

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO  
ESCOLA DE QUÍMICA

**Adryena Teixeira Teixeira**  
**Amanda Carvalho Martins da Silva**



AVALIAÇÃO TÉCNICA E ECONÔMICA DA PRODUÇÃO DE  
COMBUSTÍVEL DE AVIAÇÃO A PARTIR DE ETANOL

RIO DE JANEIRO

2023

Adryena Teixeira Teixeira  
Amanda Carvalho Martins da Silva

AVALIAÇÃO TÉCNICA E ECONÔMICA DA PRODUÇÃO DE COMBUSTÍVEL DE  
AVIAÇÃO A PARTIR DE ETANOL

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado à Escola de Química da Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários à obtenção do grau de Engenheiro Químico.

Orientador(es): Raquel Massad Cavalcante, *D. Sc*  
André Ferreira Young, *D. Sc*.

Rio de Janeiro

2023

## CIP - Catalogação na Publicação

T266a Teixeira, Adryena Teixeira; Silva, Amanda Carvalho Martins da  
AVALIAÇÃO TÉCNICA E ECONÔMICA DA PRODUÇÃO DE  
COMBUSTÍVEL DE AVIAÇÃO A PARTIR DE ETANOL / Adryena  
Teixeira Teixeira, Amanda Carvalho Martins da Silva. -- Rio  
de Janeiro, 2023.  
75 f.

Orientadora: Raquel Massad Cavalcante.  
Coorientador: André Ferreira Young.  
Trabalho de conclusão de curso (graduação) -  
Universidade Federal do Rio de Janeiro, Escola de  
Química, Bacharel em Engenharia Química, 2023.

1. bioquerosene de aviação. 2. Alcohol-to-Jet. 3.  
biocombustível. 4. simulação de processos. 5. análise  
econômica. I. Cavalcante, Raquel Massad, orient. II.  
Young, André Ferreira, coorient. III. Título.

Adryena Teixeira Teixeira  
Amanda Carvalho Martins da Silva

AVALIAÇÃO TÉCNICA E ECONÔMICA DA PRODUÇÃO DE COMBUSTÍVEL DE  
AVIAÇÃO A PARTIR DE ETANOL

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado à  
Escola de Química da Universidade Federal do  
Rio de Janeiro, como parte dos requisitos  
necessários à obtenção do grau de Engenheiro  
Químico.

Aprovado em 18 de julho de 2023.

---

Raquel Massad Cavalcante, *D, Sc*, UFRJ

---

André Ferreira Young, *D, Sc*, UFF

---

Fábio de Almeida Oroski, *D, Sc*, UFRJ

---

Luana Barros Furtado, *D, Sc*, UFRJ

Rio de Janeiro  
2023

*Dedicamos este trabalho e todo esforço que aqui colocamos a aqueles que contribuíram para nossa educação e diretamente ou indiretamente fizeram parte deste ciclo que se fecha.*

## **AGRADECIMENTOS**

Gostaríamos de agradecer aos nossos familiares, especialmente aos nossos pais, por todo apoio e suporte durante essa jornada. Graças a vocês e aos esforços dedicados para o nosso ingresso na UFRJ, hoje estamos concluindo a graduação.

Além disso, gostaríamos de agradecer aos nossos amigos, em especial aos colegas de 2016.1 e 2016.2, por compartilhar conosco as aventuras acadêmicas nestes anos deixando tudo mais leve e prazeroso com muitas risadas pelo DAEQ. Em especial, gostaríamos de citar alguns nomes como: Gustavo, Marianne e Karine. Agradecemos pelo forte laço criado após muitos almoços e jantas no bandeirão, pelas comemorações e apreensões vividas em algumas matérias. Vocês contribuíram imensamente para o nosso resultado final.

Por fim, gostaríamos de agradecer aos nossos orientadores, Raquel Massad e André Young, por todo amparo, leitura e correções para elaboração deste trabalho. Além de agradecer à Universidade Federal do Rio de Janeiro e seus docentes por todo aprendizado para nossa formação acadêmica.

*“Todo abismo é navegável a barquinhos de papel”*

*João Guimarães Rosa.*

## RESUMO

TEIXEIRA, Adryena Teixeira; SILVA, Amanda Carvalho Martins da. **Avaliação Técnica e Econômica da Produção de Combustível de Aviação a Partir de Etanol**. Rio de Janeiro, 2023. Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação em Engenharia Química) - Escola de Química, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2023.

No contexto atual do mercado de aviação, a busca por alternativas mais sustentáveis e de baixa emissão de carbono tem impulsionado a demanda por bioquerosene. Nesse âmbito, o trabalho teve como objetivo avaliar a viabilidade da construção de uma planta de bioquerosene de aviação no Brasil, utilizando o processo *Alcohol-to-Jet* com etanol como matéria-prima. A metodologia adotada envolveu o estudo da capacidade produtiva, a simulação no *software Aspen Plus® v12.1* e a análise econômica do processo. Foram considerados os custos dos equipamentos, a correção temporal e o investimento fixo. Em seguida, foram realizadas análises que contemplaram diferentes cenários, com variações nos preços do etanol e do bioquerosene.

Dentre os cenários mais promissores, obtiveram-se aqueles em que os preço por kg do biocombustível foi estimado em US\$ 2,57, chegando a US\$ 1,86 como preço mais baixo. Essas estimativas se apresentaram competitivas com relação ao mercado internacional de US\$ 2,70 por kg, ganhando uma vantagem na margem de 5% a 31% inferior. Avaliou-se também o preço da matéria-prima e os cenários apresentaram preços por kg de etanol entre US\$ 0,37 e US\$ 0,39. A viabilidade nesses casos se torna possível mediante análise do histórico de precificação do álcool no Brasil, no qual os preços anteriores à pandemia de 2019 apresentaram patamares similares aos obtidos nos cenários apresentados.

