



Análise Econômica e de Impacto Ambiental de Processos de Planta Simulada de Biodiesel via Catálise Heterogênea

Juliana Rambaldi Oliveira
Paulo Victor da Silva Carvalho

Projeto Final de Curso em Engenharia Química

Orientadores

Prof. Raquel Massad Cavalcante, D.Sc

Prof. André Ferreira Young, D.Sc

Março de 2023

Análise Econômica e de Impacto Ambiental de Processos de Planta Simulada de Biodiesel via Catálise Heterogênea

Juliana Rambaldi Oliveira

Paulo Victor da Silva Carvalho

Projeto de Final de Curso submetido ao Corpo Docente da Escola de Química, como parte dos requisitos necessários à obtenção do grau de Engenheiro Químico.

Aprovado por:

Fábio Almeida Oroski, D.Sc.

George Victor Brigagão, D.Sc.

Orientado por:

Raquel Massad Cavalcante, D.Sc.

André Ferreira Young, D.Sc.

Rio de Janeiro, RJ - Brasil

Março de 2023

Dedico este trabalho aos meus pais, que sempre torceram por mim e me incentivaram por toda a minha trajetória, sendo peças fundamentais para minha formação.

Juliana Rambaldi Oliveira

Dedico este trabalho à minha mãe, que nunca duvidou de mim, mesmo quando eu duvidava. E dedico este trabalho, especialmente, à minha avó que partiu ano passado antes que eu conseguisse me formar, mas que tenho certeza de que, onde quer que esteja, está me observando e me protegendo.

Paulo Victor da Silva Carvalho

AGRADECIMENTOS

Primeiramente queria agradecer aos meus pais, Rosi e Sergio, por serem os grandes responsáveis por quem eu sou e terem me propiciado toda a minha formação. E acima de tudo, por serem os meus maiores apoiadores e amigos durante toda a minha vida.

Agradeço também, especialmente, às minhas irmãs Mari e Sofia por serem minhas melhores amigas e me ensinarem a cada dia a ser uma pessoa melhor. Obrigada por acreditarem em mim, mesmo nos meus momentos de maior insegurança. Sem vocês não estaria aqui, sem a menor dúvida.

Sou muito grata à UFRJ por todos os aprendizados, por ter me ensinado a ser uma pessoa resiliente e batalhadora. E principalmente por todos os amigos que ela me trouxe, em especial a Juliana, a Natália e a Raquel, que desde o primeiro dia na EQ estiveram comigo, estudando, rindo e chorando, me apoiando sempre que precisei. Vocês foram essenciais para que eu tenha conseguido concluir essa etapa da minha vida.

Gostaria de agradecer ao Paulo, minha dupla durante os últimos meses, pela confiança, parceria e apoio no desenvolvimento deste trabalho. Obrigada por estar comigo em cada reunião de domingo, noites viradas e crises de insegurança.

E por fim, obrigado à Raquel Massad e ao André Young, meus orientadores, pela atenção, confiança e dedicação durante todo o tempo de elaboração deste trabalho.

Juliana Rambaldi Oliveira

Agradeço primeiro à minha mãe, que não só é a maior responsável pelo que me tornei, mas que sempre foi e será minha melhor amiga e maior torcedora. Sem seu suporte eu não estaria aqui hoje.

Agradeço também a todo o resto da minha família por todo o apoio, amor e paciência. Sobretudo, obrigado a minha tia Rosemary, minha segunda mãe, meu tio Alexandre e minha tia Luciana. E serei eternamente grato aos meus tios Paraguassu e Maria José, que não somente me apoiaram e me incentivaram, como por muitos anos possibilitaram que eu tivesse acesso à educação de qualidade que me trouxe até aqui. Sem qualquer um de vocês, nenhum dos objetivos que alcancei até hoje teriam sido possíveis.

Sou muito grato também a todos os meus amigos por estarem ao meu lado, por me aguentarem nos momentos de drama, por me fazerem rir e por me ouvirem quando precisei.

Obrigado à Ju, minha “dupla de milhões” como todos chamam. Por toda a ajuda, parceria e paciência nesses últimos meses.

Obrigado aos meus orientadores, Raquel Massad e André Young, pela paciência, disponibilidade, cuidado e atenção durante todo o tempo de elaboração deste trabalho. E por fim, obrigado à Escola de Química e à UFRJ por todos esses anos e ensinamentos.

Paulo Victor da Silva Carvalho

Resumo do Projeto de Final de Curso apresentado à Escola de Química como parte dos requisitos necessários para obtenção do grau de Engenheiro Químico.

ANÁLISE ECONÔMICA E DE IMPACTO AMBIENTAL DE PROCESSOS DE PLANTA SIMULADA DE BIODIESEL VIA CATÁLISE HETEROGÊNEA

Juliana Rambaldi Oliveira
Paulo Victor da Silva Carvalho

Março, 2023

Orientador: Prof.^a. Raquel Massad Cavalcante, D.Sc
Coorientador: Prof. André Ferreira Young, D.Sc

Resumo

A maior parte da energia consumida no mundo, atualmente, é essencialmente fóssil. Estas fontes, contudo, apresentam algumas questões importantes relacionadas não somente ao fato de serem limitadas, mas também pelos impactos ambientais causados por elas. Debates e novas tecnologias têm surgido nas últimas décadas, buscando alternativas mais sustentáveis e menos poluentes. Dentro desse contexto, dentre os combustíveis alternativos estudados, tem-se o biodiesel como uma das oportunidades. Juntamente com o etanol, o biodiesel é um dos combustíveis alternativos mais utilizados mundialmente. Contudo, dadas as suas características de produção, que impactam sua viabilidade e competitividade, sua utilização ainda enfrenta algumas barreiras. O presente trabalho busca avaliar, sob o viés econômico, se a produção de biodiesel via catálise heterogênea (uma tecnologia de produção alternativa à forma tradicional de produção via catálise homogênea alcalina) é economicamente viável e quais fatores têm maior influência no desempenho econômico do processo. Para tal, quatro catalisadores diferentes foram selecionados (MgO, SrO, PbO e Pb₃O₄). Além da análise econômica, o estudo buscou realizar uma análise de sustentabilidade utilizando-se uma abordagem multicritérios, via metodologia específica, a fim de se comparar os processos. Para esta análise, além das condições simuladas no presente estudo, foram considerados outros quatro casos de estudos anteriores. Concluiu-se que o processo ainda não é lucrativo de maneira independente (sem incentivos governamentais). Ademais, sob o viés econômico e de impacto ambiental, o CaO foi o catalisador mais vantajoso. Foi avaliado, também que, dentre todos os casos (simulados e de outros estudos), o processo que utiliza fontes alternativas para a produção de CaO é o mais ambientalmente favorável. Por fim, restringindo-se aos quatro novos catalisadores avaliados no presente trabalho, o SrO foi o catalisador a apresentar melhor desempenho ambiental.

SUMÁRIO

1. Introdução	1
1.1 Contextualização	1
1.2 Objetivo Geral	3
1.2.1 Objetivos Específicos	3
2. Revisão Bibliográfica	4
2.1 Matérias-primas	5
2.2 Condições Operacionais	6
2.3 Catálise homogênea	7
2.4 Catálise heterogênea	8
2.4.1 Óxidos de metais alcalino-terrosos	9
2.4.2 Óxidos de Chumbo	16
3. Preparação do Ambiente de Simulação	20
3.1 Definição dos Componentes	20
3.2 Determinação dos Pacotes Termodinâmicos	21
3.3 Determinação de Condições de Entrada e Saída	23
3.4 Modelagem da Reação	23
4. Simulações	24
4.1 Condições Operacionais das Simulações	24
4.2 Simulação do Caso 1	30
4.2.1 Correntes de Entrada e 1ª Transesterificação	30
4.2.2 Resfriamento da Corrente de Produto	31
4.2.3 Recuperação de Catalisador e Metanol	31
4.2.4 2ª Transesterificação	32
4.2.5 Lavagem	32
4.2.6 Purificação dos Produtos	33
4.3 Simulação dos Casos 2, 3 e 4	33
5. Dimensionamento dos equipamentos	35
5.1 Reatores	35
5.2 Colunas de destilação	37
5.3 Vasos de Lavagem	39
5.4 Trocadores de Calor	39
6. Análise Econômica	41
6.1 Investimento	43
6.1.1 Custo das Bombas	44
6.1.2 Custo dos Motores Elétricos	45
6.1.3 Custo dos Trocadores de Calor	46
6.1.4 Custo das Colunas de Destilação	47
6.1.5 Custo dos Reatores	50
6.1.6 Custo do Sistema de Lavagem	50
6.1.7 Custo do Calcinador	50
6.1.8 Custos de Produção	51
7. Análise de Sustentabilidade	53
7.1 Metodologia	53
7.1.1 Atribuição de notas para os GDC's	55
7.1.2 Indicadores quantitativos	55
7.1.3 Cálculo do índice de criticidade dos critérios de <i>design</i> verde (GDCl)	58
7.1.4 Cálculo do fator de criticidade e grau de sustentabilidade	58
8. Resultados e Discussão	60
8.1 Avaliação Econômica	60
8.2 Avaliação de Sustentabilidade	66

9. Conclusão e Sugestões.....	70
10. Referências Bibliográficas.....	72
11. Apêndices	82
Apêndice I – Descrição das Correntes de Processo	82
Apêndice II – Especificação e Custo dos Equipamentos.....	102
Apêndice III – Resultados de Performance dos Processos	109
Apêndice IV – Fluxos de Caixa	110

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 2.1: Reação geral de transesterificação	4
Figura 2.2: Fluxograma do processo de transesterificação.....	5
Figura 4.1: Fluxograma da simulação de produção de biodiesel via catálise heterogênea com MgO (Caso 1)	25
Figura 4.2: Fluxograma da simulação de produção de biodiesel via catálise heterogênea com SrO (Caso 2)	26
Figura 4.3 Fluxograma da simulação de produção de biodiesel via catálise heterogênea com PbO (Caso 3).....	27
Figura 4.4: Fluxograma da simulação de produção de biodiesel via catálise heterogênea com Pb3O4 (Caso 4).....	28
Figura 8.1: Contribuição dos custos (por tipo) para o custo total de produção.	61
Figura 8.2: Contribuição relativa dos equipamentos no investimento fixo.	63
Figura 8.3: Mapa de comprometimento com os critérios de Design Verde.	66
Figura 8.4: Indicadores quantitativos calculadas para cada caso em estudo.....	68

ÍNDICE DE TABELAS

Tabela 2.1: Comparação da catálise homogênea em meio básico e meio ácido.	8
Tabela 2.2: Resumo dos estudos de transesterificação com óxidos de metais alcalinos.	17
Tabela 3.1: Dados físico-químicos dos catalisadores.	21
Tabela 3.2: Coeficientes binários obtidos do simulador (HYSYS)	22
Tabela 3.3: Coeficientes binários obtidos via cálculos	22
Tabela 4.1: Descrição dos processos simulados.....	24
Tabela 4.2: Condições operacionais das simulações.....	29
Tabela 6.1: Preços dos componentes utilizados nos processos.....	42
Tabela 6.2: Diâmetro mínimo para a parede de vasos verticais.....	48
Tabela 7.1: Descrição dos processos simulados.....	52
Tabela 7.2: Critérios de <i>design</i> verde.....	53
Tabela 7.3: Indicadores Quantitativos.....	54
Tabela 8.1: Resultados econômicos para cada condição (em US\$ x 10 ⁻⁶).	59
Tabela 8.2: Preço de equilíbrio do do óleo de soja.....	63
Tabela 8.3: Preço de equilíbrio do biodiesel.....	64
Tabela 8.4: Métricas individuais de performance.....	67
Tabela I.1: Correntes de processo do caso 1.....	81
Tabela I.2: Correntes de processo do caso 2.....	86
Tabela I.3: Correntes de processo do caso 3.....	90
Tabela I.4: Correntes de processo do caso 4.....	95
Tabela II.1: Equipamentos do caso 1.....	101
Tabela II.2: Equipamentos do caso 2.....	102
Tabela II.3: Equipamentos do caso 3.....	103
Tabela II.4: Equipamentos do caso 4.....	105
Tabela III.1: Critérios de performance quantitativos para os processos analisados.....	108
Tabela III.2: Critérios de performance quantitativos normalizados para os processos analisados.....	108
Tabela IV.1: Fluxo de Caixa do caso R1.....	110
Tabela IV.2: Fluxo de Caixa do caso R2.....	111
Tabela IV.3: Fluxo de Caixa do caso R3.....	112
Tabela IV.4: Fluxo de Caixa do caso R4.....	113
Tabela IV.5: Fluxo de Caixa do caso 1.....	114
Tabela IV.6: Fluxo de Caixa do caso 2.....	115
Tabela IV.7: Fluxo de Caixa do caso 3.....	116
Tabela IV.8: Fluxo de Caixa do caso 4.....	117

1. Introdução

1.1 Contextualização

A existência humana é dependente essencialmente do consumo de energia, para que os homens possam realizar todas as suas atividades. Com esse fim, desde a Segunda Guerra Mundial, tem-se o petróleo como a principal matéria-prima para a geração de energia. No entanto, essa fonte possui algumas limitações, principalmente no âmbito ambiental, não só por ser finita, logo não renovável, como também pela sua elevada taxa de emissão de poluentes para a atmosfera (EPE, 2017).

A maior parte da energia consumida no mundo é a fóssil, com o petróleo, gás natural e carvão como as principais fontes de energia, correspondendo a mais de 80% do consumo mundial (BP, 2022).

Sendo assim, a busca por fontes de energia renováveis alternativas cresceu exponencialmente no início do século XXI, em especial os estudos relativos ao biodiesel. O biodiesel consiste em ésteres alquílicos de ácidos graxos obtidos através de diferentes óleos e gorduras vegetais e animais, e é utilizado como combustível alternativo ao diesel de petróleo, com desempenho muito semelhante, não exigindo modificações nos motores quando misturado até determinadas proporções (DABDOUB et al, 2009). O desenvolvimento do biodiesel apresenta diversos benefícios sociais, econômicos e ambientais.

Socialmente, as grandes áreas de terras cultiváveis podem gerar uma ampliação do número de empregos no setor primário/campo. Segundo estudo realizado pelo CEPEA-USP (Centro de Estudos Avançados em Economia Aplicada da Universidade de São Paulo) em parceria com a Associação Brasileira das Indústrias de Óleos Vegetais (ABIOVE), em 2021 havia cerca de 20 mil empregos diretos na produção de biodiesel no país. O mesmo estudo indica que os investimentos na produção de biodiesel oferecem oportunidades de geração de empregos diretos e indiretos no Brasil (CEPEA; ABIOVE, 2022). Além disso, por utilizar como matéria-prima, essencialmente, óleos vegetais, o mercado de biodiesel contribui para o desenvolvimento do setor agrário.

Sob o viés econômico, a utilização de biodiesel reduz a dependência da oscilação do preço do petróleo e escassez deste, contribuindo para uma matriz energética mais robusta. Além disso, contribui na redução da quantidade de diesel fóssil importado (CNA, 2022).

Ambientalmente, o uso de biodiesel contribui para a redução de emissões líquidas de gases de efeito estufa à medida que o gás carbônico emitido pelo diesel é reincorporado pela biomassa que compõe a matéria-prima do biocombustível. Ou seja, as emissões ocorrem em um ciclo fechado de carbono, que é continuamente emitido e reutilizado, diferente do que ocorre na queima de combustíveis fósseis. Em 2021, o biodiesel contribuiu para evitar 19 milhões de toneladas de gás carbônico equivalente no Brasil (EPE, 2022a).

Em suma, pode-se inferir que o biodiesel se apresenta como uma alternativa mais sustentável frente a combustíveis fósseis e como uma forte oportunidade no processo de transição da matriz energética mundial.

Contudo, uma das principais barreiras do mercado de biodiesel quando comparado a alternativas fósseis está associada aos aspectos econômicos relacionados aos custos produtivos. Segundo Gebremariam et al. (2018), este é o principal fator que dificulta a expansão do mercado deste biocombustível. Desta forma, é necessário avaliar oportunidades com foco na redução destes custos, que podem estar atrelados à melhoria das tecnologias de produção, ou à redução de custos capitais e com matéria-prima. Conclui-se, portanto, que a identificação de tais oportunidades necessita, invariavelmente, de análises econômicas a fim de atestar o efeito das variações destes diferentes fatores nos custos.

Para além das discussões acerca da viabilidade econômica das fontes renováveis de energia, é necessário levar-se em consideração seus aspectos socioambientais. Uma vez que entre as alternativas renováveis algumas serão mais sustentáveis do que outras, comparações acerca destes aspectos também são importantes. Como citado por Azadi et al. (2012), “Enquanto biocombustíveis têm sido considerados como uma boa alternativa para combustíveis fósseis, ainda restam muitos debates sobre seus impactos em humanos e no meio ambiente (tradução nossa)”¹.

Portanto, juntamente com as análises econômicas, avaliações de impacto ambiental contribuem para uma avaliação mais completa no que tange o mercado de biocombustíveis.

Atualmente, a produção de biodiesel, no mundo, ocorre, tradicionalmente, utilizando-

¹ Azadi et al. (2012): “While biofuels have currently been regarded as a good alternative for fossil fuels, there remain many debates on their impacts on human and environment.”

se processos via catálise homogênea alcalina (BASHIR et al., 2022). Entretanto, têm sido propostas alternativas a esta forma de produção, utilizando-se rotas de catálise heterogênea a fim de reduzir custos e a geração de efluentes, além de facilitar a obtenção e purificação do biodiesel (TAVIZÓN-POZOS et al., 2021).

1.2 Objetivo Geral

A partir deste contexto, o presente trabalho busca realizar uma análise econômica do processo de produção de biodiesel via catálise heterogênea considerando cinco diferentes catalisadores. Para isso, o trabalho de Galvão (2019) foi adotado como principal referência, com suporte de simulações em Aspen HYSYS[®].

Adicionalmente, o estudo realiza uma avaliação multicritério de sustentabilidade dos processos para possibilitar uma comparação mais completa entre eles. Para tal, a metodologia apresentada no trabalho de Araújo et al. (2015) foi adaptada para utilização no presente trabalho.

1.2.1 Objetivos Específicos

Dentre os objetivos específicos, têm-se:

- Simular, por meio do *software* Aspen HYSYS[®], quatro fluxogramas de produção de biodiesel via catálise heterogênea, variando-se os catalisadores e condições operacionais necessárias;
- Estimar e comparar os custos obtidos nas análises econômicas de cada fluxograma a partir das simulações realizadas, identificando, se possível, a melhor alternativa;
- Determinar o preço de equilíbrio do biodiesel para cada fluxograma;
- Avaliar a sensibilidade dos custos de produção em relação a alguns fatores principais do processo;
- Estimar e comparar os resultados obtidos na análise de sustentabilidade de cada fluxograma a partir das simulações realizadas, identificando, se possível, a melhor alternativa.

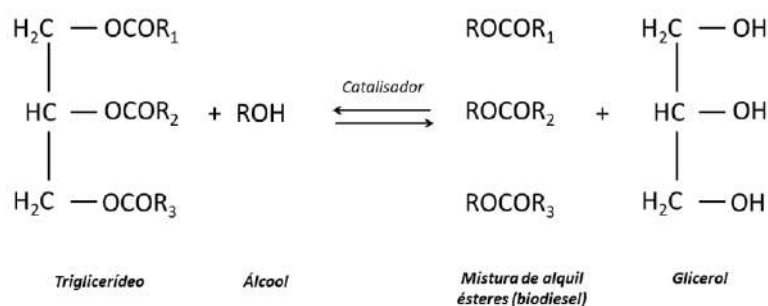
2. Revisão Bibliográfica

A utilização de óleos e gorduras como combustível pode ser feita de diferentes formas. As principais tecnologias são: aplicação direta combinado ao diesel fóssil (*blending*), microemulsão, pirólise e transesterificação.

Todos os métodos apresentam vantagens e desvantagens a depender dos parâmetros analisados: econômicos, ambientais, técnicos etc. No entanto, a transesterificação se apresenta como a rota tecnológica mais utilizada (KUSS et al., 2015 e BASHIR et al., 2022) e é o objeto de estudo do presente trabalho.

A geração de biodiesel via transesterificação é o método de produção mais aplicado atualmente, pelo qual o biodiesel é obtido via reações químicas entre álcoois e triglicerídeos na relação estequiométrica de 3 para 1, respectivamente, conforme a Figura 2.1. A reação é catalisada e gera, além dos ésteres que compõem o biodiesel, um coproduto, glicerol, o qual possui valor de mercado e diversas aplicações.

Figura 2.1: Reação geral de transesterificação

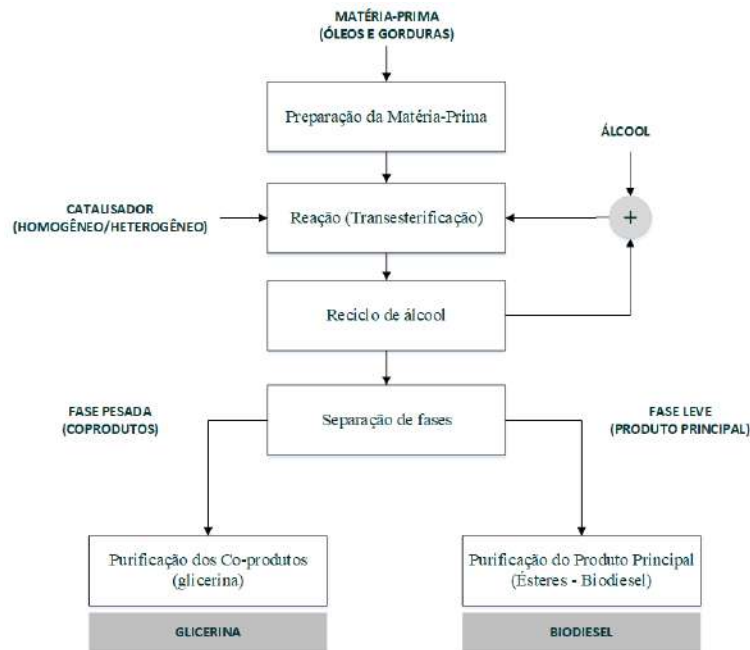


$R_1, (N=1,2,\dots)$ – cadeias carbônicas de ácidos graxos
 R – grupo alquil do álcool utilizado

Fonte: Elaboração própria. Adaptado de EMBRAPA (2021)

O processo, em linhas gerais, é composto por etapas de pré-tratamento e preparação da matéria-prima, reação, separação de fases, recuperação de álcool, e purificação dos produtos (biodiesel e glicerol), conforme o diagrama de blocos da Figura 2.2.

Figura 2.2: Diagrama de blocos simplificado do processo de transesterificação



Fonte: Elaboração própria. Adaptado de Kuss et al. (2015) e Lourinho et al. (2015)

2.1 Matérias-primas

Os triglicerídeos, principal matéria-prima do processo, são moléculas cuja estrutura química é composta pela combinação de três moléculas de ácidos graxos associadas ao glicerol, conforme a Figura 2.1. As cadeias de ácidos graxos podem ser iguais ou diferentes a depender do tipo de triglicerídeo em questão.

Tradicionalmente, no processo de geração de biodiesel, estes triglicerídeos são obtidos de óleos e gorduras diversos. Especificamente no cenário brasileiro, de acordo com o Anuário Estatístico da ANP (Agência Nacional de Petróleo) de 2022, a soja permanece como a principal fonte de triglicerídeos para produção de biodiesel, correspondendo a 72,1% da produção total em 2021 (cerca de 4,9 milhões de metros cúbicos).

Em relação ao álcool, o principal aplicado na geração de biodiesel é o metanol, por apresentar custo relativamente reduzido frente a outros tipos de álcool, pelo processo de separação do metanol da glicerina e dos éteres ser mais fácil do que quando o etanol é utilizado, pela formação de azeótropos água-etanol e por vantagens em termos de eficiência reacional (KUSS et al., 2015 e YOUNG, 2015). Dados do Anuário Estatístico da ANP de 2022 indicam um consumo de metanol na geração de biodiesel de 760,5 mil metros cúbicos em 2021.

2.2 Condições Operacionais

Os fatores que interferem no processo de transesterificação são diversos. Dentre eles, cabe citar: teor de ácidos graxos livres, umidade, intensidade de agitação, temperatura reacional, razão molar álcool:triglicerídeo, tempo de reação, além de tipo e quantidade de catalisador.

Acidez elevada (ácidos graxos livres), bem como umidade, contribuem para reações de saponificação (formação de sabão), o que, além de reduzir o rendimento do processo, contribui para aumento da viscosidade, formação de géis e dificulta a separação da glicerina em etapas posteriores do processo. Em linhas gerais, matérias-primas com teores menores de umidade e ácidos graxos livres (menor que 1%) permitem a catálise do processo em meio básico (ZULQARNAIN et al., 2021). Para maiores teores de umidade e acidez, os efeitos de saponificação passam a ser mais críticos para a rentabilidade do processo.

A agitação, por outro lado, tem relação direta com o grau de mistura dos reagentes e transferência de massa do processo. Óleos e álcoois não são totalmente solúveis entre si, de forma que a reação de transesterificação ocorre, majoritariamente, na interface entre ambas as fases. Dessa forma, a produção de biodiesel, tradicionalmente, é agitada mecanicamente para facilitar a transferência de massa. É necessário trabalhar em condições otimizadas de agitação, uma vez que velocidades baixas tem efeito negativo na formação do produto, porém velocidades muito elevadas também contribuem negativamente à medida que levam à formação irreversível de emulsões decorrentes da saponificação (CASTRO et al., 2019 e ZULQARNAIN et al. 2021).

A temperatura da reação tem efeitos diversos e, por vezes, divergentes. Por um lado, temperaturas mais altas contribuem para diminuição da viscosidade do óleo e aumento da velocidade reacional, contribuindo favoravelmente para o processo. Por outro lado, temperaturas elevadas favorecem a saponificação, contribuem para a vaporização do álcool e consequente redução do rendimento, além de poder ter efeitos de degradação dos produtos, como a glicerina (YOUNG, 2015 e CASTRO et al., 2019). É necessário, portanto, utilizar-se temperaturas otimizadas no processo para garantir bons resultados.

A razão molar álcool:triglicerídeo afeta o rendimento do processo, pois a reação de transesterificação é reversível. Assim, de maneira geral, trabalha-se com condições de

excesso de álcool para favorecimento do equilíbrio reacional no sentido dos produtos (LEUNG et al., 2006 e CASTRO et al., 2019).

Por fim, a aplicação de catalisador tem por objetivo aumentar a velocidade reacional e o rendimento do processo, contribuindo para sua viabilidade técnico-econômica. As quantidades e características do catalisador (ácido ou básico) também interferem de diferentes maneiras nos processos de saponificação.

2.3 Catálise homogênea

A produção de biodiesel via catálise homogênea é a rota tradicionalmente usada no processo devido aos custos e à eficiência obtida (BASHIR et al., 2022). A mesma é denominada homogênea pois se utilizam catalisadores que se apresentam nas mesmas fases que os reagentes e produtos da reação (líquidas, em solução). Eles podem ser ácidos ou básicos.

A catálise homogênea utilizando catalisadores básicos oferece vantagens frente à catálise em meio ácido sobretudo no que tange às velocidades reacionais, sendo cerca de 4000 vezes mais rápida (BASHIR et al., 2022). No entanto, por tratar-se de um meio reacional básico, a presença de ácidos graxos livres na matéria-prima pode levar à formação de sabão, prejudicando o rendimento de biodiesel e a separação final, como já discutido. A Tabela 2.1 resume as principais vantagens e desvantagens da catálise homogênea em meio básico e ácido.

Os catalisadores básicos mais utilizados são hidróxidos de sódio (NaOH) e potássio (KOH), sendo os catalisadores a base de sódio mais vantajosos sob o ponto de vista da separação de fases (RUHUL et al., 2015 e BASHIR et al., 2022). Por outro lado, os catalisadores ácidos mais utilizados são os ácidos sulfúrico, sulfônico e clorídrico (RAMOS et al., 2011 e BASHIR et al., 2022).

Estudos foram realizados considerando a combinação de catálise ácida e básica em um processo em duas etapas. No entanto, abordagens desse tipo, embora solucionem, em parte, algumas das limitações técnicas supracitadas, acarretam tempos de reação e custos maiores para o processo (JAMIL et al., 2018).

Por outro lado, a síntese de biodiesel por catálise homogênea apresenta algumas desvantagens. Dentre elas, vale citar: perda de rendimento devido à formação de sabões, altos custos associados à separação do catalisador e geração de grandes quantidades de

resíduos durante o processo (VYAS et al., 2010; KISS et al., 2010 e LOURINHO et al., 2015).

Tabela 2.1. Comparação da catálise homogênea em meio básico e meio ácido

pH do meio	Vantagens	Desvantagens
Meio básico	Menores tempos reacionais; Condições de operação mais brandas; Alta disponibilidade; Custos baixos.	Baixo rendimento em matérias-primas ácidas (acima de 1% de acidez) devido a reações da saponificação; Sensibilidade a altos teores de água.
Meio ácido	Bons rendimentos em matérias-primas de acidez elevada (acima de 1%); Sem reações de saponificação.	Necessidade de condições mais severas (maiores temperaturas, maiores razões molares álcool:triglicerídeo etc.); Tempos reacionais maiores; Efeitos de corrosão.

Fonte: Elaboração própria. Adaptado de Lam et al. (2010); Bashir et al. (2022) e Jamil et al. (2018).

Desta forma, alternativas de produção visando contornar tais desvantagens vêm sendo estudadas frente à sua viabilidade e competitividade em relação à rota tradicional de produção. Dentre as tecnologias, a utilização de catalisadores heterogêneos se configura como uma alternativa interessante à medida que seu processo de recuperação e reuso é mais simples. Além disso, o uso de catalisadores sólidos oferece oportunidades de redução de consumo de água na purificação do biodiesel, tornando o processo mais vantajoso sob o ponto de vista ambiental (DABDOUB et al., 2009; VYAS et al., 2010 e LOURINHO et al., 2015).

