pressure: 1,8 bar

Duty: cal/sec

Vapor fraction:

Pressure drop correlation parameter:

☐ Always calculate pressure drop correlation parameter

Valid phases: Vapor-Liquid

Fonte: Arquivo pessoal do autor

Figura B.8 – Detalhes da aba “Specifications” do combustor

Operating conditions

Flash Type: Temperature, Pressure

Temperature: 800 C

Pressure: 1,8 bar

Duty: cal/sec

Vapor fraction:

Valid phases: Vapor-Liquid

Fonte: Arquivo pessoal do autor

Figura B.9 – Detalhes da aba “Reactions” do combustor

Reactions

Rxn No.	Specification type	Molar extent	Units	Fractional conversion	Fractional Conversion of Component	Stoichiometry
1	Frac. conversion		kmol/hr	1	H2	0,5 O2 + H2 --> H2O(MIXED)

New Edit Delete Copy Paste

☐ Reactions occur in series

Fonte: Arquivo pessoal do autor

Figura B.10 – Detalhes da aba “Specifications” do trocador de calor TC3.

The screenshot shows the 'Specifications' tab of a software interface for heat exchanger TC3. The tab is selected, and the 'Flash specifications' section is active. It contains several input fields and dropdown menus:

- Flash Type:** A dropdown menu with 'Temperature' and 'Pressure' options. 'Temperature' is currently selected.
- Temperature:** A text input field containing '120' and a unit dropdown menu set to 'C'.
- Temperature change:** A text input field and a unit dropdown menu set to 'C'.
- Degrees of superheating:** A text input field and a unit dropdown menu set to 'C'.
- Degrees of subcooling:** A text input field and a unit dropdown menu set to 'C'.
- Pressure:** A text input field containing '1,8' and a unit dropdown menu set to 'bar'.
- Duty:** A text input field and a unit dropdown menu set to 'cal/sec'.
- Vapor fraction:** A text input field.
- Pressure drop correlation parameter:** A text input field.
- Always calculate pressure drop correlation parameter:** A checkbox that is currently unchecked.
- Valid phases:** A dropdown menu with 'Vapor-Liquid' selected.

Fonte: Arquivo pessoal do autor

A seguir, as tabelas B.1, B.2 e B.3 com os dados do balanço de massa e energia da simulação da SOFC:

Tabela B.1 – Dados das correntes da simulação da SOFC parte 1.

Corrente	H2-AL	AR-AL	H2-COMP	AR-COMP
Temperatura (°C)	25	25	101,61	76,94
Pressão (bar)	1	1	1,8	1,8
Fluxo molar (kmol.h ⁻¹)	7,50.10 ⁻⁵	0,0002	7,50.10 ⁻⁵	0,0002
	Frações Molares			
H ₂ O	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
H ₂	1,0000	0,0000	1,0000	0,0000
O ₂	0,0000	0,2100	0,0000	0,2100
N ₂	0,0000	0,7900	0,0000	0,7900
Fluxo mássico (kg.h ⁻¹)	0,00015	0,00577	0,00015	0,00577

Fonte: Arquivo pessoal do autor

Tabela B.2 – Dados das correntes da simulação da SOFC parte 2.

Corrente	AN-E-CAC	CA-E-CAC	AN-S-CAC	CA-S-CAC
Temperatura (°C)	500	500	800	800
Pressão (bar)	1,8	1,8	1,8	1,8
Fluxo molar (kmol.h ⁻¹)	7,50.10 ⁻⁵	0,0002	7,50.10 ⁻⁵	0,0001625
Frações Molares				
H ₂ O	0,0000	0,0000	0,9996	0,0000
H ₂	1,0000	0,0000	0,0004	0,0000
O ₂	0,0000	0,2100	0,0000	0,0277
N ₂	0,0000	0,7900	0,0000	0,9723
Fluxo mássico (kg.h ⁻¹)	0,00015	0,00577	0,00135	0,00457

Fonte: Arquivo pessoal do autor

Tabela B.3 – Dados das correntes da simulação da SOFC parte 3.

Corrente	COMB-S	TC1-S	TC2-S	TC3-S
Temperatura (°C)	800	696,34	377,04	120
Pressão (bar)	1,8	1,8	1,8	1,8
Fluxo molar (kmol.h ⁻¹)	0,0002375	0,0002375	0,0002375	0,0002375
Frações Molares				
H ₂ O	0,3159	0,3159	0,3159	0,3159
H ₂	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
O ₂	0,0189	0,0189	0,0189	0,0189
N ₂	0,6652	0,6652	0,6652	0,6652
Fluxo mássico (kg.h ⁻¹)	0,00592	0,00592	0,00592	0,00592

Fonte: Arquivo pessoal do autor

A seguir, a tabela B.4 com os dados dos resultados do presente trabalho e da literatura. da simulação da SOFC:

Tabela B.4 – Dados dos resultados do presente trabalho e da literatura.

Presente Trabalho		Lakshmi et al. [58]		Gebregergis et al. [59]	
j(A/cm ²)	V _{celula} (V)	j(A/cm ²)	V _{celula} (V)	j(A/cm ²)	V _{celula} (V)
0	1,10	0	1,0925	0	1,107
0,25	1,02	0,25168	0,9249	0,25131	0,99907
0,5	0,95	0,50336	0,85534	0,49869	0,94698
0,75	0,91	0,74664	0,81423	0,75	0,8986
1,00	0,87	1,0067	0,77628	1,0013	0,86884
1,25	0,83	1,25	0,74783	1,2526	0,83535
1,50	0,80	1,5017	0,72253	1,5	0,80558
1,75	0,77	1,7534	0,69407	1,7513	0,77209
2,00	0,74	2,0134	0,66561	2,0026	0,7386
2,25	0,71	2,2651	0,63399	2,25	0,70512
2,50	0,68	2,5	0,60553	2,5052	0,66419
2,75	0,65	2,7517	0,56126	2,7526	0,61209
3	0,45	2,9866	0,4	2,9961	0,4

Fonte: Arquivo pessoal do autor

8.3 Apêndice C: Cálculos e dados da simulação da Planta piloto

O presente apêndice apresenta os cálculos e dados utilizados na simulação da planta piloto, baseada na Planta de Hidrogênio Verde da Eletrobrás, localizada na UHE de Itumbiara. Nele são apresentadas figuras com os dados usados na simulação e tabelas com os valores do balanço de massa e energia.

Para o cálculo da quantidade de H₂ reagido, utiliza-se a Equação 52.

$$U_f = \frac{iM_{H_2}}{2F\dot{m}_{H_2}} \quad (52)$$

Como $U_f = 0,85$ e $M_{H_2} = 2,016$, tem-se:

$$\dot{m}_{H_2} = \frac{206,4 \cdot 2,016}{0,85 \cdot 2 \cdot 96485} = 2,54 \cdot 10^{-3} \frac{g}{s}$$

Para o cálculo da quantidade de H₂ reagido para uma SOFC com 3,6 kW de geração, utiliza-se a seguinte regra de três.

$$\begin{array}{rcl} 2,16 \cdot 10^{-3} \frac{g}{s} & \text{---} & 120,45 \text{ W} \\ Z \frac{g}{s} & \text{---} & 3600 \text{ W} \\ Z = 7,58 \cdot 10^{-2} \frac{g}{s} \end{array}$$

Para o cálculo do número de mols de H₂ reagido, utiliza-se a seguinte regra de três.

$$\begin{array}{rcl} 1 \frac{mol}{s} & \text{---} & 2,016 \frac{g}{s} \\ X \frac{mol}{s} & \text{---} & 6,44 \cdot 10^{-2} \frac{g}{s} \\ X = 3,76 \cdot 10^{-2} \frac{mol}{s} \end{array}$$

Para o cálculo do potencial da célula, utiliza-se a Equação 7.

$$V_{ec} = V^o + [(r_1 + d_1) + r_2 T + d_2 p]j + slog \left[\left(t_1 + \frac{t_2}{T} + \frac{t_3}{T^2} \right) j + 1 \right] \quad (7)$$