Palavras-chave: bioquerosene de aviação; *Alcohol-to-Jet*; etanol; biocombustível; simulação de processos; análise econômica.



## ABSTRACT

TEIXEIRA, Adryena Teixeira; SILVA, Amanda Carvalho Martins da. **Avaliação Técnica e Econômica da Produção de Combustível de Aviação a Partir de Etanol**. Rio de Janeiro, 2023. Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação em Engenharia Química) - Escola de Química, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2023.

In the current context of the aviation market, the search for more sustainable and low-carbon alternatives has driven the demand for biojet fuel. In this scope, the objective of this work was to evaluate the feasibility of constructing an aviation biojet fuel plant in Brazil using the Alcohol-to-Jet process with ethanol as the feedstock. The methodology adopted involved the study of production capacity, simulation using Aspen Plus® v12.1 software, and economic analysis of the process. The costs of equipment, time correction and fixed investment were considered. Subsequently, analyses were conducted considering different scenarios with variations in ethanol and biojet fuel prices.

Among the most promising scenarios, the one in which the biofuel price per kg was estimated at US\$2,57, reaching a low of US\$1,86, was obtained. These estimates were competitive compared to the international market price of US\$2,70 per kg, with an advantage of 5% up to 31% lower. The price of the feedstock was also evaluated, and the scenarios presented ethanol prices per kg ranging from US\$0,37 to US\$0,39. Viability in these cases becomes possible by analyzing the pricing history of ethanol in Brazil, where prices prior to the 2019 pandemic reached similar levels to those obtained in the presented scenarios.

Keywords: aviation biokerosene; Alcohol-to-Jet; ethanol; biofuel; process simulation; economic analysis.

## LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 - Projeção da produção de combustíveis de aviação ao longo dos anos no Brasil.

Figura 2 - Estrutura de rotas de produção dos biocombustíveis de aviação.

Figura 3 - Diagrama de blocos do processo de produção de BioQAV pela rota ATJ.

Figura 4 - Esquema reacional de desidratação do etanol para formação de etileno.

Figura 5 - Esquema reacional de oligomerização do etileno para produção de oligômeros.

Figura 6 - Esquema reacional de hidrogenação dos oligômeros para formação das parafinas.

Figura 7 - Fluxograma do processo de produção de BioQAV pelo processo ATJ no Aspen Plus® v12.1.

Figura 8 - Análise de custo percentual dos componentes do custo direto.

Figura 9 - Série histórica do preço do etanol no Brasil.

Figura 10 - Fluxograma do processo de produção de BioQAV pelo processo ATJ no Aspen Plus® v12.1 com variáveis de produção.

## **LISTA DE TABELAS**

Tabela 1 - Rotas tecnológicas aprovadas pela ASTM.

Tabela 2 - Componentes químicos utilizados na simulação.

Tabela 3 - Condições operacionais da etapa de desidratação.

Tabela 4 - Fração mássica dos oligômeros formados na reação de oligomerização.

Tabela 5 - Condições operacionais da etapa de oligomerização.

Tabela 6- Condições operacionais da etapa de hidrogenação.

Tabela 7 - Identificação dos equipamentos do processo.

Tabela 8 - Espessura mínima conforma diâmetro interno em ft.

Tabela 9 - Taxa de troca térmica, utilidade e área de troca nos trocadores de calor.

Tabela 10 - Correlações percentuais para os elementos dos custos diretos, custos indiretos e despesas gerais.

Tabela 11 - Preços unitários de materiais e utilidades.

Tabela 12 - Investimento Total.

Tabela 13 - Distribuição do custo total.

Tabela 14 - Determinação do lucro líquido anual considerando os impostos.

Tabela 15 - Caracterização das correntes do processo.

Tabela 16 - Dados gerais dos equipamentos da simulação e seus dimensionamentos.

## LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

ANEEL	Agência Nacional de Energia Elétrica
ANP	Agência Nacional de Petróleo
ASTM	<i>American Society for Testing and Materials</i>
BioQAV	Bioquerosene de Aviação
CHJ	Querosene de hidrotermólise catalítica
COVID-19	Pandemia de coronavírus ocorrida no ano de 2019
CSTR	<i>Continuous Stirred-Tank Reactor</i>
DSTWU	Coluna de destilação <i>Shortcut</i> do Aspen
FT	<i>Fisher-Tropsch</i>
GGE	Galão de gasolina equivalente
HETP	<i>Height Equivalent to a Theoretical Plate</i>
IATA	International Air Transport Association
ICAO	International civil aviation organization
PCI	<i>Plant Cost Index</i>
PFR	<i>Plug Flow Reactor</i>
RadFrac.	Coluna de destilação rigorosa do Aspen
RStoic	Reator Estequiométrico do Aspen
SIP	Iso-parafinas sintetizadas de açúcares fermentados e hidroprocessados
SPK-A	Querosene Parafínico sintetizado com aromáticos
SPK-ATJ	Querosene Parafínico sintetizado por álcool
SPK-FT	Querosene Parafínico Hidroprocessado e sintetizado por Fischer-Tropsch;
SPK-HC-HEFA	Querosene parafínico sintetizado por hidrocarbonetos derivados, ácidos graxos e ésteres hidroprocessados
SPK-HEFA	Querosene Parafínico sintetizado por ácidos graxos e ésteres hidroprocessados;
TMA	Taxa de atratividade mínima
UNIFAC	Sistema semi empírico para a predição da atividade não eletrolítica em misturas não ideais
VPL	Valor presente líquido