2.4 Catálise heterogênea

A produção via catálise heterogênea ocorre quando se utilizam catalisadores em fases diferentes da matéria-prima e/ou dos produtos. Esta forma de produção tem sido estudada frente ao processo tradicional (homogêneo) devido, principalmente, a possibilitar a

redução de custos nas etapas de separação e purificação dos produtos, contribuir para a redução da geração de efluentes e do consumo de água, por empregar catalisadores não corrosivos, que tem menor sensibilidade à presença de água na matéria-prima e por serem reutilizáveis (TAVIZÓN-POZOS et al., 2021).

Em contrapartida, a obtenção de biodiesel via catalisadores heterogêneos apresenta desvantagens associadas a: dificuldades no armazenamento destes catalisadores, que tendem a absorver umidade; tempos de reação mais lentos; e rendimentos inferiores frente ao processo catalisado homogeneamente - decorrentes das dificuldades de transferência de massa no processo. (TAVIZÓN-POZOS et al., 2021).

Assim como na catálise homogênea, pode-se separar os catalisadores heterogêneos em ácidos e básicos, e estes irão, em parte, apresentar as mesmas vantagens e desvantagens dos catalisadores homogêneos análogos. Uma série de alternativas tem sido avaliadas, como óxidos de metais alcalinos, zeólitas, hidrotalcitas, dentre outros. O óxido de cálcio (CaO) tem sido amplamente estudado devido a algumas características principais como baixa solubilidade no metanol, força básica, baixo custo e relativa facilidade de síntese (ZABETI et al. 2009).

Apesar dos vários estudos realizados com o óxido de cálcio, uma série de outros catalisadores têm sido avaliados em diferentes condições de matéria-prima e produção. Revisões detalhadas podem ser encontradas em Semwal et al. (2011) e Jamil et al. (2018). Para o presente estudo, foram selecionadas outras quatro alternativas de catalisadores: óxido de magnésio (MgO), óxido de estrôncio (SrO) e dois óxidos de chumbo (PbO e Pb₃O₄).

2.4.1 Óxidos de metais alcalino-terrosos

Este grupo de óxidos, composto por MgO, CaO, SrO e BaO, tem sido amplamente estudado como catalisadores heterogêneos na produção de biodiesel por apresentar vantagens frente a outras alternativas, como disponibilidade, preços e atividade catalítica (TAVIZÓN-POZOS et al., 2021). Esta classe se enquadra como catalisadores de ação básica. A atividade catalítica destes materiais está associada, principalmente, aos sítios na superfície dos catalisadores, bem como à força básica de cada um deles.

De acordo com Watkins et al. (2004), juntamente com os resultados obtidos por Ruppert et al. (2008), que quantificaram a força básica de cada um destes catalisadores, a

força básica segue a seguinte sequência: BaO > SrO > CaO > MgO.

De acordo com Hattori (1995), os sítios básicos são gerados durante as altas temperaturas de calcinação (em torno de 1200 K), que removem a água adsorvida e dióxido de carbono, gerando uma superfície livre de carbonatos e hidróxidos. A temperatura de calcinação tem grande impacto na força básica do catalisador final, onde temperaturas mais brandas geram sítios ativos mais fracos.

Diferentes estudos, como os de Gryglewicz (1999) e Hattori (2000), foram feitos avaliando os mecanismos de catálise por parte dos óxidos de metais alcalino-terrosos na transesterificação de biodiesel. Dois mecanismos possíveis que podem explicar o efeito destes óxidos são os mecanismos de Eley-Rideal e Langmuir-Hinshelwood.

No primeiro mecanismo citado (Eley-Rideal), os sítios básicos do catalisador (O_2^-), removem os íons H^+ do álcool utilizado na transesterificação. Em contrapartida, o grupamento R-O remanescente do álcool é adsorvido no sítio metálico do catalisador formando um alcóxido aniônico. Após esta etapa, considerada crucial para o processo, a carbonila do triglicerídeo atrai o alcóxido aniônico formando um intermediário tetraédrico. Em seguida, este novo intermediário atrai o H^+ anteriormente ligado ao sítio básico do catalisador para ser rearranjado de forma a gerar o éster (biodiesel) (TAVIZÓN-POZOS et al., 2021).

Por outro lado, descrevendo o processo via Langmuir-Hinshelwood, o início do mecanismo ocorre de maneira idêntica ao descrito no parágrafo anterior. A diferença nesta proposta de mecanismo reside na adsorção do grupo carbonila por outro sítio metálico, criando um complexo catiônico. Em seguida, o alcóxido ativado realiza um ataque nucleofílico na carbonila para criação do intermediário tetraédrico. A molécula formada é então desadsorvida através dos arranjos do oxigênio de forma a resultar na geração do éster e de um diglicerídeo. O processo, então, é repetido mais duas vezes até o consumo completo do triglicerídeo e formação de uma molécula de glicerol (TAVIZÓN-POZOS et al., 2021).

Dentre os quatro catalisadores do grupo, o óxido de magnésio, apesar de apresentar a menor basicidade, também é o menos solúvel em metanol (ZABETI et al., 2009). Além disso, o mesmo mantém consideravelmente sua atividade catalítica quando em presença de matérias-primas com alta concentração de água (Du et al., 2019).

Cantrell et al. (2005) avaliaram a transesterificação de tributirato de glicerol utilizando diferentes catalisadores a base de magnésio, dentre eles hidralcitas e óxido de magnésio (MgO). Os resultados obtidos após 3 horas de reação a 60 °C e 0,4% em peso de catalisador foram de apenas 11% de rendimento, indicando baixa atividade deste catalisador em baixas temperaturas, conforme esperado com base na escala de força básica discutida anteriormente.

Em contrapartida, Di Serio et al. (2006) também investigaram hidralcitas e MgO, obtidos em diferentes condições e formas de preparo. A matéria-prima usada foi o óleo de soja e diferentes condições e parâmetros operacionais foram analisados. As melhores condições foram para a transesterificação a 180 °C por 1 hora, com cerca de 3% do catalisador em peso e razão molar de 12:1, obtendo-se um rendimento de 95% para os ensaios com MgO. O estudo também buscou avaliar o efeito da presença de água na atividade dos catalisadores, uma vez que este fator afeta a atividade de diversos catalisadores heterogêneos. Sínteses foram realizadas em meios com alta concentração de água (10000 ppm) e não foram observadas alterações na atividade catalítica, indicando uma estabilidade do MgO em ambientes com excesso de água. Esses resultados são interessantes sob o ponto de vista industrial pois indicam uma possibilidade de redução de custos associados ao pré-tratamento da matéria-prima. Este estudo foi selecionado para o presente trabalho como referência para a simulação utilizando-se óxido de magnésio.

Tantirungrotechai et al. (2013) avaliaram o uso de estrôncio suportado em MgO na síntese de biodiesel utilizando óleo de soja. As condições ótimas foram obtidas para a reação a 65 °C por 30 minutos, utilizando uma razão metanol:óleo de 12:1 e 5% em peso de catalisador. O rendimento de biodiesel nestas condições foi de 93%. O estudo também avaliou a reutilização do catalisador, contudo, sem processos de regeneração, o catalisador apresenta queda considerável na atividade catalítica (acima de 50%).

Os estudos conduzidos por Du et al. (2019) buscaram avaliar o efeito de combinação do óxido magnésio com suportes a base de carbono (ureia, etilenoglicol e PVA) na transesterificação de óleo de mamona. As reações foram executadas a 75 °C por 1 hora, com razão molar etanol:óleo de 12:1 e concentração de 6% em peso dos catalisadores sintetizados. Os rendimentos obtidos foram de cerca de 96%, 94% e 92% para os catalisadores a base de ureia, PVA e etilenoglicol, respectivamente. A reutilização dos catalisadores também foi investigada, indicando a possibilidade de reutilizá-lo por até 5

ciclos.

O CaO, em contrapartida, é o óxido mais pesquisado do grupo, dada sua relativa força básica, solubilidade reduzida em metanol, e relativa facilidade e baixo custo de obtenção (ZABETI et al., 2009).

Liu et al. (2008) estudaram a transesterificação de óleo de soja utilizando CaO. A reação foi realizada a 65 °C por 3 horas utilizando razão molar metanol:óleo de 12:1 e 8% em peso de catalisador. Os rendimentos obtidos foram de 95% nestas condições. O estudo identificou que o catalisador manteve sua atividade catalítica por até 20 ciclos.

Kouzu et al. (2008) realizaram experimentos com óleo de soja e óleo de cozinha usado utilizando óxido de cálcio (CaO) obtido através de calcinação de calcário (CaCO₃) como catalisador. O ensaio obteve rendimentos de 93% para o biodiesel via transesterificação durante 1 hora à temperatura de refluxo de metanol, com razão molar metanol:óleo de 12:1 e 0,6% de catalisador (em peso) para o ensaio empregando óleo de soja. Nas mesmas condições, o rendimento utilizando-se óleo de cozinha foi de apenas 66%.

Yoosuk et al. (2010) utilizaram CaO como catalisador na transesterificação de óleo de dendê. O estudo buscou avaliar os efeitos de uma maneira alternativa de produção de CaO. O trabalho utilizou um método de hidratação e desidratação de calcitas. As reações foram realizadas a 60 °C, utilizando-se razão molar metanol:óleo de 15:1, com 7% em peso do catalisador. O tempo de reação ótimo foi avaliado no estudo e determinado em 45 minutos. Os rendimentos obtidos no trabalho desenvolvido foram de cerca de 96% para o catalisador preparado pelo método de hidratação e desidratação.

Nair et al. (2012) estudaram a transesterificação de óleo de fritura usado utilizando CaO oriundo da calcinação de conchas de mariscos em pó. As conchas pulverizadas foram calcinadas a 900 °C em duas tempos diferentes (2,5 horas e 3,5 horas). As condições ótimas do estudo levaram a 89% de rendimento em biodiesel com a reação ocorrendo a 60 °C por 3 horas com aproximadamente 2% de catalisador em peso e razão metanol:óleo de 6:1.

Dentre outros estudos envolvendo a produção de CaO obtido a partir de materiais biológicos, também podem ser encontrados os estudos de Nakatani et al. (2009), que utilizaram cascas de ostras para obter cerca de 74% de rendimento de biodiesel a partir de óleo de soja após 5 horas de reação a 65 °C, razão metanol:óleo de 6:1 e 25% em peso de

catalisador; Wei et al. (2009), que utilizaram casca de ovos para a transesterificação de óleo de soja durante 3 horas à 65 °C com 3% do catalisador em peso e razão molar metanol:óleo de 9:1, resultando em 95% de rendimento; e o estudo de Viriya-empikul et al. (2010), que utilizaram moluscos e cascas de ovos para produzir biodiesel a partir de óleo de dendê com rendimento de 95%, executando a síntese a 60 °C por 2 horas com 10% de catalisador em peso e 12:1 de razão molar metanol:óleo.

Teo et al. (2014) avaliaram a transesterificação de óleo de pinhão-manso (*Jatropha curcas L.*) usando catalisadores a base de CaO. As condições ótimas do experimento levaram a rendimentos acima de 80% para reações de síntese a 65 °C utilizando-se 5% do catalisador em peso e razão metanol:óleo de 15:1. No entanto, foram necessárias 6 horas de reação para obter-se tais rendimentos. Ensaios de reutilização e estabilidade também foram executados, indicando a possibilidade de utilizar-se os catalisadores por até 6 ciclos.

O SrO apresenta alta atividade catalítica dentre os catalisadores deste grupo e não é tóxico (ZABETI et al., 2009 e Tantirungrotechai et al., 2013). Ainda, segundo Liu et al. (2007), o óxido de estrôncio é insolúvel em metanol, óleos vegetais e ésteres de ácido graxos.

Neste último estudo, as condições ótimas foram avaliadas e resultaram na transesterificação sendo realizada a 65 °C, por 30 minutos, empregando-se uma razão metanol:óleo de 12:1 e 3% do catalisador em peso. O rendimento obtido foi de 95%. O estudo também avaliou o número de ciclos de operação, reportando um total de 10 ciclos sem alterações nos rendimentos. Este estudo foi selecionado para o presente trabalho como referência para a simulação utilizando-se óxido de estrôncio.

O óxido de bário, por sua vez, não foi selecionado para este estudo, apesar de ser o óxido de maior força básica e atividade catalítica dentre os óxidos do grupo. O BaO é tóxico e apresenta alta solubilidade em metanol e etanol, e efeitos adversos no meio ambiente (Du et al., 2019).

Sahani et al. (2018) avaliaram a combinação de óxido de bário com lantânio por diferentes métodos na transesterificação de óleo de mahua (*Madhuca indica*). As condições operacionais foram otimizadas e estudos de lixiviação também foram realizados. O estudo indicou rendimentos máximos de 97% a 65 °C por 2 horas utilizando-se 1,5% em peso do catalisador e razão metanol:óleo de 18:1. Contudo, na avaliação de reutilização do catalisador, foram obtidas perdas consideráveis em rendimento após o

primeiro ciclo de uso.

Fard et al. (2019), por sua vez, avaliaram a obtenção de biodiesel utilizando sebo bovino como matéria-prima e BaO como catalisador heterogêneo. O estudo buscou otimizar parâmetros como razão metanol:óleo, quantidade de catalisador e temperatura, além de investigar a reutilização do óxido. Nas condições otimizadas (50 °C por 5 horas com 4% em peso de catalisador e 16:1 de razão molar metanol:óleo), o rendimento obtido foi de 94%. Além disso, a partir do terceiro ciclo de uso, o catalisador passou a apresentar perda representativa no rendimento, confirmando tendências observadas em estudos previamente mencionados.

Jamil et al. (2021), por outro lado, avaliaram a performance do BaO combinado com óxido de molibdênio (MoO₂) na produção de biodiesel utilizando óleos de semente de *Balanites aegyptiaca*. No estudo, as condições operacionais ótimas foram investigadas e foi avaliada a reutilização do catalisador. Os resultados levaram a rendimentos máximos de cerca de 98% para reações realizadas a 65 °C por 2 horas, com 4,5% de catalisador em peso e razão molar metanol:óleo de 16:1. Foram realizados cinco ciclos de reuso sem perdas representativas nos resultados

Hanif et al. (2022) utilizaram nanopartículas de óxido de bário para síntese de biodiesel usando sementes de cedro (*Toona ciliata*) como matéria-prima e um reator de membrana. As condições ótimas do estudo levaram a transesterificação a 90 °C por 150 minutos, utilizando razão molar metanol:óleo de 9:1 e 0,4% em peso de catalisador. O rendimento de biodiesel obtido foi de 94%.

Outros estudos buscaram comparar os catalisadores do grupo ou combiná-los a fim de avaliar os efeitos nos rendimentos dos processos. Um exemplo é o estudo realizado por Yan et al. (2008), que estudaram os quatro catalisadores do grupo na transesterificação de óleo de colza. As reações foram realizadas a 65 °C durante 3,5 horas, com razão molar metanol:óleo de 18:1 e 10% em peso de catalisador. Os rendimentos obtidos para MgO, CaO, SrO e BaO foram, respectivamente, de 5%, 58%, 60% e 86%.

Mootabadi et al. (2010) avaliaram CaO, SrO e BaO na transesterificação de óleo de dendê utilizando tecnologia ultrassônica para auxiliar o processo. O estudo buscou identificar as condições ótimas de tempo de reação, razão molar álcool:óleo, concentração de catalisador, além de realizar testes de reutilização. A temperatura foi controlada e mantida em 65 °C durante todos os testes. O estudo identificou ganhos de rendimento para

todos os catalisadores com o suporte do processador ultrassônico na transesterificação. As condições ótimas obtidas foram de 60 minutos de reação, utilizando razão molar metanol:óleo de 9:1, 3% em peso de catalisador, com utilização de 50% da amplitude do processador ultrassônico (20 Hz e 100 W). Nestas condições, os rendimentos obtidos para CaO, SrO e BaO foram, respectivamente, de 77%, 95% e 95%. Também foi identificado que, dentre os catalisadores, o que apresentou maior queda de atividade nos testes de reutilização foi o BaO devido, principalmente, à sua dissolução (aproximadamente 14% da massa na camada de biodiesel).

Salamatinia et al. (2013) avaliaram a performance dos quatro óxidos (CaO, BaO, SrO e MgO) na transesterificação de óleo de dendê. Os catalisadores foram avaliados em duas condições de concentração (3% e 5% em peso) para temperaturas e tempos de reação iguais (60 °C e 90 minutos, respectivamente). Também foram avaliados os efeitos de lixiviação dos catalisadores. Os resultados obtidos no estudo indicaram maiores rendimentos para o óxido de bário (BaO), com cerca de 95% de rendimento, e, em segundo lugar, o óxido de estrôncio, com 86%. Contudo, o BaO foi o catalisador encontrado em maior quantidade no biodiesel produzido, indicando uma alta solubilidade (363,8 mg/L), enquanto os outros catalisadores foram encontrados somente em traços.

Alguns estudos ainda têm buscado aumentar a estabilidade destes catalisadores através de combinações entre os mesmos. Dentre estes estudos, cabe citar o estudo de Ali et al. (2017), que avaliaram a combinação de SrO e CaO como catalisador na transesterificação de óleo de pinhão-manso (*Jatropha curcas* L.). A reação foi executada a 65 °C por 30 minutos, com razão metanol:óleo de 10:1 e 6% em peso de catalisador. Duas técnicas de agitação foram avaliadas: agitação magnética e ultrassônica. Os rendimentos obtidos foram, respectivamente, de 89% e 95%.

Shahbazi et al. (2020) sintetizaram catalisadores combinados de SrO e MgO e avaliaram a performance dos mesmos na transesterificação de óleo de cozinha usado. Os parâmetros reacionais foram avaliados e otimizados no estudo. As condições ótimas do experimento (50 °C por 1 hora, razão metanol:óleo de 7:1) levaram a rendimentos de 88% em biodiesel.

Sulaiman et al. (2020) estudaram os óxidos deste grupo suportados em alumina. Os resultados obtidos na transesterificação a 65 °C por 3 horas com 6% de catalisador (em peso) e 18:1 de razão molar metanol:óleo resultaram em rendimentos relativamente

baixos, sendo o catalisador a base de bário o que apresentou o melhor rendimento (cerca de 74%). Em um segundo momento, os catalisadores foram dopados com ferro com o objetivo de otimizar a performance. Os resultados do estudo levaram a um rendimento de 84%, também para o catalisador a base de bário, utilizando as mesmas condições operacionais já mencionadas.

Zhang et al. (2021) estudaram a combinação dos óxidos de estrôncio e cálcio com alumina na síntese de biodiesel a partir de óleo de dendê utilizando irradiação por micro-ondas. Nas condições ótimas do experimento, 65 °C por 3 horas com razão molar metanol:óleo de 15:1 e 7,5% em peso de catalisador, foram obtidos rendimentos de 96%. O estudo também identificou perda de rendimento de apenas 4% após 5 ciclos de reuso do catalisador.

Os resultados dos estudos relatados nesta seção estão sintetizados na Tabela 2.2.

2.4.2 Óxidos de Chumbo

Diferentemente dos óxidos de metais alcalino terrosos, estudos em relação à performance catalítica de óxidos de chumbo na produção de biodiesel são mais escassos e, portanto, informações mais específicas quanto às características e mecanismos deste tipo de catalisador não foram obtidas.

Singh et al. (2007) buscaram avaliar a performance de diferentes catalisadores na transesterificação de óleo de soja: MgO, CaO, BaO, PbO, e MnO₂. No estudo, a reação de transesterificação foi realizada a 215 °C em um reator de alta pressão durante 2 horas. A concentração em peso de catalisador era de cerca de 2% e a razão molar metanol:óleo de 7:1. Este estudo preliminar indicou o PbO como o catalisador com segundo maior rendimento do grupo avaliado (89%), sendo superado somente pelo óxido de bário em termos de rendimento (95%). Contudo, para este último, foram verificados efeitos de craqueamento dos ésteres formados após determinado tempo de reação.

Tabela 2.2. Resumo dos estudos de transesterificação com óxidos de metais alcalinos

Catalisador (% em peso)	Tempo (h)	Temp (°C)	Razão molar metanol:óleo	Rendimento máximo	Referência
MgO (0,4%)	3	60	30:1	11%	Cantrell et al. (2005)
MgO (3%)	1	180	12:1	95%	Di Serio et al. (2006)
MgO (5%)	0,5	65	12:1	93%	Tantirungrotechai et al. (2013)
MgO (6%)	1	75	12:1	96%	Du et al. (2019)
CaO (8%)	3	65	12:1	95	Liu et al. (2008)
CaO (0,6%)	1	-	12:1	93	Kouzu et al. (2008)
CaO (7%)	0,75	06	15:1	96	Yoosuk et al. (2010)
CaO (2%)	3	60	6:1	89	Nair et al. (2012)
CaO (25%)	5	65	6:1	74	Nakatani et al. (2009)
CaO (3%)	3	65	9:1	95	Wei et al. (2009)
CaO (10%)	2	60	12:1	95	Viriya-empikul et al. (2010)
CaO (5%)	6	65	15:1	80	Teo et al. (2014)
SrO (3%)	0,5	65	12:1	95	Liu et al. (2007)
BaO (1,5%)	2	65	18:1	97	Sahani et al. (2018)
BaO (4%)	5	50	16:1	94	Fard et al. (2019)
BaO (4,5%)	2	65	12:1	98	Jamil et al. (2021)
BaO (0,4%)	2,5	90	9:1	94	Hanif et al. (2022)
MgO, CaO, SrO e MgO (10%)	3,5	65	18:1	5, 58, 60 e 86, respectivamente	Yan et al. (2008)
CaO, SrO e BaO (3%)	1	65	9:1	77, 95 e 95, respectivamente	Mootabadi et al. (2010)
MgO, CaO, SrO e BaO (5%)	1,5	60	9:1	8,67,86 e 95, respectivamente	Salamatinia et al. (2013)
SrO, CaO (6%)	0,5	65	10:1	89 e 95, respectivamente	Ali et al. (2017)
SrO e MgO	1	50	7:1	88	Shahbazi et al. (2020)
MgO, CaO, SrO, BaO (6%)	3	65	18:1	79, 81, 82 e 84, respectivamente	Sulaiman et al. (2020)
SrO e CaO (7,5%)	3	65	15:1	96	Zhang et al. (2021)

Fonte: Elaboração própria.

Em uma segunda avaliação, Singh et al. (2008) avaliaram três óxidos de chumbo diferentes (PbO , PbO_2 e Pb_3O_4) juntamente com MgO , CaO , ZnO , e Tl_2O_3 na produção de biodiesel utilizando óleo de soja. O estudo indicou que os óxidos com melhores performances na transesterificação eram os óxidos de chumbo, reportando rendimentos de 89%. O estudo também avaliou efeitos de lixiviação dos respectivos catalisadores. Os resultados indicaram alta taxa de lixiviação para o PbO no biodiesel. Contudo, para o Pb_3O_4 , os valores de lixiviação no biodiesel estavam entre os menores, inclusive quando comparado ao CaO e MgO (760 mg/kg contra 6800 mg/kg e 8200 mg/kg, respectivamente). As melhores condições reacionais encontradas foram 150 °C (PbO) e 215 °C (Pb_3O_4) por 2 horas, com 2% em peso de catalisador e razão molar metanol:óleo de 7:1.

Considerando-se os resultados de rendimento e de lixiviação encontrados por Singh et al. (2008) entre os óxidos de chumbo e alguns óxidos de metais alcalino terrosos, este trabalho foi utilizado como referência nas simulações do presente estudo. Além dos trabalhos já mencionados, outros estudos foram realizados avaliando a combinação do óxido de chumbo com outros materiais e reagentes.

Singh et al. (2014) estudaram a síntese de biodiesel utilizando óxidos de metais suportados em zeólitas como catalisador, dentre eles PbO . As matérias-primas base do estudo foram óleos de pinhão-manso (*Jatropha curcas* L.). Os resultados indicaram alta atividade catalítica nas condições experimentais, com rendimentos acima de 90% e com potencial de ser empregado mesmo em matérias-primas com alto teor de ácidos graxos livres. Também foram avaliados efeitos de lixiviação dos catalisadores, obtendo-se baixos níveis de perda do catalisador (cerca de 10 ppm) devido às altas interações entre o óxido e a zeólita (suporte), uma redução significativa dos resultados reportados para o óxido isolado (sem suporte), que apresenta valores de lixiviação cerca de 340 vezes maior.

Khan (2016) avaliou a síntese de biodiesel utilizando uma série de catalisadores, incluindo o PbO . A partir dos experimentos realizados, a reatividade dos catalisadores foi ranqueada e o óxido de chumbo (II) apresentou reatividade menor que o óxido de magnésio, óxido de menor força básica do grupo dos metais alcalino-terrosos, conforme apresentado na seção anterior. Contudo, é importante ressaltar que a matéria-prima utilizada para a síntese de biodiesel neste trabalho foi a alga marinha da espécie *Melanothamnus afaqhusainii*, o que limita as conclusões do trabalho para outros cenários

de síntese de biodiesel.

Melnyk et al. (2020) estudaram diferentes óxidos de metais, dentre eles o PbO. As reações de transesterificação foram realizadas utilizando óleo de girassol como matéria-prima e etanol. A temperatura da reação foi mantida em 75 °C por 2,5 horas com razão molar etanol:óleo de cerca de 4:1 e 0,25% em peso do catalisador. Para o PbO, o rendimento obtido foi de 73%.

3. Preparação do Ambiente de Simulação

O presente trabalho foi desenvolvido baseando-se nas referências e premissas utilizadas por Galvão (2019), com os ajustes e considerações necessárias aos processos alternativos analisados neste estudo. Desta forma, realiza-se uma continuação dos estudos inicialmente desenvolvidos.

Galvão (2019) simulou e avaliou economicamente a transesterificação de óleo de soja via catálise heterogênea utilizando óxido de cálcio (CaO). No estudo, foram considerados três casos distintos baseados em artigos selecionados e, desta forma, foram realizadas três simulações utilizando este catalisador: CaO combinado com pequena quantidade de água, CaO obtido a partir de cascas de ovos e CaO tratado com uma mistura de glicerol e metanol. O autor também simulou como *benchmark* um processo de transesterificação via catálise homogênea alcalina. Para as simulações, o trabalho utilizou o simulador Aspen HYSYS[®] na versão 8.8 e definiu-se, para além dos componentes, o pacote termodinâmico mais adequado para as simulações, especificações de correntes de entrada, capacidade de produção e aspectos reacionais.

Desta forma, ao longo do capítulo, quando necessário, as simulações desenvolvidas por Galvão (2019) serão denominadas como “simulações de referência”. O simulador utilizado para obter os dados necessários às análises econômicas e de sustentabilidade neste trabalho foi o Aspen HYSYS[®] versão 12.1.

Para a preparação do ambiente de simulação, a definição de componentes, pacotes termodinâmicos e reações foi feita de maneira idêntica às simulações de referência, com alteração somente dos catalisadores, conforme será descrito. Nas seções a seguir, será feita uma breve descrição desses pontos.

3.1 Definição dos Componentes

Para o óleo de soja, foi mantida a representação deste componente pela trioleína, substância presente na base de dados do Aspen HYSYS[®]. Da mesma forma, o biodiesel foi determinado como o oleato de metila, também presente na base de dados. Além disso, não foi considerada a existência de ácidos graxos livres e ocorrência de hidrólise na simulação.

O glicerol também está presente na base de dados do simulador e foi adicionado, dada

sua formação como subproduto da transesterificação. A água foi adicionada na simulação considerando sua aplicação na etapa de lavagem do biodiesel, e constava na base de dados do simulador. O metanol, presente na base de dados, foi mantido como o álcool usado nas simulações.

Para os catalisadores heterogêneos, por outro lado, ponto principal de análise deste trabalho, foram necessários ajustes específicos na simulação. Tal qual nas simulações de referência, os catalisadores foram adicionados como sólidos hipotéticos, o que requer a definição de propriedades específicas como densidade e massa molar. Os valores inseridos no simulador foram extraídos do *Handbook of Chemistry and Physics* (HAYNES et al., 2014), conforme Tabela 3.1.

Tabela 3.1. Dados físico-químicos dos catalisadores

Catalisador	Massa molar (g/mol)	Densidade (kg/m³)
Óxido de magnésio (MgO)	40,304	3600
Óxido de estrôncio (SrO)	103,62	5100
Monóxido de chumbo II (PbO)	223,2	9495
Tetróxido de chumbo (Pb₃O₄)	685,6	8920

Fonte: Elaboração própria. Adaptado de Haynes et al. (2014)

3.2 Determinação dos Pacotes Termodinâmicos

Os pacotes termodinâmicos foram os mesmos usados nas simulações de referência, a fim de manter a compatibilidade entre os estudos. Desta forma, para a maior parte dos equipamentos e correntes da simulação foi utilizado o modelo UNIQUAC, fazendo uso dos coeficientes de interação binária presentes *software*, conforme Tabela 3.2. Para a fase gás, por outro lado, foi utilizado o modelo de equação de estado de Peng-Robinson (*default* adotado pelo simulador durante a configuração do pacote termodinâmico).

Já a partir dos vasos de lavagem para separação do biodiesel e do glicerol, foram feitas alterações no pacote termodinâmico dado que a separação destes componentes não ocorria da forma esperada. Desta forma foi utilizado o modelo UNIQUAC com coeficientes

calculados separadamente, seguindo a metodologia citada em Mohsen-Nia et al. (2007) e Casas et al. (2014), que foram manualmente inseridos na simulação, conforme Tabela 3.3. Os valores dos coeficientes binários para cada componente, portanto, foram iguais aos utilizados por Galvao (2019).