Para isso, utiliza-se os parâmetros da Tabela A.1. Com isso, tem-se:

$$\begin{aligned} V_{célula} = & 1,23 + [(4,445153 \cdot 10^{-5} - 3,12996 \cdot 10^{-6}) + 6,88874 \cdot 10^{-9} \cdot 75 + 4,47137 \cdot 10^{-7} \cdot 7] \cdot 4200 \\ & + 0,33824 \cdot \log \left[\left(-0,01539 + \frac{2,00181}{75} + \frac{15,24178}{75} \right) \cdot 4200 + 1 \right] = 2,0202 \text{ V} \end{aligned}$$

Para o cálculo da eficiência de Faraday, utiliza-se a Equação 9.

$$\eta_F = \left(\frac{j^2}{f_{11} + f_{12}T + j^2} \right) (f_{21} + f_{22}T) \quad (9)$$

Para isso, utiliza-se os parâmetros da Tabela A.2. Com isso, têm-se:

$$\eta_F = \left(\frac{3000^2}{478645,74 - 2953,15.75 + 3000^2} \right) (1,0396 - 0,00104.75) = 0,9349$$

Para determinar a potência, utiliza-se a equação 10.

$$n_{H_2} = n_{H_2O} = \frac{P_{ec}}{V_{ec}n_{e^-}F} \eta_F \quad (10)$$

Como $n_{e^-} = 2$ e $n_{H_2} = 3,76.10^{-2}$, tem-se:

$$P = \frac{3,20.10^{-2} \cdot 2,02 \cdot 2.96485}{0,9349} = 15125,27 \text{ W}$$

Para determinar o número de células, utiliza-se da equação Equação 8.

$$P_{ec} = V_{ec} N_{ec} j A_{ec} \quad (8)$$

Com isso, têm-se:

$$N_{célula} = \frac{15125,27}{2,02 \cdot 3000 \cdot 0,24} = 11 \text{ células}$$

Para o cálculo da eficiência voltaica, utiliza-se a Equação 11:

$$\eta_v = \frac{U_{tn}}{V_{ec}} \quad (11)$$

Como $V_{th} = 1,481 \text{ V}$, tem-se:

$$\eta_{volt} = \frac{1,481}{2,0202} = 0,7332$$

A seguir, as figuras C.1 a C.15 com os dados utilizados na simulação do Projeto Piloto:

Figura C.1 – Dados da corrente de entrada.

Specifications

Flash Type: Temperature Pressure

State variables:

Temperature: 25 C

Pressure: 30 bar

Vapor fraction:

Total flow basis: Mole

Total flow rate: 0.1354 kmol/hr

Solvent:

Reference Temperature:

Volume flow reference temperature: C

Component concentration reference temperature: C

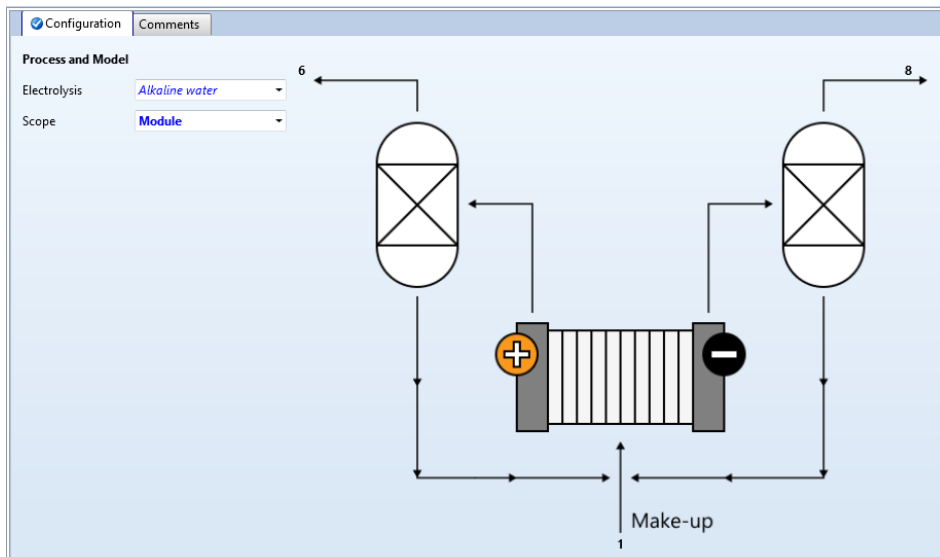
Composition: Mass-Frac

Component	Value
H2O	1
H2	
O2	
KOH	
H3O+	
K+	
OH-	

Total: 1

Fonte: Arquivo pessoal do autor.

Figura C.2 – Detalhes da aba “Setup” na parte “Configurations” do bloco de eletrólise



Fonte: Arquivo pessoal do autor

Figura C.3 - Detalhes da aba “Specifications” do bloco da eletrólise

Process and Model

Electrolysis: Alkaline water

Scope: Module

Reactions

Anode: $2OH^- = 0.5O_2 + H_2O + 2e^-$

Cathode: $2H_2O + 2e^- = H_2 + 2OH^-$

Overall: $H_2O = H_2 + 0.5O_2$

Operating Conditions

Total power: 15.13 kW

Number of stacks: 1

Number of cells per stack: 11

Total duty: cal/sec

Anode pressure: -2.5 bar

Calculation Methods

Efficiency based: Voltage efficiency

Efficiency: 0.7601

Module Specifications

Basis: Mole

Calculate makeup water: ☒

Product Composition

Component	2	3
Hydrogen	0	0.96
Oxygen	0.96	0

Product Flow

Calculate product flows from specified power or current: ☒

Specify cathode product flow: kmol/hr

Specify anode product flow: kmol/hr

Total current: amp

Anode to feed ratio: 0.5

Faraday efficiency: 0.9349

Temperature: 75 C

Cathode pressure: -2.5 bar

Fonte: Arquivo pessoal do autor

Figura C.4 – Detalhes da aba “Specifications” dos trocadores de calor TC 03 e 04.

Flash specifications

Flash Type: Temperature

Pressure

Temperature: 25 C

Temperature change: C

Degrees of superheating: C

Degrees of subcooling: C

Pressure: 27.5 bar

Duty: cal/sec

Vapor fraction

Pressure drop correlation parameter

☐ Always calculate pressure drop correlation parameter

Valid phases

Vapor-Liquid

Fonte: Arquivo pessoal do autor

Figura C.5 – Detalhes da aba “Specifications” dos separadores SEP 03 e 04.

Flash specifications

Flash Type: Temperature Pressure

Temperature: 25 C

Pressure: 27.5 bar

Duty: cal/sec

Vapor fraction:

Valid phases: Vapor-Liquid

Fonte: Arquivo pessoal do autor

Figura C.6 - Dados da corrente de entrada de Hidrogênio.

Specifications

Flash Type: Temperature Pressure

State variables:

Temperature: 25 C

Pressure: 1 bar

Total flow rate: 0.28 kg/hr

Composition:

Component	Value
H2O	0.0012
H2	0.9988
O2	
KOH	
H3O+	
K+	
OH-	
N2	

Total: 1

Fonte: Arquivo pessoal do autor

Figura C.7 – Dados da corrente de entrada de Ar.

Specifications

Flash Type: Temperature Pressure

State variables:

Temperature: 25 C

Pressure: 1 bar

Total flow rate: 0.645 kmol/hr

Composition:

Component	Value
H2O	
H2	
O2	0.21
KOH	
N2	0.79
H3O+	
K+	
OH-	

Total: 1

Fonte: Arquivo pessoal do autor

Figura C.8 – Detalhes da aba “Specifications” do trocador de calor TC05

The screenshot displays the 'Specifications' tab for heat exchanger TC05. The interface includes several sections for configuration:

- Model fidelity:** Radio buttons for Shortcut (selected), Detailed, Shell & Tube, Kettle Reboiler, Thermosyphon, Air Cooled, and Plate.
- Hot fluid:** Radio buttons for Shell and Tube.
- Shortcut flow direction:** Radio buttons for Countercurrent (selected), Cocurrent, Multipass (calculate number of shells), and Multipass (shells in series, set to 1).
- Calculation mode:** A dropdown menu set to 'Design'.
- Exchanger specification:** A section with a dropdown for 'Specification' set to 'Exchanger duty', a 'Value' of 1.196 kJ/sec, and fields for 'Exchanger area' (sqm), 'Constant UA' (cal/sec-K), and 'Minimum temperature approach' (1 C). Buttons for 'Copy calculated area to input' and 'Copy calculated UA to input' are present.
- Buttons:** 'Size Exchanger', 'Specify Geometry', and 'Results' at the bottom.