## LISTA DE SÍMBOLOS

$\rho_i$	Densidade da espécie “i”
$\eta_M$	Eficiência do motor
$\eta_P$	Eficiência da bomba
A	Fator de correlação para cálculo do $F_M$ em trocador de calor casca e tubo
$A_T$	Área de troca térmica
B	Fator de correlação para cálculo do $F_M$ em trocador de calor casca e tubo
$C_B$	Custo base do equipamento
$C_{BM}$	Custo do motor associado
$C_{MDO}$	Custo anualizado da mão de obra
$C_p$	Custo total do equipamento
$C_{pk}$	Custo do recheio
$C_{PL}$	Custo das plataformas e escadas
D	Diâmetro do equipamento
$D_i$	Diâmetro interno da coluna
E	Eficiência da solda
$f_L$	Fator de Lang
$F_L$	Fator é uma correção que depende do comprimento dos tubos
$F_{LG}$	Fator de correlação entre vazão mássica líquida e gasosa
$F_M$	Fator material para dimensionamento do equipamento
$F_P$	Fator de pressão para dimensionamento do equipamento
$F_S$	Fator tamanho para dimensionamento do equipamento
G	Aceleração da gravidade
G	Vazão da fase gasosa
$H_1$	Altura da alimentação no vaso até o topo da coluna
$H_2$	Altura entre a alimentação no vaso e altura do líquido
$H_{Liq}$	Altura do líquido acumulado no tempo de 10 min
L	Vazão da fase líquida
$L_c$	Altura da coluna
$N_{np}$	Número de equipamentos que não operam com sólidos
P	Número de equipamentos que operam com sólidos
$P_d$	Pressão de operação corrigida
$P_o$	Pressão de operação
Q	Taxa de transferência de calor
S	Estresse máximo que o material resiste
$S_m$	Salário médio do operador
$t_s$	Espessura final do equipamento
$t_{op}$	Tempo de operação
$T_{EC}$	Temperatura de entrada no casco
$T_{ET}$	Temperatura de entrada no tubo
$T_{SC}$	Temperatura de saída no casco
$T_{ST}$	Temperatura de saída no tubo
$U_L$	Viscosidade fase líquida
$U_S$	Velocidade de separação das gotas
$U_f$	Velocidade de inundação;
U	Coefficiente global de transferência de calor

V	Volume do reator
$V_p$	Volume de recheio
$V_v$	Vazão volumétrica do gás
Y	Fator de correlação de Leva (1992)
W	Peso do equipamento

## SUMÁRIO

<b>1 INTRODUÇÃO</b> .....	<b>16</b>
1.1 CONTEXTUALIZAÇÃO .....	16
<b>1.1.1 A motivação para produção do bioquerosene</b> .....	<b>16</b>
<b>1.1.2 Cenário de importação e exportação</b> .....	<b>17</b>
<b>1.1.3 Adaptação da infraestrutura</b> .....	<b>18</b>
<b>1.1.4 Rotas Biotecnológicas</b> .....	<b>19</b>
1.2 OBJETIVOS .....	21
<b>1.2.1 Objetivo Geral</b> .....	<b>21</b>
<b>1.2.2 Objetivos Específicos</b> .....	<b>21</b>
<b>2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA</b> .....	<b>22</b>
2.1 ALCOHOL-TO-JET .....	22
<b>2.1.1 Desidratação</b> .....	<b>23</b>
<b>2.1.2 Oligomerização</b> .....	<b>24</b>
<b>2.1.3 Hidrogenação</b> .....	<b>25</b>
<b>2.1.4 Destilação</b> .....	<b>26</b>
2.2 ANÁLISES TÉCNICO-ECONÔMICAS DO PROCESSO ATJ .....	26
<b>3 PREPARAÇÃO DO AMBIENTE DE SIMULAÇÃO</b> .....	<b>28</b>
3.1 DEFINIÇÃO DA CAPACIDADE PRODUTIVA .....	28
3.2 COMPONENTES QUÍMICOS ENVOLVIDOS NO PROCESSO .....	28
3.3 ESCOLHA DO PACOTE TERMODINÂMICO .....	29
3.4 MODELAGEM DAS REAÇÕES .....	30
<b>3.4.1 Reação de Desidratação</b> .....	<b>30</b>
<b>3.4.2 Reação de Oligomerização</b> .....	<b>31</b>
<b>3.4.3 Reação de Hidrogenação</b> .....	<b>31</b>
3.5 SIMULAÇÃO DO PROCESSO .....	32
<b>4 DIMENSIONAMENTOS E CUSTOS DOS EQUIPAMENTOS</b> .....	<b>37</b>
4.1 REATORES .....	37
4.2 VASOS DE SEPARAÇÃO .....	40
4.3 TROCADORES DE CALOR.....	41

4.4 BOMBAS .....	44
4.5 COMPRESSORES .....	46
4.6 COLUNA DE DESTILAÇÃO .....	46
<b>5 CUSTOS DE PRODUÇÃO .....</b>	<b>48</b>
<b>6 FLUXO DE CAIXA E ANÁLISE ECONÔMICA .....</b>	<b>51</b>
<b>7 RESULTADOS E DISCUSSÃO .....</b>	<b>53</b>
7.1 INVESTIMENTO INICIAL .....	53
7.2 CUSTOS TOTAIS E RECEITA GERADA.....	53
7.3 LUCRATIVIDADE E RETORNO DO INVESTIMENTO.....	55
7.3.1 Cenário 1 .....	56
7.3.2 Cenário 2 .....	57
7.3.3 Cenário 3 .....	57
7.3.4 Cenário 4 .....	57
7.3.5 Cenário 5 .....	58
<b>8 CONCLUSÃO.....</b>	<b>60</b>
<b>9 REFERÊNCIA BIBLIOGRÁFICA.....</b>	<b>61</b>