Tabela 3.2. Coeficientes binários do modelo UNIQUAC

Antes dos vasos de lavagem (default)					
	H₂O	Metanol	Trioleína	M-Oleato	Glicerol
H₂O	-	-357,830	576,387	555,034	96,918
Metanol	572,738	-	-93,611	11172,227	-265,110
Trioleína	563,365	582,117	-	48,529	1006,035
M-Oleato	515,400	-76,037	-47,009	-	980,798
Glicerol	7,832	408,956	-679,553	-390,282	-
Após vasos de lavagem (calculados)					
	H₂O	Metanol	Trioleína	M-Oleato	Glicerol
H₂O	-	95,259	-388,587	-388,864	130,652
Metanol	-10,377	-	166,217	-51,323	195,527
Trioleína	2212,690	457,975	-	156,324	884,113
M-Oleato	1695,602	622,095	-139,466	-	595,241
Glicerol	-290,904	-76,632	-255,941	-61,600	-

Fonte: Elaboração própria.

É válido ressaltar, contudo, que para a simulação envolvendo a utilização de óxido de estrôncio foi observada, mesmo com a referida diferenciação dos pacotes termodinâmicos, uma não separação de biodiesel e glicerol nos vasos de lavagem. Ambos os componentes estavam saindo pela corrente inferior (líquido pesado) ao invés de serem separados nas correntes de líquido leve (biodiesel) e líquido pesado (glicerol).

A fim de resolver este problema, especificamente para a simulação relacionada ao óxido de estrôncio, foi feita uma configuração manual dentro do simulador nos coeficientes binários para tornar o biodiesel imiscível nos outros componentes (metanol, água e glicerol) e vice e versa. No módulo de configuração do pacote termodinâmico do HYSYS® foi selecionado a opção de tornar o componente imiscível para o metanol, água e glicerol de forma a levar o simulador a ajustar os valores dos coeficientes.

Com esta alteração, foi possível obter a separação desejada do biodiesel para posterior destilação (purificação).

3.3 Determinação de Condições de Entrada e Saída

As correntes de entrada (metanol, água, trioleína e catalisador) seguiram o mesmo padrão das simulações de referência: especificadas com temperatura de 25 °C e pressão de 101,3 kPa.

Em relação às saídas, também se decidiu por manter a vazão de produto (biodiesel) igual à estabelecida para as simulações de referência, ou seja, em torno de 17,380 kg/h, o que corresponde a cerca de 19 m³/h baseado no valor de densidade média do biodiesel usado por Young (2015). Dessa forma, as avaliações foram realizadas sobre plantas de igual capacidade, garantindo a fidedignidade das análises. Para o atual cenário de produção de biodiesel no Brasil, esta capacidade corresponde a uma planta de escala média (ANP,2022a).

3.4 Modelagem da Reação

Para a modelagem da reação de transesterificação, também se optou por seguir as simulações de referência. Desta forma, também foram utilizados reatores de conversão. Em posse das informações dos parâmetros e condições experimentais descritos em cada um dos artigos utilizados (conversão, concentração de reagentes, tempo de reação etc.), foram realizados os cálculos reacionais que serão descritos posteriormente neste trabalho, de modo a propiciar o dimensionamento dos reatores.

4. Simulações

A partir das definições explicitadas no capítulo anterior, foram geradas as simulações para cada catalisador. As diferentes simulações serão denominadas segundo a relação apresentada na Tabela 4.1. Os fluxogramas específicos de cada simulação estão exibidos nas Figuras 4.1 a 4.4.

Tabela 4.1. Descrição dos processos simulados

Caso	Descrição
1	Catálise heterogênea utilizando MgO como catalisador
2	Catálise heterogênea utilizando SrO como catalisador
3	Catálise heterogênea utilizando PbO como catalisador
4	Catálise heterogênea utilizando Pb ₃ O ₄ como catalisador

Fonte: Elaboração própria.

Novamente, como no capítulo anterior, quando necessário as simulações de Galvão (2019) serão denominadas “simulações de referência”.

4.1 Condições Operacionais das Simulações

Baseado nos artigos de referência indicados no Capítulo 3, as condições reacionais assumidas em cada simulação estão dispostas na Tabela 4.2.

Para o Caso 1 foi utilizado o artigo de Serio et al. (2006), em combinação com os resultados de Du et al. (2019) para estimar o número de ciclos de reuso do catalisador. Para o Caso 2 foi utilizado o estudo de Liu et al. (2007). E para os Casos 3 e 4 foram utilizados os resultados reportados em Singh et al. (2008). Para estes dois últimos, no entanto, os autores não realizaram avaliações quanto à durabilidade dos catalisadores e não foram encontrados estudos que realizassem tal avaliação. Desta forma, para os catalisadores usados nos Casos 3 e 4, foi adotado um valor médio entre os números de ciclos de reuso assumidos nos outros casos do presente trabalho.

O número de ciclos de reuso é o valor que foi adotado como premissa para a quantidade de vezes que o catalisador pode ser reutilizado sem perdas no rendimento do processo. Este valor foi utilizado na configuração do separador de correntes (TEE-101) mencionado mais a frente neste capítulo para determinar a massa de catalisador que

deve ser retirado do processo. Dessa forma, pode-se obter diretamente da simulação a quantidade de catalisador que deve ser adquirida no processo, dado importante na estimativa de custos que será detalhada mais à frente no presente trabalho. A configuração foi feita de forma que a quantidade de catalisador retirada pelo separador de corrente é o inverso do número de ciclos de cada Caso analisado.

Figura 4.1: Fluxograma da simulação de produção de biodiesel via catálise heterogênea com MgO (Caso 1)

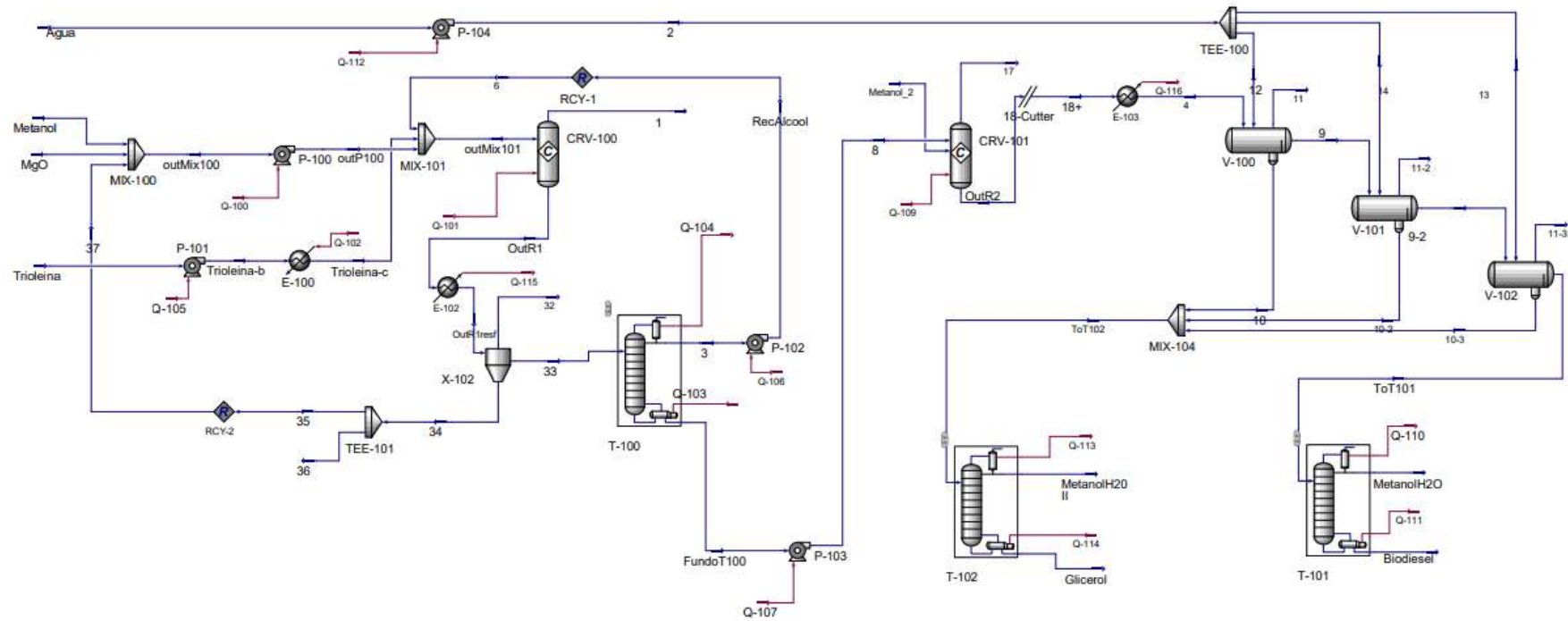


Figura 4.2: Fluxograma da simulação de produção de biodiesel via catálise heterogênea com SrO (Caso 2)

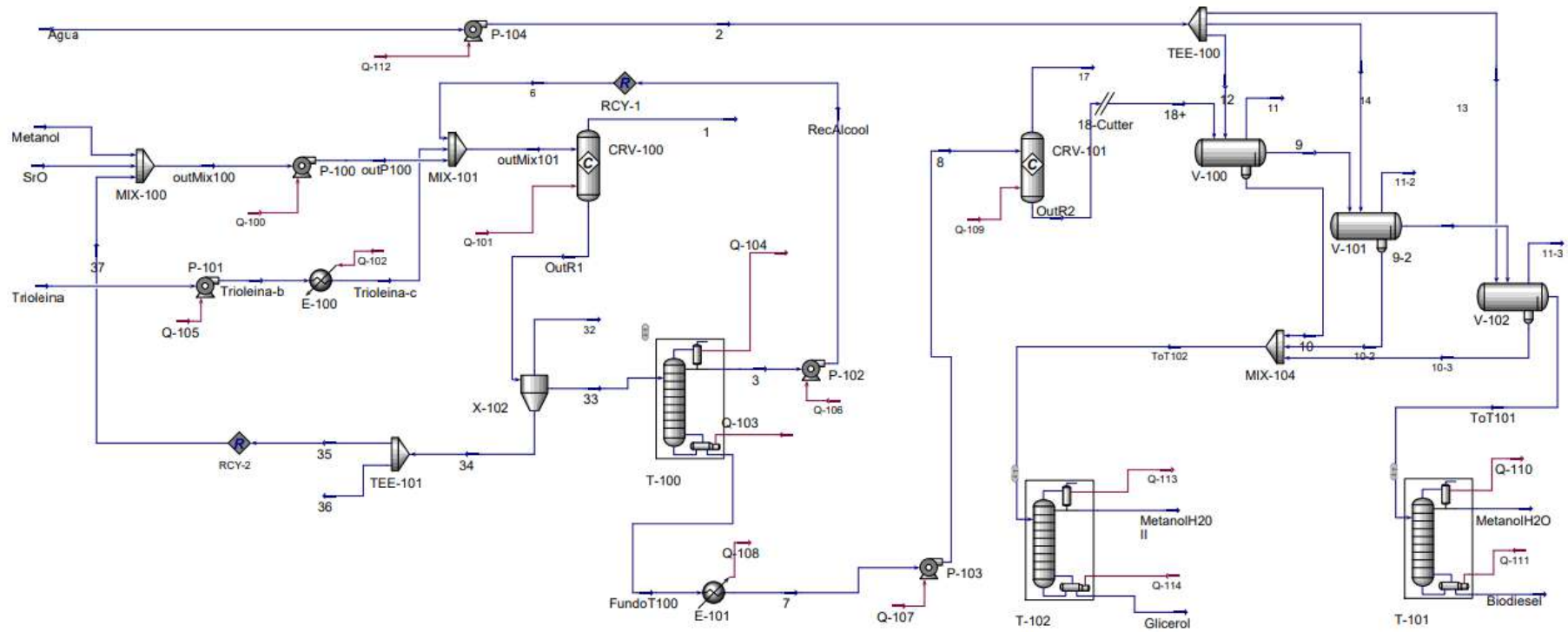


Figura 4.3 Fluxograma da simulação de produção de biodiesel via catálise heterogênea com PbO (Caso 3)

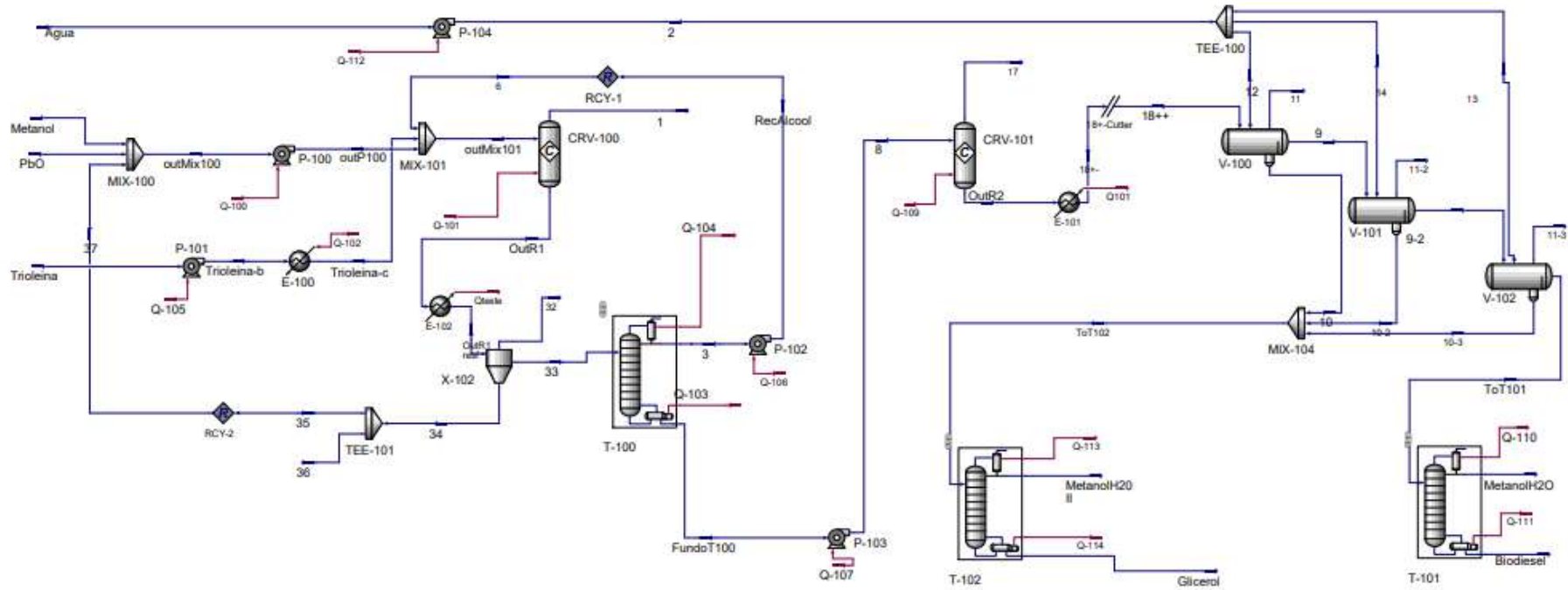


Figura 4.4: Fluxograma da simulação de produção de biodiesel via catálise heterogênea com Pb_3O_4 (Caso 4)

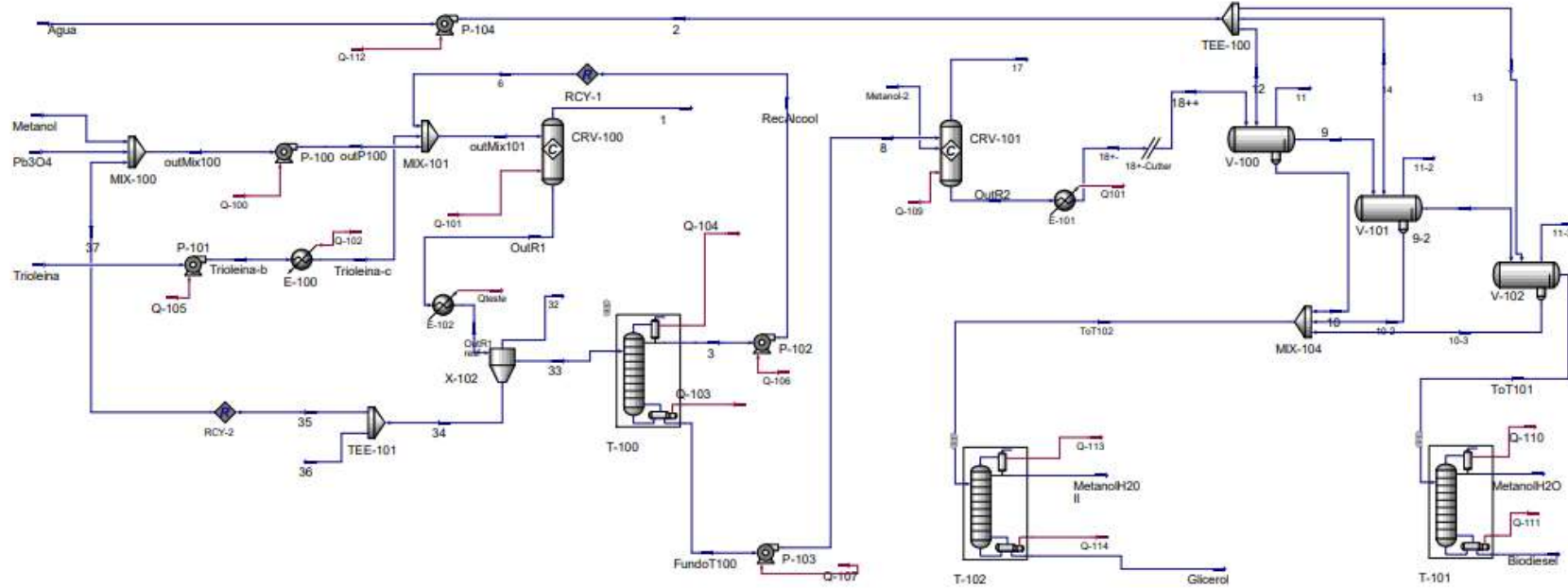


Tabela 4.2. Condições operacionais das Simulações

Parâmetro	Caso 1	Caso 2	Caso 3	Caso 4
Temperatura	180 °C	65 °C	150 °C	225 °C
Razão metanol/TG	12:1	12:1	7:1	7:1
%peso catalisador	3,3	3	1,7	1,7
Rendimento	95%	95%	89%	89%
Número de ciclos	5	10	7	7

Fonte: Elaboração própria, com dados de Serio et al. (2006); Liu et al. (2007); Singh et al. (2008) e Du et al. (2019).

Dessa forma, em cada simulação, a temperatura dos reatores foi configurada conforme a Tabela 4.2. Da mesma forma, a vazão de metanol e de catalisador foi alterada de forma a atingir as especificações necessárias. O rendimento também foi configurado nas reações de cada simulação. E o número de ciclos foi utilizado para determinar a quantidade de massa a ser retirada no separador de correntes mencionado mais adiante neste capítulo.

Dada a similaridade da estrutura geral das simulações, o processo será descrito, em detalhes, para o Caso 1. Para os demais casos, serão explicitadas somente as diferenças necessárias, caso existam. Informações específicas sobre as correntes de cada caso podem ser consultadas, individualmente, no Apêndice I deste trabalho.

4.2 Simulação do Caso 1

4.2.1 Correntes de Entrada e 1ª Transesterificação

As correntes de alimentação (trioleína, metanol e MgO), especificadas como descrito no capítulo anterior, necessitaram ser ajustadas para as condições específicas da reação, conforme descrito no artigo base (Tabela 4.2), antes de sua entrada no reator de transesterificação. Dessa forma, as correntes de álcool e catalisador foram previamente misturadas em um mixer (MIX-100). Em seguida, uma bomba (P-100) foi utilizada para pressurizar a mistura na pressão necessária para a reação (400 kPa). De maneira semelhante, a corrente de trioieína foi pressurizada (P-101) para a mesma pressão de operação e, em seguida, aquecida (E-100) para a temperatura da reação (180 °C). Ambas as correntes, por fim, foram combinadas via outro misturador (MIX-101). Neste misturador também existe uma corrente de entrada referente ao reciclo de metanol.

Finalmente, a corrente final contendo todos os reagentes pode ser direcionada ao

reator de conversão (CRV-100). Apesar de possuir duas correntes de saída, como pode ser visto na Figura 4.1, a corrente contendo os produtos é a corrente inferior. A corrente superior é uma requisição específica do simulador, porém não tem significado físico real.

As vazões das correntes de entrada foram ajustas de tal forma a não somente permitir a obtenção da vazão desejada de biodiesel ao final da simulação, mas também respeitando parâmetros experimentais do artigo base, como razão metanol:óleo e quantidade (em massa) de catalisador no reator.

4.2.2 Resfriamento da Corrente de Produto

Diferentemente da simulação de referência, para algumas das simulações do presente estudo foi adicionado um trocador de calor (E-102) logo após o reator de transesterificação. Esta alteração se deve às diferenças de condições operacionais. Algumas das simulações assumem que a transesterificação seja realizada em temperaturas de operação iguais ou superiores a 150 °C. Uma vez que acima desta temperatura tem-se efeitos de degradação do glicerol (YOUNG, 2015), resfriou-se a corrente antevendo-se a necessidade de se evitar a degradação deste coproduto, fonte de receita adicional do processo.

4.2.3 Recuperação de Catalisador e Metanol

A corrente de saída do reator contém os produtos da transesterificação (biodiesel e glicerol), como também reagentes não convertidos (metanol e trioleína), além do próprio catalisador sólido. De forma a simplificar as etapas seguintes e permitir a estimativa de gastos com catalisador ao longo da operação, optou-se por seguir as simulações de referência, mantendo-se o separador sólido-líquido (X-102) a fim de retirar-se todo o catalisador da corrente de produto.

Esta corrente é então enviada para um separador de correntes (TEE-101), o qual foi configurado para simular a quantidade de ciclos de operação estabelecida para cada catalisador, retirando parte da corrente de sólido a cada ciclo e permitindo uma melhor visualização da quantidade de catalisador necessária ao longo do tempo. O restante da corrente é reciclado e misturado junto às correntes de entrada no mixer (MIX-100).

A corrente de líquido de saída do separador sólido-líquido é, em seguida, enviada para uma coluna de destilação (T-100) a fim de recuperar parte do metanol e reciclá-lo. As

condições operacionais (razão de refluxo e vazão de destilação) da coluna foram ajustadas de forma a se obter uma corrente praticamente pura de metanol no topo (acima de 99,9%). A temperatura foi acompanhada como uma restrição do processo de forma a evitar degradação dos componentes.

4.2.4 2ª Transesterificação

A corrente de produto pós-recuperação de metanol é, então, enviada para uma segunda etapa de reação. A decisão de utilização de um segundo reator de transesterificação (CRV-101) foi baseada nas referências seguidas por Galvão (2019), que buscavam aumentar a conversão do processo (ABBASZADEH et al., 2012 e MARINKOVIC et al., 2016). O procedimento foi mantido visando a compatibilidade entre os processos analisados no presente trabalho.

Previamente a esta etapa, foram feitos alguns ajustes para algumas das condições simuladas. Nas simulações de referência foi necessário resfriar a corrente de entrada do reator devido ao fato de a temperatura da mesma após a destilação (para recuperação do metanol) estar acima da temperatura de reação (65 °C). Para algumas simulações deste trabalho, contudo, foi possível configurar a operação das colunas de destilação de forma a permitir a saída de uma corrente em temperaturas abaixo de 150 °C (evitando, dessa forma, a degradação do glicerol), porém em temperaturas próximas das condições de reação. Desta forma, retirou-se o resfriador intermediário entre a coluna de destilação (T-100) e o reator da segunda transesterificação (CRV-101).

Ainda, a corrente antes da entrada no reator CRV-101 foi repressurizada (P-103) de forma a reajustar a pressão de operação para 400 kPa. Por fim, foi adicionada uma corrente extra de metanol (metanol_2) para manutenção da razão metanol:óleo indicada.

4.2.5 Lavagem

A corrente de saída do reator CRV-101 segue para a etapa de lavagem, cujo objetivo é separar a fração rica em biodiesel da fração rica em glicerol para posterior purificação de ambos os produtos, de forma a fazê-los atingir a especificação necessária.

Dadas as altas temperaturas de reação, previamente aos vasos de lavagem foi inserido um trocador de calor (E-103) para redução da temperatura e otimização da lavagem. Esta etapa seguiu as simulações de referência, necessitando de três vasos de lavagem (V-

100/101/102) em série, utilizando água. A corrente de água foi dividida igualmente entre os estágios de lavagem por um separador de correntes (TEE-100).

O glicerol foi coletado na corrente inferior (líquido pesado) dos vasos, enquanto as correntes ricas em biodiesel foram coletadas na saída lateral (líquido leve). As correntes ricas em glicerol foram combinadas em um misturador (MIX-104) para posterior envio a uma coluna de destilação (T-102). A corrente rica em biodiesel também foi enviada a uma outra coluna de destilação (T-101) para purificação.

4.2.6 Purificação dos Produtos

As colunas de destilação (T-101/102) foram ajustadas tal qual a coluna T-100 mencionada anteriormente, alterando-se parâmetros de taxa de destilação, temperatura e vazão de refluxo, a fim de se obter glicerol e biodiesel dentro das especificações comerciais. Vale ressaltar que, para o caso do glicerol, alguns ajustes finos foram realizados na coluna de forma a garantir que a temperatura de saída do glicerol não excedesse 150 °C, para, novamente, evitar a degradação deste subproduto.

4.3 Simulação dos Casos 2, 3 e 4

Conforme mencionado, os fluxogramas das simulações são bastante semelhantes entre si. Portanto, a descrição completa dos fluxogramas não se faz necessária para os demais casos.

No que tange ao Caso 2, as diferenças estruturais frente ao Caso 1 residem em:

1. Não foi necessário adicionar um trocador de calor após a saída do reator da 1ª transesterificação, uma vez que a temperatura de reação era de 65 °C (como nas simulações de referência);
2. Foi necessário adicionar o resfriador entre a saída da coluna T-100 e o segundo reator (CRV-101) para adequar a temperatura da corrente às condições de reação;
3. Não foi necessário adicionar uma corrente de metanol no segundo reator para ajuste de razão molar metanol:óleo.

Para o Caso 3, por outro lado, a única distinção estrutural foi:

1. Não foi necessário adicionar uma corrente de metanol no segundo reator para ajuste de razão molar metanol:óleo.

Para o Caso 4, não há diferenças de estrutura frente à simulação do Caso 1.

É importante ressaltar, contudo, que todos os casos diferem entre si, para além dos pontos supracitados, no que se refere a condições operacionais (temperatura, razão metanol:óleo, conversão etc.), conforme descrito anteriormente neste capítulo.

5. Dimensionamento dos equipamentos

A partir dos resultados das simulações, foi possível realizar o dimensionamento dos equipamentos, etapa indispensável para a estimativa dos custos na análise econômica. O dimensionamento, tal qual para as simulações de referência, foi feito através de correlações e equações específicas para cada equipamento. Grande parte dos cálculos foram baseados nas orientações de Seider et al. (2016), conforme indicado ao longo do capítulo.

5.1 Reatores

Para os reatores utilizados na transesterificação do óleo de soja, foram dimensionados reatores CSTR (*continuous stirred tank*), onde foi assumida mistura ideal para efeitos de cálculo. Para determinação do volume dos tanques reacionais utilizados, é necessária, primeiramente, a solução do balanço de massa. Realizando o balanço de massa para o óleo de soja (simulado como trioleína), tem-se:

$$F_{A,0} = F_A + V(-r_A), \quad (5.1)$$

onde $F_{A,0}$ é a vazão molar de entrada de trioleína;

F_A é a vazão molar de saída de trioleína;

$-r_A$ é a taxa reacional em função da trioleína;

V é o volume do meio reacional.

Reescrevendo a vazão molar em função das concentrações e vazões volumétricas, pode-se modificar a Equação 5.1 conforme mostrado na Equação 5.2:

$$v \times C_{A,0} = v \times C_A + V(-r_A) \quad (5.2)$$

onde v é a vazão volumétrica no reator;

C_A é a concentração molar de trioleína;

$C_{A,0}$ é a concentração molar inicial de trioleína.

A taxa reacional, por sua vez, pode ser reescrita a partir da cinética da reação. Seguindo-se o dimensionamento das simulações de referência, onde tratou-se a reação de transesterificação como sendo irreversível e de segunda ordem:

$$-r_A = k C_A C_B \quad (5.3)$$

onde k é constante da velocidade de reação;

C_B se refere ao metanol.

As concentrações dos reagentes A (trioleína) e B (metanol) podem ser escritas em função do reagente limitante e da conversão pelas Equações 5.4 e 5.5:

$$C_A = C_{A,0}(1 - X_A) \quad (5.4)$$

$$C_B = C_{A,0}(\alpha - \beta X_A) \quad (5.5)$$

onde α é a razão molar entre os componentes B e A;

β é a razão estequiométrica entre os componentes B e A;

X_A é a conversão da reação.

Substituindo-se as Equações 5.3, 5.4 e 5.5 na Equação 5.2, obtém-se

$$C_{A,0} \times X_A = k \frac{V}{\nu} \times C_{A,0}^2 (1 - X_A) (\alpha - \beta X_A) \quad (5.6)$$

Os valores para cada variável podem ser obtidos facilmente em posse dos dados das simulações. A exceção está associada ao parâmetro cinético de velocidade de reação (k), o qual não é fornecido pelo simulador. Para a correta determinação do volume do reator, no entanto, este parâmetro também necessita ser determinado.

Para isso, foram utilizados os dados experimentais descritos por cada artigo de referência. Os experimentos foram feitos em reatores batelada. Portanto, o balanço de massa dos dados experimentais pode ser descrito por:

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} = -r_A \quad (5.7)$$

Rescrevendo-se a Equação 5.7 em função do reagente limitante e da conversão, utilizando-se as Equações 5.3, 5.4 e 5.5, e integrando-se a equação resultante, obtém-se o valor de k conforme a Equação 5.8.

$$t_b = \frac{1}{kC_{A,0}} \int_0^{X_{A,f}} \frac{1}{(1-X_A)(\alpha-\beta X_A)} \partial X_A \quad (5.8)$$

onde os limites de integração correspondem a $t_0 = 0$ até $t_b =$ tempo total de reação descrito no artigo

$X_{A,f}$ é a conversão resultante obtida no artigo.