Fonte: Arquivo pessoal do autor

Figura C.9 – Detalhes da aba “Specifications” dos trocadores de calor TC06 e TC07.

The screenshot displays the 'Specifications' tab for heat exchangers TC06 and TC07. The interface includes several sections for configuration:

- Model fidelity:** Radio buttons for Shortcut (selected), Detailed, Shell & Tube, Kettle Reboiler, Thermosyphon, Air Cooled, and Plate.
- Hot fluid:** Radio buttons for Shell and Tube.
- Shortcut flow direction:** Radio buttons for Countercurrent (selected), Cocurrent, Multipass (calculate number of shells), and Multipass (shells in series, set to 1).
- Calculation mode:** A dropdown menu set to 'Design'.
- Exchanger specification:** A section with a dropdown for 'Specification' set to 'Cold stream outlet temperature', a 'Value' of 550 C, and fields for 'Exchanger area' (sqm), 'Constant UA' (cal/sec-K), and 'Minimum temperature approach' (1 C). Buttons for 'Copy calculated area to input' and 'Copy calculated UA to input' are present.
- Buttons:** 'Size Exchanger', 'Specify Geometry', and 'Results' at the bottom.

Fonte: Arquivo pessoal do autor

Figura C.10 – Detalhes da aba “Specifications” do Anodo.

Specifications Products Assign Streams Inerts Restricted Equilibrium PSD Utility Comments

Calculation option
Calculate phase equilibrium and chemical equilibrium

Operating conditions
 Pressure 1 bar
 Temperature 750 C
 Heat Duty 0 cal/sec

Phases
 Maximum number of fluid phases 1
☒ Include vapor phase
☐ Include solid solutions (Alloys)
 Maximum number of solid solution phases 0
☐ Merge all CISOLID species into the first CISOLID substream

Fonte: Arquivo pessoal do autor

Figura C.11 – Detalhes da aba “Specifications” do Catodo.

Specifications Feed Flash Outlet Flash Utility Comments

Outlet stream conditions
 Outlet stream S16
 Substream MIXED

Component ID	Specification	Basis	Value	Units
H2O	Split fraction			
H2	Split fraction			
O2	Flow	Mass	1.8414	kg/hr
KOH	Split fraction			
N2	Flow	Mole	0	kmol/hr
H3O+	Split fraction			
K+	Split fraction			
OH-	Split fraction			

Fonte: Arquivo pessoal do autor

Figura C.12 – Detalhes da aba “Specifications” do trocador de calor do Catodo.

Flash specifications

Flash Type: Temperature, Pressure

Temperature: 750 C

Temperature change: C

Degrees of superheating: C

Degrees of subcooling: C

Pressure: 1 bar

Duty: cal/sec

Vapor fraction:

Pressure drop correlation parameter:

☐ Always calculate pressure drop correlation parameter

Valid phases

Vapor-Liquid

Fonte: Arquivo pessoal do autor

Figura C.13 – Detalhes da aba “Specifications” do combustor

Operating conditions

Flash Type: Temperature, Pressure

Temperature: 850 C

Pressure: 1 bar

Duty: cal/sec

Vapor fraction:

Valid phases

Vapor-Liquid

Fonte: Arquivo pessoal do autor

Figura C.14 – Detalhes da aba “Reactions” do combustor

Rxn No.	Specification type	Molar extent	Units	Fractional conversion	Fractional Conversion of Component	Stoichiometry
1	Frac. conversion		kmol/hr	1 H2		H2 + 0.5 O2 --> H2O(MIXED)

New Edit Delete Copy Paste

☐ Reactions occur in series

Fonte: Arquivo pessoal do autor

Figura C.15 – Detalhes da aba “Specifications” do trocador de calor TC08.

The screenshot displays the 'Specifications' tab for heat exchanger TC08. The tabs at the top are: Specifications (selected), Streams, LMTD, Pressure Drop, U Methods, Film Coefficients, Utilities, and Comments.

Model fidelity:

- ☒ Shortcut
- ☐ Detailed
- ☐ Shell & Tube
- ☐ Kettle Reboiler
- ☐ Thermosyphon
- ☐ Air Cooled
- ☐ Plate

Hot fluid:

- ☐ Shell
- ☐ Tube

Shortcut flow direction:

- ☒ Countercurrent
- ☐ Cocurrent
- ☐ Multipass, calculate number of shells
- ☐ Multipass, shells in series: 1

Calculation mode: Design

Exchanger specification:

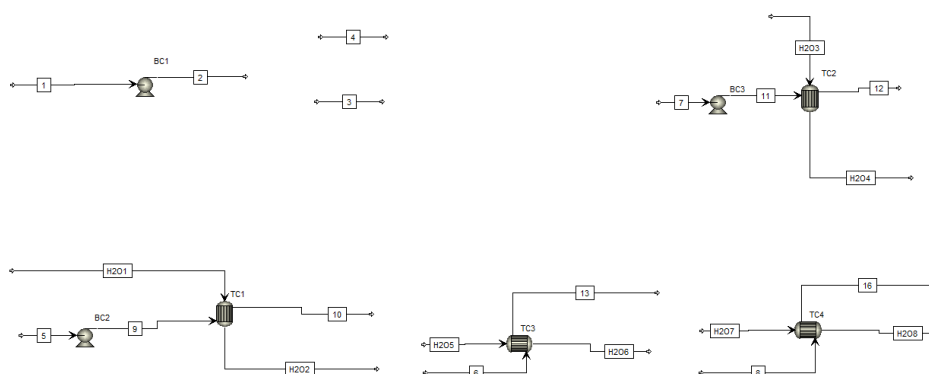
- Specification: Hot stream outlet temperature
- Value: 120 C
- Exchanger area: sqm
- Constant UA: cal/sec-K
- Minimum temperature approach: 1 C

Buttons at the bottom: Size Exchanger, Specify Geometry, Results.

Fonte: Arquivo pessoal do autor

Além disso, o *Aspen Plus* foi utilizado para fazer o balanço de massa e energia das demais correntes do PFD mostrado na Figura 13. E isso foi feito como mostra a Figura C.16 a seguir.

Figura C.16 – Fluxograma do BME das demais correntes



Fonte: Arquivo pessoal do autor

As especificações de cada um dos equipamentos e correntes utilizadas na Figura C.16 estão presentes nas figuras C.17 a C.30 a seguir.

Figura C.17 – Dados da corrente 1.

Specifications

Flash Type: **Temperature** **Pressure**

State variables:

- Temperature: 25 C
- Pressure: 1 bar
- Vapor fraction:
- Total flow basis: Mass
- Total flow rate: 2,61 kg/hr
- Solvent:

Reference Temperature:

- Volume flow reference temperature: C
- Component concentration reference temperature: C

Composition: Mole-Frac

Component	Value
H2O	1
H2	
O2	
KOH	
H3O+	
K+	
OH-	
N2	
Total	1

Fonte: Arquivo pessoal do autor

Figura C.18 – Detalhes da aba “Specifications” da bomba BC 01.

Main Flowsheet x BC1 (Pump) x +

Specifications Calculation Options Flash Options Utility Comments

Model:

☒ Pump ☐ Turbine

Pump outlet specification:

- ☒ Discharge pressure: 30 bar
- ☐ Pressure increase: bar
- ☐ Pressure ratio:
- ☐ Power required: kW
- ☐ Use performance curve to determine discharge conditions

Efficiencies:

Pump: Driver:

Fonte: Arquivo pessoal do autor

Figura C.19 – Dados da corrente 3.

Specifications

Flash Type: **Temperature** **Pressure**

State variables:

- Temperature: 75 C
- Pressure: 27.5 bar
- Vapor fraction:
- Total flow basis: Mass
- Total flow rate: 4.1 kg/hr
- Solvent:

Reference Temperature:

- Volume flow reference temperature: C
- Component concentration reference temperature: C

Composition: Mass-Frac

Component	Value
H2O	0.32
H2	
O2	0.514
N2	
KOH	0.166
H3O+	
K+	
OH-	
Total	1

Fonte: Arquivo pessoal do autor

Figura C.20 – Dados da corrente 4.