# 1 INTRODUÇÃO

## 1.1 CONTEXTUALIZAÇÃO

### 1.1.1 A motivação para produção do bioquerosene

Nos últimos anos, a comunidade científica e lideranças governamentais têm-se preocupado cada vez mais com os impactos ao meio ambiente causados pela emissão de CO<sub>2</sub>. Nesta perspectiva, o setor de transportes é um dos maiores responsáveis desta problemática e, especificamente, o transporte aéreo chega a representar 2% das emissões de CO<sub>2</sub> do mundo, segundo dados da *International Air Transportation Association* – IATA. Concomitante ao Acordo de Paris e o Protocolo de Kyoto, as empresas de transporte aéreo se comprometeram com o programa “*Fly Net Zero*”, reduzindo até 2050 as emissões de carbono (IATA, 2022).

Diante desse desafio, um dos principais pilares é o uso de biocombustíveis em detrimento ao querosene de aviação (QAV) e da gasolina de aviação, utilizados atualmente, derivados do refino de petróleo. Além disso, estima-se que o crescimento, entre 2020 e 2050, deste setor alcançaria o triplo da taxa de crescimento de 6,8 ocorrido entre 1960 e 2018 (ICAO, 2016; LEE et al., 2021). Dessa maneira, para alcançar as demandas estimadas, a produção de biocombustíveis de aviação deverá alcançar até 2050 uma produção cerca de 56 vezes a existente em 2021 (IATA, 2022).

A produção de biocombustíveis de aviação pode ocorrer de diversas maneiras, podendo partir de matérias-primas como biomassas, gases industriais e os mais variados resíduos sólidos e líquidos. Os processos industrialmente conhecidos serão:

- Querosene Parafínico sintetizado por ácidos graxos e ésteres hidroprocessados (SPK-HEFA);
- Iso-parafinas sintetizadas de açúcares fermentados e hidroprocessados (SIP);
- Querosene Parafínico Hidroprocessado e sintetizado por Fischer-Tropsch (SPK-FT);
- Querosene Parafínico sintetizado com aromáticos (SPK-A);
- Querosene Parafínico sintetizado por álcool (SPK-ATJ);

No entanto, nenhum destes processos é economicamente competitivo quando comparado à produção de combustíveis fosseis provenientes do refino de petróleo, já que este compõe um modelo de negócio consolidado no Brasil e no mundo.

O Brasil conta com grande experiência no setor de biocombustíveis, principalmente com o etanol e o biodiesel. As características climáticas e territoriais favoráveis tornam o desenvolvimento de sua cadeia produtiva um importante pilar socioeconômico para o país. No setor de transportes, a necessidade de ganhos de eficiência junta-se com os objetivos de segurança energética e de redução das emissões, gerando incentivos à substituição de fontes de energia.

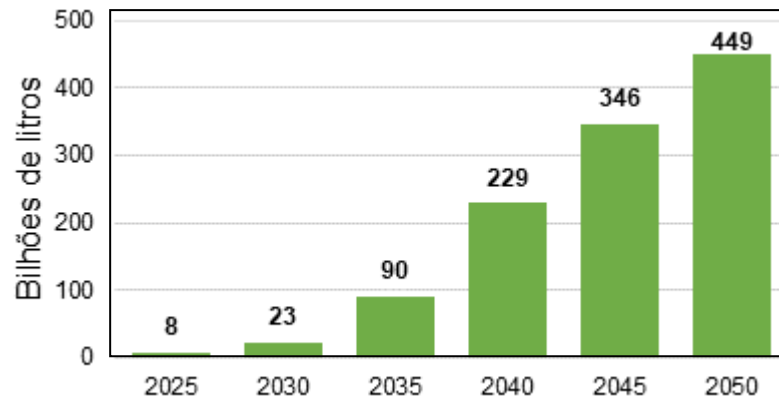
Atualmente, além desses biocombustíveis, o querosene de hidrotermólise catalítica (CHJ) e o querosene parafínico sintetizado por hidrocarbonetos derivados, ácidos graxos e ésteres hidroprocessados (SPK-HC-HEFA), são regulamentados pela ASTM D7566.

### **1.1.2 Cenário de importação e exportação**

De acordo com o Anuário Estatístico de 2021 da ANP (Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis), antes da pandemia de COVID-19 o mercado brasileiro produziu cerca de 6,383 milhões m<sup>3</sup> de querosene e gasolina de aviação, porém com a redução dos voos a produção destes combustíveis caiu 47%. No que tange ao mercado internacional, o volume importado dos combustíveis de aviação chegou a ser de aproximadamente 1,097 milhões m<sup>3</sup> em 2019, porém apresentou uma queda com o primeiro ano de pandemia, atingindo um total de 362 mil m<sup>3</sup> de volume importado em 2020 (ANP, 2021).