Uma vez calculado o valor de k pela Equação 5.8, pode-se obter o volume pela Equação 6.6. Em seguida, foi incluído um fator de 10% para o *headspace*, com base na recomendação de Silla (2003). Para o dimensionamento final, a relação entre altura e diâmetro dos reatores foi estabelecida em 3:1.

O dimensionamento dos misturadores e serpentinas de cada reator seguiu as recomendações de Seider et al. (2016).

5.2 Colunas de destilação

As colunas de destilação foram dimensionadas utilizando o método de Leva, conforme descrito em Seider et al. (2016). Baseado no trabalho de Galvão (2019), as colunas foram consideradas como colunas recheadas, onde se utilizou anéis de Pall de 1 polegada (colunas com mais estágios) ou 2 polegadas (colunas com menor número de estágios).

O conjunto de Equações 5.9 a 5.14 foi usado para se calcular os diâmetros das colunas:

$$f\{\rho_L\} = -0,8787 + 2,6776 \left(\frac{\rho_{H_2O\langle L \rangle}}{\rho_L} \right) - 0,6313 \left(\frac{\rho_{H_2O\langle L \rangle}}{\rho_L} \right)^2 \quad (5.9)$$

$$f\{\mu_L\} = 0,96\mu_L^{0,19} \quad (5.10)$$

$$fF_{LG} = \frac{L}{G} \left(\frac{\rho_G}{\rho_L} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (5.11)$$

$$Y = \frac{U_f^2 F_p}{g} \left(\frac{\rho_G}{\rho_{H_2O(L)}} \right) f\{\rho_L\} f\{\mu_L\} \quad (5.12)$$

$$Y = \exp[-3,7121 - 1,0371(\ln F_{LG}) - 0,1501(\ln F_{LG})^2 - 0,007544(\ln F_{LG})^3] \quad (5.13)$$

$$D_T = \left(\frac{4G}{\pi(fU_f)\rho_G} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (5.14)$$

onde D_T é o diâmetro calculado;

G é a vazão mássica de vapor;

f é um fator de dimensionamento empírico que normalmente assume valor igual a 0,7;

U_f é a velocidade de inundação;

ρ_G é a densidade da fase vapor;

Y é o fator de velocidade de inundação (adimensional);

F_{LG} é um parâmetro relacionado aos fluxos internos de vapor e líquido na coluna;

$\rho_{H_2O(L)}$ é a densidade da água em fase líquida;

ρ_L é a densidade da fase líquida;

μ_L é a viscosidade da fase líquida;

g é a aceleração gravitacional;

F_p é o fator de empacotamento, relacionado ao tipo de recheio escolhido;

L é a vazão mássica de líquido.

O procedimento foi aplicado, para cada coluna, em três pontos: topo, fundo e centro. Seguindo o procedimento de Galvão (2019), o diâmetro utilizado foi o maior diâmetro encontrado.

Para altura da coluna, por sua vez, foi utilizado o método HETP (*Height Equivalent to a Theoretical Plate*). Embora não seja previsto no método, foi assumida eficiência de

70% para cada estágio das colunas simuladas (excetuando-se refeedor e condensador). A correlação utilizada foi baseada em Seider et al. (2016):

$$HETP = 1,5D_p + 0,5 \quad (5.15)$$

onde D_p é o diâmetro nominal do recheio da coluna (em polegadas).

HETP é a altura de prato equivalente (em pés)

A altura disponível para o condensadores foi obtida considerando-a como três quartos do diâmetro da coluna, enquanto o espaço disponível para o refeedor teve a altura assumida como um diâmetro inteiro.

5.3 Vasos de Lavagem

Os vasos de lavagem foram dimensionados considerando-os como um conjunto de vasos de mistura e decantadores. Para os vasos de mistura utilizaram-se as recomendações de Seider et al. (2016) de 1:1 para a relação altura:diâmetro e tempo de residência de 5 minutos (t_{res}). O volume foi determinado, portanto, por:

$$v \times t_{res} = V \quad (5.16)$$

onde v é a vazão volumétrica de entrada no vaso;

V é volume do vaso.

Os decantadores foram dimensionados utilizando razão comprimento:diâmetro de 4:1 e com metade da capacidade sendo utilizada. O cálculo de área de decantação foi feito utilizando as recomendações de Seider et al. (2016), onde estima-se uma relação de 1 ft² de área para cada 5 gal/min.

5.4 Trocadores de Calor

Para os trocadores de calor, Seider et al. (2016) sugerem que os trocadores com área de troca térmica superior a 200 ft devem ser projetados como casco e tubo de cabeça flutuante, enquanto trocadores com área de troca térmica inferior a 200 ft sejam projetados como trocadores duplo-tubo.

Para determinar a área de troca térmica, fez-se uso da Equação 5.17:

$$Q = UA_T \Delta T_{LM} \quad (5.17)$$

onde Q é a taxa de transferência de calor;

U é o coeficiente global de troca térmica;

A_T é a área total de troca térmica;

ΔT_{LM} é a média logarítmica da diferença de temperaturas.

Para determinação de A_T foram utilizados os dados da simulação para a taxa de transferência de calor e os valores de U , que como no trabalho de Galvão (2019) foram determinados a partir da análise de valores encontrados em Seider et al. (2016). Os fluidos de utilidade, por sua vez, foram determinados seguindo-se a metodologia de Young (2015). Dessa forma, as utilidades utilizadas nos processos foram:

- vapor saturado a 400 psi (temperatura de 229,2 °C);
- vapor superaquecido a 500 °C (2700 kPa);
- água a 25 °C, com variação de temperatura de 10 °C;
- amônia a 1,11 °C, com variação de temperatura de 10 °C.

6. Análise Econômica

A avaliação econômica e de sustentabilidade serão apresentadas de maneira separada. A etapa de avaliação econômica desenvolvida nesse capítulo tem como objetivo a comparação das quatro alternativas de catalisadores heterogêneos para produção de biodiesel. A análise de fluxo de caixa realizada no presente trabalho terá por único objetivo permitir a geração e determinação dos indicadores necessários para a correta aplicação da metodologia adotada na análise de sustentabilidade a qual será apresentada em maiores detalhes no próximo capítulo. Além disso, os resultados econômicos das simulações de referência de Galvão (2019) foram atualizados para valor presente, para permitir a análise conjunta de todos os casos.

Para as novas simulações, foram estimados os custos de produção, bem como o investimento inicial para a implantação da planta e sua receita em cada um dos casos. Esse trabalho visa obter uma estimativa preliminar de custos. Essa mesma abordagem pode ser encontrada, na literatura, em outros estudos relacionados a rotas de produção de biodiesel (ZHANG et al., 2003b; WEST et al., 2008; YOUNG, 2015; GALVÃO, 2019; PIRES, 2022).

Para o presente trabalho, foram considerados preços, em sua maioria, referentes a novembro de 2022. A comercialização de biodiesel não é mais realizada por leilão desde 2021, portanto, o biodiesel teve seu preço calculado a partir dos dados reportados pela Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis (ANP) em seu site, onde é mantida uma base de dados atualizada semanalmente com os preços de derivados do petróleo e biocombustíveis (tanto de produtores, quanto de importadores). Os preços são reportados em reais por litro. Assim, o preço utilizado nas análises econômicas foi calculado através da média dos valores praticados em 2022 combinados à densidade média do biodiesel e à cotação média do dólar na época (US\$ 1,00 a R\$ 5,3502).

Para os catalisadores, a busca foi realizada em duas fontes: o Comex Stat - base de dados oficiais do comércio exterior do Governo Federal (CS, 2022) - e Alibaba (Alibaba, 2022). No primeiro, é possível fazer a busca pela Nomenclatura Comum do Mercosul (número NCM) e geram-se os preços e quantidade de exportação e importação do produto desejado para 2022, em dólar americano (US\$) e quilograma líquido, respectivamente. Os valores médios foram obtidos a partir da razão entre esses valores em dólar por quilograma. Na segunda fonte, pode-se buscar pelo nome do produto. A busca foi feita

apenas por fornecedores que realizavam entregas no Brasil, analisando se as quantidades fornecidas atendiam à escala de produção simulada e se o grau de pureza era suficiente para atender às especificações.

Para o presente trabalho, foi escolhido o cenário de maior representatividade analisando o volume comercializado em ambas as bases de dados. Sendo assim, foram utilizados os valores do Alibaba para todos os catalisadores uma vez que as quantidades comercializadas no Comex Stat eram muito baixas, excetuando-se o óxido de estrôncio (SrO). Para este catalisador não foram encontrados preços específicos, por isso foi considerado o custo do carbonato de estrôncio somado ao custo de um calcinador, a ser detalhado mais à frente.

Para o metanol, glicerina e o óleo de soja, a base utilizada foi o Comex Stat, realizando-se uma média entre o valor das exportações e das importações (CS, 2022). O custo das utilidades - água e vapor (400 psi e superaquecido) - foram obtidos utilizando os valores reportados no Aspen HYSYS[®]. Para os valores de amônia e disposição de efluentes foram utilizados os valores recomendados por Perlingeiro (2005). Já o valor utilizado para a eletricidade foi obtido a partir do Informativo de Gestão do Setor Elétrico do segundo quadrimestre de 2022 (informativo mais recente até o momento da realização deste trabalho), desenvolvido pela Secretaria de Energia Elétrica do Ministério de Minas e Energia (MME,2022). No informativo são reportadas as tarifas elétricas praticadas para os diferentes setores do país em dólar por megawatts. Optou-se por utilizar a tarifa praticada para o setor industrial (em dólar por kilowatts). Os valores obtidos para cada insumo podem ser vistos na Tabela 6.1.

Tabela 6.1: Preços dos componentes utilizados nos processos.

Componente	Preço (US\$/kg)	Referência
Óleo Bruto	1,3579	(CS, 2022)
Metanol	0,5459	(CS, 2022)
Glicerina Bruta	0,6707	(CS, 2022)
Biodiesel	1,3428	(ANP, 2022b)
MgO	0,3435	(ALIBABA, 2022c; ALIBABA, 2022d)
SrCO₃	1,2832	(CS, 2022)
PbO	2,3375	(ALIBABA, 2022a; ALIBABA, 2022b; ALIBABA, 2022e)
Pb₃O₄	2,2051	(ALIBABA, 2022f; ALIBABA, 2022g)
Amônia (como utilidade) (US\$/kg)	0,00050	(PERLINGEIRO, 2005)
Vapor Superaquecido (US\$/kJ)	$2,5 \cdot 10^{-6}$	Aspen HYSYS [®]
Vapor 400 psi (US\$/kJ)	$2,2 \cdot 10^{-6}$	Aspen HYSYS [®]
Água Natural (US\$/kJ)	$2,12 \cdot 10^{-7}$	Aspen HYSYS [®]
Eletricidade (US\$/kWh)	0,10792	(MME,2022).
Disposição Efluentes	0,15000	(PERLINGEIRO, 2005)
Água	0,000020	Aspen HYSYS [®]

Fonte: Elaboração própria.

6.1 Investimento

Para a estimativa do investimento, portanto, é necessário determinar os custos de cada equipamento simulado. Para tal, foram utilizadas correlações propostas em Seider et al. (2016). As correlações foram elaboradas para um período específico. Assim, é necessário atualizar os custos obtidos para o valor presente de forma a obter avaliações econômicas mais precisas. As atualizações foram feitas utilizando-se o *Chemical Engineering Plant Cost Index* (PCI), o qual é atualizado mensalmente. Neste estudo, os valores de PCI utilizados foram de 567 (referente ao ano de 2013) e de 824,5 (referente a agosto de 2022, valor mais recente).

A fórmula para o cálculo da estimativa de investimento fixo é dada pela Equação 6.1.

$$I_f = 1,05 f_L \sum_i \frac{PCI}{PCI_b} C_i \quad (6.1)$$

onde I_f é o investimento fixo;

f_L é o fator de Lang;

PCI é o *Plant Cost Index* atual;

PCI_b é o *Plant Cost Index* para o ano base;

C_i é o custo f.o.b. de aquisição do equipamento i .

Foi mantido nesse trabalho o fator de Lang utilizado no trabalho de referência de Galvão (2019), ou seja, utilizou-se um valor de 4,8.

A metodologia para o dimensionamento dos custos individuais de cada equipamento será descrita a seguir e os resultados consolidados, para cada caso, estão referenciados no Apêndice II.

6.1.1 Custo das Bombas

O custo das bombas é dado pela Equação 6.2.

$$C_P = F_T F_M C_B \quad (6.2)$$

onde F_T é o fator associado ao tipo de bomba, número de estágios, orientação, frequência de rotação, vazão de líquido e altura manométrica;

F_M é o fator associado ao material da bomba;

C_B é o custo base obtido a partir das Equações 6.3 e 6.4

O valor de F_T é igual a 1, uma vez que as bombas são de um estágio, possuem orientação vertical e rotação de 3600 rpm. F_M é igual a 1,35 para bombas de aço carbono.

Para C_B , tem-se:

$$C_B = e^{(12,1656 - 1,1448 \ln(S) + 0,0862 [\ln(S)]^2)} \quad (6.3)$$

$$S = QH^{0,5} \quad (6.4)$$

onde Q é a vazão que passa na bomba em galões/min;

H é a altura manométrica em ft.

Nesse estudo, uma bomba não atendeu às especificações de bombas centrífugas, que são:

1. Vazão volumétrica entre 10 e 5.000 galões/min;
2. Altura manométrica entre 50 e 3200 ft;
3. Viscosidade cinemática abaixo de 100 centistokes.

Para esse caso, faz-se necessário o uso de uma bomba de engrenagem externa, e a estimativa de seu custo é obtida pelas Equações 6.5 e 6.6:

$$C_P = F_M C_B \quad (6.5)$$

$$C_B = e^{(8,2816 - 0,2918 \ln(Q) + 0,0743 [\ln(Q)]^2)} \quad (6.6)$$

onde F_M é o fator associado ao material da bomba, igual a 1,35;

C_B é o custo base obtido a partir das Equações 6.5 e 6.6;

Q é a vazão que passa na bomba em galões/min;

H é a altura manométrica em ft.

O Caso 1, que utiliza MgO como catalisador, foi o único em que esse tipo de bomba foi utilizado, para a bomba P-102, que não atingiu a vazão volumétrica mínima de 10 galões/min.

6.1.2 Custo dos Motores Elétricos

Além do custo das bombas calculado pelas Equações 6.3 e 6.6, faz-se necessário calcular o custo dos motores elétricos para o seu funcionamento, que é dado pela Equação 6.7:

$$C_M = F_T C_B \quad (6.7)$$

onde F_T é o fator associado ao tipo de motor, igual a 1,8.

C_B é o custo base, obtido a partir da Equação 6.8, relacionando a potência (Equação 6.9), η_p (Equação 6.10) e η_m (Equação 6.11):

$$C_B = e^{(5,9332+0,16829 \ln(P_C)-0,11056[\ln(P_C)]^2+0,071413[\ln(P_C)]^3-0,0063788[\ln(P_C)]^4)} \quad (6.8)$$

$$P_C = \frac{QH\rho}{33000\eta_p\eta_m} \quad (6.9)$$

$$\eta_p = -0,316 + 0,24015 \ln(Q) - 0,01199[\ln(Q)]^2 \quad (6.10)$$

$$\eta_m = 0,80 + 0,0319 \ln\left(\frac{QH\rho}{33000\eta_p}\right) - 0,00182 \left[\ln\left(\frac{QH\rho}{33000\eta_p}\right)\right]^2 \quad (6.11)$$

onde Q é a vazão que passa na bomba em galões/min;

H é a altura manométrica em ft;

ρ é a densidade do líquido em lb/galão.

6.1.3 Custo dos Trocadores de Calor

Trocadores do tipo casco e tubo têm o seu custo calculado pelas Equações 6.12 e 6.13:

$$C_{TC} = F_P F_M F_L C_B \quad (6.12)$$

$$C_B = e^{(11,4185-0,9288 \ln(A_T)+0,09861[\ln(A_T)]^2)} \quad (6.13)$$

onde A_T é a área externa dos tubos;

F_P é o fator relativo a correções para casos de reforço de pressão, considerado 1 neste estudo;

F_M é o fator relativo aos materiais utilizados para construção, nesse caso o aço carbono, seguindo a Equação 6.14;

F_L é a correção de comprimento de tubo, nesse estudo considerado igual a 1,25.

$$F_M = a + \left(\frac{A}{100}\right)^b \quad (6.14)$$

Os coeficientes a e b foram considerados zero, uma vez que se considerou aço carbono como material de construção dos trocadores.

Para casos em que a área de troca térmica do trocador seja inferior a 200 ft², estes foram dimensionados como trocadores do tipo duplo-tubo e seu custo pôde ser estimado pela Equação 6.15:

$$C_{TC} = e^{(7,21718+0,16 \ln(A_T))} \quad (6.15)$$

Por fim, para as serpentinas responsáveis pela manutenção das temperaturas nos reatores, o custo é dado pela Equação 6.16:

$$C_{TC} = e^{(8,2015+0,4343 \ln(A_T)+0,03812[\ln(A_T)]^2)} \quad (6.16)$$

6.1.4 Custo das Colunas de Destilação

O custo de colunas de destilação é a soma de duas contribuições: custo do vaso e custo de instalação de plataformas e escadas.

O custo do vaso (C_V) depende do peso W , em lb, e pode ser calculado pela Equação 6.17. O valor de W , por sua vez, pode ser obtido pela Equação 6.18:

$$C_V = e^{10,5449-0,4672 \ln(W)+0,05482 \ln(W)^2} \quad (6.17)$$

$$W = \pi(D + t_s)(L + 0,8D)t_s\rho_s \quad (6.18)$$

onde D é o diâmetro (interno) da coluna;

L é a altura da coluna;

t_s é a espessura da parede da coluna;

ρ_s é a densidade do material da coluna (aço carbono = 0,284 lb/in³).

O custo C_{PL} - plataformas e escadas - é dado pela Equação 6.19 e o custo total é dado pela Equação 6.20:

$$C_{PL} = 341(D)^{0,63316}(L)^{0,80161} \quad (6.19)$$

$$C_{CD} = F_M C_V + C_{PL} \quad (6.20)$$

onde F_M depende do material e vale 1 para o aço carbono.

A determinação da espessura da parede da coluna depende da pressão na qual ela opera. Para as colunas que operam a pressão atmosférica, a espessura pode ser calculada pela Equação 6.21:

$$t_s = \frac{10 D}{2SE - 12} \quad (6.21)$$

onde D é o diâmetro (interno) da coluna;

S é o máximo estresse suportado pelo material;

E é um termo relativo à eficiência de solda.

Para esse trabalho, utilizou-se 13.750 psi como valor de S e 0,85 como eficiência de solda, conforme adotado por Young (2015).

Os valores de espessura devem ainda respeitar valores mínimos por questões de segurança estrutural. Dessa maneira, se o valor calculado de espessura não satisfizer a espessura mínima da Tabela 6.2, deve-se adotar o valor mínimo correspondente. Ao valor obtido após conferência com a tabela, deve-se adicionar 1/8 de polegada devido à corrosão das paredes.

Tabela 6.2: Diâmetros mínimos para a parede de vasos verticais.

Diâmetro do Vaso (ft)	Espessura Mínima (in)
<4	1/4
4-6	5/16
6-8	3/8
8-10	7/16
10-12	1/2

Fonte: Seider et al. (2016)

Para colunas operadas a vácuo, deve-se utilizar a Equação 6.22 para cálculo da espessura das paredes. Essas colunas ainda devem ser equipadas com o aparato de vácuo, para o qual uma estimativa de custo é dada pela Equação 6.23:

$$t_s = 1,3D_0 \left(\frac{PL}{E_M D_0} \right) \quad (6.22)$$

onde D_0 é o diâmetro (externo) da coluna em in;

P é a pressão mínima de operação em psig;

L é a altura da coluna em in;

E_M é o módulo de elasticidade do material n a maior temperatura de operação.

$$C_{v\u00e1cuo} = 2,394 \left(\frac{G}{P} \right) \quad (6.23)$$

onde G é a vazão mássica de vapor no fundo em lb/h;

P é a pressão que deve ser alcançada em torr.

A última etapa é calcular os custos relacionados ao recheio da coluna. O volume de recheio pode ser obtido facilmente a partir do diâmetro interno e da altura do recheio. O custo de anéis de Pall de metal de 1 in é de aproximadamente 39 US\$/ft³ e o custo de anéis de 2 in é de 25 US\$/ft³.

6.1.5 Custo dos Reatores

A fórmula para a estimativa do custo dos vasos dos reatores, que são vasos verticais, é dada pela Equação 6.24 - sendo W calculado pela Equação 6.18 – e o custo das plataformas e escadas é dado pela Equação 6.25. Por fim, a custo total do reator é calculado segundo a Equação 6.26.

$$C_v = e^{(7,3190+0,18255 \ln(W)+0,02297[\ln(W)]^2)} \quad (6.24)$$

$$C_{PL} = 410(D)^{0,73950}(L)^{0,70684} \quad (6.25)$$

$$C_R = F_M C_V + C_{PL} \quad (6.26)$$

6.1.6 Custo do Sistema de Lavagem

Seguindo a metodologia utilizada para vasos, dimensionou-se o sistema de lavagem, composto por vasos misturadores e decantadores, desconsiderando o custo com plataformas e escadas. Foram considerados vasos horizontais e o material de ambos os equipamentos foi aço carbono. O custo é dado pela Equação 6.27, sendo W calculado pela Equação 6.18.

$$C_v = e^{(5,636+0,4599 \ln(W)+0,00582[\ln(W)]^2)} \quad (6.27)$$

6.1.7 Custo do Calcinador

Para a estimativa de custo do calcinador, seguiu-se a mesma abordagem do trabalho de referência (GALVÃO, 2019). Assim, utilizou-se o custo real do calcinador obtido em Mackenzie et al. (2007) como dado de referência.

A Equação 6.28 é a fórmula de custo para um calcinador fornecida em Seider et al. (2016):

$$C_p = 0,677Q^{0,81} \quad (6.28)$$

onde Q é o consumo energético em BTU/hora.

Considerando a proporcionalidade entre o consumo energético e a massa calcinada, obtém-se a Equação 6.29, que estima o custo do calcinador (C_{calci}) em função da massa de catalisador:

$$C_{calci} = 735,31m^{0,81} \quad (6.29)$$

onde m é a massa de catalisador reposta anualmente (ton/ano).

A partir da massa de catalisador repostada anualmente para a planta simulada, foi possível, portanto, extrapolar os custos e consumo energético para o calcinador simulado.

6.1.8 Custos de Produção

A estimativa dos custos de produção foi feita considerando a categorização em custos diretos, indiretos e despesas gerais, conforme Turton et al. (2018).

Dentro da categoria de custos indiretos consideram-se gastos que independem do nível de produção da planta, como estocagem de materiais, seguro e impostos. As despesas gerais, por sua vez, englobam custos administrativos, de comercialização dos produtos e de pesquisa e desenvolvimento (P&D). Os custos diretos, por fim, correspondem aos custos relacionados ao nível de produção da planta, como custo de matéria-prima, utilidades, mão de obra, manutenção e suprimentos, além de custos com patentes e *royalties*, tratamento de efluentes, dentre outros.

A premissa de horas de produção no ano seguiu os trabalhos de referência (GALVÃO, 2019; PIRES, 2022), considerando produção contínua (24 horas) durante 330 dias no ano. Dessa forma, o total de horas de produção considerado nos cálculos foi de 7.920 horas ao ano.

O custo com os insumos foi obtido diretamente pela combinação das vazões anuais com os custos de cada componente, obtidos conforme descrito no início deste capítulo. Para o custo de mão de obra, utilizou-se a Equação 6.30, conforme descrito por Turton et al. (2018):

$$N_{OP} = (6,29 + 31,7P^2 + 0,23N_{NP})^{0,5} \quad (6.30)$$

onde N_{OP} é o número de operários por turno;

P é o número de processos que envolvem o manuseio de sólidos, considerado 2 devido aos reatores de catálise heterogênea;

N_{NP} é a quantidade de equipamentos que não envolvem o manuseio de sólidos, excetuando-se vasos e bombas.

A partir da determinação do número de operários por turno, pode-se obter o custo total com mão de obra. Para isso, foram consultados salários médios de operadores industriais no Brasil, resultando em cerca de R\$ 2196,00 (GLASSDOOR, 2023). A este valor, de forma a obter-se o salário bruto, foram acrescentados encargos como férias, FGTS, multas por rescisão e previdência social num total de 39% sobre o salário médio (CORA, 2023) resultando em R\$ 3052,00.

As correlações para determinação dos demais custos diretos estão diretamente indicadas na tabela de resultados, no Capítulo 8.

7. Análise de Sustentabilidade

A etapa de análise de sustentabilidade descrita no presente capítulo baseia-se na avaliação de um conjunto de princípios de sustentabilidade qualitativos e de indicadores quantitativos. Tais aspectos serão analisados para cada um dos casos mencionados no trabalho de referência de Galvão (2019), bem como para os quatro novos casos propostos no presente estudo, permitindo a comparação entre eles e a definição, se houver, da melhor rota estudada, seguindo a denominação da Tabela 7.1.

Tabela 7.1. Descrição dos processos simulados

Caso	Descrição
R1	Catálise homogênea utilizando NaOH como catalisador
R2	Catálise heterogênea utilizando CaO puro como catalisador
R3	Catálise heterogênea utilizando resíduos de casca de ovo como catalisador
R4	Catálise heterogênea utilizando CaO tratado com metanol e glicerol como catalisador
1	Catálise heterogênea utilizando MgO como catalisador
2	Catálise heterogênea utilizando SrO como catalisador
3	Catálise heterogênea utilizando PbO como catalisador
4	Catálise heterogênea utilizando Pb ₃ O ₄ como catalisador

Fonte: Elaboração própria.

O presente trabalho foi desenvolvido baseando-se na metodologia descrita por Araújo et al. (2015), com os ajustes e considerações necessárias às particularidades das simulações e condições desenvolvidas neste estudo. O *software* utilizado para a obtenção dos resultados foi o Scilab® v6.1.1.

7.1 Metodologia

A metodologia proposta baseia-se em uma análise multicritério para a determinação de um melhor caso diante de diversas possibilidades; dessa forma, combina-se critérios qualitativos e quantitativos, que são julgados, ranqueados e analisados de acordo com o impacto observado para cada um dos casos, de modo que se obtenha a melhor opção.

Os princípios qualitativos assumidos, seguindo a metodologia proposta por Araújo et

al. (2015), foram os critérios de *design* verde (*Green Design Criteria – GDC*), apresentados na Tabela 7.2.

Tabela 7.2 Critérios de *design* verde

GDC	Descrição
1	Prevenir ao invés de tratar resíduos é a melhor estratégia de proteção ambiental
2	Incorporar todos os materiais utilizados no processo no produto final, projetando sob medida para as necessidades com a máxima eficiência
3	Uso e geração de substâncias que possuem baixa ou nenhuma toxicidade para a saúde humana e meio ambiente, enquanto preserva-se a eficácia de seu uso
4	Reconhecimento dos impactos ambientais e econômicos das necessidades de energia, minimizando-os
5	Uso de materiais renováveis em vez de materiais não renováveis
6	Evitar subprodutos, utilizando catalisadores o mais seletivos possível
7	Evitar derivação desnecessária e minimizar a complexidade dos produtos
8	O produto não deve persistir no ambiente após a utilização. A durabilidade direcionada, e não a imortalidade, deve ser um objetivo de <i>design</i>
9	Monitoramento e controle em tempo real do processo para minimizar a poluição e a liberação de substâncias perigosas
10	Incorporar uma abordagem holística e sistêmica para a redução de riscos
11	A complexidade deve ser vista como um investimento ao fazer escolhas de <i>design</i> na reciclagem, reutilização ou disposição correta de materiais
12	A diversidade de materiais em produtos multicomponentes deve ser minimizada para promover a desmontagem e a retenção de valor
13	Design para desempenho em uma "vida após a morte" comercial
14	Projetar de forma holística com soluções inovadoras, ao mesmo tempo em que se atende às especificidades geográficas e culturais

Fonte: Elaboração própria. Adaptado de Araújo et al. (2015)

Os indicadores quantitativos podem ser divididos em duas categorias, ambiental e econômica, e foram escolhidos com base na sua simplicidade de cálculo, disponibilidade de informações e referência da metodologia base, conforme Tabela 7.3.

Tabela 7.3 Indicadores Quantitativos

Aspecto Avaliado	Indicador	Descrição/ Fórmula
Ambiental	E-Factor	Resíduo total (kg/h) / Produto (kg/h)
	Intensidade de energia elétrica (EEI)	Energia elétrica utilizada (kW) / Produto (kg/h)
	Intensidade de energia térmica (TEI)	Energia térmica utilizada (kW) / Produto (kg/h)
	Intensidade de água	Água consumida (kg/h) / Produto (kg/h)
	Intensidade de carbono	CO ₂ emitido (kg/h) / Produto (kg/h)
Econômico	PE	Preço de equilíbrio do Biodiesel para lucro igual a zero
	VPL	Valor Presente Líquido
	TRAI*	Taxa de Retorno Anual sobre o Investimento
	LCC*	Custo de Ciclo de Vida (<i>lifecycle cost</i>)

Fonte: Elaboração própria. Adaptado de Araújo et al. (2015)

*Fórmulas descritas nas próximas seções.

7.1.1 Atribuição de notas para os GDC's

Para análise qualitativa, foram atribuídas notas para cada um dos GDC's de acordo com o nível de cumprimento de cada critério em cada um dos casos, seguindo a regra explicitada a seguir:

- 1 – Alto nível de cumprimento do GDC;
- 3 – Médio nível de cumprimento do GDC;
- 9 – Baixo nível de cumprimento do GDC.

É importante destacar que cinco critérios presentes no trabalho de Araújo et al. (2015) foram desconsiderados por não fazerem parte do escopo de análise do presente estudo.