Specifications

Flash Type: **Temperature** **Pressure**

State variables

Temperature: 75 C

Pressure: 27.5 bar

Vapor fraction:

Total flow basis: Mass

Total flow rate: 2.25 kg/hr

Solvent:

Reference Temperature

Volume flow reference temperature: C

Component concentration reference temperature: C

Composition

Mass-Frac

Component	Value
H2O	0.5901
H2	0.1153
O2	
KOH	0.2946
H3O+	
K+	
OH-	
N2	
Total	1

Fonte: Arquivo pessoal do autor

Figura C.21 – Dados da corrente 5.

Specifications

Flash Type: **Temperature** **Pressure**

State variables

Temperature: 75 C

Pressure: 27.5 bar

Vapor fraction:

Total flow basis: Mass

Total flow rate: 4.48 kg/hr

Solvent:

Reference Temperature

Volume flow reference temperature: C

Component concentration reference temperature: C

Composition

Mass-Frac

Component	Value
H2O	0.848
H2	
O2	
KOH	0.152
H3O+	
K+	
OH-	
N2	
Total	1

Fonte: Arquivo pessoal do autor

Figura C.22 – Detalhes da aba “Specifications” da bomba BC 02.

Main Flowsheet x BC2 (Pump) +

Specifications

Model

☒ Pump ☐ Turbine

Pump outlet specification

☒ Discharge pressure: 30 bar

☐ Pressure increase: bar

☐ Pressure ratio:

☐ Power required: kW

☐ Use performance curve to determine discharge conditions

Efficiencies

Pump:

Driver:

Fonte: Arquivo pessoal do autor

Figura C.23 – Detalhes da aba “Specifications” do trocador de calor TC 01.

Model fidelity

- ☒ Shortcut
- ☐ Detailed
- ☐ Shell & Tube
- ☐ Kettle Reboiler
- ☐ Thermosyphon
- ☐ Air Cooled
- ☐ Plate

Hot fluid

- ☐ Shell
- ☐ Tube

Shortcut flow direction

- ☒ Countercurrent
- ☐ Cocurrent
- ☐ Multipass, calculate number of shells
- ☐ Multipass, shells in series

Calculation mode: **Design**

Exchanger specification

Specification: **Hot stream outlet temperature**

Value: **C**

Exchanger area: **sqm**

Constant UA: **cal/sec-K**

Minimum temperature approach: **C**

Fonte: Arquivo pessoal do autor

Figura C.24 – Dados da corrente 6.

Flash Type: **Temperature** **Pressure**

State variables

Temperature: **C**

Pressure: **bar**

Vapor fraction:

Total flow basis: **Mass**

Total flow rate: **kg/hr**

Solvent:

Reference Temperature

Volume flow reference temperature: **C**

Component concentration reference temperature: **C**

Composition

Component	Value
H2O	0,04
H2	
O2	0,96
KOH	
H3O+	
K+	
OH-	
N2	
Total	1

Fonte: Arquivo pessoal do autor

Figura C.25 – Detalhes da aba “Specifications” do trocador de calor TC 03.

Model fidelity

- ☒ Shortcut
- ☐ Detailed
- ☐ Shell & Tube
- ☐ Kettle Reboiler
- ☐ Thermosyphon
- ☐ Air Cooled
- ☐ Plate

Hot fluid

- ☐ Shell
- ☐ Tube

Shortcut flow direction

- ☒ Countercurrent
- ☐ Cocurrent
- ☐ Multipass, calculate number of shells
- ☐ Multipass, shells in series

Calculation mode: **Design**

Exchanger specification

Specification: **Hot stream outlet temperature**

Value: **C**

Exchanger area: **sqm**

Constant UA: **cal/sec-K**

Minimum temperature approach: **C**

Fonte: Arquivo pessoal do autor

Figura C.26 – Dados da corrente 7.

The screenshot shows the 'Specifications' tab for a stream. The 'Flash Type' is set to 'Temperature' and 'Pressure'. The 'State variables' section includes: Temperature (75 C), Pressure (27.5 bar), Vapor fraction (empty), Total flow basis (Mass), Total flow rate (1.87 kg/hr), and Solvent (empty). The 'Reference Temperature' section includes: Volume flow reference temperature (C) and Component concentration reference temperature (C). The 'Composition' section shows a table with components and their mass fractions.

Component	Value
H2O	0.65
H2	
O2	
KOH	0.35
H3O+	
K+	
OH-	
Total	1

Fonte: Arquivo pessoal do autor

Figura C.27 – Detalhes da aba “Specifications” da bomba BC 03.

The screenshot shows the 'Specifications' tab for a pump. The 'Model' section has 'Pump' selected. The 'Pump outlet specification' section includes: Discharge pressure (30 bar), Pressure increase (bar), Pressure ratio, Power required (kW), and Use performance curve to determine discharge conditions. The 'Efficiencies' section includes: Pump and Driver.

Fonte: Arquivo pessoal do autor

Figura C.28 – Detalhes da aba “Specifications” do trocador de calor TC 02.

The screenshot shows the 'Specifications' tab for a heat exchanger. The 'Model fidelity' section includes: Shortcut, Detailed, Shell & Tube, Kettle Reboiler, Thermosyphon, Air Cooled, and Plate. The 'Hot fluid' section includes: Shell and Tube. The 'Shortcut flow direction' section includes: Countercurrent, Cocurrent, Multipass, calculate number of shells, and Multipass, shells in series (1). The 'Calculation mode' is set to 'Design'. The 'Exchanger specification' section includes: Specification (Hot stream outlet temperature), Value (25 C), Exchanger area (sqm), Constant UA (cal/sec-K), and Minimum temperature approach (1 C). There are buttons for 'Size Exchanger', 'Specify Geometry', and 'Results'.

Fonte: Arquivo pessoal do autor

Figura C.29 – Dados da corrente 8.

Specifications

Flash Type: **Temperature** **Pressure**

State variables:

- Temperature: 75 C
- Pressure: 27.5 bar
- Vapor fraction:
- Total flow basis: **Mass**
- Total flow rate: 0.38 kg/hr
- Solvent:

Reference Temperature:

- Volume flow reference temperature: C
- Component concentration reference temperature: C

Composition:

Component	Value
H2O	0.04
H2	0.96
O2	
KOH	
H3O+	
K+	
OH-	
N2	
Total	1

Fonte: Arquivo pessoal do autor

Figura C.30 – Detalhes da aba “Specifications” do trocador de calor TC 04.

Specifications

Model fidelity:

- ☒ Shortcut
- ☐ Detailed
- ☐ Shell & Tube
- ☐ Kettle Reboiler
- ☐ Thermosyphon
- ☐ Air Cooled
- ☐ Plate

Hot fluid:

- ☐ Shell
- ☐ Tube

Shortcut flow direction:

- ☒ Countercurrent
- ☐ Cocurrent
- ☐ Multipass, calculate number of shells
- ☐ Multipass, shells in series: 1

Calculation mode: **Design**

Exchanger specification:

- Specification: **Hot stream outlet temperature**
- Value: 25 C
- Exchanger area: sqm
- Constant UA: cal/sec-K
- Minimum temperature approach: 1 C

Buttons: Size Exchanger, Specify Geometry, Results

Fonte: Arquivo pessoal do autor

A seguir, as tabelas C.1 a C.7 com o balanço de massa e energia da planta piloto.

Tabela C.1 – BME da Planta Piloto parte 1.