Ao considerar o cenário da produção e importação de querosene, há a necessidade de mitigação das emissões de gases que afetam o efeito estufa e as projeções do mercado quanto ao crescimento do setor de aviação são positivas visto que a produção de biocombustíveis visa alcançar o patamar de 449 bilhões de litros até 2050 (Figura 1) segundo a IATA (IATA, 2022). O Brasil, nesse ponto, apesar de não produzir bioquerosene em quantidades significativas, já instituiu o Programa Nacional do Bioquerosene ao final de 2021, que incentiva a produção, pesquisa e comercialização do produto, além da negociação de unidades de crédito de descarbonização (MME, 2021).

**Figura 1 - Projeção da produção de combustíveis de aviação ao longo dos anos no Brasil.**



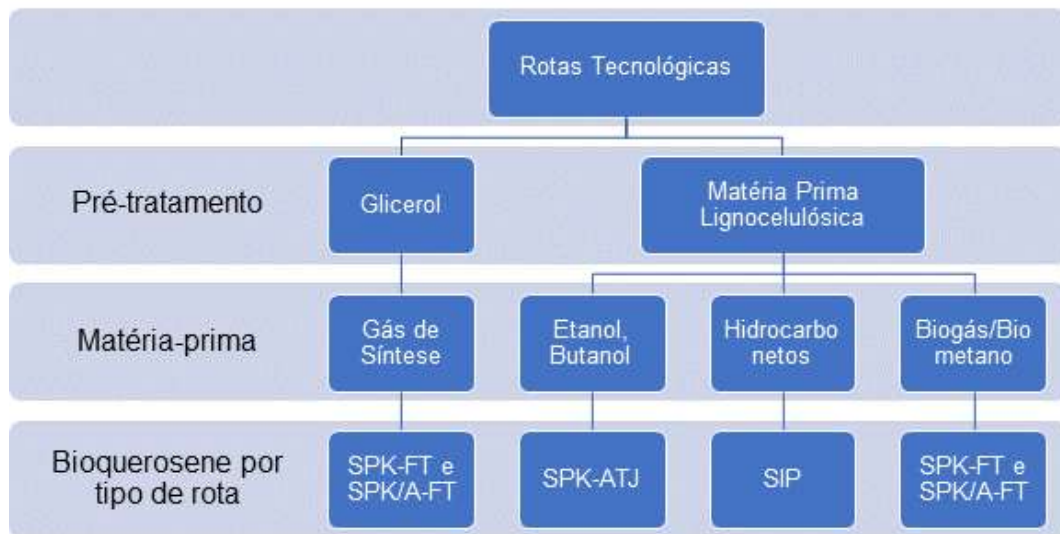
Fonte: Adaptado de IATA (2022)

### 1.1.3 Adaptação da infraestrutura

O grande desafio da implementação dos biocombustíveis está associado ao viés econômico, mas também à escalabilidade da produção para atender demandas no mercado. Apesar da indústria petroleira ser bem consolidada, no Brasil o álcool destinado principalmente à indústria de combustíveis possui papel relevante na economia do país, existindo inúmeras oportunidades de se associar às diversas cadeias produtivas, como a de bioquerosene, por exemplo. Apesar de poder ser produzido a partir de inúmeras biomassas é interessante, em um aspecto financeiro, que este seja derivado de matérias-primas que possam ser cultivadas em larga escala.

O Brasil, como um grande produtor de etanol e biodiesel, torna-se um potencial grande *player* para a produção de bioquerosene, uma vez que a partir da integração dessas plantas pode-se gerar produtos com maior valor agregado permitindo maior rentabilidade. Uma concepção de biorrefinaria focada na produção de bioquerosene a partir dos coprodutos da indústria do biodiesel pode ser vista na Figura 2. Nesta podem-se observar as possibilidades de pré-tratamento, matéria prima e rotas que podem ser assumidas para a produção de bioquerosene.

**Figura 2 - Estrutura de rotas de produção dos biocombustíveis de aviação.**



Fonte: Autoria própria.

#### 1.1.4 Rotas Tecnológicas

Os biocombustíveis precisam ser certificados pela *American Society for Testing and Materials* (ASTM) com as especificações de ASTM D1655 para alcançar as compatibilidades necessárias com a frota aérea existente e os níveis máximos de mistura com o querosene de aviação descritos na Tabela 1. Além disso, a partir de 2009, utilizando a ASTM D4054, é possível fornecer uma estrutura para o processo de aprovação de novos biocombustíveis, seguindo diversas etapas até a aprovação final. Até o momento, segundo a Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis somente os biocombustíveis sintetizados pelas rotas SPK-HEFA, SPK-SIP, SPK-FT, SPK/A-FT e SPK-ATJ foram certificados como componentes que podem ser utilizados na mistura de combustíveis de aviação convencionais (ANP, 2020).

A SPK-HEFA é uma rota que utiliza como matéria-prima óleos vegetais e gorduras animais para a conversão em hidrocarbonetos por hidrogenação, passando posteriormente por hidrocrackeamento ou isomerização para se adequar a quantidade desejável do biocombustível conforme as normas. Essa rota já é vista comercialmente, dentre os principais produtores estão a empresa finlandesa Neste Oil, as americanas Gevo, Amyris e AltAir Fuels e a francesa Total.

Já a SPK-SIP é uma rota que utiliza açúcares e leveduras para a produção de hidrocarbonetos, passando por hidrocrackeamento e transformando hidrocarbonetos em iso-

parafinas. Pela ASTM, a mistura de bioquerosene produzido por esta via ao combustível fóssil não deve ser maior que 10% vol, devido à sua maior viscosidade e, conseqüentemente, menor performance e eficiência de combustão.