7.1.2 Indicadores quantitativos

O cômputo dos indicadores quantitativos (Apêndice III) foi feito com base nos resultados dos balanços de massa e de energia fornecidos pelo próprio Aspen HYSYS®

v12.1.

Para o E-Factor, a partir das vazões mássicas de cada produto, foram somadas todas as vazões de saída, excetuando a de biodiesel e a de glicerina, para que assim se obtivesse a massa de resíduo, e dividiu-se isso pela soma dos produtos gerados.

Para a intensidade de energia elétrica consumida, considerou-se a energia requerida pelos motores dos equipamentos e dividiu-se pela soma dos produtos gerados. De forma análoga, para a energia térmica, considerou-se a energia requisitada pelos trocadores de calor, dividindo pelo mesmo denominador.

Para a intensidade de água, o numerador considerou a água consumida ao longo do processo para o resfriamento / aquecimento das correntes e na etapa de lavagem. E para o valor da intensidade de carbono, utilizou-se o valor diretamente fornecido pelo simulador para a quantidade de CO₂ equivalente emitido. Ambos os indicadores foram divididos pela soma total de produtos.

Para os indicadores econômicos, observa-se pela análise econômica que as simulações, assim como previsto na literatura, não apresentam lucro. Desta forma, a simples análise de indicadores como VPL e TRAI não seria aplicável. Assim, para a análise de sustentabilidade, considerou-se um cenário para o qual o preço do biodiesel estivesse 15% acima do preço de equilíbrio calculado para cada caso, de modo que se pudesse ter uma base comparativa em um cenário de retorno do investimento.

Quatro são os indicadores econômicos, sendo eles o Preço de Equilíbrio do Biodiesel - vide Tabela 8.4, Valor Presente Líquido (VPL), a Taxa de Retorno Anual sobre o Investimento (TRAI) e o Custo de Ciclo de Vida (LCC).

Para o segundo, fez-se necessário a projeção do fluxo de caixa, Apêndice IV. Para isso, premissas foram consideradas para a simplificação da análise:

- Receita e custo constantes ao longo do tempo;
- Operação da planta iniciada apenas no quarto ano, sendo os três primeiros exclusivos para investimento e construção;
- Ciclo de vida da planta igual a 23 anos (de operação);
- Taxa mínima de atratividade (TMA) igual a 20%, definida de modo que fosse superior à Taxa Selic igual a 13,65% (EXAME, 2023), por ser um bom indexador,

e que estivesse dentro da faixa considerada dentre as referências analisadas. Além disso, o valor definido também levou em consideração o panorama atual da indústria do biodiesel com uma complexa regulamentação, sendo assim mais conservador, tendo um um alto risco atrelado

Assim, seguindo a Equação 8.1, o VPL foi calculado para cada um dos casos:

$$VPL = \sum_{i=1}^t \frac{CF_i}{(1+r)^i} \quad (8.1)$$

onde CF_i é o fluxo de caixa no ano i ;

t é o tempo de operação em anos;

r é a taxa de desconto (considerada igual à taxa de mínima atratividade).

O Custo de Ciclo de Vida é dado pela Equação 8.2:

$$LCC = \frac{C_P + t(C_{OP})}{tP_A} \quad (8.2)$$

onde C_P é o custo de capital, englobando os custos dos equipamentos para o funcionamento da planta;

C_{OP} é o custo de operação, englobando os custos diretos e indiretos, necessários para que a planta opere, como mão de obra, matéria-prima e manutenção;

t é o tempo de operação da planta;

P_A é a produção anual (ton).

Para a TRAI, tem-se que ela será dada pela Equação 8.3. Diferentemente do lucro líquido, ela considera a depreciação.

$$TRAI = \frac{(\text{lucro líquido após taxas} - \text{depreciação})}{(\text{investimento total})} \quad (8.3)$$

Assim, obteve-se uma matriz M_{ij} , sendo i os critérios de performance escolhidos e j o número os casos analisados. Dando prosseguimento à análise, normalizou-se a matriz, dividindo-a pela média de cada uma das métricas, obtendo-se a matriz NM_{ij} e, a partir dos valores obtidos, foram atribuídos valores para cada um dos critérios seguindo a regra a seguir (Apêndice III):

- 1 – Boa performance, se $NM_{ij} < 1$;
- 3 – Performance regular, se $1 \leq NM_{ij} < 3$;
- 9 – Performance ruim, se $NM_{ij} \geq 3$.

7.1.3 Cálculo do índice de criticidade dos critérios de *design* verde (GDCl)

O índice de criticidade representa o quão crítico um determinado critério é para um processo. Para o cálculo foram considerados pesos iguais para todos os critérios de *design* verde, de modo que, nesse caso, o índice de criticidade para cada um dos critérios (GDCl) é dado pela Equação 8.4:

$$GDCl = GD \cdot \left(\frac{1}{nc}\right) \quad (8.4)$$

onde GD é a matriz com as notas atribuídas para cada um dos critérios de *design* verde em cada caso;

nc é o número de critérios. O produto desse índice com os indicadores quantitativos normalizados resulta em uma matriz de gravidade.

7.1.4 Cálculo do fator de criticidade e grau de sustentabilidade

De modo a auxiliar no processo de tomada de decisão, dois índices individuais são propostos para a análise de sustentabilidade, sendo eles o fator de criticidade (CF) e o grau de sustentabilidade (SD). Estes podem ser calculados pelas Equações 8.5, 8.6 e 8.7:

$$CF = GDCI_{np \times 1} * (NM_{np \times nm} * \begin{bmatrix} 1 \\ \dots \\ 1 \end{bmatrix}_{nm \times 1}) \quad (8.5)$$

$$SI = \frac{100}{cf_{ref}} CF \quad (8.6)$$

$$SD = 100 * \begin{bmatrix} 1/si_1 \\ \dots \\ 1/si_{np} \end{bmatrix}_{np \times 1} \quad (8.7)$$

onde cf_{ref} é o fator de criticidade para um processo de referência escolhido dentre os em análise;

SI é o índice de severidade.

8. Resultados e Discussão

8.1 Avaliação Econômica

A partir das simulações, dos dimensionamentos e precificação dos equipamentos, e das estimativas de custos com base em correlações, foi possível gerar os resultados econômicos das plantas de produção de biodiesel para cada um dos catalisadores heterogêneos avaliados neste trabalho. Além disso, foi possível a atualização para valor presente das simulações de referência. Estes resultados estão sintetizados na Tabela 8.1.

Tabela 8.1: Resultados econômicos para cada condição (em US\$ x 10⁻⁶).

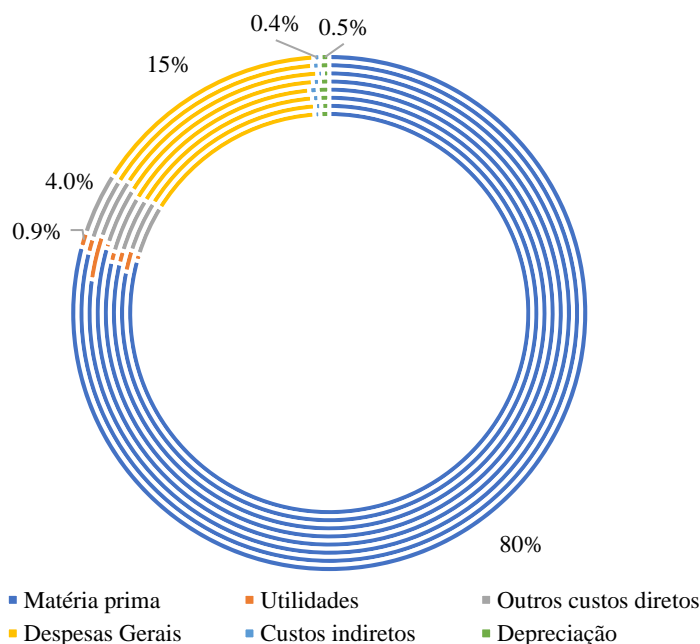
	R1	R2	R3	R4	1	2	3	4
INVESTIMENTO								
Custo Total dos Equipamentos	3,55	3,03	3,53	4,02	3,37	2,17	3,03	2,75
Investimento Fixo, CFC	17,90	15,29	17,80	20,24	17,00	10,95	15,28	13,87
Capital de Giro, CWC = 0,15CFC	3,36	2,87	3,34	3,79	3,19	2,05	2,87	2,60
Investimento Total, CTC = CFC + CWC	21,25	18,16	21,14	24,03	20,19	13,01	18,15	16,46
CUSTOS DIRETOS								
Matéria prima								
Óleo vegetal	191,43	188,20	186,05	186,05	186,05	186,05	186,05	186,05
Metanol	9,14	9,30	9,14	9,28	26,83	17,59	10,94	17,32
Catalisador e Solventes								
H ₂ SO ₄	0,32	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
NaOH	0,54	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Água	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Catalisador heterogêneo								
Mão de Obra, COL	0,29	0,54	0,54	0,54	0,54	0,54	0,54	0,54
Supervisão Técnica, CSC = 0,15COL	0,04	0,08	0,08	0,08	0,08	0,08	0,08	0,08
Utilidades								
Vapor Superaquecido	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Vapor 400 psi	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Água de Resfriamento	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Eletricidade								
Amônia	1,39	4,20	2,37	1,89	1,01	7,70	2,37	2,37
Disposição de Efluentes								
Manutenção e Reparos, CMR = 0,06CFC	1,07	0,92	1,07	1,21	1,01	0,66	0,91	0,82
Suprimentos Operacionais, COS = 0,15CMR	0,16	0,14	0,16	0,18	0,15	0,10	0,14	0,12
Encargos de Laboratório, CLC = 0,15COL	0,04	0,08	0,08	0,08	0,08	0,08	0,08	0,08
Patentes e Royalties, CPR = 0,03CTP	7,56	7,53	7,39	7,39	8,00	7,91	7,48	7,69
Subtotal	213,20	211,93	207,76	207,55	225,00	222,80	210,42	216,64
CUSTOS INDIRETOS								
Empacotamento e Estocagem, COPS = 0,60 (COL+CSC+CMR)	0,85	0,92	1,01	1,10	0,98	0,77	0,92	0,87
Impostos Locais, LT = 0,015CFC	0,27	0,23	0,27	0,30	0,25	0,16	0,23	0,21
Seguro, IN = 0,005CFC	0,09	0,08	0,09	0,10	0,08	0,05	0,08	0,07
Subtotal	1,20	1,23	1,37	1,51	1,32	0,99	1,22	1,14
DESPESAS GERAIS								
Custos Administrativos, CAD = 0,25COPS	0,21	0,23	0,25	0,28	0,25	0,19	0,23	0,22
Distribuição e Venda dos Produtos, CDS = 0,10CTP	25,21	25,10	24,63	24,63	26,65	26,35	24,93	25,65
Pesquisa e Desenvolvimento, CRD = 0,05CTP	12,61	12,55	12,32	12,31	13,33	13,18	12,46	12,82
Subtotal	38,03	37,89	37,20	37,22	40,23	39,72	37,62	38,69
Custo Total de Produção, CTP	252,11	251,04	246,33	246,27	266,54	263,50	249,26	256,47
RECEITA								
Vendas Anuais de Biodiesel	185,25	186,40	184,51	184,77	184,70	184,25	184,78	183,78
Crédito Anual de Glicerina	9,76	9,85	9,15	9,04	9,07	9,73	9,12	8,96
Vendas Anuais de Na ₂ SO ₄	0,53	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Receita total	195,55	196,25	193,66	193,81	193,78	193,98	193,90	192,75
Lucro Líquido Anual	-56,57	-54,79	-52,67	-52,46	-72,77	-69,52	-55,36	-63,73
PREÇO DE EQUILÍBRIO DO ÓLEO DE SOJA (US\$/Kg)	1,03	1,03	1,04	1,04	0,92	0,94	1,03	0,98
PREÇO DE EQUILÍBRIO DO BIODIESEL (US\$/Kg)	1,75	1,74	1,73	1,72	1,87	1,85	1,75	1,81

Fonte: Elaboração própria com base nas correlações de Turton et al. (2018)

Conforme se pode observar pela linha de lucro líquido anual da Tabela 8.1, para qualquer caso, a planta simulada apresenta prejuízo, não sendo um investimento economicamente viável. Estes resultados são esperados e já foram reportados em trabalhos anteriores (ZHANG et al., 2003; WEST et al.; YOUNG, 2015; GALVÃO, 2019; PIRES, 2022; dentre outros). Ou seja, a produção de biodiesel de maneira isolada não se configura como um processo rentável, necessitando de incentivos governamentais para tornar-se economicamente viável. Sendo assim, foram avaliados os preços de equilíbrio para o óleo de soja e o biodiesel a partir dos quais a planta viesse a dar lucro, conforme será discutido mais à frente.

Dentre os principais motivos que dificultam a rentabilidade de investimentos voltados para a produção de biodiesel está o custo com matérias-primas. Por utilizar-se de óleos vegetais que possuem outros fins considerados mais nobres (principalmente alimentação), o custo de matéria-prima é muito próximo ao custo do próprio biodiesel (vide Tabela 7.1), o que estreita as possibilidades de lucro do empreendimento. A contribuição relativa de cada tipo de custo no custo total de produção pode ser observada na Figura 8.1.

Figura 8.1: Contribuição dos custos (por tipo) para o custo total de produção (R1 - círculo interno - ao 4 - círculo externo)



Fonte: Elaboração própria.

O gráfico exibe os oito casos em conjunto de maneira crescente da circunferência

interna até a exterior, ou seja, a circunferência mais interna corresponde ao Caso R1, enquanto a circunferência mais externa corresponde ao Caso 4. Por motivos visuais, optou-se por mostrar as porcentagens numéricas somente para um dos casos (Caso 4). No entanto, como se pode observar, as proporções de custo se mantêm em todos os casos.

Do gráfico observa-se que, em média, cerca de 80% dos custos de produção estão associados às matérias-primas. Este resultado está em linha com outros estudos como, por exemplo, o Plano Decenal de Expansão de Energia 2032 da EPE (EPE, 2022b). A maior parte do custo com matéria-prima está associada ao óleo de soja assumido como fonte de triglicerídeos nas simulações, correspondendo a cerca de 90% do custo total com matéria-prima.

Por sua vez, avaliando-se a contribuição relativa de cada um dos equipamentos no investimento total, Figura 8.2, vê-se que os custos dos reatores e colunas de destilação (que incluem refeedores e condensadores) contribuem com, aproximadamente, 93% do investimento.

Considerando-se que o dimensionamento dos reatores foi realizado com base em hipóteses e variáveis experimentais dos artigos base, é razoável que ocorram maiores variações associadas a estes equipamentos. Entre os reatores, vê-se que os casos com maiores contribuições percentuais são os Casos R3 e R4 (CaO a partir de casca de ovos e tratado com glicerol, respectivamente), enquanto as menores contribuições foram os Casos 1 e 2 (MgO e SrO). Isso pode ser explicado pelo fato dos Casos R3 e R4 possuírem os maiores tempos reacionais (180 minutos), enquanto os Casos 1 e 2 apresentam os menores (entre 30 a 60 minutos). Conforme demonstrado nos capítulos anteriores, os tempos de residência influenciam diretamente no volume requerido para os reatores e, por consequência, nos seus custos.

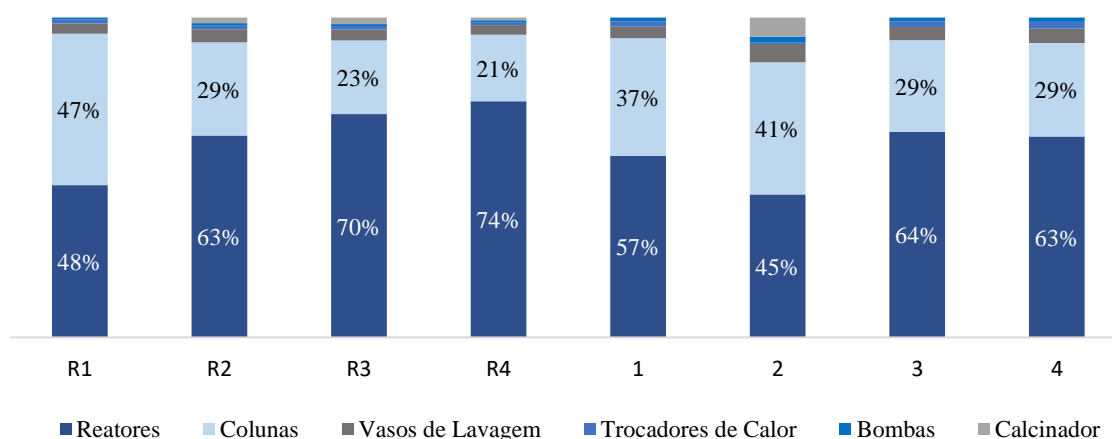
Para as colunas de destilação, por sua vez, vê-se que as maiores contribuições foram para os Casos R1, 1 e 2, enquanto para os outros casos a contribuição relativa foi, em média, muito próxima. Para o Caso R1, a coluna T-102 (de purificação do glicerol) necessitou de um número maior de pratos teóricos (mais do que o dobro para os outros Casos) e de uma altura cerca de três vezes maior para atingir a especificação de pureza necessária para o glicerol. Além disso, a coluna operou sob temperaturas de fundo mais severas que as outras colunas (cerca do dobro), requerendo maior vazão de utilidade no refeedor. Todos esses fatores contribuíram, significativamente, para o aumento de custo

desta coluna frente aos outros casos. Para os Casos 1 e 2, por sua vez, o principal fator contribuidor para as diferenças observadas estão associadas à altura das colunas T-100 (reciclo de metanol) e T-102, que também foram maiores que a média.

É válido ressaltar que para o Caso R1, correspondente à catálise homogênea, a necessidade de condições mais extremas e tamanhos maiores na coluna de tratamento de glicerol contribuíram para o aumento dos custos quando comparado aos casos heterogêneos, indicando uma vantagem destes.

Outra pequena diferença está associada aos custos com trocadores de calor, uma vez que o Caso 2 (catálise utilizando óxido de estrôncio) necessitou de um trocador de calor a menos por operar em temperaturas mais brandas. Além disso, observa-se que para os Casos R2, R3, R4 e 2 foi adicionado um calcinador, conforme explicado no Capítulo 7.

Figura 8.2: Contribuição relativa dos equipamentos no investimento fixo



Fonte: Elaboração própria.

Por fim, também foram realizadas análises de sensibilidade para algumas variáveis do processo. Dentre as variáveis analisadas, a que apresentou efeitos mais consideráveis na lucratividade do processo foi o custo de aquisição da matéria-prima principal, o óleo de soja. Conforme a Tabela 8.2, é necessário que o preço do óleo de soja caia, em média, para valores em torno de US\$ 1,00/kg para que o processo atinja o ponto com lucro zero. Tal redução corresponde a uma queda média de 26% no preço considerado inicialmente (Tabela 7.1).

Tabela 8.2: Preços de equilíbrio do óleo de soja.

Condição	Preço (US\$/kg)	Variação
R1	1,03	- 24%
R2	1,03	- 24%
R3	1,04	- 23%
R4	1,04	- 23%
1	0,92	- 32%
2	0,94	- 31%
3	1,03	- 24%
4	0,98	- 28%

Fonte: Elaboração própria.

O custo do óleo de soja, portanto, deveria variar entre, no máximo, US\$ 0,92 (MgO) e US\$ 1,04 (CaO a partir de casca de ovos). Tendo isso em vista, foi feita uma avaliação dos dados históricos para o óleo de soja no Comex Stat entre 2018 e 2022. Entre os meses de 2021 e 2022, o preço médio do óleo de soja se manteve em torno de US\$ 1,25 e, portanto, acima do preço de equilíbrio encontrado para qualquer caso simulado. Entre 2018 e 2020, no entanto, a média do preço estava em torno de US\$ 0,70, o que tornaria os preços de equilíbrio encontrados na tabela acima viáveis para todas as alternativas processuais.

A mesma análise foi feita para outras variáveis, contudo foram necessárias variações muito extensas para obter-se mudanças significativas nos resultados econômicos, indicando baixa sensibilidade a estes fatores. Um exemplo foi a análise variando-se o custo de venda da glicerina, onde seria necessária uma variação de mais de 700% para se atingir o patamar de lucro zero, o que não é factível em um cenário real de investimento.

Para o biodiesel, por fim, o preço de equilíbrio foi analisado pautado com base na variação de dois critérios, o lucro líquido anual e a taxa de retorno anual do investimento, de forma a observar os efeitos da depreciação na dinâmica do preço. Para ambos os critérios, foram buscados os preços que levassem os valores a zero. A Tabela 8.3 resume os resultados obtidos.

Tabela 8.3: Preços de equilíbrio do biodiesel.

Condição	Lucro Líquido		TRAI	
	Preço (US\$/kg)	Δ (%)	Preço (US\$/kg)	Δ (%)
R1	1,75	31%	1,75	31%
R2	1,74	29%	1,76	31%
R3	1,73	29%	1,75	30%
R4	1,72	28%	1,75	31%
1	1,87	39%	1,90	41%
2	1,85	38%	1,87	39%
3	1,75	30%	1,77	32%
4	1,81	35%	1,83	36%

Fonte: Elaboração própria.

A análise dos preços de equilíbrio revela que o preço do biodiesel para o qual a planta começaria a apresentar lucro varia entre US\$ 1,72 (Caso R4 – CaO) e US\$ 1,90 (Caso 1-MgO) nos diferentes cenários analisados, e que a depreciação em influência marginal neste valor. Portanto, em média, o preço de equilíbrio necessário ao biodiesel é de US\$ 1,78/kg, o que equivale a um aumento de preço de, aproximadamente, 32% frente ao preço de venda adotado inicialmente no presente trabalho. Comparando com o histórico de preços do biodiesel no ano de 2022, a partir dos dados reportados pela Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis em seu portal eletrônico (ANP, 2022b), tem-se que o preço máximo atingido foi de US\$ 1,43, não sendo suficiente atingir o ponto de equilíbrio nos casos em estudo.

A partir dos resultados, percebe-se, também, que quatro casos utilizando catalisadores heterogêneos (R2 – CaO, R3 – CaO de resíduos de casca de ovo, R4 – CaO tratado com glicerol e 3 – PbO) apresentaram preços de equilíbrio menores frente ao Caso R1 (catálise homogênea), evidenciando vantagens econômicas da catálise heterogênea frente à catálise homogênea. De forma mais restrita, vê-se que os Casos R3 e R4 foram os que apresentaram, em linhas gerais, os melhores resultados econômicos (conforme Tabela 8.1): menores custos com catalisador, menores preços de equilíbrio para o biodiesel e maiores preços de equilíbrio para o óleo de soja. Ou seja, os Casos R3 e R4 atingem o preço de equilíbrio mesmo com a venda de biodiesel a preços menores ou comprando-se a matéria-prima a preços mais elevados frente aos outros casos, indicando maior resiliência e, portanto, possibilidades de rentabilidade.

Logo, o catalisador mais indicado, sob o viés econômico, foi o CaO. Comparando todos os catalisadores heterogêneos avaliados, nota-se que, após o CaO, o PbO é o segundo mais vantajoso economicamente, seguido de Pb₃O₄, SrO e MgO. Além disso, conforme mencionado anteriormente, alguns casos heterogêneos apresentaram performance econômica igual ou superior ao caso homogêneo, o que indica oportunidades de desenvolvimento da catálise heterogênea no mercado brasileiro de biodiesel.

8.2 Avaliação de Sustentabilidade

A partir do procedimento explicitado no Capítulo 7, uma análise de sustentabilidade pode ser feita para cada um dos catalisadores avaliados. É válido ressaltar, que, conforme mencionado no capítulo anterior, foi-se utilizada como premissa o preço do biodiesel 15% acima do preço de equilíbrio para que se tivesse uma base comparativa em um cenário com retorno do investimento.

Primeiramente, um mapa com as notas atribuídas para cada um dos critérios em relação ao comprometimento com as GDCs pode ser observado na Figura 8.3. Os valores foram atribuídos a partir de uma análise exclusiva dos autores, sendo assim, para uma análise mais aprofundada, outras perspectivas poderiam ser consideradas.

Figura 8.3: Mapa de comprometimento com os critérios de *design* verde

	GDC #1	GDC #2	GDC #3	GDC #5	GDC #6	GDC #7	GDC #8	GDC #11	GDC #14	GDCI
R1	9	3	3	3	1	3	3	3	9	4,11
R2	1	1	1	3	1	1	3	1	3	1,67
R3	1	1	1	1	1	1	3	1	1	1,22
R4	3	3	3	3	1	3	3	1	3	2,56
1	3	9	1	3	1	1	3	1	3	2,78
2	3	3	3	3	1	1	3	1	3	2,33
3	1	1	9	3	1	3	3	1	3	2,78
4	1	3	9	3	1	3	3	1	3	3,00

Fonte: Elaboração própria.

Verticalmente, observa-se que para os GDC#1, GDC#2 e GDC#7 tem-se uma disparidade entre as notas atribuídas para os casos analisados com CaO (R2, R3 e R4), sendo o Caso R4 (CaO tratado com metanol e glicerol) o com maior impacto ambiental. Isso pode ser explicado por esse processo ter um menor rendimento e, conseqüentemente, gerar mais resíduos. Ainda, analisa-se que para o GDC#2, o Caso 1, que utiliza MgO, apresenta o maior impacto e isso pode ser explicado por este processo apresentar maior quantidade de resíduos que os demais. O maior volume de resíduos pode ser justificado por dois principais motivos: a elevada razão entre metanol e triglicerídeos, 12:1, e um

menor número de ciclos do catalisador, de modo que, conseqüentemente, se tenha mais resíduos de catalisador sendo dispensados. Outro destaque é para a relevância do GDC#3 nos casos que utilizam chumbo como catalisador (Casos 3 e 4), uma vez que este é altamente tóxico. Além disso, para o Caso R4, o GDC#3 é relevante, uma vez que não só o metanol é utilizado como reagente no processo, como ele também é utilizado, em conjunto com o glicerol, para tratar previamente o catalisador de óxido de cálcio.

Horizontalmente, e utilizando o GDCI como critério de comparação, tem-se que os casos que utilizam óxido de cálcio padrão (R2) e obtido a partir de casca de ovos (R3) são os com menor impacto ambiental de acordo com este critério, o que corrobora para o fato de estas serem as propostas mais difundidas na literatura. As vantagens deste último são decorrentes dos GDC#5 e GDC#14. O primeiro é em função do catalisador obtido a partir de fontes alternativas ser renovável quando em comparação ao catalisador puro obtido a partir da mineração. Enquanto pelo GDC#14, dada a inovação na forma de se obter matéria-prima para o catalisador, o óxido de cálcio obtido a partir de fonte alternativa destaca-se em relação ao óxido de cálcio convencional.

Além disso, observa-se que todas as alternativas heterogêneas (R2, R3, R4, 1, 2, 3 e 4) apresentam melhores resultados que o processo com catálise homogênea (R1). Isso pode ser justificado pelo fato do processo de reação homogênea, R1, gerar como resíduo sulfato de sódio, impactando o GDC#1; por requerer uma coluna de maior complexidade, dada a necessidade de se ter uma retirada lateral de Na_2SO_4 , impactando o GDC#11; e, por fim, por ser uma solução menos inovadora no mercado quando comparada com os novos catalisadores em estudo, impactando o GDC#14.

Os balanços de massa e energia para os processos resultaram no cálculo das métricas individuais mostradas na Tabela 8.4, bem como nos indicadores quantitativos mostrados na Figura 8.4.

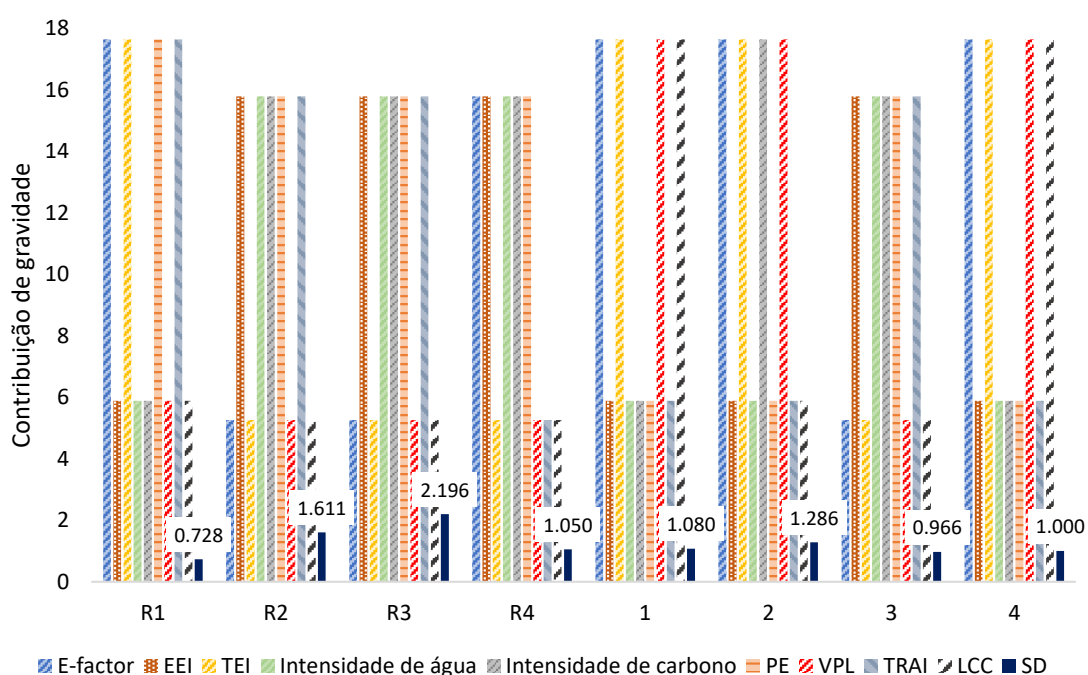
Tabela 8.4: Métricas individuais de performance

Condição	CF	SI	SD
R1	69,889	137,037	0,730
R2	31,667	62,092	1,611
R3	23,222	45,534	2,196
R4	48,556	95,207	1,050
1	47,222	92,593	1,080
2	39,667	77,778	1,286
3	52,778	103,486	0,966
4	51,000	100,000	1,000

Fonte: Elaboração própria.