Corrente	1	2	3	4	5
Nome da Corrente	Água - Alim. AEL	Água - Saída BC 01	Oxigênio - Saída AEL	Hidrogênio - Saída AEL	Reciclo - Saída SEP 01
Fluido	Água	Água	Oxigênio + Água + Eletrólito	Hidrogênio + Água + Eletrólito	Eletrólito
Vazão mássica (kg/h)	2,61	2,61	4,10	2,25	4,48
Vazão volumétrica (L/h)	2,61	2,61	70,89	140,42	4,03
Densidade (kg/L)	0,998	0,998	0,058	0,016	1,111
Temperatura (C)	25	26,78	75	75	75
Pressão (bar)	1	30	27,5	27,5	27,5
Frações Molares					
H ₂ O	1,000	1,000	0,483	0,344	0,946
H ₂	0,000	0,000	0,000	0,600	0,000
O ₂	0,000	0,000	0,437	0,000	0,000
KOH	0,000	0,000	0,080	0,055	0,054
N ₂	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000

Fonte: Arquivo pessoal do autor.

Tabela C.2 – BME da Planta Piloto parte 2.

Corrente	6	7	8	9	10
Nome da Corrente	Oxigênio - Saída SEP 01	Reciclo - Saída SEP 02	Hidrogênio - Saída SEP 02	Reciclo - Saída BC 02	Reciclo - Saída TC 01
Fluido	Oxigênio + Água	Eletrólito	Hidrogênio + Água	Eletrólito	Eletrólito
Vazão mássica (kg/h)	2,23	1,87	0,38	4,48	4,48
Vazão volumétrica (L/h)	72,09	1,43	147,60	4,03	3,94
Densidade (kg/L)	0,031	1,307	0,003	1,111	1,137
Temperatura (C)	75	75	75	75	25
Pressão (bar)	27,5	27,5	27,5	30	30
Frações Molares					
H ₂ O	0,040	0,853	0,040	0,946	0,946
H ₂	0,000	0,000	0,960	0,000	0,000
O ₂	0,960	0,000	0,000	0,000	0,000
KOH	0,000	0,147	0,000	0,054	0,054
N ₂	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000

Fonte: Arquivo pessoal do autor.

Tabela C.3 – BME da Planta Piloto parte 3.

Corrente	11	12	13	14	15
Nome da Corrente	Reciclo - Saída BC 03	Reciclo - Saída TC 02	Oxigênio - Saída TC 03	Oxigênio - Saída SEP 03	Purga 1 (Pur O2)
Fluido	Eletrólito	Eletrólito	Oxigênio + Água	Oxigênio + Água	Água
Vazão mássica (kg/h)	1,87	1,87	2,23	2,18	0,05
Vazão volumétrica (L/h)	1,43	1,40	60,29	60,25	0,05
Densidade (kg/L)	1,307	1,337	0,037	0,036	0,997
Temperatura (C)	75	25	25	25	25
Pressão (bar)	30	30	27,5	27,5	27,5
Frações Molares					
H ₂ O	0,853	0,853	0,040	0,001	0,999
H ₂	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
O ₂	0,000	0,000	0,960	0,999	0,001
KOH	0,147	0,147	0,000	0,000	0,000
N ₂	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000

Fonte: Arquivo pessoal do autor.

Tabela C.4 – BME da Planta Piloto parte 4.

Corrente	16	17	18	19	20
Nome da Corrente	Hidrogênio - Saída TC 04	Hidrogênio - Saída SEP 04	Purga 2 (Pur H2)	Purga Final	Hidrogênio - Saída HM 01
Fluido	Hidrogênio + Água	Hidrogênio + Água	Água	Água	Hidrogênio + Água
Vazão mássica (kg/h)	0,38	0,28	0,10	0,15	0,28
Vazão volumétrica (L/h)	125,03	124,93	0,10	0,15	3412,30
Densidade (kg/L)	0,003	0,002	0,997	0,997	0,0001
Temperatura (C)	25	25	25	25	25
Pressão (bar)	27,5	27,5	27,5	27,5	1
Frações Molares					
H ₂ O	0,040	0,001	1,000	1,000	0,001
H ₂	0,960	0,999	0,000	0,000	0,999
O ₂	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
KOH	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
N ₂	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000

Fonte: Arquivo pessoal do autor.

Tabela C.5 – BME da Planta Piloto parte 5.

Corrente	21	22	23	24	25
Nome da Corrente	Água - Saída TMH 01	Água - Saída BC 04	Água - Saída TC 05	Hidrogênio - Saída TC 06	Ar - Entra TC 07
Fluido	Água	Água	Água	Hidrogênio + Água	Ar
Vazão mássica (kg/h)	36,03	36,03	36,03	0,28	18,61
Vazão volumétrica (L/h)	36,13	36,13	36,53	9392,53	15981,66
Densidade (kg/L)	0,997	0,997	0,986	0,000	0,001
Temperatura (C)	25	25	53,60	550,0	25,00
Pressão (bar)	1	1	1	1	1
Frações Molares					
H ₂ O	1,000	1,000	1,000	0,000	0,000
H ₂	0,000	0,000	0,000	1,000	0,000
O ₂	0,000	0,000	0,000	0,000	0,210
KOH	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
N ₂	0,000	0,000	0,000	0,000	0,790

Fonte: Arquivo pessoal do autor.

Tabela C.6 – BME da Planta Piloto parte 6.

Corrente	26	27	28	29	30
Nome da Corrente	Ar - Saída TC 07	Saída SOFC - AN	Saída SOFC - CAT	Gases - Saída COMB 01	Gases - Saída TC 05
Fluido	Ar	Água + Hidrogênio	Água + Ar	Água + Ar	Água + Ar
Vazão mássica (kg/h)	18,61	2,11	16,78	18,89	18,89
Vazão volumétrica (L/h)	44154,82	10979,59	50011,57	66309,63	55970,63
Densidade (kg/L)	0,0004	0,0002	0,0003	0,0003	0,0003
Temperatura (C)	550,00	750,00	750,00	850,00	675,04
Pressão (bar)	1	1	1	1	1
Frações Molares					
H ₂ O	0,000	0,896	0,000	0,181	0,181
H ₂	0,000	0,104	0,000	0,000	0,000
O ₂	0,210	0,000	0,133	0,100	0,100
KOH	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
N ₂	0,790	0,000	0,867	0,718	0,718

Fonte: Arquivo pessoal do autor.

Tabela C.7 – BME da Planta Piloto parte 7.

Corrente	31	32	33	34	35
Nome da Corrente	Gases - Saída TC 06	Gases - Saída TC 07	Gases - Saída TC 08	Água Fria - Circ Refrig	Água Quente - Circ Refrig
Fluido	Água + Ar	Água + Ar	Água + Ar	Água	Água
Vazão mássica (kg/h)	18,89	18,89	18,89	36,03	36,03
Vazão volumétrica (L/h)	51107,17	23836,80	23193,02	36,13	36,15
Densidade (kg/L)	0,0004	0,001	0,001	0,997	0,997
Temperatura (C)	592,51	130,88	120	25	27,25
Pressão (bar)	1	1	1	1	1
Frações Molares					
H ₂ O	0,181	0,181	0,181	1,000	1,000
H ₂	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
O ₂	0,100	0,100	0,100	0,000	0,000
KOH	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
N ₂	0,718	0,718	0,718	0,000	0,000

Fonte: Arquivo pessoal do autor.

8.4 Apêndice D: Cálculos e dados da simulação da Planta industrial

Este apêndice reúne os cálculos e dados utilizados para a simulação da planta industrial. Nele são apresentadas figuras com os dados usados na simulação e tabelas com os valores do balanço de massa e energia e informações da análise econômica feita.

Para calcular o fator multiplicador para levar os resultados da planta piloto para a capacidade da planta industrial, deve-se dividir a potência da planta industrial pela da planta piloto, como é mostrado abaixo.

$$Fator = \frac{3600}{3,6} = 1000$$

E para calcular o fator multiplicador referente a configuração da planta, foi feito a divisão das horas totais no ano pelas horas de sol no ano, como é mostrado abaixo.

$$Fator = \frac{8760}{2400} = 3,65$$

A seguir, a figuras D.1 a D.10 com os dados utilizados na simulação da Planta Industrial:

Figura D.1 – Dados da corrente de entrada de Hidrogênio.