O processo SPK-FT utiliza gás de síntese e, através do processo de *Fisher-Tropsch* (FT), converte o mesmo em parafinas de longas cadeias de carbono, que são craqueadas e isomerizadas, produzindo parafinas idênticas às do QAV de origem fóssil. Além disso, na mesma lógica, existe o processo SPK/ A-FT, que adiciona à rota anterior o processo de alquilação de aromáticos leves, alternativa que apresenta compostos aromáticos em sua composição.

Por fim, há o processo SPK-ATJ, uma rota utiliza como matéria-prima álcool. Nesta rota, o convencional é que a matéria prima passe primeiramente pelo processo de desidratação até a formação das insaturações e siga para a oligomerização, aumentando sua cadeia de carbonos. Em sequência, passe pelo processo de quebra das insaturações por meio de uma reação de hidrogenação e finaliza a rota com fracionamento. Atualmente, o processo ATJ foi certificado para a produção utilizando o etanol ou o iso-butanol e produzido principalmente pela Lanzatech e Gevo. A grande vantagem desse processo é com relação à escala de operação, já utilizada industrialmente, na produção de biodiesel e etanol, necessitando menos adaptações e gerando menos erros de processo quando comparada aos outros processos alternativos. Por esses motivos, o objetivo deste trabalho é avaliar técnico e economicamente a produção de combustível de aviação a partir de etanol.

Tabela 1 - Rotas tecnológicas aprovadas pela ASTM.

<b>Combustíveis</b>	<b>Matéria Prima</b>	<b>Data de Certificação</b>	<b>Nível Máximo de Mistura</b>
SPK-HEFA	Óleos vegetais e Gorduras Animais.	2011	50%
SPK-SIP	Fermentação de açúcares.	2014	10%
SPK-FT	Biomassas renováveis, Carvão ou Gás natural.	2009	50%
SPK/A-FT	Biomassas renováveis, Carvão ou Gás natural.	2015	50%
SPK-ATJ	Biomassas renováveis, Material celulósico, Amidos e Açúcares.	2016	50%

Fonte: Assis; Andrade (2022).

## 1.2 OBJETIVOS

### 1.2.1 Objetivo Geral

O presente trabalho tem como objetivo geral simular e avaliar economicamente a viabilidade da rota biotecnológica Alcohol-to-Jet (ATJ) para a síntese de bioquerosene de aviação no Brasil, utilizando o etanol com matéria-prima do processo.

### 1.2.2 Objetivos Específicos

Para atingir objetivo geral, o trabalho consta com os seguintes objetivos específicos:

1 - Revisar os mecanismos reacionais, catalisadores utilizados no processo ATJ e conversões obtidas na literatura, a fim de se elaborar o fluxograma do processo e simular a produção do bioquerosene.

2 - Definir capacidade produtiva a partir do previsto no plano estratégico da Petrobras.

3 - Simular processo utilizando Aspen Plus® v12.1 e elaborar fluxograma de processo.

4 - Dimensionar os equipamentos do processo a partir da capacidade produtiva.

5 - Analisar economicamente, levantando custos de capital e operacional, além de calcular o fluxo de caixa e o *payback*.

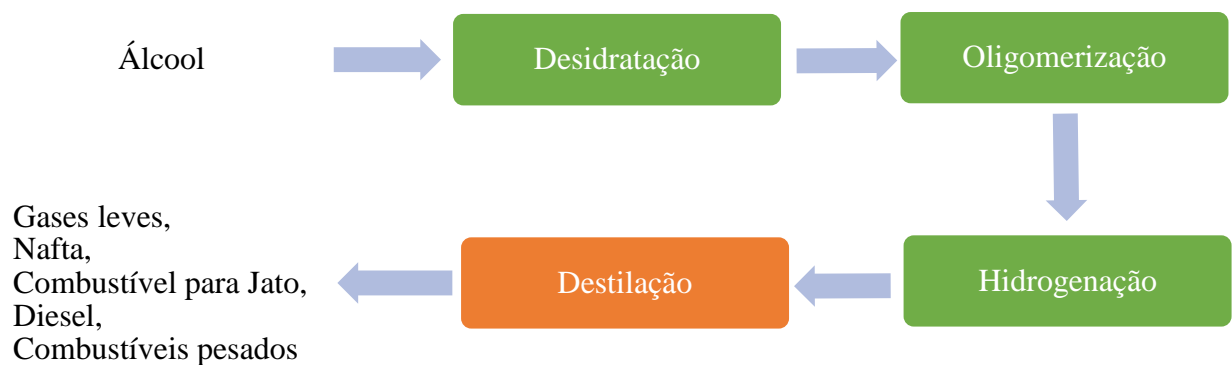
6 - Avaliar a viabilidade do processo criando cenários com as variáveis de preço do bioquerosene e preço do etanol, trazendo análises críticas.

## 2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

### 2.1 ALCOHOL-TO-JET

O processo para a produção do Bioquerosene de Aviação (BioQAV) pode ser representado através das etapas descritas na Figura 3 da rota ATJ.

**Figura 3 - Diagrama de blocos do processo de produção de BioQAV pela rota ATJ.**



Fonte: Autoria própria.

A matéria-prima do processo ATJ é o álcool proveniente da fermentação dos açúcares. O etanol de primeira ou segunda geração segue para as três etapas reacionais: desidratação, oligomerização e hidrogenação. Por fim, é necessária uma zona de separação por meio do processo de destilação, resultando nas frações de gases leves, nafta, gasolina, bioquerosene (ou combustível para jato, *jet fuel*), diesel e óleos combustíveis pesados (ANP, 2020)

Algumas empresas já estudam o processo ATJ para a produção de combustíveis de origem renovável, tais como: GEVO, Cobalt, BYOGY, Lanzatech, entre outras (Brooks et al., 2016). O processo da GEVO parte da plantação de milho e do isobutanol, e foi aprovado pela ASTM em 2016. Já no caso da BYOGY, o processo de produção parte do etanol, por meio de síntese catalítica, e foi aprovado em 2018 pela ASTM (Radich, 2015).