Figura 8.4: Indicadores quantitativos calculados para cada caso em estudo

E-factor, Intensidade de energia elétrica (EEI), Intensidade de energia térmica (TEI), Intensidade de água, Intensidade de carbono, Preço de equilíbrio (PE), Valor Present Líquido (VPL), Taxa de Retorno Anual sobre o Investimento (TRAI), Custo de Ciclo de Vida (LCC), Grau de Sustentabilidade (SD)



Fonte: Elaboração própria.

Fazendo uma análise da Figura 8.4, tem-se que para a catálise homogênea (R1), alternativa amplamente utilizada atualmente na indústria, as contribuições mais

significativas para o fraco desempenho ambiental do processo são o E-factor (quantidade de resíduo gerado) e a intensidade de energia térmica. Além disso, pelo aspecto econômico, o preço de equilíbrio e a Taxa de Retorno Anual sobre o Investimento são as contribuições dominantes. Para os Casos R2 e R3, utilizando óxido de cálcio puro e a partir de casca de ovo como catalisador, as principais contribuições são da intensidade de energia elétrica, de água e de carbono, além do PE e da TRAI no âmbito econômico. Para o Caso R4, no qual o catalisador CaO é tratado com metanol e glicerol, o E-Factor soma-se a estes fatores, enquanto a TRAI deixa de ser tão importante.

Analisando os catalisadores alvos do presente estudo, para os casos utilizando MgO (1) e Pb3O4 (4), os indicadores com maiores contribuição são o E-factor (quantidade de resíduo gerado), a intensidade de energia térmica, o Valor Presente Líquido (VPL) e o Custo de Ciclo de Vida (LCC). O Caso 2, que utiliza SrO como catalisador, tem como contribuições mais significativas o E-factor, intensidade de energia térmica e de carbono, e o VPL. Por fim, o caso com óxido de chumbo (PbO) como catalisador, Caso 3, apresenta contribuições mais significativas da intensidade de energia elétrica, de água e de carbono do lado ambiental, e do preço de equilíbrio e da Taxa de Retorno Anual sobre o Investimento do ponto de vista econômico.

Compilando as análises, pode-se inferir que, por estas métricas - e considerando pesos igualitários para os aspectos econômicos e ambientais -, o caso que utiliza casca de ovos como matéria-prima para confecção do catalisador (R3) é o mais sustentável, por apresentar um menor fator de criticidade (23,222) e maior grau de sustentabilidade (2,196), Tabela 8.4. Isso significa que o menor custo e condições mais brandas de operação, como a temperatura de reação igual a 65 °C, justificam a utilização do CaO como catalisador em detrimento dos demais. Além disso, analisando apenas os catalisadores objetos de simulação no presente estudo, tem-se que o SrO, Caso 2, apresenta-se como o mais promissor ambientalmente, apesar de todos os casos apresentarem graus de sustentabilidade próximos, enquanto os catalisadores a base de PbO, Casos 3 e 4, perdem do ponto de vista ambiental devido à elevada toxicidade do metal. No entanto, apesar de sua toxicidade, ainda assim ficam em vantagem quando comparados à rota convencional homogênea, Caso R1, fator muito importante, uma vez que essa é a rota mais utilizada atualmente.

9. Conclusão e Sugestões

As análises realizadas no presente trabalho foram executadas a partir de simulações no *software* Aspen HYSYS® v12.1 e com rotinas em Scilab® v6.1.1. A partir das premissas adotadas (vide Capítulo 4) e em posse dos dados das correntes obtidos pelo simulador (Apêndice I), foram resolvidos os balanços de massa e energia e foram realizados os cálculos necessários ao dimensionamento dos equipamentos e à determinação dos custos para a análise econômica. Estes dados também foram aplicados nas rotinas da análise de sustentabilidade.

A análise econômica revela que o preço de equilíbrio do biodiesel para as alternativas processuais simuladas varia entre US\$ 1,72 (Caso R4 – CaO) e US\$ 1,90 (Caso 1- MgO) nos diferentes casos analisados. A comparação com histórico de preços do biodiesel em 2022 indicou que os preços praticados não seriam suficientes para retornar resultados lucrativos para os casos em estudo, mas tampouco para rota convencional (Caso R1), demandando incentivos governamentais.

Uma análise semelhante indica que o preço de equilíbrio do óleo de soja, por sua vez, poderia variar entre US\$ 0,92 (Caso 1 – MgO) e US\$ 1,04 (Caso 3 – CaO a partir de casca de ovos). A comparação com histórico de preços nos últimos anos, indicou que um retorno aos patamares de preço observados entre 2018 e 2020 poderia propiciar a viabilidade de todos os casos avaliados.

Através tanto da análise econômica quanto da análise de sustentabilidade, pode-se perceber uma nítida vantagem econômica e ambiental dos catalisadores a base de CaO (R2, R3 e R4) em relação aos demais óxidos, e uma vantagem maior ainda em produzi-los a partir de fontes alternativas (R3). Essa conclusão corrobora com uma tendência na linha de pesquisas que pode ser observada na área sobre a utilização de biomassa como matéria-prima para catalisadores na produção de biodiesel. Assim como as cascas de ovos, conchas de ostras, cascas de caranguejo e resíduos ósseos de animais estão sendo estudados para este fim, uma vez que apresentam como vantagem a possibilidade de agregar valor a esses resíduos, além de mitigar os problemas causados pelo descarte inadequado dos mesmos (Proença et al., 2019).

Analisando apenas os catalisadores objetos de simulação no presente estudo, tem-se que o SrO, Caso 2, apresenta-se como o mais promissor ambientalmente, apesar de todos

os casos apresentarem graus de sustentabilidade próximos e sempre melhores que o da rota convencional (catálise homogênea alcalina). Embora economicamente interessantes entre os catalisadores heterogêneos, catalisadores a base de chumbo, Casos 3 e 4, perdem do ponto de vista ambiental devido à elevada toxicidade do metal.

Como oportunidades de aprofundamento, cabe citar a otimização dos processos e utilização de modelagens mais rigorosas (cinéticas) de forma a refinar os resultados econômicos obtidos. Além disso, para a análise de sustentabilidade, pode-se atribuir diferentes pesos no cálculo do GDCI em função de uma análise mais robusta do mercado e das políticas públicas ligadas à indústria do biodiesel, de modo a se gerar uma avaliação mais criteriosa. Seguindo a mesma abordagem, para a atribuição de notas para os critérios de *design* verde é interessante que diferentes perspectivas sejam coletadas, de modo a conferir maior robustez para a análise e evitar enviesamentos, dado o seu caráter subjetivo.

10. Referências Bibliográficas

Abbaszaadeh, A., Ghobadian, B., Omidkhah, M. R., & Najafi, G. (2012). Current biodiesel production technologies: A comparative review. *Energy Conversion and Management*, 63, 138–148. <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2012.02.027>

Ali, S. D., Javed, I. N., Rana, U. A., Nazar, M. F., Ahmed, W., Junaid, A., Pasha, M., Nazir, R., & Nazir, R. (2017). Novel SrO-CaO mixed metal oxides catalyst for ultrasonic-assisted transesterification of jatropha oil into biodiesel. *Australian Journal of Chemistry*, 70(3), 258–264. <https://doi.org/10.1071/CH16236>

Alibaba. (2022a). Pbo litharge de óxido de chumbo amarelo 99.5% pó de pureza cas: 1317-36-8. Disponível em: < https://portuguese.alibaba.com/p-detail/PbO-62093889782.html?spm=a2700.galleryofferlist.normal_offer.d_title.219ad511YIzZO9> . Acesso em: 20 de dezembro de 2022.

Alibaba. (2022b). Bateria de alta qualidade grau de óxido de chumbo amarelo litharge pbo. Disponível em: <https://portuguese.alibaba.com/p-detail/Lead-1600565722996.html?spm=a2700.galleryofferlist.normal_offer.d_title.19e7d511Daazxn&s=p> . Acesso em: 20 de dezembro de 2022.

Alibaba. (2022c). 85% 88% 90% 92% 95% Óxido de magnésio MgO precio. Disponível em: < https://portuguese.alibaba.com/p-detail/Mgo-60611668220.html?spm=a2700.galleryofferlist.normal_offer.d_title.3169d511K60N9p&s=p> . Acesso em: 20 de dezembro de 2022.

Alibaba. (2022d). Óxido de magnésio usado para extração de urânio 235 mgo 97% 96% 95% preço. Disponível em: < https://portuguese.alibaba.com/p-detail/Magnesium-62128269645.html?spm=a2700.galleryofferlist.normal_offer.d_title.19e7d511Daazxn&s=p> Acesso em: 20 de dezembro de 2022.

Alibaba. (2022e). Litharge amarelo de óxido de chumbo pbo. Disponível: < https://portuguese.alibaba.com/p-detail/yellow-60428116092.html?spm=a2700.galleryofferlist.normal_offer.d_title.219ad511YIzZO9> . Acesso em: 20 de dezembro de 2022.

Alibaba. (2022f). Chumbo tetroxide pb3o4. Disponível em: <<https://portuguese.alibaba.com/p-detail/lead-60398815372.html?spm=a2700.details.0.0.4eb973f4NF4Cbm>>. Acesso em: 20 de dezembro de 2022.

Alibaba. (2022g). 98% óxido de chumbo vermelho pb3o4. Disponível em: < <https://portuguese.alibaba.com/p-detail/98-60409146350.html?spm=a2700.details.0.0.4eb973f4NF4Cbm>>. Acesso em: 20 de dezembro de 2022.

ANP, Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis. (2022a). Anuário Estatístico Brasileiro do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis. Disponível em: <<https://www.gov.br/anp/pt-br/centrais-de-conteudo/publicacoes/anuario-estatistico/anuario-estatistico-2022>> . Acesso em: 20 de novembro de 2022.

ANP, Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis. (2022b). Preços médios ponderados semanais praticados por produtores e importadores de derivados de petróleo e biodiesel. Disponível em: < <https://www.gov.br/anp/pt-br/assuntos/precos-e-defesa-da-concorrenca/precos/precos-de-produtores-e-importadores-de-derivados-de-petroleo>>. Acesso em: 20 de dezembro de 2022.

Araújo, Q. F. O., Medeiros, L. J., Yokoyama, L., & Morgado, V. R. C. (2015). Metrics for sustainability analysis of post-combustion abatement of CO₂ emissions: Microalgae mediated routes and CCS (carbon capture and storage). *Energy*, 92, 556–568. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2015.03.116>

Azadi, H., de Jong, S., Derudder, B., de Maeyer, P., & Witlox, F. (2012). Bitter sweet: How sustainable is bio-ethanol production in Brazil? In *Renewable and Sustainable Energy Reviews* (Vol. 16, Issue 6, pp. 3599–3603). <https://doi.org/10.1016/j.rser.2012.03.015>

Bashir, M. A., Wu, S., Zhu, J., Krosuri, A., Khan, M. U., & Ndeddy Aka, R. J. (2022). Recent development of advanced processing technologies for biodiesel production: A critical review. In *Fuel Processing Technology* (Vol. 227). Elsevier B.V. <https://doi.org/10.1016/j.fuproc.2021.107120>

BP, British Petroleum (2022). Statistical Review of World Energy 2022. Disponível em <<https://www.bp.com/en/global/corporate/energy-economics/statistical-review-of-world-energy.html>>. Acesso em: 26 de novembro de 2022.

Bournay, L., Casanave, D., Delfort, B., Hillion, G., & Chodorge, J. A. (2005). New heterogeneous process for biodiesel production: A way to improve the quality and the value of the crude glycerin produced by biodiesel plants. *Catalysis Today*, 106(1–4), 190–192. <https://doi.org/10.1016/j.cattod.2005.07.181>

Cantrell, D. G., Gillie, L. J., Lee, A. F., & Wilson, K. (2005). Structure-reactivity correlations in MgAl hydrotalcite catalysts for biodiesel synthesis. *Applied Catalysis A: General*, 287(2), 183–190. <https://doi.org/10.1016/j.apcata.2005.03.027>

CASAS, A. Liquid–liquid phase equilibria for soybean oil methanolysis: Experimental, modeling, and data prediction. (2014). *Industrial & Engineering Chemistry Research*, v. 53(9).3731–3736.

Castro, L. da S., Barañano, A. G. (2019). Produção de biodiesel, métodos, perspectivas para o Brasil – uma revisão. *Revista Liberato*, 20(33), 41–56. <https://doi.org/0.31514/rliberato.2019v20n33.p41>

CEPEA, Centro de Estudos Avançados em Economia Aplicada – ESALQ/USP, ABIOVE, Associação Brasileira das Indústrias de Óleos Vegetais. (2022). PIB, Emprego e Comércio Exterior nas Cadeias Agropecuárias. Disponível em <<https://www.cepea.esalq.usp.br/br/releases/cepea-e-abiove-passam-a-divulgar-dados-ineditos-de-geracao-de-pib-empregos-e-comercio-exterior-da-cadeia-da-soja-e-de-biodiesel.aspx>>. Acesso em 12 de janeiro de 2023.

CNA, Confederação Nacional de Agricultura e Pecuário do Brasil. (2022). Mercado

mundial de diesel e perspectivas que impactam a produção agropecuária brasileira. Disponível em <<https://cnabrazil.org.br/publicacoes/mercado-em-foco-mercado-mundial-de-diesel-e-perspectivas-que-impactam-a-producao-agropecuaria-brasileira>>. Acesso em 15 de novembro de 2022.

CORA. (2023). O que são encargos trabalhistas e como fazer os cálculos?. Disponível em: <<https://www.cora.com.br/blog/encargos-trabalhistas/>>. Acesso em: 25 de fevereiro de 2023.

CS, ComexStat. (2022). Exportação e Importação Geral. Disponível em: <<http://comexstat.mdic.gov.br/pt/geral>>. Acesso em: 12 de Dezembro de 2022.

Dabdoub, M. J., & Bronzel, J. L. (2009). Biodiesel: visão crítica do status atual e perspectivas na academia e na indústria. In *Quim. Nova* (Vol. 32, Issue 3).

Demirbas, A. (2008). Biodiesel: A realistic fuel alternative for diesel engines. In *Biodiesel: A Realistic Fuel Alternative for Diesel Engines*. Springer London. <https://doi.org/10.1007/978-1-84628-995-8>

Di Serio, M., Ledda, M., Cozzolino, M., Minutillo, G., Tesser, R., & Santacesaria, E. (2006). Transesterification of soybean oil to biodiesel by using heterogeneous basic catalysts. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 45(9), 3009–3014. <https://doi.org/10.1021/ie051402o>

Du, L., Li, Z., Ding, S., Chen, C., Qu, S., Yi, W., Lu, J., & Ding, J. (2019). Synthesis and characterization of carbon-based MgO catalysts for biodiesel production from castor oil. *Fuel*, 258. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2019.116122>

Duarte, V. H., Valetini, K. H. M., Santos, B. G., Nadaletti, C. W. & Vieira, B. (2022). Biocombustíveis: uma revisão sobre o panorama histórico, produção e aplicações do biodiesel. *Meio Ambiente (Brasil)*, v.4, n.2, p.50-68.

EPE, Empresa de Pesquisa Energética. (2022a). Análise de Conjunta dos Biocombustíveis – Ano 2021. Disponível em <<https://www.epe.gov.br/pt/publicacoes-dados-abertos/publicacoes/analise-de-conjuntura-dos-biocombustiveis-2021>>. Acesso em 4 de dezembro de 2022.

EPE, Empresa de Pesquisa Energética. (2022b). Estudos do Plano Decenal de Expansão de Energia 2032. Disponível em <<https://www.epe.gov.br/pt/publicacoes-dados-abertos/publicacoes/plano-decena-de-expansao-de-energia-2032>>. Acesso em 14 de novembro de 2022.

EMBRAPA, Empresa Brasileira de Pesquisa Agropecuária. (2021). Transesterificação. Disponível em <<https://www.embrapa.br/agencia-de-informacao-tecnologica/tematicas/agroenergia/biodiesel/tecnologia/transesterificacao>>. Acesso em 09 de novembro de 2022.

Fard, R. G. Z., Jafari, D., Palizian, M., & Esfandyari, M. (2019). Biodiesel production from beef tallow using the barium oxide catalyst. *Reaction Kinetics, Mechanisms and Catalysis*, 128(2), 723–738. <https://doi.org/10.1007/s11144-019-01672-z>

Galina, D.; Porto, P. S. da S.; Freitas, R. R. (2018). Study of the technologies for biodiesel production from microalgae of the Genus *nannochloropsis*. *Research, Society and Development* (v.7.n.12). <https://doi.org/10.33448/rsd-v7i12.482>

Galvão, C. M. (2019). Simulação e avaliação econômica da produção de biodiesel de soja via catálise heterogênea. Trabalho de Conclusão de Curso – Escola de Química, Universidade Federal do Rio de Janeiro. Rio de Janeiro, p.152.

Gebremariam, S. N., & Marchetti, J. M. (2018). Economics of biodiesel production: Review. In *Energy Conversion and Management* (Vol. 168, pp. 74–84). Elsevier Ltd. <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2018.05.002>

Glassdoor. (2023). Salários do cargo de Operador Industrial – Brasil. Disponível em: <https://www.glassdoor.com.br/Sal%C3%A1rios/operador-industrial-sal%C3%A1rio-SRCH_K00,19.htm> Acesso em: 25 de fevereiro de 2023.

Gryglewicz, S. (1999). Rapeseed oil methyl esters preparation using heterogeneous catalysts. *Bioresource Technology*, 70(3), 249-253. [https://doi.org/10.1016/S0960-8524\(99\)00042-5](https://doi.org/10.1016/S0960-8524(99)00042-5)

Hattori, H. (1995). Heterogeneous Basic Catalysis. In *Chem. Rev.* 95(5), 537-558. <https://doi.org/10.1021/cr00035a005>

Hattori, H., Shima, M., & Kabashima, H. (2000). Alcoholysis of ester and epoxide catalyzed by solid bases. *12th International Congress on Catalysis, Proceedings of the 12th ICC*, 3507–3512. doi:10.1016/s0167-2991(00)80566-2

Haynes, W. M., Lide, D.R., Bruno, T. J. (2014). *CRC Handbook of Chemistry and Physics*. CRC Press. 95ed.

Hanif, S., Alsaiari, M., Ahmad, M., Sultana, S., Zafar, M., Rozina, Harraz, F. A., Alharbi, A. F., Abahussain, A. A. M., & Ahmad, Z. (2022). Membrane reactor based synthesis of biodiesel from *Toona ciliata* seed oil using barium oxide nano catalyst. *Chemosphere*, 308. <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2022.136458>

Jamil, F., Al-Haj, L., Al-Muhtaseb, A. H., Al-Hinai, M. A., Baawain, M., Rashid, U., & Ahmad, M. N. M. (2018). Current scenario of catalysts for biodiesel production: A critical review. In *Reviews in Chemical Engineering* (Vol. 34, Issue 2, pp. 267–297). Walter de Gruyter GmbH. <https://doi.org/10.1515/revce-2016-0026>

Jamil, F., Al-Riyami, M., Al-Haj, L., Al-Muhtaseb, A. H., Myint, M. T. Z., Baawain, M., & Al-Abri, M. (2021). Waste *Balanites aegyptiaca* seed oil as a potential source for biodiesel production in the presence of a novel mixed metallic oxide catalyst. *International Journal of Energy Research*, 45(12), 17189–17202. <https://doi.org/10.1002/er.5609>

Khan, A. M., & Fatima, N. (2016). Biodiesel synthesis via metal oxides and metal chlorides catalysis from marine alga *Melanothamnus afaqhusainii*. *Chinese Journal of Chemical Engineering*, 24(3), 388–393. <https://doi.org/10.1016/j.cjche.2015.12.015>

Kiss, F. E., Jovanović, M., & Bošković, G. C. (2010). Economic and ecological aspects

of biodiesel production over homogeneous and heterogeneous catalysts. *Fuel Processing Technology*, 91(10), 1316–1320. <https://doi.org/10.1016/j.fuproc.2010.05.001>

Knothe, G. (2010). History of Vegetable Oil-Based Diesel Fuels. In *The Biodiesel Handbook: Second Edition* (pp. 5–19). Elsevier Inc. <https://doi.org/10.1016/B978-1-893997-62-2.50007-3>

Kouzu, M., Kasuno, T., Tajika, M., Sugimoto, Y., Yamanaka, S., & Hidaka, J. (2008). Calcium oxide as a solid base catalyst for transesterification of soybean oil and its application to biodiesel production. *Fuel*, 87(12), 2798–2806. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2007.10.019>

Kuss, V. V., Kuss, A. V., da Rosa, R. G., Aranda, D. A. G., & Cruz, Y. R. (2015). Potential of biodiesel production from palm oil at Brazilian Amazon. In *Renewable and Sustainable Energy Reviews* (Vol. 50, pp. 1013–1020). Elsevier Ltd. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2015.05.055>

Lam, M. K., Lee, K. T., & Mohamed, A. R. (2010). Homogeneous, heterogeneous and enzymatic catalysis for transesterification of high free fatty acid oil (waste cooking oil) to biodiesel: A review. In *Biotechnology Advances* (Vol. 28, Issue 4, pp. 500–518). <https://doi.org/10.1016/j.biotechadv.2010.03.002>

Leung, D. Y. C., & Guo, Y. (2006). Transesterification of neat and used frying oil: Optimization for biodiesel production. *Fuel Processing Technology*, 87(10), 883–890. <https://doi.org/10.1016/j.fuproc.2006.06.003>

Liu, X., He, H., Wang, Y., & Zhu, S. (2007). Transesterification of soybean oil to biodiesel using SrO as a solid base catalyst. *Catalysis Communications*, 8(7), 1107–1111. <https://doi.org/10.1016/j.catcom.2006.10.026>

Liu, X., He, H., Wang, Y., Zhu, S., & Piao, X. (2008). Transesterification of soybean oil to biodiesel using CaO as a solid base catalyst. *Fuel*, 87(2), 216–221. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2007.04.013>

Lourinho, G., & Brito, P. (2015). Advanced biodiesel production technologies: novel developments. In *Reviews in Environmental Science and Biotechnology* (Vol. 14, Issue 2, pp. 287–316). Kluwer Academic Publishers. <https://doi.org/10.1007/s11157-014-9359-x>

Mackenzie, A. et al. Economics of CO₂ capture using the calcium cycle with a pressurized fluidized bed combustor. *Energy & Fuels*, v. 21, n. 2, p. 920–926, 2007. <https://doi.org/10.1021/ef0603378>

Mansouri, S. S., Gargalo, C. L., Udugama, I. A., Ramin, P., Sales-Cruz, M., Sin, G., & Gernaey, K. v. (2019). *Economic Risk Analysis and Critical Comparison of Biodiesel Production Systems* (pp. 127–148). https://doi.org/10.1007/978-3-030-00985-4_6

MARINKOVIC, D. M. (2016). Calcium oxide as a promising heterogeneous catalyst for biodiesel production: Current state and perspectives. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, v. 56, p. 1387 – 1408.

- Martinez-Guerra, E., & Gude, V. G. (2014). Transesterification of used vegetable oil catalyzed by barium oxide under simultaneous microwave and ultrasound irradiations. *Energy Conversion and Management*, 88, 633–640. <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2014.08.060>
- Melnyk, Y., Starchevskiy, R., & Melnyk, S. (2020). Technological Aspects of Vegetable Oils Transesterification with Ethanol in the Presence of Metal Oxides. *Kemija u Industriji*, 69(7–8), 365–370. <https://doi.org/10.15255/kui.2019.059>
- Mizik, T., & Gyarmati, G. (2021). Economic and Sustainability of Biodiesel Production—A Systematic Literature Review. In *Clean Technologies* (Vol. 3, Issue 1, pp. 19–36). MDPI. <https://doi.org/10.3390/cleantechnol3010002>
- MME. Ministério de Minas e Energia. Secretaria de Energia Elétrica. Departamento de Gestão do Setor Elétrico. (2022). Informativo Gestão do Setor Elétrico 2º Quadrimestre 2022. Disponível em <<https://www.gov.br/mme/pt-br/assuntos/secretarias/energia-eletrica/publicacoes/informativo-gestao-setor-eletrico>>. Acesso em 12 de novembro de 2022.
- MOHSEN-NIA, M.; DARGAHI, M. Liquid-liquid equilibrium for systems of (corn oil + oleic acid + methanol or ethanol) at (303.15 and 313.15) k. (2007) *Journal of Chemical & Engineering Data*, v. 52(3), 910–914.
- Mootabadi, H., Salamatinia, B., Bhatia, S., & Abdullah, A. Z. (2010). Ultrasonic-assisted biodiesel production process from palm oil using alkaline earth metal oxides as the heterogeneous catalysts. *Fuel*, 89(8), 1818–1825. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2009.12.023>
- Murray, R., King, G., & Wyse-Mason, R. (2021). Micro-emulsification vs. transesterification: an investigation of the efficacy of methanol use in improving vegetable oil engine performance. *Biofuels*, 12(9), 1165–1174. <https://doi.org/10.1080/17597269.2019.1598316>
- Nair, P., Singh, B., Upadhyay, S. N., & Sharma, Y. C. (2012). Synthesis of biodiesel from low FFA waste frying oil using calcium oxide derived from Meretrix meretrix as a heterogeneous catalyst. *Journal of Cleaner Production*, 29–30, 82–90. <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2012.01.039>
- Nakatani, N., Takamori, H., Takeda, K., & Sakugawa, H. (2009). Transesterification of soybean oil using combusted oyster shell waste as a catalyst. *Bioresource Technology*, 100(3), 1510–1513. <https://doi.org/10.1016/j.biortech.2008.09.007>
- Orsi, M. H. (2021). Tecnologias de Produção de Biodiesel: Uma revisão. Trabalho de Conclusão de Curso – Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal de São Carlos. São Paulo, p.46.
- Pasha, M. K., Dai, L., Liu, D., Guo, M., & Du, W. (2021). An overview to process design, simulation and sustainability evaluation of biodiesel production. In *Biotechnology for Biofuels* (Vol. 14, Issue 1). BioMed Central Ltd. <https://doi.org/10.1186/s13068-021-01977-z>

Perlingeiro, C. (2005). Engenharia de processos: análise, simulação, otimização e síntese de processos químicos. Edgard Blücher.

Pires, D. V. (2022). Avaliação Técnica e Econômica de Diferentes Matérias-Primas para Produção de Biodiesel. Trabalho de Conclusão de Curso – Escola de Química, Universidade Federal do Rio de Janeiro. Rio de Janeiro, p.233.

Pousa, G. P. A. G., Santos, A. L. F., & Suarez, P. A. Z. (2007). History and policy of biodiesel in Brazil. *Energy Policy*, 35(11), 5393–5398. <https://doi.org/10.1016/j.enpol.2007.05.010>

Proença, B. S. G., Feihmann, A. C., Filho L. C., Beneti, S. C. (2019). Síntese de Catalisador à Base de Casca de Ovo Aplicado à Produção de Biodiesel. XI EPCC – Encontro Internacional de Produção Científica.

Ramos, L. P. ;, Silva, F. R. ;, Mangrich, A. S. ;, & Cordeiro, C. S. (2011). Tecnologias de Produção de Biodiesel Biodiesel Production Technologies. In *Rev. Virtual Quim* (Vol. 3, Issue 5). <http://www.uff.br/rvq>

Ramos, L. P., Kothe, V., César-Oliveira, M. A. F., Muniz-Wypych, A. S., Nakagaki, S., Krieger, N., Wypych, F., & Cordeiro, C. S. (2017). Biodiesel: Raw materials, production technologies and fuel properties. In *Revista Virtual de Química* (Vol. 9, Issue 1, pp. 317–369). Sociedade Brasileira de Química. <https://doi.org/10.21577/1984-6835.20170020>

Ruhul, A. M., Kalam, M. A., Masjuki, H. H., Fattah, I. M. R., Reham, S. S., & Rashed, M. M. (2015). State of the art of biodiesel production processes: A review of the heterogeneous catalyst. In *RSC Advances* (Vol. 5, Issue 122, pp. 101023–101044). Royal Society of Chemistry. <https://doi.org/10.1039/c5ra09862a>

Ruppert, A. M, Meeldijk J. D., Kuipers B.W.M, Erné B.H., Weckhuysen, B.M. (2008). Glycerol Etherification over Highly Active CaO-based Materials: New Mechanistic Aspects and Related Colloidal Particle Formation. In *Chemistry – A European Journal* (Vol. 14, Issue 7, pp. 2016 – 2024). <https://doi.org/10.1002/chem.200701757>

Sahani, S., & Sharma, Y. C. (2018). Economically viable production of biodiesel using a novel heterogeneous catalyst: Kinetic and thermodynamic investigations. *Energy Conversion and Management*, 171, 969–983. <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2018.06.059>

Salamatinia, B., Hashemizadeh, I., Abdullah, Z. A. (2013). Alkaline Earth Metal Oxide Catalysts for Biodiesel Production from Palm Oil: Elucidation of Process Behaviors and Modeling Using Response Surface Methodology. In *J. Chem. Chem. Eng* (Vol. 32, Issue 1). <https://doi.org/10.30492/IJCCE.2013.5911>

Sampaio, R. M., Beatriz, M., & Bonacelli, M. (n.d.). Tecnologias renováveis: interação entre políticas públicas e iniciativa privada, a partir da produção brasileira de biodiesel RESUMO. In *Tecnol. Soc* (Vol. 34).

Sankumgon, A., Assawadithalerd, M., Phasukarratchai, N., Chollacoop, N., & Tongcumpou, C. (2018). Properties and performance of microemulsion fuel: blending of jatropha oil, diesel, and ethanol- surfactant. *Renewable Energy Focus*, 24, 28–32.