The screenshot shows a software interface for specifying input stream data. It is divided into several sections:

- Specifications:**
 - Flash Type: Temperature (selected), Pressure
 - State variables:
 - Temperature: 25 C
 - Pressure: 1 bar
 - Vapor fraction: (empty)
 - Total flow basis: Mass (selected)
 - Total flow rate: 277.46 kg/hr
 - Solvent: (empty)
 - Reference Temperature:
 - Volume flow reference temperature: C
 - Component concentration reference temperature: C
- Composition:**
 - Mole-Frac (selected)
 - Table with Component and Value columns:

Component	Value
H2O	0,0012
H2	0,9988
O2	
KOH	
H3O+	
K+	
OH-	
N2	
 - Total: 1
- Component Attributes:** (collapsed)
- Particle Size Distribution:** (collapsed)

Fonte: Arquivo pessoal do autor

Figura D.2 – Dados da corrente de entrada de Ar.

Specifications

Flash Type: **Temperature** **Pressure**

State variables:

- Temperature: 25 C
- Pressure: 1 bar
- Vapor fraction:
- Total flow basis: **Mass**
- Total flow rate: 18608.5 kg/hr
- Solvent:

Reference Temperature:

- Volume flow reference temperature: C
- Component concentration reference temperature: C

Composition: **Mole-Frac**

Component	Value
H2O	
H2	
O2	0.21
KOH	
N2	0.79
H3O+	
K+	
OH-	
R245FA	
ISOBUT-01	
Total	1

Fonte: Arquivo pessoal do autor

Figura D.3 – Detalhes da aba “Specifications” do trocador de calor TC05

Specifications | Streams | LMTD | Pressure Drop | **U Methods** | Film Coefficients | Utilities | Comments

Model fidelity

- ☒ Shortcut
- ☐ Detailed
- ☐ Shell & Tube
- ☐ Kettle Reboiler
- ☐ Thermosyphon
- ☐ Air Cooled
- ☐ Plate

Hot fluid

- ☐ Shell
- ☐ Tube

Shortcut flow direction

- ☒ Countercurrent
- ☐ Cocurrent
- ☐ Multipass, calculate number of shells
- ☐ Multipass, shells in series: 1

Calculation mode: **Design**

Exchanger specification

Specification: **Exchanger duty**

Value: 1196 kJ/sec

Exchanger area: sqm [Copy calculated area to input]

Constant UA: cal/sec-K [Copy calculated UA to input]

Minimum temperature approach: 1 C

Size Exchanger | Specify Geometry | Results

Fonte: Arquivo pessoal do autor

Figura D.4 – Detalhes da aba “Specifications” dos trocadores de calor TC06 e TC07.

Specifications | Streams | LMTD | Pressure Drop | **U Methods** | Film Coefficients | Utilities | Comments

Model fidelity
☒ Shortcut
☐ Detailed
☐ Shell & Tube
☐ Kettle Reboiler
☐ Thermosyphon
☐ Air Cooled
☐ Plate

Hot fluid
☐ Shell
☐ Tube

Shortcut flow direction
☒ Countercurrent
☐ Cocurrent
☐ Multipass, calculate number of shells
☐ Multipass, shells in series

Calculation mode: **Design**

Exchanger specification
 Specification: **Cold stream outlet temperature**
 Value: **C**
 Exchanger area: **sqm**
 Constant UA: **cal/sec-K**
 Minimum temperature approach: **C**

Fonte: Arquivo pessoal do autor

Figura D.5 – Detalhes da aba “Specifications” do Anodo.

Specifications | Products | Assign Streams | Inerts | Restricted Equilibrium | PSD | Utility | Comments

Calculation option
Calculate phase equilibrium and chemical equilibrium

Operating conditions
 Pressure: **bar**
☒ Temperature: **C**
☐ Heat Duty: **cal/sec**

Phases
 Maximum number of fluid phases:
☒ Include vapor phase
☐ Include solid solutions (Alloys)
 Maximum number of solid solution phases:
☐ Merge all CISOLID species into the first CISOLID substream

Fonte: Arquivo pessoal do autor

Figura D.6 – Detalhes da aba “Specifications” do Catodo.

Specifications | Feed Flash | Outlet Flash | Utility | Comments

Outlet stream conditions
 Outlet stream: **S16**
 Substream: **MIXED**

Component ID	Specification	Basis	Value	Units
H2O	Split fraction			
H2	Split fraction			
O2	Flow	Mass	1841.4	kg/hr
KOH	Split fraction			
N2	Flow	Mole	0	kmol/hr
H3O+	Split fraction			
K+	Split fraction			
OH-	Split fraction			
R245FA	Split fraction			
ISOBU-01	Split fraction			

Fonte: Arquivo pessoal do autor

Figura D.7 – Detalhes da aba “Specifications” do trocador de calor do Catodo.

Flash specifications

Flash Type: Temperature, Pressure

Temperature: 750 C

Temperature change: C

Degrees of superheating: C

Degrees of subcooling: C

Pressure: 1 bar

Duty: cal/sec

Vapor fraction:

Pressure drop correlation parameter:

☐ Always calculate pressure drop correlation parameter

Valid phases: Vapor-Liquid

Fonte: Arquivo pessoal do autor

Figura D.8 – Detalhes da aba “Specifications” do combustor

Operating conditions

Flash Type: Temperature, Pressure

Temperature: 850 C

Pressure: 1 bar

Duty: cal/sec

Vapor fraction:

Valid phases: Vapor-Liquid

Fonte: Arquivo pessoal do autor

Figura D.9 – Detalhes da aba “Reactions” do combustor

Rxn No.	Specification type	Molar extent	Units	Fractional conversion	Fractional Conversion of Component	Stoichiometry
1	Frac. conversion		kmol/hr	1 H2		H2 + 0.5 O2 --> H2O(MIXED)

Reactions occur in series

Fonte: Arquivo pessoal do autor

Figura D.10 – Detalhes da aba “Specifications” do trocador de calor TC08.

Specifications | Streams | LMTD | Pressure Drop | **U Methods** | Film Coefficients | Utilities | Comments

Model fidelity

- ☒ Shortcut
- ☐ Detailed
- ☐ Shell & Tube
- ☐ Kettle Reboiler
- ☐ Thermosyphon
- ☐ Air Cooled
- ☐ Plate

Hot fluid

- ☐ Shell
- ☐ Tube

Shortcut flow direction

- ☒ Countercurrent
- ☐ Cocurrent
- ☐ Multipass, calculate number of shells
- ☐ Multipass, shells in series: 1

Calculation mode: **Design**

Exchanger specification

Specification: **Hot stream outlet temperature**

Value: 120 C

Exchanger area: sqm [Copy calculated area to input]

Constant UA: cal/sec-K [Copy calculated UA to input]

Minimum temperature approach: 1 C

[Size Exchanger] [Specify Geometry] [Results]

Fonte: Arquivo pessoal do autor

Além disso, o *Aspen Plus* foi utilizado para fazer o balanço de massa e energia das demais correntes do PFD mostrado na Figura 13. E isso foi feito como mostra a Figura C.16. As especificações de cada um dos equipamentos são as mesmas mostradas no apêndice C, e os das correntes utilizadas estão presentes nas Figuras D.11 a D.17 a seguir.

Figura D.11 – Dados da corrente 1.

Mixed | CI Solid | NC Solid | Flash Options | EO Options | Costing | Comments

Specifications

Flash Type: **Temperature** | **Pressure**

State variables

Temperature: 25 C

Pressure: 1 bar

Vapor fraction: []

Total flow basis: **Mass**

Total flow rate: 9511,13 kg/hr

Solvent: []

Reference Temperature

Volume flow reference temperature: C

Component concentration reference temperature: C

Composition

Mole-Frac

Component	Value
H2O	1
H2	
O2	
KOH	
H3O+	
K+	
OH-	
N2	
Total	1

Component Attributes

Particle Size Distribution

Fonte: Arquivo pessoal do autor

Figura D.12 – Dados da corrente 3.

Specifications

Flash Type: Temperature Pressure

State variables

Temperature: 75 C

Pressure: 27.5 bar

Vapor fraction:

Total flow basis: Mass

Total flow rate: 14979.2 kg/hr

Solvent:

Reference Temperature

Volume flow reference temperature: C

Component concentration reference temperature: C

Composition

Mass-Frac

Component	Value
H2O	0.32
H2	
O2	0.514
KOH	0.166
H3O+	
K+	
OH-	
N2	
Total	1

Fonte: Arquivo pessoal do autor

Figura D.13 – Dados da corrente 4.