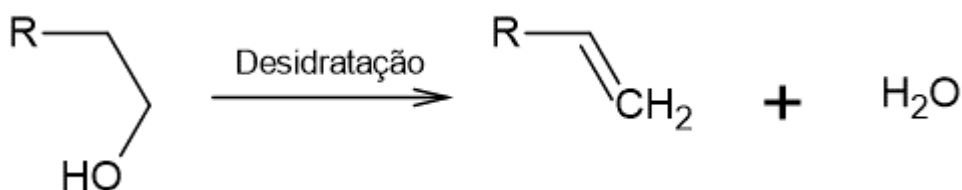
Apesar de o Brasil não possuir projetos com produções significativas de bioquerosene de aviação, todas as etapas do processo ATJ já são conhecidas e consolidadas em outros processos, o que facilita o aumento de escala. No entanto, a integração de todo o processo e o

desenvolvimento dessas etapas de produção desde a matéria-prima sacarínea até o bioQAV, ainda está presente somente em escala piloto (Mawhood et al., 2016). Em janeiro de 2023, entretanto Agência Ambiental Americana (EPA) reconheceu o etanol derivado da cana de açúcar produzido no Brasil como sustentável para a produção do combustível de aviação (Washington; Menotti, 2023), abrindo margem e agregando valor ao produto que pode ser derivado do álcool da produção da cana de açúcar brasileira.

### 2.1.1 Desidratação

A desidratação é primeira etapa reacional do processo ATJ. Nesta etapa, álcoois – o tamanho da cadeia depende do intermediário utilizado – são desidratados a alquenos, eliminando  $H_2O$ , como descrito na Figura 4. A desidratação catalítica de etanol a eteno segue como uma via alternativa da produção de eteno derivado da petroquímica, sendo um mecanismo bastante estudado ao longo dos anos. Devido a inúmeras pesquisas, esse processo já vem se desenvolvendo através de catalisadores heterogêneos de alta seletividade e altas taxas de conversão, como o caso do SynDol<sup>®</sup>, zeólitas e fosfatos de silício-alumínio (Zhang, 2013a). A formação da ligação dupla em conjunto com a eliminação de uma molécula de água é baseada na catálise ácida, podendo ser utilizada uma gama de catalisadores, como zeólitas derivadas de SAPO, H-ZSM-5, resinas de caráter ácido, óxidos de metais de transição e, principalmente, alumina, uma vez que estes são de fácil preparo e possuem conversões próximas a 99%, com alta seletividade para eteno (Zhang, 2013b).

**Figura 4 - Esquema reacional de desidratação do etanol para formação de etileno.**



Fonte: Autoria própria.

No Brasil, o processo de desidratação do etanol já é bem estabelecido, tanto que a Braskem desenvolveu em 2010 uma planta de desidratação de etanol para a produção de “polietileno verde” a partir da produção de bioetanol (Brooks et al., 2016).

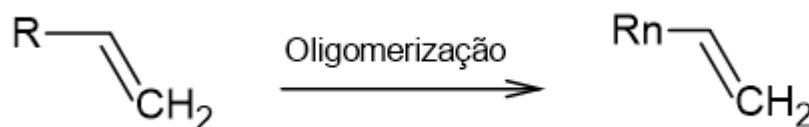


Neste processo é utilizada catálise ácida, onde o catalisador protona o grupo hidroxila, que sai como uma molécula de água, enquanto a base conjugada do catalisador desprotona o grupo metil, reorganizando o hidrocarboneto em etileno. A água é gerada como um subproduto da reação, sendo necessário um processo de separação já que na etapa de oligomerização é necessário um sistema livre de água. Nestes casos, dependendo do desenho da planta e das condições de processo, pode-se realizar uma combinação entre colunas de destilação e peneiras moleculares para a separação da água do meio reacional. Além disso, para aumentar a conversão, pode-se alocar uma corrente de reciclo dos álcoois não reagidos para o reator (Geleynse et al., 2018).

### 2.1.2 Oligomerização

Após a etapa de desidratação, o produto resultante passa pelo processo de oligomerização, onde irá ocorrer o aumento das cadeias de carbono como pode ser observado na Figura 5. Para alcançar um incremento nas cadeias de carbono que esteja dentro dos limites especificados da faixa do combustível, pode ser necessário realizar mais de uma etapa de processamento com catalisadores ácidos, como zeólitas, catalisadores de Ziegler-Natta e catalisadores com níquel e fósforo ligantes (Wang et al., 2016). Com somente uma etapa de oligomerização é possível atingir uma alta taxa de conversão de eteno, no entanto ocorre uma maior seletividade para cadeias de carbonos do tipo C1-C4, que são indesejáveis na produção de combustíveis de aviação (Geleynse et al., 2018).

**Figura 5 - Esquema reacional de oligomerização do etileno para produção de oligômeros.**



Fonte: Autoria própria.