<https://doi.org/10.1016/j.ref.2017.12.001>

Semwal, S., Arora, A. K., Badoni, R. P., & Tuli, D. K. (2011). Biodiesel production using heterogeneous catalysts. In *Bioresource Technology* (Vol. 102, Issue 3, pp. 2151–2161). <https://doi.org/10.1016/j.biortech.2010.10.080>

SEIDER, W. (2016). *Product and Process Design Principles: Synthesis, Analysis and Evaluation*. 4thed. John Wiley & Sons Incorporated.

Serio, M.D., Ledda, M., Cozzolino, M., Minutillo, G., Tesser, R. & Santacesaria, E. (2006). Transesterification of Soybean Oil to Biodiesel by Using Heterogeneous Basic Catalysts. In *Ind. Eng. Chem. Res* (Vol. 45, Issue 9., pp. 3009-3014). <https://doi.org/10.1021/ie051402o>

Shahbazi, F., Mahdavi, V., & Zolgharnein, J. (2020). Preparation and characterization of SrO/MgO nanocomposite as a novel and efficient base catalyst for biodiesel production from waste cooking oil: a statistical approach for optimization. *Journal of the Iranian Chemical Society*, 17(2), 333–349. <https://doi.org/10.1007/s13738-019-01772-6>

Silla, H. *Chemical Process Engineering: Design And Economics*. (2003). Taylor & Francis. (Chemical Industries).

Singh, D., Bhoi, R., Ganesh, A., & Mahajani, S. (2014). Synthesis of biodiesel from vegetable oil using supported metal oxide catalysts. *Energy and Fuels*, 28(4), 2743–2753. <https://doi.org/10.1021/ef500045x>

Singh, A. K., & Fernando, S. D. (2007). Reaction kinetics of soybean oil transesterification using heterogeneous metal oxide catalysts. *Chemical Engineering and Technology*, 30(12), 1716–1720. <https://doi.org/10.1002/ceat.200700274>

Singh, A. K., & Fernando, S. D. (2008). Transesterification of Soybean Oil Using Heterogeneous Catalysts. *Energy & Fuels*, 22(3), 2067–2069. <https://doi.org/10.1021/ef800072z>

Songstad, D. D., Lakshmanan, P., Chen, J., Gibbons, W., Hughes, S., & Nelson, R. (2009). Historical perspective of biofuels: Learning from the past to rediscover the future. In *In Vitro Cellular and Developmental Biology - Plant* (Vol. 45, Issue 3, pp. 189–192). <https://doi.org/10.1007/s11627-009-9218-6>

Sulaiman, N. F., Hashim, A. N. N., Toemen, S., Rosid, S. J. M., Mokhtar, W. N. A. W., Nadarajan, R., & Bakar, W. A. W. A. (2020). Biodiesel production from refined used cooking oil using co-metal oxide catalyzed transesterification. *Renewable Energy*, 153, 1–11. <https://doi.org/10.1016/j.renene.2020.01.158>

Tantirungrotechai, J., Thepwatee, S., & Yoosuk, B. (2013). Biodiesel synthesis over Sr/MgO solid base catalyst. *Fuel*, 106, 279–284. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2013.01.028>

Tavizón-Pozos, J. A., Chavez-Esquivel, G., Suárez-Toriello, V. A., Santolalla-Vargas, C. E., Luévano-Rivas, O. A., Valdés-Martínez, O. U., Talavera-López, A., & Rodríguez, J. A. (2021). State of art of alkaline earth metal oxides catalysts used in the

transesterification of oils for biodiesel production. In *Energies* (Vol. 14, Issue 4). MDPI AG. <https://doi.org/10.3390/en14041031>

Teo, S. H., Rashid, U., & Taufiq-Yap, Y. H. (2014). Biodiesel production from crude *Jatropha Curcas* oil using calcium based mixed oxide catalysts. *Fuel*, *136*, 244–252. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2014.07.062>

Turton, R., Bailie, R. C., Whiting, W. B., Shaeiwitz, J. A., Bhattacharyya D. (2018). *Analysis, Synthesis, and Design of Chemical Processes*. Prentice Hall.

Viriya-empikul, N., Krasae, P., Puttasawat, B., Yoosuk, B., Chollacoop, N., & Faungnawakij, K. (2010). Waste shells of mollusk and egg as biodiesel production catalysts. *Bioresource Technology*, *101*(10), 3765–3767. <https://doi.org/10.1016/j.biortech.2009.12.079>

Vyas, A. P., Verma, J. L., & Subrahmanyam, N. (2010). A review on FAME production processes. In *Fuel* (Vol. 89, Issue 1, pp. 1–9). <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2009.08.014>

Wang, Y. T., Cong, W. J., Zeng, Y. N., Zhang, Y. Q., Liang, J. L., Li, J. G., Jiang, L. Q., & Fang, Z. (2021). Direct production of biodiesel via simultaneous esterification and transesterification of renewable oils using calcined blast furnace dust. *Renewable Energy*, *175*, 1001–1011. <https://doi.org/10.1016/j.renene.2021.05.013>

Watkins, R. S., Lee, A. F., & Wilson, K. (2004). Li-CaO catalysed tri-glyceride transesterification for biodiesel applications. *Green Chemistry*, *6*(7), 335–340. <https://doi.org/10.1039/b404883k>

Wei, Z., Xu, C., & Li, B. (2009). Application of waste eggshell as low-cost solid catalyst for biodiesel production. *Bioresource Technology*, *100*(11), 2883–2885. <https://doi.org/10.1016/j.biortech.2008.12.039>

West, A. H., Posarac, D., Ellis, N. (2008). Assessment of four biodiesel production processes using hysys.plant. *Bioresource Technology*, *99*(14), pp. 6587 – 6601. <https://doi.org/10.1016/j.biortech.2007.11.046>

Yan, S., Lu H. & Liang B. (2008). Supported CaO Catalysts Used in the Transesterification of Rapeseed Oil for the Purpose of Biodiesel Production. *Energy & Fuels*, *22*, 646-651. <https://doi.org/10.1021/ef070105o>

Yoosuk, B., Udomsap, P., Puttasawat, B., & Krasae, P. (2010). Modification of calcite by hydration-dehydration method for heterogeneous biodiesel production process: The effects of water on properties and activity. *Chemical Engineering Journal*, *162*(1), 135–141. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2010.05.013>

Young, A. (2015). *Comparação da Produção de Biodiesel a partir dos Óleos de Soja e de Dendê com Etanol via Catálise Homogênea Alcalina*. Trabalho de Conclusão de Curso – Escola de Química, Universidade Federal do Rio de Janeiro. Rio de Janeiro, p.203

Zabeti, M., Wan Daud, W. M. A., & Aroua, M. K. (2009). Activity of solid catalysts for biodiesel production: A review. *Fuel Processing Technology*, *90*(6), 770–777. <https://doi.org/10.1016/j.fuproc.2009.03.010>

ZHANG, Y.; DUBÉ, M. A.; MCLEAN, D. D.; KATES, M. (2003). Biodiesel production from waste cooking oil: 1. Process design and technological assessment. *Bioresource Technology*, v. 89(1). 1–16.

Zhang, Y., Niu, S., Han, K., Li, Y., & Lu, C. (2021). Synthesis of the SrO–CaO–Al₂O₃ trimetallic oxide catalyst for transesterification to produce biodiesel. *Renewable Energy*, 168, 981–990. <https://doi.org/10.1016/j.renene.2020.12.132>

Zuhairi Abdullah, A. (2013). A r c h i v e o f S I D Alkaline Earth Metal Oxide Catalysts for Biodiesel Production from Palm Oil: Elucidation of Process Behaviors and Modeling Using Response Surface Methodology. In *J. Chem. Chem. Eng* (Vol. 32, Issue 1). www.SID.ir

Zulqarnain, Ayoub, M., Yusoff, M. H. M., Nazir, M. H., Zahid, I., Ameen, M., Sher, F., Floresyona, D., & Budi Nursanto, E. (2021). A comprehensive review on oil extraction and biodiesel production technologies. *Sustainability (Switzerland)*, 13(2), 1–28. <https://doi.org/10.3390/su13020788>

11. Apêndices

Apêndice I – Descrição das Correntes de Processo

Tabela I.1: Correntes de processo do caso 1

-		Metanol	MgO	outMix100	outP100	outMix101
Peso molecular	g/mol	32,04	40,30	32,83	32,83	93,01
Temperatura	°C	25	25	33	33	42
Pressão	kPa	101,3	101,3	101,3	400	400
Vazão molar	kgmol/h	190,00	3,97	209,87	209,87	276,23
Vazão mássica	kg/h	6087,96	160,00	6890,51	6890,51	25690,95
Vazão volumétrica	m ³ /h	7,65	0,04	7,88	7,88	28,65
Frações Mássicas						
Glicerol		0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
Água		0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
Metanol		1,0000	0,0000	0,8836	0,8836	0,2954
Trioleína		0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,6734
M-oleato		0,0000	0,0000	0,0003	0,0003	0,0001
MgO		0,0000	1,0000	0,1161	0,1161	0,0311

Tabela I.1: Correntes de processo do caso 1 (cont.)

-		1	OutR1	Trioleína	Trioleína-b	Trioleína-c
Peso molecular	g/mol	32,26	144,34	885,43	885,43	885,43
Temperatura	°C	180	180	25	27	175
Pressão	kPa	400	400	101,3	400	400
Vazão molar	kgmol/h	126,52	149,72	19,54	19,54	19,54
Vazão mássica	kg/h	4081,42	21610,22	17300,00	17300,00	17300,00
Vazão volumétrica	m ³ /h	5,12	23,53	18,89	18,89	18,89
Frações Mássicas						
Glicerol		0,0036	0,0784	0,0000	0,0000	0,0000
Água		0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
Metanol		0,9914	0,0813	0,0000	0,0000	0,0000
Trioleína		0,0000	0,0400	1,0000	1,0000	1,0000
M-oleato		0,0049	0,7632	0,0000	0,0000	0,0000
MgO		0,0000	0,0370	0,0000	0,0000	0,0000

Tabela I.1: Correntes de processo do caso 1 (cont.)

-		3	FundoT100	RecAlcool	6	32
Peso molecular	g/mol	32,04	232,52	32,04	32,04	144,34
Temperatura	°C	28	140	28	28	100
Pressão	kPa	20	30	400	400	400
Vazão molar	kgmol/h	46,81	83,03	46,81	46,83	0,00
Vazão mássica	kg/h	1500,00	19307,03	1500,00	1500,44	0,00
Vazão volumétrica	m ³ /h	1,89	21,42	1,89	1,89	0,00
Frações Mássicas						
Glicerol		0,0000	0,0878	0,0000	0,0000	0,0784
Água		0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
Metanol		1,0000	0,0133	1,0000	1,0000	0,0813
Trioleína		0,0000	0,0448	0,0000	0,0000	0,0400
M-oleato		0,0000	0,8541	0,0000	0,0000	0,7632
MgO		0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0370

Tabela I.1: Correntes de processo do caso 1 (cont.)

-		33	34	35	36	37
Peso molecular	g/mol	160,24	40,42	40,42	40,42	40,42
Temperatura	°C	100	100	100	100	100
Pressão	kPa	400	400	400	400	400
Vazão molar	kgmol/h	129,85	19,87	15,90	3,97	15,90
Vazão mássica	kg/h	20807,04	803,18	642,55	160,64	642,55
Vazão volumétrica	m ³ /h	23,30	0,23	0,18	0,05	0,18
Frações Mássicas						
Glicerol		0,0814	0,0003	0,0003	0,0003	0,0003
Água		0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
Metanol		0,0845	0,0003	0,0003	0,0003	0,0003
Trioleína		0,0416	0,0002	0,0002	0,0002	0,0002
M-oleato		0,7925	0,0031	0,0031	0,0031	0,0031
MgO		0,0000	0,9960	0,9960	0,9960	0,9960

Tabela I.1: Correntes de processo do caso 1 (cont.)

-		9	10	11	9-2	10-2
Peso molecular	g/mol	184,61	55,66	24,00	137,76	37,85
Temperatura	°C	62	62	62	59	59
Pressão	kPa	200	200	200	200	200
Vazão molar	kgmol/h	100,24	30,90	0,00	138,43	6,22
Vazão mássica	kg/h	18505,74	1719,88	0,00	19070,49	235,26
Vazão volumétrica	m ³ /h	20,93	1,44	0,00	21,52	0,21
Frações Mássicas						
Glicerol		0,0196	0,8249	0,0002	0,0112	0,6359
Água		0,0297	0,1459	0,4304	0,0666	0,3356
Metanol		0,0127	0,0291	0,5694	0,0120	0,0285
Trioleína		0,0014	0,0000	0,0000	0,0014	0,0000
M-oleato		0,9366	0,0001	0,0001	0,9089	0,0000
MgO		0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000

Tabela I.1: Correntes de processo do caso 1 (cont.)

-		11-2	ToT101	10-3	11-3	12
Peso molecular	g/mol	21,51	112,85	28,02	20,47	18,02
Temperatura	°C	59	57	57	57	25
Pressão	kPa	200	200	200	200	200
Vazão molar	kgmol/h	0,00	173,84	9,00	0,00	44,41
Vazão mássica	kg/h	0,00	19618,34	252,15	0,00	800,00
Vazão volumétrica	m ³ /h	0,00	22,09	0,23	0,00	0,80
Frações Mássicas						
Glicerol		0,0000	0,0054	0,4284	0,0000	0,0000
Água		0,6290	0,0985	0,5433	0,7260	1,0000
Metanol		0,3709	0,0113	0,0283	0,2739	0,0000
Trioleína		0,0000	0,0013	0,0000	0,0000	0,0000
M-oleato		0,0000	0,8835	0,0000	0,0000	0,0000
MgO		0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000

Tabela I.1: Correntes de processo do caso 1 (cont.)

-		13	14	ToT102	MetanolH2O	Biodiesel
Peso molecular	g/mol	18,02	18,02	47,86	19,53	296,38
Temperatura	°C	25	25	61	38	280
Pressão	kPa	200	200	200	10	20
Vazão molar	kgmol/h	44,41	44,41	46,12	115,24	58,60
Vazão mássica	kg/h	800,00	800,00	2207,28	2250,00	17368,34
Vazão volumétrica	m ³ /h	0,80	0,80	1,88	2,29	19,80
Frações Mássicas						
Glicerol		0,0000	0,0000	0,7595	0,0420	0,0006
Água		1,0000	1,0000	0,2115	0,8592	0,0000
Metanol		0,0000	0,0000	0,0290	0,0983	0,0000
Trioleína		0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0015
M-oleato		0,0000	0,0000	0,0000	0,0005	0,9979
MgO		0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000

Tabela I.1: Correntes de processo do caso 1 (cont.)

-		MetanolH2O II	Glicerol	17	OutR2	8
Peso molecular	g/mol	19,08	85,70	34,32	223,97	232,52
Temperatura	°C	36	148	180	180	140
Pressão	kPa	10	20	400	400	400
Vazão molar	kgmol/h	26,19	19,92	0,00	86,73	83,03
Vazão mássica	kg/h	499,85	1707,43	0,00	19425,62	19307,03
Vazão volumétrica	m ³ /h	0,52	1,36	0,00	21,57	21,42
Frações Mássicas						
Glicerol		0,0000	0,9818	0,0285	0,0917	0,0878
Água		0,8721	0,0181	0,0000	0,0000	0,0000
Metanol		0,1279	0,0000	0,9180	0,0147	0,0133
Trioleína		0,0000	0,0000	0,0000	0,0013	0,0448
M-oleato		0,0000	0,0001	0,0535	0,8923	0,8541
MgO		0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000

Tabela I.1: Correntes de processo do caso 1 (cont.)

-		18+	Água	2	OutR1resf	4
Peso molecular	g/mol	223,97	18,02	18,02	144,34	223,97
Temperatura	°C	180	25	25	100	65
Pressão	kPa	400	101,3	200	400	400
Vazão molar	kgmol/h	86,73	133,22	133,22	149,72	86,73
Vazão mássica	kg/h	19425,62	2400,00	2400,00	21610,22	19425,62
Vazão volumétrica	m ³ /h	21,57	2,40	2,40	23,53	21,57
Frações Mássicas						
Glicerol		0,0917	0,0000	0,0000	0,0784	0,0917
Água		0,0000	1,0000	1,0000	0,0000	0,0000
Metanol		0,0147	0,0000	0,0000	0,0813	0,0147
Trioleína		0,0013	0,0000	0,0000	0,0400	0,0013
M-oleato		0,8923	0,0000	0,0000	0,7632	0,8923
MgO		0,0000	0,0000	0,0000	0,0370	0,0000

Tabela I.1: Correntes de processo do caso 1 (cont.)

-		Metanol_2
Peso molecular	g/mol	32,04
Temperatura	°C	140
Pressão	kPa	400
Vazão molar	kgmol/h	3,70
Vazão mássica	kg/h	118,56
Vazão volumétrica	m ³ /h	0,15
Frações Mássicas		
Glicerol		0,0000
Água		0,0000
Metanol		1,0000
Trioleína		0,0000
M-oleato		0,0000
MgO		0,0000

Tabela I.2: Correntes de processo do caso 2

-		Metanol	SrO	outMix100	outP100	outMix101
Peso molecular	g/mol	32,04	103,62	36,26	36,26	97,41
Temperatura	°C	25	25	32	32	33
Pressão	kPa	101,3	101,3	101,3	400	400
Vazão molar	kgmol/h	127,00	0,72	134,95	134,95	263,77
Vazão mássica	kg/h	4069,32	75,00	4892,92	4892,92	25694,64
Vazão volumétrica	m ³ /h	5,11	0,01	5,28	5,28	28,56
Frações Mássicas						
Glicerol		0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
Água		0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
Metanol		1,0000	0,0000	0,8317	0,8317	0,2947
Trioleína		0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,6733
M-oleato		0,0000	0,0000	0,0001	0,0001	0,0000
SrO		0,0000	1,0000	0,1682	0,1682	0,0320

Tabela I.2: Correntes de processo do caso 2 (cont)

-		1	OutR1	Trioleína	Trioleína-b	Trioleína-c
Peso molecular	g/mol	32,04	97,41	885,43	885,43	885,43
Temperatura	°C	65	65	25	27	60
Pressão	kPa	400	400	101,3	400	400
Vazão molar	kgmol/h	0,00	263,77	19,54	19,54	19,54
Vazão mássica	kg/h	0,00	25695,33	17300,00	17300,00	17300,00
Vazão volumétrica	m ³ /h	0,00	28,56	18,89	18,89	18,89
Frações Mássicas						
Glicerol		0,0000	0,0665	0,0000	0,0000	0,0000
Água		0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
Metanol		1,0000	0,2252	0,0000	0,0000	0,0000
Trioleína		0,0000	0,0337	1,0000	1,0000	1,0000
M-oleato		0,0000	0,6426	0,0000	0,0000	0,0000
SrO		0,0000	0,0320	0,0000	0,0000	0,0000

Tabela I.2: Correntes de processo do caso 2 (cont)

-		3	FundoT100	RecAlcool	6	7
Peso molecular	g/mol	32,04	145,79	32,04	32,04	145,79
Temperatura	°C	28	71	28	28	65
Pressão	kPa	20	30	400	400	30
Vazão molar	kgmol/h	109,23	146,59	109,23	109,29	146,59
Vazão mássica	kg/h	3500,01	21371,64	3500,01	3501,71	21371,64
Vazão volumétrica	m ³ /h	4,40	24,00	4,40	4,40	24,00
Frações Mássicas						
Glicerol		0,0000	0,0800	0,0000	0,0000	0,0800
Água		0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
Metanol		1,0000	0,1070	1,0000	1,0000	0,1070
Trioleína		0,0000	0,0405	0,0000	0,0000	0,0405
M-oleato		0,0000	0,7725	0,0000	0,0000	0,7725
SrO		0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000

Tabela I.2: Correntes de processo do caso 2 (cont)

-		32	33	34	35	36
Peso molecular	g/mol	32,04	97,22	103,61	103,61	103,61
Temperatura	°C	65	65	65	65	65
Pressão	kPa	400	400	400	400	400
Vazão molar	kgmol/h	0,00	255,82	7,95	7,15	0,79
Vazão mássica	kg/h	0,00	24871,65	823,67	741,31	82,37
Vazão volumétrica	m ³ /h	0,00	28,40	0,16	0,15	0,02
Frações Mássicas						
Glicerol		0,0000	0,0687	0,0001	0,0001	0,0001
Água		0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
Metanol		1,0000	0,2327	0,0002	0,0002	0,0002
Trioleína		0,0000	0,0348	0,0000	0,0000	0,0000
M-oleato		0,0000	0,6638	0,0006	0,0006	0,0006
SrO		0,0000	0,0000	0,9991	0,9991	0,9991

Tabela I.2: Correntes de processo do caso 2 (cont)

-		37	9	10	11	9-2
Peso molecular	g/mol	103,61	174,65	39,23	28,57	182,42
Temperatura	°C	65	62	62	62	60
Pressão	kPa	400	200	200	200	200
Vazão molar	kgmol/h	7,22	108,39	82,61	0,00	102,59
Vazão mássica	kg/h	748,60	18931,06	3240,61	0,00	18713,80
Vazão volumétrica	m ³ /h	0,15	21,75	3,05	0,00	21,47
Frações Mássicas						
Glicerol		0,0001	0,0000	0,5544	0,0000	0,0000
Água		0,0000	0,0029	0,2299	0,1559	0,0050
Metanol		0,0002	0,0792	0,2150	0,8441	0,0664
Trioleína		0,0000	0,0014	0,0000	0,0000	0,0014
M-oleato		0,0006	0,9165	0,0008	0,0000	0,9271
SrO		0,9991	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000

Tabela I.2: Correntes de processo do caso 2 (cont)

-		10-2	11-2	ToT101	10-3	11-3
Peso molecular	g/mol	20,26	26,13	195,66	19,87	25,35
Temperatura	°C	60	60	57	57	57
Pressão	kPa	200	200	200	200	200
Vazão molar	kgmol/h	50,21	0,00	94,39	52,60	0,00
Vazão mássica	kg/h	1017,26	0,00	18468,49	1045,32	0,00
Vazão volumétrica	m ³ /h	1,08	0,00	21,17	1,10	0,00
Frações Mássicas						
Glicerol		0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
Água		0,7478	0,2907	0,0039	0,7870	0,3388
Metanol		0,2514	0,7093	0,0553	0,2125	0,6611
Trioleína		0,0000	0,0000	0,0014	0,0000	0,0000
M-oleato		0,0007	0,0000	0,9394	0,0004	0,0000
SrO		0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000

Tabela I.2: Correntes de processo do caso 2 (cont)

-		12	13	14	ToT102	MetanolH2O
Peso molecular	g/mol	18,02	18,02	18,02	28,60	31,72
Temperatura	°C	25	25	25	61	17
Pressão	kPa	200	200	200	200	10
Vazão molar	kgmol/h	44,41	44,41	44,41	185,42	36,02
Vazão mássica	kg/h	800,00	800,00	800,00	5303,19	1142,54
Vazão volumétrica	m ³ /h	0,80	0,80	0,80	5,24	1,41
Frações Mássicas						
Glicerol		0,0000	0,0000	0,0000	0,3388	0,0000
Água		1,0000	1,0000	1,0000	0,4390	0,0627
Metanol		0,0000	0,0000	0,0000	0,2215	0,8937
Trioleína		0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
M-oleato		0,0000	0,0000	0,0000	0,0007	0,0435
SrO		0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000

Tabela I.2: Correntes de processo do caso 2 (cont)

-		Biodiesel	MetanolH2O II	Glicerol	17	OutR2
Peso molecular	g/mol	296,80	21,15	86,16	32,04	145,79
Temperatura	°C	280	28	150	65	65
Pressão	kPa	20	10	20	400	400
Vazão molar	kgmol/h	58,38	164,16	21,26	0,00	146,59
Vazão mássica	kg/h	17325,95	3471,52	1831,67	0,00	21371,68
Vazão volumétrica	m ³ /h	19,76	3,78	1,46	0,00	24,00
Frações Mássicas						
Glicerol		0,0000	0,0000	0,9809	0,0000	0,0841
Água		0,0000	0,6617	0,0171	0,0000	0,0000
Metanol		0,0000	0,3383	0,0000	0,9999	0,1027
Trioleína		0,0015	0,0000	0,0000	0,0000	0,0012
M-oleato		0,9985	0,0000	0,0020	0,0000	0,8120
SrO		0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000

Tabela I.2: Correntes de processo do caso 2 (cont)

-		8	18+	Agua	2
Peso molecular	g/mol	145,79	145,79	18,02	18,02
Temperatura	°C	65	65	25	25
Pressão	kPa	400	400	101,3	200
Vazão molar	kgmol/h	146,59	146,59	133,22	133,22
Vazão mássica	kg/h	21371,64	21371,68	2400,00	2400,00
Vazão volumétrica	m ³ /h	24,00	24,00	2,40	2,40
Frações Mássicas					
Glicerol		0,0800	0,0841	0,0000	0,0000
Água		0,0000	0,0000	1,0000	1,0000
Metanol		0,1070	0,1027	0,0000	0,0000
Trioleína		0,0405	0,0012	0,0000	0,0000
M-oleato		0,7725	0,8120	0,0000	0,0000
SrO		0,0000	0,0000	0,0000	0,0000

Tabela I.3: Correntes de processo do caso 3

-		Metanol	PbO	outMix100	outP100	outMix101
Peso molecular	g/mol	32,04	223,20	35,84	35,84	140,65
Temperatura	°C	25,00	25,00	34,05	34,17	45,12
Pressão	kPa	101,3	101,3	101,3	400	400
Vazão molar	kgmol/h	79,00	0,22	80,60	80,60	156,34
Vazão mássica	kg/h	2531,31	50,00	2888,65	2888,65	21989,44
Vazão volumétrica	m ³ /h	3,18	0,01	3,22	3,22	24,37
Frações Mássicas						
Glicerol		0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
Água		0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
Metanol		1,0000	0,0000	0,8763	0,8763	0,1970
Trioleína		0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,7867
M-oleato		0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
PbO		0,0000	1,0000	0,1236	0,1236	0,0162

Tabela I.3: Correntes de processo do caso 3 (cont.)

-		1	OutR1	Trioleína	Trioleína-b	Trioleína-c
Peso molecular	g/mol	32,12	140,65	885,43	885,43	885,43
Temperatura	°C	150,00	150,00	25,00	26,94	150,00
Pressão	kPa	400	400	101,3	400	400
Vazão molar	kgmol/h	0,00	156,34	19,54	19,54	19,54
Vazão mássica	kg/h	0,00	21990,09	17300,00	17300,00	17300,00
Vazão volumétrica	m ³ /h	0,00	24,37	18,89	18,89	18,89
Frações Mássicas						
Glicerol		0,0012	0,0728	0,0000	0,0000	0,0000
Água		0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
Metanol		0,9971	0,1210	0,0000	0,0000	0,0000
Trioleína		0,0000	0,0865	1,0000	1,0000	1,0000
M-oleato		0,0017	0,7034	0,0000	0,0000	0,0000
PbO		0,0000	0,0162	0,0000	0,0000	0,0000

Tabela I.3: Correntes de processo do caso 3 (cont.)

-		3	FundoT100	RecAlcool	6	32
Peso molecular	g/mol	32,04	201,75	32,04	32,04	140,65
Temperatura	°C	28,20	96,76	28,37	28,37	100,00
Pressão	kPa	20	30	400	400	400
Vazão molar	kgmol/h	56,49	98,25	56,49	56,20	0,00
Vazão mássica	kg/h	1809,96	19822,76	1809,96	1800,80	0,00
Vazão volumétrica	m ³ /h	2,27	22,06	2,27	2,26	0,00
Frações Mássicas						
Glicerol		0,0000	0,0808	0,0000	0,0000	0,0728
Água		0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
Metanol		1,0000	0,0429	1,0000	1,0000	0,1210
Trioleína		0,0000	0,0960	0,0000	0,0000	0,0865
M-oleato		0,0000	0,7803	0,0000	0,0000	0,7034
PbO		0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0162

Tabela I.3: Correntes de processo do caso 3 (cont.)

-		33	34	35	36	37
Peso molecular	g/mol	139,80	223,12	223,12	223,12	223,12
Temperatura	°C	100,00	100,00	100,00	100,00	100,00
Pressão	kPa	400	400	400	400	400
Vazão molar	kgmol/h	154,74	1,60	1,38	0,22	1,38
Vazão mássica	kg/h	21632,72	357,37	307,34	50,03	307,34
Vazão volumétrica	m ³ /h	24,33	0,04	0,03	0,01	0,03
Frações Mássicas						
Glicerol		0,0740	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
Água		0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
Metanol		0,1230	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001
Trioleína		0,0880	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001
M-oleato		0,7150	0,0004	0,0004	0,0004	0,0004
PbO		0,0000	0,9994	0,9994	0,9994	0,9994

Tabela I.3: Correntes de processo do caso 3 (cont.)

-		33	34	35	36	37
Peso molecular	g/mol	139,80	223,12	223,12	223,12	223,12
Temperatura	°C	100,00	100,00	100,00	100,00	100,00
Pressão	kPa	400	400	400	400	400
Vazão molar	kgmol/h	154,74	1,60	1,38	0,22	1,38
Vazão mássica	kg/h	21632,72	357,37	307,34	50,03	307,34
Vazão volumétrica	m ³ /h	24,33	0,04	0,03	0,01	0,03
Frações Mássicas						
Glicerol		0,0740	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
Água		0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
Metanol		0,1230	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001
Trioleína		0,0880	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001
M-oleato		0,7150	0,0004	0,0004	0,0004	0,0004
PbO		0,0000	0,9994	0,9994	0,9994	0,9994

Tabela I.3: Correntes de processo do caso 3 (cont.)