Specifications

Flash Type: Temperature Pressure

State variables

Temperature: 75 C

Pressure: 27.5 bar

Vapor fraction:

Total flow basis: Mass

Total flow rate: 8217.32 kg/hr

Solvent:

Reference Temperature

Volume flow reference temperature: C

Component concentration reference temperature: C

Composition

Mass-Frac

Component	Value
H2O	0.5837
H2	0.1216
O2	
KOH	0.2947
H3O+	
K+	
OH-	
N2	
Total	1

Fonte: Arquivo pessoal do autor

Figura D.14 – Dados da corrente 5.

Specifications

Flash Type: Temperature Pressure

State variables

Temperature: 75 C

Pressure: 27.5 bar

Vapor fraction:

Total flow basis: Mass

Total flow rate: 16353.8 kg/hr

Solvent:

Reference Temperature

Volume flow reference temperature: C

Component concentration reference temperature: C

Composition

Mass-Frac

Component	Value
H2O	0.848
H2	
O2	
KOH	0.152
H3O+	
K+	
OH-	
N2	
Total	1

Fonte: Arquivo pessoal do autor

Figura D.15 – Dados da corrente 6.

Specifications

Flash Type: Temperature Pressure

State variables

Temperature: 75 C

Pressure: 27,5 bar

Vapor fraction:

Total flow basis: Mass

Total flow rate: 8136,47 kg/hr

Solvent:

Reference Temperature

Volume flow reference temperature: C

Component concentration reference temperature: C

Composition: Mole-Frac

Component	Value
H2O	0,04
H2	
O2	0,96
KOH	
H3O+	
K+	
OH-	
N2	
Total	1

Fonte: Arquivo pessoal do autor

Figura D.16 – Dados da corrente 7.

Specifications

Flash Type: Temperature Pressure

State variables

Temperature: 75 C

Pressure: 27,5 bar

Vapor fraction:

Total flow basis: Mass

Total flow rate: 6842,69 kg/hr

Solvent:

Reference Temperature

Volume flow reference temperature: C

Component concentration reference temperature: C

Composition: Mass-Frac

Component	Value
H2O	0,65
H2	
O2	
KOH	0,35
H3O+	
K+	
OH-	
N2	
Total	1

Fonte: Arquivo pessoal do autor

Figura D.17 – Dados da corrente 8.

Specifications

Flash Type: Temperature Pressure

State variables

Temperature: 75 C

Pressure: 27,5 bar

Vapor fraction:

Total flow basis: Mass

Total flow rate: 1374,66 kg/hr

Solvent:

Reference Temperature

Volume flow reference temperature: C

Component concentration reference temperature: C

Composition: Mole-Frac

Component	Value
H2O	0,04
H2	0,96
KOH	
H3O+	
K+	
OH-	
N2	
Total	1

Fonte: Arquivo pessoal do autor

A seguir, as tabelas D.1 a D.7 com os dados do balanço de massa e energia da planta piloto.

Tabela D.1 – BME da Planta Industrial parte 1.

Corrente	1	2	3	4	5
Nome da Corrente	Água - Alim. AEL	Água - Saída BC 01	Oxigênio - Saída AEL	Hidrogênio - Saída AEL	Reciclo - Saída SEP 01
Fluido	Água	Água	Oxigênio + Água + Eletrólito	Hidrogênio + Água + Eletrólito	Eletrólito
Vazão mássica (kg/h)	9511,13	9511,13	14979,16	8217,32	16353,83
Vazão volumétrica (m³/h)	9,53	9,53	258,76	512,53	14,72
Densidade (kg/L)	0,997	0,998	0,058	0,016	1,111
Temperatura (C)	25	26,78	75	75	75
Pressão (bar)	1	30	27,5	27,5	27,5
Frações Molares					
H ₂ O	1,000	1,000	0,483	0,344	0,946
H ₂	0,000	0,000	0,000	0,600	0,000
O ₂	0,000	0,000	0,437	0,000	0,000
KOH	0,000	0,000	0,080	0,055	0,054
N ₂	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000

Fonte: Arquivo pessoal do autor.

Tabela D.2 – BME da Planta Industrial parte 2.

Corrente	6	7	8	9	10
Nome da Corrente	Oxigênio - Saída SEP 01	Reciclo - Saída SEP 02	Hidrogênio - Saída SEP 02	Reciclo - Saída BC 02	Reciclo - Saída TC 01
Fluido	Oxigênio + Água	Eletrólito	Hidrogênio + Água	Eletrólito	Eletrólito
Vazão mássica (kg/h)	8136,47	6842,69	1374,66	16353,83	16353,83
Vazão volumétrica (m³/h)	263,13	5,24	538,75	14,72	14,39
Densidade (kg/L)	0,031	1,307	0,003	1,111	1,137
Temperatura (C)	75	75	75	75	25
Pressão (bar)	27,5	27,5	27,5	30	30
Frações Molares					
H ₂ O	0,040	0,853	0,040	0,946	0,946
H ₂	0,000	0,000	0,960	0,000	0,000
O ₂	0,960	0,000	0,000	0,000	0,000
KOH	0,000	0,147	0,000	0,054	0,054
N ₂	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000

Fonte: Arquivo pessoal do autor.

Tabela D.3 – BME da Planta Industrial parte 3.

Corrente	11	12	13	14	15
Nome da Corrente	Reciclo - Saída BC 03	Reciclo - Saída TC 02	Oxigênio - Saída TC 03	Oxigênio - Saída SEP 03	Purga 1 (Pur O2)
Fluido	Eletrólito	Eletrólito	Oxigênio + Água	Oxigênio + Água	Água
Vazão mássica (kg/h)	6842,69	6842,69	8136,47	7956,20	180,27
Vazão volumétrica (m³/h)	5,24	5,12	220,08	219,89	0,18
Densidade (kg/L)	1,307	1,337	0,037	0,036	0,997
Temperatura (C)	75	25	25	25	25
Pressão (bar)	30	30	27,5	27,5	27,5
Frações Molares					
H ₂ O	0,853	0,853	0,040	0,001	0,999
H ₂	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
O ₂	0,000	0,000	0,960	0,999	0,001
KOH	0,147	0,147	0,000	0,000	0,000
N ₂	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000

Fonte: Arquivo pessoal do autor.

Tabela D.4 – BME da Planta Industrial parte 4.

Corrente	16	17	18	19	20
Nome da Corrente	Hidrogênio - Saída TC 04	Hidrogênio - Saída SEP 04	Purga 2 (Pur H2)	Purga Final	Hidrogênio - Saída HM 01
Fluido	Hidrogênio + Água	Hidrogênio + Água	Água	Água	Hidrogênio + Água
Vazão mássica (kg/h)	1374,66	1012,73	361,93	542,21	277,46
Vazão volumétrica (m³/h)	456,37	456,01	0,36	0,54	3412,30
Densidade (kg/L)	0,003	0,002	0,997	0,997	0,0001
Temperatura (C)	25	25	25	25	25
Pressão (bar)	27,5	27,5	27,5	27,5	1
Frações Molares					
H ₂ O	0,040	0,001	1,000	1,000	0,001
H ₂	0,960	0,999	0,000	0,000	0,999
O ₂	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
KOH	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
N ₂	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000

Fonte: Arquivo pessoal do autor.

Tabela D.5 – BME da Planta Industrial parte 5.

Corrente	21	22	23	24	25
Nome da Corrente	Água - Saída TMH 01	Água - Saída BC 04	Água - Saída TC 05	Hidrogênio - Saída TC 06	Ar - Entra TC 07
Fluido	Água	Água	Água	Hidrogênio + Água	Ar
Vazão mássica (kg/h)	36030,56	36030,56	36030,56	277,46	18608,51
Vazão volumétrica (m³/h)	36,13	36,13	36,53	7783,46	15981,66
Densidade (kg/L)	0,997	0,997	0,986	0,00004	0,001
Temperatura (C)	25	25	53,60	550,0	25,00
Pressão (bar)	1	1	1	1	1
Frações Molares					
H ₂ O	1,000	1,000	1,000	0,000	0,000
H ₂	0,000	0,000	0,000	1,000	0,000
O ₂	0,000	0,000	0,000	0,000	0,210
KOH	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
N ₂	0,000	0,000	0,000	0,000	0,790

Fonte: Arquivo pessoal do autor.

Tabela D.6 – BME da Planta Industrial parte 6.

Corrente	26	27	28	29	30
Nome da Corrente	Ar - Saída TC 07	Saída SOFC - AN	Saída SOFC - CAT	Gases - Saída COMB 01	Gases - Saída TC 05
Fluido	Ar	Água + Hidrogênio	Água + Ar	Água + Ar	Água + Ar
Vazão mássica (kg/h)	18608,51	2110,13	16775,84	18885,97	18885,97
Vazão volumétrica (m³/h)	36966,82	9668,54	41114,76	55746,65	48254,37
Densidade (kg/L)	0,0004	0,0002	0,0003	0,0003	0,0003
Temperatura (C)	550,00	750,00	750,00	850,00	674,88
Pressão (bar)	1	1	1	1	1
Frações Molares					
H ₂ O	0,000	0,896	0,000	0,181	0,181
H ₂	0,000	0,104	0,000	0,000	0,000
O ₂	0,210	0,000	0,133	0,100	0,100
KOH	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
N ₂	0,790	0,000	0,867	0,718	0,718

Fonte: Arquivo pessoal do autor.

Tabela D.7 – BME da Planta Industrial parte 7.

Corrente	31	32	33	34	35
Nome da Corrente	Gases - Saída TC 06	Gases - Saída TC 07	Gases - Saída TC 08	Água Fria - Circ Refrig	Água Quente - Circ Refrig
Fluido	Água + Ar	Água + Ar	Água + Ar	Água	Água
Vazão mássica (kg/h)	18885,97	18885,97	18885,97	36030,56	36030,56
Vazão volumétrica (m³/h)	43985,39	23836,80	19497,73	36,13	36,18
Densidade (kg/L)	0,0004	0,001	0,001	0,997	0,997
Temperatura (C)	592,51	130,88	120	25	27,25
Pressão (bar)	1	1	1	1	1
Frações Molares					
H ₂ O	0,181	0,181	0,181	1,000	1,000
H ₂	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
O ₂	0,100	0,100	0,100	0,000	0,000
KOH	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
N ₂	0,718	0,718	0,718	0,000	0,000

Fonte: Arquivo pessoal do autor.

Para determinar o CAPEX da Planta Industrial, utiliza-se a Equação 57.

$$CAPEX = ISBL[(1 + \%_{EC} + \%_{EDC} + \%_{CG})(1 + \%_{OSBL})] \quad (57)$$

Com isso, têm-se:

$$CAPEX = 179110297,98 \cdot [(1 + 0,1 + 0,1 + 0,1) \cdot (1 + 0,3)] = 302696403,59$$

Para determinar o Custo Fixo da Planta Industrial, utiliza-se a Equação 64.

$$C_F = MO + ISBL[\%_{Ma} + \%_{Imp}] + Out \quad (64)$$

Com isso, têm-se:

$$C_F = 574600 + 179110297,98[0,03 + 0,01] + 0$$

$$C_F = 7739011,92 \text{ R\$/ano}$$

Para determinar o Custo Variável da Planta Industrial, utiliza-se a Equação 62.

$$C_V = P_T C_U \quad (62)$$

Com isso, têm-se:

$$C_V = 0,9 \frac{\text{R\$}}{\text{kWh}} 223315,8 \frac{\text{kWh}}{\text{ano}} + 10 \frac{\text{R\$}}{\text{m}^3} 53496,7 \frac{\text{m}^3}{\text{ano}} + 3,65 \frac{\text{R\$}}{\text{kg}} 4789,9 \frac{\text{kg}}{\text{ano}}$$

$$C_V = 753424,96 \text{ R\$/ano}$$

Para determinar o OPEX da Planta Industrial, utiliza-se a Equação 61.

$$OPEX = C_F + C_V \quad (61)$$

Com isso, têm-se:

$$OPEX = 7739011,92 + 753424,96 = 8492436,88 \text{ R\$/ano}$$

Para determinar o Rendimento da Planta Industrial, utiliza-se a Equação 66.

$$R_T = P_U V_T \quad (66)$$

Com isso, têm-se:

$$R_T = 0,75 \frac{\text{R\$}}{\text{kWh}} 31104000 \frac{\text{kWh}}{\text{ano}} = 23.328.000,0 \text{ R\$/ano}$$

A seguir, Tabela D.8 com os dados das receitas para todos os anos analisados.

Tabela D.8 – Dados do rendimento para todos os anos analisados.

Ano	Receita (R\$/ano)	Ano	Receita (R\$/ano)
1	23328000,00	11	45889706,86
2	24960960,00	12	49101986,34
3	26708227,20	13	52539125,39
4	28577803,10	14	56216864,16
5	30578249,32	15	60152044,66
6	32718726,77	16	64362687,78
7	35009037,65	17	68868075,93
8	37459670,28	18	73688841,24
9	40081847,20	19	78847060,13
10	42887576,51	20	84366354,34

Fonte: Arquivo pessoal do autor

A seguir, Tabela D.9 com os dados do DRE para todos os anos analisados.

Tabela D.9 – Dados do DRE para todos os anos analisados.

Ano	OPEX (R\$/ano)	Depreciação (R\$/ano)	Lucro Bruto (R\$/ano)	Lucro Liq (R\$/ano)
1	8492436,88	17911029,80	-3075466,68	-3075466,68
2	9086907,46	17911029,80	-2036977,26	-2036977,26
3	9722990,99	17911029,80	-925793,59	-925793,59
4	10403600,36	17911029,80	263172,95	173694,15
5	11131852,38	17911029,80	1535367,14	1013342,31
6	11911082,05	17911029,80	2896614,93	1911765,85
7	12744857,79	17911029,80	4353150,06	2873079,04
8	13636997,84	17911029,80	5911642,65	3901684,15
9	14591587,69	17911029,80	7579229,72	5002291,62
10	15612998,82	17911029,80	9363547,89	6179941,60
11	16705908,74	0	29183798,12	19261306,76
12	17875322,35	0	31226663,99	20609598,23
13	19126594,92	0	33412530,47	22052270,11
14	20465456,56	0	35751407,60	23595929,02
15	21898038,52	0	38254006,14	25247644,05
16	23430901,22	0	40931786,56	27014979,13
17	25071064,30	0	43797011,62	28906027,67
18	26826038,80	0	46862802,44	30929449,61
19	28703861,52	0	50143198,61	33094511,08
20	30713131,83	0	53653222,51	35411126,86

Fonte: Arquivo pessoal do autor

A seguir, Tabela D.10 com os dados do Fluxo de caixa para todos os anos analisados.

Tabela D.10 – Dados do fluxo de caixa para todos os anos analisados.

Ano	Fluxo de Caixa Livre	Fluxo de Caixa Livre Descontado	Fluxo de Caixa Livre Acumulado
0	-302696403,59	-302696403,59	-302696403,59
1	14835563,12	13246038,50	-289450365,09
2	15874052,54	14173261,19	-275277103,90
3	16985236,21	15165389,48	-260111714,42
4	18084723,94	16147074,95	-243964639,47
5	18924372,11	16896760,81	-227067878,66
6	19822795,65	17698924,69	-209368953,97
7	20784108,84	18557240,03	-190811713,94
8	21812713,95	19475637,45	-171336076,48
9	22913321,41	20458322,69	-150877753,79
10	24090971,40	21509795,90	-129367957,90
11	19261306,76	17197595,32	-112170362,58
12	20609598,23	18401426,99	-93768935,58
13	22052270,11	19689526,88	-74079408,70
14	23595929,02	21067793,77	-53011614,93
15	25247644,05	22542539,33	-30469075,60
16	27014979,13	24120517,08	-6348558,52
17	28906027,67	25808953,28	19460394,76
18	30929449,61	27615580,01	47075974,77
19	33094511,08	29548670,61	76624645,38
20	35411126,86	31617077,55	108241722,93

Fonte: Arquivo pessoal do autor.