-		9	10	11	9-2	10-2
Peso molecular	g/mol	171,71	54,27	26,78	131,37	37,72
Temperatura	°C	62,08	62,08	62,08	59,25	59,25
Pressão	kPa	200	200	200	200	200
Vazão molar	kgmol/h	109,68	32,98	0,00	147,58	6,50
Vazão mássica	kg/h	18832,72	1790,11	0,00	19387,47	245,26
Vazão volumétrica	m ³ /h	21,33	1,53	0,00	21,92	0,22
Frações Mássicas						
Glicerol		0,0197	0,7950	0,0001	0,0113	0,6148
Água		0,0292	0,1398	0,2524	0,0656	0,3217
Metanol		0,0283	0,0652	0,7475	0,0267	0,0636
Trioleína		0,0030	0,0000	0,0000	0,0029	0,0000
M-oleato		0,9198	0,0001	0,0000	0,8935	0,0000
PbO		0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000

Tabela I.3: Correntes de processo do caso 3 (cont.)

-		11-2	ToT101	10-3	11-3	12
Peso molecular	g/mol	24,02	109,04	28,31	22,56	18,02
Temperatura	°C	59,25	56,77	56,77	56,77	25,01
Pressão	kPa	200	200	200	200	200
Vazão molar	kgmol/h	0,00	182,73	9,26	0,00	44,41
Vazão mássica	kg/h	0,00	19925,38	262,08	0,00	800,00
Vazão volumétrica	m ³ /h	0,00	22,47	0,24	0,00	0,80
Frações Mássicas						
Glicerol		0,0000	0,0055	0,4176	0,0000	0,0000
Água		0,4290	0,0971	0,5192	0,5395	1,0000
Metanol		0,5710	0,0252	0,0632	0,4605	0,0000
Trioleína		0,0000	0,0029	0,0000	0,0000	0,0000
M-oleato		0,0000	0,8693	0,0000	0,0000	0,0000
PbO		0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000

Tabela I.3: Correntes de processo do caso 3 (cont.)

-		13	14	ToT102	MetanolH2O	Biodiesel
Peso molecular	g/mol	18,02	18,02	47,13	20,52	297,13
Temperatura	°C	25,01	25,01	61,06	33,10	280,11
Pressão	kPa	200	200	200	10	20
Vazão molar	kgmol/h	44,41	44,41	48,75	124,25	58,48
Vazão mássica	kg/h	800,00	800,00	2297,45	2549,98	17375,40
Vazão volumétrica	m ³ /h	0,80	0,80	1,99	2,66	19,81
Frações Mássicas						
Glicerol		0,0000	0,0000	0,7327	0,0430	0,0000
Água		1,0000	1,0000	0,2025	0,7588	0,0000
Metanol		0,0000	0,0000	0,0648	0,1966	0,0000
Trioleína		0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0033
M-oleato		0,0000	0,0000	0,0000	0,0016	0,9967
PbO		0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000

Tabela I.3: Correntes de processo do caso 3 (cont.)

-		MetanolH2O II	Glicerol	17	OutR2	8
Peso molecular	g/mol	20,29	85,16	32,39	201,75	201,75
Temperatura	°C	30,81	144,99	150,00	150,00	97,01
Pressão	kPa	10	20	400	400	400
Vazão molar	kgmol/h	28,58	20,17	0,00	98,25	98,25
Vazão mássica	kg/h	580,00	1717,45	0,00	19822,84	19822,76
Vazão volumétrica	m ³ /h	0,62	1,37	0,00	22,06	22,06
Frações Mássicas						
Glicerol		0,0000	0,9801	0,0054	0,0905	0,0808
Água		0,7434	0,0198	0,0000	0,0000	0,0000
Metanol		0,2566	0,0000	0,9865	0,0328	0,0429
Trioleína		0,0000	0,0000	0,0000	0,0029	0,0960
M-oleato		0,0000	0,0001	0,0081	0,8738	0,7803
PbO		0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000

Tabela I.3: Correntes de processo do caso 3 (cont.)

-		18++	Água	2	OutR1 resf	18+-
Peso molecular	g/mol	201,75	18,02	18,02	140,65	201,75
Temperatura	°C	65,00	25,00	25,01	100,00	65,00
Pressão	kPa	400	101,3	200	400	400
Vazão molar	kgmol/h	98,25	133,22	133,22	156,34	98,25
Vazão mássica	kg/h	19822,84	2400,00	2400,00	21990,09	19822,84
Vazão volumétrica	m ³ /h	22,06	2,40	2,40	24,37	22,06
Frações Mássicas						
Glicerol		0,0905	0,0000	0,0000	0,0728	0,0905
Água		0,0000	1,0000	1,0000	0,0000	0,0000
Metanol		0,0328	0,0000	0,0000	0,1210	0,0328
Trioleína		0,0029	0,0000	0,0000	0,0865	0,0029
M-oleato		0,8738	0,0000	0,0000	0,7034	0,8738
PbO		0,0000	0,0000	0,0000	0,0162	0,0000

Tabela I.4: Correntes de processo do caso 4

-		Metanol	Pb3O4	outMix100	outP100	outMix101
Peso molecular	g/mol	32,04	685,60	34,57	34,57	137,56
Temperatura	°C	25,00	25,00	30,69	30,82	42,43
Pressão	kPa	101,3	101,3	101,3	400	400
Vazão molar	kgmol/h	120,00	0,06	120,47	120,47	160,91
Vazão mássica	kg/h	3845,03	43,00	4164,54	4164,54	22134,28
Vazão volumétrica	m ³ /h	4,83	0,00	4,87	4,87	24,60
Frações Mássicas						
Glicerol		0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
Água		0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
Metanol		1,0000	0,0000	0,9233	0,9233	0,2040
Trioleína		0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,7816
M-oleato		0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
Pb₃O₄		0,0000	1,0000	0,0767	0,0767	0,0144

Tabela I.4: Correntes de processo do caso 4 (cont.)

-		1	OutR1	Trioleína	Trioleína-b	Trioleína-c
Peso molecular	g/mol	33,24	196,75	885,43	885,43	885,43
Temperatura	°C	215,00	215,00	25,00	26,94	140,00
Pressão	kPa	400	400	101,3	400	400
Vazão molar	kgmol/h	58,24	102,66	19,54	19,54	19,54
Vazão mássica	kg/h	1935,91	20199,02	17300,00	17300,00	17300,00
Vazão volumétrica	m ³ /h	2,41	22,18	18,89	18,89	18,89
Frações Mássicas						
Glicerol		0,0158	0,0778	0,0000	0,0000	0,0000
Água		0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
Metanol		0,9554	0,0492	0,0000	0,0000	0,0000
Trioleína		0,0000	0,0942	1,0000	1,0000	1,0000
M-oleato		0,0288	0,7630	0,0000	0,0000	0,0000
Pb₃O₄		0,0000	0,0158	0,0000	0,0000	0,0000

Tabela I.4: Correntes de processo do caso 4 (cont.)

-		3	FundoT100	RecAlcool	6	32
Peso molecular	g/mol	32,04	236,32	32,04	32,04	196,75
Temperatura	°C	28,20	130,00	28,37	28,37	100,00
Pressão	kPa	20	30	400	400	400
Vazão molar	kgmol/h	20,91	81,28	20,91	20,90	0,00
Vazão mássica	kg/h	670,03	19209,47	670,03	669,74	0,00
Vazão volumétrica	m ³ /h	0,84	21,31	0,84	0,84	0,00
Frações Mássicas						
Glicerol		0,0000	0,0818	0,0000	0,0000	0,0778
Água		0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
Metanol		1,0000	0,0168	1,0000	1,0000	0,0492
Trioleína		0,0000	0,0991	0,0000	0,0000	0,0942
M-oleato		0,0000	0,8023	0,0000	0,0000	0,7630
Pb₃O₄		0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0158

Tabela I.4: Correntes de processo do caso 4 (cont.)

-		33	34	35	36	37
Peso molecular	g/mol	194,52	685,11	685,11	685,11	685,11
Temperatura	°C	100,00	100,00	100,00	100,00	100,00
Pressão	kPa	400	400	400	400	400
Vazão molar	kgmol/h	102,20	0,47	0,40	0,07	0,40
Vazão mássica	kg/h	19879,50	319,52	274,79	44,73	276,51
Vazão volumétrica	m ³ /h	22,15	0,04	0,03	0,01	0,03
Frações Mássicas						
Glicerol		0,0790	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
Água		0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
Metanol		0,0500	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
Trioléina		0,0957	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
M-oleato		0,7753	0,0002	0,0002	0,0002	0,0002
Pb₃O₄		0,0000	0,9997	0,9997	0,9997	0,9997

Tabela I.4: Correntes de processo do caso 4 (cont.)

-		9	10	11	9-2	10-2
Peso molecular	g/mol	184,52	55,56	23,98	137,66	37,77
Temperatura	°C	61,98	61,98	61,98	59,07	59,07
Pressão	kPa	200	200	200	200	200
Vazão molar	kgmol/h	100,10	30,60	0,00	138,27	6,24
Vazão mássica	kg/h	18469,95	1699,80	0,00	19034,38	235,57
Vazão volumétrica	m ³ /h	20,89	1,42	0,00	21,48	0,21
Frações Mássicas						
Glicerol		0,0196	0,8242	0,0002	0,0112	0,6347
Água		0,0298	0,1467	0,4320	0,0668	0,3368
Metanol		0,0127	0,0291	0,5678	0,0119	0,0284
Trioléina		0,0031	0,0000	0,0000	0,0030	0,0000
M-oleato		0,9348	0,0000	0,0001	0,9071	0,0000
Pb₃O₄		0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000

Tabela I.4: Correntes de processo do caso 4 (cont.)

-		11-2	ToT101	10-3	11-3	12
Peso molecular	g/mol	21,50	112,78	27,95	20,47	18,02
Temperatura	°C	59,07	56,54	56,54	56,54	25,01
Pressão	kPa	200	200	200	200	200
Vazão molar	kgmol/h	0,00	173,63	9,05	0,00	44,41
Vazão mássica	kg/h	0,00	19581,54	252,84	0,00	800,00
Vazão volumétrica	m ³ /h	0,00	22,05	0,23	0,00	0,80
Frações Mássicas						
Glicerol		0,0000	0,0053	0,4265	0,0000	0,0000
Água		0,6299	0,0987	0,5452	0,7265	1,0000
Metanol		0,3700	0,0112	0,0283	0,2735	0,0000
Trioleína		0,0000	0,0029	0,0000	0,0000	0,0000
M-oleato		0,0000	0,8818	0,0000	0,0000	0,0000
Pb₃O₄		0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000

Tabela I.4: Correntes de processo do caso 4 (cont.)

-		13	14	ToT102	MetanolH2O	Biodiesel
Peso molecular	g/mol	18,02	18,02	47,70	19,92	297,15
Temperatura	°C	25,01	25,01	60,91	38,38	280,13
Pressão	kPa	200	200	200	10	20
Vazão molar	kgmol/h	44,41	44,41	45,88	115,47	58,16
Vazão mássica	kg/h	800,00	800,00	2188,22	2300,00	17281,53
Vazão volumétrica	m ³ /h	0,80	0,80	1,86	2,34	19,71
Frações Mássicas						
Glicerol		0,0000	0,0000	0,7578	0,0455	0,0000
Água		1,0000	1,0000	0,2132	0,8406	0,0000
Metanol		0,0000	0,0000	0,0289	0,0957	0,0000
Trioleína		0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0033
M-oleato		0,0000	0,0000	0,0000	0,0182	0,9967
Pb₃O₄		0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000

Tabela I.4: Correntes de processo do caso 4 (cont.)

-		MetanolH2O II	Glicerol	17	OutR2	8
Peso molecular	g/mol	19,07	86,04	38,31	224,49	236,32
Temperatura	°C	36,48	150,00	215,00	215,00	130,26
Pressão	kPa	10	20	400	400	400
Vazão molar	kgmol/h	26,27	19,61	0,00	86,28	81,28
Vazão mássica	kg/h	500,92	1687,30	0,00	19369,76	19209,47
Vazão volumétrica	m ³ /h	0,52	1,34	0,00	21,51	21,31
Frações Mássicas						
Glicerol		0,0000	0,9828	0,0633	0,0910	0,0818
Água		0,8737	0,0171	0,0000	0,0000	0,0000
Metanol		0,1263	0,0000	0,7995	0,0146	0,0168
Trioleína		0,0000	0,0000	0,0000	0,0029	0,0991
M-oleato		0,0000	0,0001	0,1371	0,8914	0,8023
Pb₃O₄		0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000

Tabela I.4: Correntes de processo do caso 4 (cont.)

-		18++	Água	2	OutR1 resf	18+-
Peso molecular	g/mol	224,49	18,02	18,02	196,75	224,49
Temperatura	°C	65,00	25,00	25,01	100,00	65,00
Pressão	kPa	400	101,3	200	400	400
Vazão molar	kgmol/h	86,28	133,22	133,22	102,66	86,28
Vazão mássica	kg/h	19369,76	2400,00	2400,00	20199,02	19369,76
Vazão volumétrica	m ³ /h	21,51	2,40	2,40	22,18	21,51
Frações Mássicas						
Glicerol		0,0910	0,0000	0,0000	0,0778	0,0910
Água		0,0000	1,0000	1,0000	0,0000	0,0000
Metanol		0,0146	0,0000	0,0000	0,0492	0,0146
Trioleína		0,0029	0,0000	0,0000	0,0942	0,0029
M-oleato		0,8914	0,0000	0,0000	0,7630	0,8914
Pb₃O₄		0,0000	0,0000	0,0000	0,0158	0,0000

Tabela I.4: Correntes de processo do caso 4 (cont.)

-		Metanol-2
Peso molecular	g/mol	32,04
Temperatura	°C	100,00
Pressão	kPa	400
Vazão molar	kgmol/h	5,00
Vazão mássica	kg/h	160,21
Vazão volumétrica	m ³ /h	0,20
Frações Mássicas		
Glicerol		0,0000
Água		0,0000
Metanol		1,0000
Trioleína		0,0000
M-oleato		0,0000
Pb₃O₄		0,0000

Apêndice II – Especificação e Custo dos Equipamentos

Tabela II.1: Equipamentos do caso 1

TROCADORES DE CALOR

Especificações	E-100	E-102	E-103
Calor Trocado (GJ/h)	0,32	4,37	5,25
Área de Troca Térmica (m ²)	3,98	40,21	62,94
Coef. Global de Transf. De Calor (KJ/°C-m ² -h)	716,01	1022,88	1022,88
Vazão de Utilidade (Kg/h)	176,74	104461,19	125559,14
Custo (US\$)	6272,77	23109,79	26656,06

Tabela II.1: Equipamentos do caso 1 (cont.)

BOMBAS

Especificações	P-100	P-101	P-102	P-103	P-104
Vazão Volumétrica (m ³ /h)	7,88	18,89	1,89	21,42	2,40
Acréscimo de Pressão (KPa)	298,70	298,70	380,00	370,00	98,70
Potência (HP)	1,36	4,88	0,44	6,58	0,15
Eletricidade (KW)	1,02	3,64	0,33	4,91	0,11
Custo da Bomba (US\$)	8921,51	9690,64	5489,93	9899,14	5793,98

Tabela II.1: Equipamentos do caso 1 (cont.)

REATORES

Especificações	CRV-100	CRV-101
Quantidade	3	2
Temperatura (°C)	180,00	180,00
Pressão (Kpa)	400,00	400,00
Comprimento/Diâmetro (m)	9,42 / 3,14	9,79 / 3,26
Vazão de Utilidade (Kg/h)	236347,33	43396,72
Custo unitário do reator (US\$)	358119,60	255562,91
Custo Turbina (US\$)	56036,12	59819,97
Custo Motor (US\$)	7843,83	8851,25
TOTAL (U\$)	1265998,65	648468,25

Tabela II.1: Equipamentos do caso 1 (cont.)

VASOS DE LAVAGEM (MISTURADORES)

Especificações	V-100	V-101	V-102
Comprimento / Diâmetro dos Decantadores (m)	1,38 / 1,38	1,36 / 1,36	1,38 / 1,38
Custo Total (US\$)	27276,76	26948,07	27251,26

Tabela II.1: Equipamentos do caso 1 (cont.)

VASOS DE LAVAGEM (DECANTADORES)

Especificações	V-100	V-101	V-102
Comprimento / Diâmetro dos Decantadores (m)	2,71 / 0,68	2,67 / 0,67	2,7 / 0,68
Custo Total (US\$)	13912,65	13697,07	13895,91

Tabela II.1: Equipamentos do caso 1 (cont.)

COLUNAS DE DESTILAÇÃO

Especificações	T-100	T-101	T-102
Temperatura - Topo/Fundo (°C)	28,2 / 140,2	38,17 / 279,9	36,39 / 148
Pressão - Topo/Fundo (Kpa)	20/30	10 / 20	10 / 20
Altura/Diâmetro (m)	9,15 / 0,96	12,73 / 3,09	6,74 / 0,81
Calor no Condensador (KJ/h)	5,32	14,84	4,45
Calor no Refervedor (KJ/h)	6,65	24,10	4,81
Vazão de Utilidade no Condensador (Kg/h)	256028,88	714320,10	214199,76
Vazão de Utilidade no Refervedor (Kg/h)	3664,16	119303,98	2649,12
Número de Estágios Teóricos	7,00	12,00	5,00
Razão de Refluxo (molar)	2,00	2,00	3,00
Custo (US\$)	71871,28	391459,93	51381,24
Custo Condensador (US\$)	24054,33	615952,47	55491,35
Custo Refervedor (US\$)	6879,39	16367,69	6627,97

Tabela II.2: Equipamentos do caso 2

Especificações	E-100	E-101
Calor Trocado (GJ/h)	0,07	0,32
Área de Troca Térmica (m ²)	0,56	5,03
Coef. Global de Transf. De Calor (KJ/°C-m ² -h)	716,01	1022,88
Vazão de Utilidade (Kg/h)	40,70	15524,68
Custo (US\$)	4578,70	3963,61

Tabela II.2: Equipamentos do caso 2 (cont.)

BOMBAS

Especificações	P-100	P-101	P-102	P-103	P-104
Vazão Volumétrica (m ³ /h)	5,28	18,89	4,40	24,00	2,40
Acréscimo de Pressão (KPa)	298,70	298,70	380,00	370,00	98,70
Potência (HP)	0,93	4,88	0,98	7,16	0,15
Eletricidade (KW)	0,69	3,64	0,73	5,34	0,11
Custo da Bomba (US\$)	7681,24	9690,64	7219,08	9996,92	5793,98

Tabela II.2: Equipamentos do caso 2 (cont.)

REATORES

Especificações	CRV-100	CRV-101
Quantidade	1	2
Temperatura (°C)	65,00	65,00
Pressão (Kpa)	400,00	400,00
Comprimento/Diâmetro (m)	10,77 / 3,59	8,07 / 2,69
Vazão de Utilidade (Kg/h)	26575,77	2688,67
Custo unitário do reator (US\$)	461267,45	166184,43
Custo Turbina (US\$)	70427,39	42962,00
Custo Motor (US\$)	11943,93	4815,41
TOTAL (U\$)	543638,77	427923,68

Tabela II.2: Equipamentos do caso 2 (cont.)

VASOS DE LAVAGEM (MISTURADORES)

Especificações	V-100	V-101	V-102
Comprimento / Diâmetro dos Decantadores (m)	1,43 / 1,43	1,38 / 1,38	1,38 / 1,38
Custo Total (US\$)	28482,29	27370,66	27226,62

Tabela II.2: Equipamentos do caso 2 (cont.)

VASOS DE LAVAGEM (DECANTADORES)

Especificações	V-100	V-101	V-102
Comprimento / Diâmetro dos Decantadores (m)	2,85 / 0,71	2,72 / 0,68	2,7 / 0,67
Custo Total (US\$)	14708,55	13974,36	13879,73

Tabela II.2: Equipamentos do caso 2 (cont.)

COLUNAS DE DESTILAÇÃO

Especificações	T-100	T-101	T-102
Temperatura - Topo/Fundo (°C)	28,2 / 71,46	16,64 / 280,1	28,26 / 150
Pressão - Topo/Fundo (Kpa)	20/30	10 / 20	10 / 20
Altura/Diâmetro (m)	10,1 / 1,5	12,22 / 2,8	8,36 / 1,73
Calor no Condensador (KJ/h)	12,41	7,15	20,83
Calor no Refervedor (KJ/h)	12,25	16,39	20,83
Vazão de Utilidade no Condensador (Kg/h)	597352,59	344211,79	1002647,41
Vazão de Utilidade no Refervedor (Kg/h)	6746,73	81136,61	11472,19
Número de Estágios Teóricos	7,00	12,00	5,00
Razão de Refluxo (molar)	2,00	4,00	2,00
Custo (US\$)	118139,68	330075,25	118447,12
Custo Condensador (US\$)	39059,20	185674,47	56205,00
Custo Refervedor (US\$)	14696,86	15123,09	19852,58

Tabela II.3: Equipamentos do caso 3

TROCADORES DE CALOR

Especificações	E-100	E-102	E-103
Calor Trocado (GJ/h)	2,68	3,92	2,64
Área de Troca Térmica (m²)	2,85	53,95	27,55
Coef. Global de Transf. De Calor (KJ/°C-m²-h)	716,01	1022,88	1022,88
Vazão de Utilidade (Kg/h)	1477,67	93744,77	63078,58
Custo (US\$)	5946,51	25265,37	21128,31

Tabela II.3: Equipamentos do caso 3 (cont.)

BOMBAS

Especificações	P-100	P-101	P-102	P-103	P-104
Vazão Volumétrica (m³/h)	3,30	11,01	2,31	21,55	2,38
Acréscimo de Pressão (KPa)	298,70	298,70	380,00	370,00	98,70
Potência (HP)	0,59	3,28	0,53	6,61	0,15
Eletricidade (KW)	0,44	2,45	0,40	4,93	0,11
Custo da Bomba (US\$)	6530,28	9921,88	5842,55	9890,55	5776,37

Tabela II.3: Equipamentos do caso 3 (cont.)

REATORES

Especificações	CRV-100	CRV-101
Quantidade	3	3
Temperatura (°C)	180,00	180,00
Pressão (Kpa)	400,00	400,00
Comprimento/Diâmetro (m)	9,74 / 3,25	9,42 / 3,14
Vazão de Utilidade (Kg/h)	4511,34	19665,11
Custo unitário dos reatores (US\$)	248302,34	269474,10
Custo Turbina (US\$)	59262,47	55992,16
Custo Motor (US\$)	8699,42	7832,45
TOTAL (U\$)	948792,68	999896,13

Tabela II.3: Equipamentos do caso 3 (cont.)

VASOS DE LAVAGEM (MISTURADORES)

Especificações	V-100	V-101	V-102
Comprimento / Diâmetro dos Decantadores (m)	1,39 / 1,39	1,37 / 1,37	1,38 / 1,38
Custo Total (US\$)	27523,41	27155,20	27452,13

Tabela II.3: Equipamentos do caso 3 (cont.)

VASOS DE LAVAGEM (DECANTADORES)

Especificações	V-100	V-101	V-102
Comprimento / Diâmetro dos Decantadores (m)	2,73 / 0,68	2,69 / 0,67	2,73 / 0,68
Custo Total (US\$)	14074,84	13832,85	14027,93

Tabela II.3: Equipamentos do caso 3 (cont.)

COLUNAS DE DESTILAÇÃO

Especificações	T-100	T-101	T-102
Temperatura - Topo/Fundo (°C)	28,2 / 96,76	33,1 / 280,1	30,81 / 145
Pressão - Topo/Fundo (Kpa)	20/30	10 / 20	10 / 20
Altura/Diâmetro (m)	9,6 / 1,22	13,62 / 3,6	6,61 / 0,73
Calor no Condensador (KJ/h)	12,41	7,15	20,83
Calor no Refervedor (KJ/h)	12,25	16,39	20,83
Vazão de Utilidade no Condensador (Kg/h)	597352,59	344211,79	1002647,41
Vazão de Utilidade no Refervedor (Kg/h)	6746,73	81136,61	11472,19
Número de Estágios Teóricos	7,00	12,00	5,00
Razão de Refluxo (molar)	2,00	4,00	2,00
Custo (US\$)	92026,76	515975,51	47294,20
Custo Condensador (US\$)	39059,20	73415,87	51703,16
Custo Refervedor (US\$)	15070,18	15123,09	19419,10

Tabela II.4: Equipamentos do caso 4

TROCADORES DE CALOR

Especificações	E-100	E-102	E-103
Calor Trocado (GJ/h)	2,47	7,00	5,51
Área de Troca Térmica (m ²)	2,49	73,53	44,88
Coef. Global de Transf. De Calor (KJ/°C-m ² -h)	716,01	1022,88	1022,88
Vazão de Utilidade (Kg/h)	1360,85	167468,01	131706,73
Custo (US\$)	5819,82	28270,64	23846,07

Tabela II.4: Equipamentos do caso 4 (cont.)

BOMBAS

Especificações	P-100	P-101	P-102	P-103	P-104
Vazão Volumétrica (m³/h)	4,87	11,03	0,86	21,39	2,38
Acréscimo de Pressão (KPa)	298,70	298,70	380,00	370,00	98,70
Potência (HP)	0,86	3,29	0,21	6,58	0,15
Eletricidade (KW)	0,64	2,45	0,15	4,90	0,11
Custo da Bomba (US\$)	7463,23	9920,35	4393,06	9890,49	5776,37

Tabela II.4: Equipamentos do caso 4 (cont.)

REATORES

Especificações	CRV-100	CRV-101
Quantidade	2	3
Temperatura (°C)	180,00	180,00
Pressão (Kpa)	400,00	400,00
Comprimento/Diâmetro (m)	9,99 / 3,33	9,14 / 3,05
Vazão de Utilidade (Kg/h)	2741,82	19665,11
Custo unitário dos reatores (US\$)	323792,30	252753,16
Custo Turbina (US\$)	61881,61	53152,80
Custo Motor (US\$)	9422,57	7113,78
TOTAL (US\$)	790192,96	939059,20

Tabela II.4: Equipamentos do caso 4 (cont.)

VASOS DE LAVAGEM (MISTURADORES)

Especificações	V-100	V-101	V-102
Comprimento / Diâmetro dos Decantadores (m)	1,38 / 1,38	1,37 / 1,37	1,37 / 1,37
Custo Total (US\$)	27334,34	27052,95	27217,12

Tabela II.4: Equipamentos do caso 4 (cont.)

VASOS DE LAVAGEM (DECANTADORES)

Especificações	V-100	V-101	V-102
Comprimento / Diâmetro dos Decantadores (m)	2,71 / 0,68	2,68 / 0,67	2,7 / 0,67
Custo Total (US\$)	13950,48	13765,80	13873,49

Tabela II.4: Equipamentos do caso 4 (cont.)

COLUNAS DE DESTILAÇÃO

Especificações	T-100	T-101	T-102
Temperatura - Topo/Fundo (°C)	28,2 / 130	36,48 / 150	38,38 / 280,1
Pressão - Topo/Fundo (Kpa)	20/30	10 / 20	10 / 20
Altura/Diâmetro (m)	8,65 / 0,68	6,56 / 0,7	13,57 / 3,57
Calor no Condensador (KJ/h)	12,41	20,83	7,15
Calor no Refervedor (KJ/h)	12,25	20,83	16,39
Vazão de Utilidade no Condensador (Kg/h)	597352,59	1002647,41	344211,79
Vazão de Utilidade no Refervedor (Kg/h)	6746,73	11472,19	81136,61
Número de Estágios Teóricos	7,00	5,00	12,00
Razão de Refluxo (molar)	2,00	2,00	4,00
Custo (US\$)	52021,53	45789,98	507538,56
Custo Condensador (US\$)	39059,20	44482,54	63424,26
Custo Refervedor (US\$)	15917,05	19852,58	15123,09

Apêndice III – Resultados de Performance dos Processos

Tabela III.1: Critérios de performance quantitativos para os processos analisados

	R1	R2	R3	R4	1	2	3	4
E-factor (kg/kg)	0,1883	0,1494	0,1269	0,2143	0,2682	0,1969	0,1428	0,2013
EEI (kwh/kg)	0,0003	0,0005	0,0005	0,0005	0,000384	0,0004197	0,0004495	0,000422
TEI (kwh/kg)	-0,7882	-0,5818	-0,6513	-0,5645	-0,7990	-0,6805	-0,6247	-0,7269
Intensidade de água (kg/kg)	32,1197	33,8750	34,8294	34,4394	29,2336	31,9013	34,1660	32,0405
Intensidade de carbono (kg/kg)	0,1377	0,1842	0,1878	0,1875	0,1745	0,2113	0,2052	0,1826
PE (US\$/kg)	1,7528	1,7374	1,7260	1,7240	1,8717	1,8494	1,7450	1,8084
VPL (PE+15%) (x 10⁷ US\$)	3,64	4,34	4,34	4,27	1,63	2,44	4,15	3,02
TRAI (PE+15%)	85,30	97,90	85,70	75,10	40,60	79,30	94,10	77,70
LCC (US\$/ton)	1350,00	1420,00	1430,00	1430,00	1550,00	1400,00	1420,00	1490,00

Tabela III.2: Critérios de performance quantitativos normalizados para os processos analisados

	R1	R2	R3	R4	1	2	3	4
E-factor (kg/kg)	3,00	1,00	1,00	3,00	3,00	3,00	1,00	3,00
EEI (kwh/kg)	1,00	3,00	3,00	3,00	1,00	1,00	3,00	1,00
TEI (kwh/kg)	3,00	1,00	1,00	1,00	3,00	3,00	1,00	3,00
Intensidade de água (kg/kg)	1,00	3,00	3,00	3,00	1,00	1,00	3,00	1,00
Intensidade de carbono (kg/kg)	1,00	3,00	3,00	3,00	1,00	3,00	3,00	1,00
PE (US\$/kg)	1,00	1,00	1,00	1,00	3,00	3,00	1,00	3,00
VPL (PE+15%) (x 10⁷ US\$)	3,00	3,00	3,00	3,00	1,00	1,00	3,00	1,00