O processo de oligomerização possui alguns fatores que podem dificultar a obtenção das longas cadeias de carbono necessárias. Em certos estudos, foi descrita a competição entre as reações de oligomerização e craqueamento das cadeias. A formação de produtos de longa cadeia é favorecida com as altas temperaturas da reação e maior superfície ácida do catalisador. Ao mesmo tempo, estes mesmos fatores favorecem as reações de craqueamento e formação de

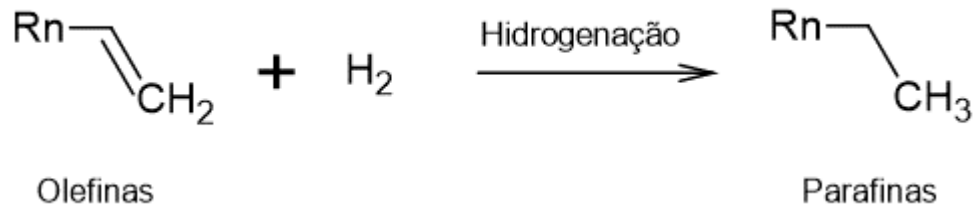
coque. Além disso, a presença de água no meio reacional favorece a formação de olefinas leves, atenuando as reações de oligomerização e craqueamento através da modificação dos sítios ácidos presentes no catalisador heterogêneo (Sun, 2014).

Para alcançar uma taxa de conversão ideal e garantir as especificações necessárias ao combustível, é necessário garantir um bom desempenho na etapa de oligomerização. O desenho dessa unidade é muito dependente de outros fatores presentes no processo como um todo, variando de acordo com a matéria-prima utilizada, os álcoois no início do processo, e com os catalisadores escolhidos. No mercado, atualmente, existem três processos estabelecidos para a oligomerização de eteno: *Chevron Phillips Chemicals*, *Ethyl* e *Shell*. O processo Chevron utiliza catalisador homogêneo Ziegler-Natta com baixa concentração, de modo que nem há o reciclo ou reutilização dele, ocorrendo somente uma conversão em aluminato de sódio e posterior descarte. O processo *Ethyl*, operado pela companhia INEOS, se baseia no processo Ziegler *Two-Step* que, diferentemente do processo Chevron, utiliza uma quantidade estequiométrica de catalisador para etileno, sendo regenerado e reutilizado após o uso. Já o terceiro processo foi desenvolvido pela Shell e utiliza um catalisador homogêneo ligante de níquel e fósforo (Singh; Naveen, 2017; Wang et al., 2016).

### 2.1.3 Hidrogenação

A hidrogenação é a última etapa reacional do processo. Nesta etapa, as olefinas resultantes da oligomerização são hidrogenadas, saturando as duplas ligações presentes, representado pela Figura 6. Esse processo é bem difundido na indústria petroquímica, a fim de garantir a baixa reatividade dos combustíveis. Para a reação é necessário utilizar um catalisador metálico baseado em níquel, platina ou paládio, sendo mais comum industrialmente os catalisadores de níquel Raney, que apresentam menor custo (Pechstein et al., 2017). O meio é submetido à atmosfera de hidrogênio a 370 °C, WHSV (peso de alimentação por hora por unidade de peso de catalisador carregado no reator) de 3 h<sup>-1</sup>, utilizando 5% Pd/C ou 5% Pt/C como catalisadores no processo chamado de hidrogenação (Jang et al., 2010; Taylor; Jenni; Peters, 2010). Há relatos de que, além da platina e do paládio suportados, na etapa de hidrotratamento pode ser usado catalisador de cobalto e molibdênio (CoMo) em suporte de carvão ativado para saturar as ligações duplas restantes (Tao et al., 2017).

**Figura 6 - Esquema reacional de hidrogenação dos oligômeros para formação das parafinas.**



Fonte: Autoria própria.

A corrente de hidrogênio é alimentada ao reator em excesso para conversão total das olefinas a parafinas. Devido a essa corrente em excesso, nessa unidade é importante um bloco de reciclo, com uma separação gás/líquido e posterior compressor para garantir a realimentação de H<sub>2</sub> na pressão ideal. Além disso, o suprimento de hidrogênio é essencial para assegurar a produção da planta. Essa matéria-prima pode ser um custo adicional da planta, mas também pode ser produzido a partir da própria biomassa (Geleynse et al., 2018).

#### 2.1.4 Destilação

Após todas as etapas reacionais, a corrente segue para uma etapa de separação com o objetivo de fracionar os diferentes componentes. Através de uma coluna de destilação, é possível dividir a corrente em: gases leves, nafta, gasolina, bioquerosene, diesel e óleos combustíveis pesados.

## 2.2 ANÁLISES TÉCNICO-ECONÔMICAS DO PROCESSO ATJ

No que diz respeito a estudos que envolvam a avaliação econômica do processo ATJ, foram encontradas três referências.

Tao et al. (2017) detalha o processo ATJ com base em duas matérias-primas diferentes - grão de milho e palha de milho - na escala de planta de 2.000 toneladas métricas secas por dia para se obter o etanol e posteriormente combustível de aviação. Os processos foram simulados utilizando a ferramenta comercial AspenPlus™ Release 7.2 para cálculo do balanço de massa e energia. Para análise econômica, assumiu-se como base o ano de 2011, de modo que foram

calculados os custos do investimento, custos fixos e variáveis, estimativa do capital inicial e precificação da matéria-prima de forma que as bases de custos usadas foram o preço mínimo de venda do combustível de todos os hidrocarbonetos produzidos. Estimou-se \$3,91 dólares por galão de gasolina equivalente (GGE) para o milho, com rendimento de 70,0% GGE/tonelada seca de biomassa e \$5,37 dólares por galão de gasolina equivalente (GGE) para a palha com rendimento de 49,6% GGE/tonelada seca de biomassa. O estudo concluiu que existem diferenças significativas quanto ao custo de capital dos dois processos, sendo 203 MM dólares do processo via grãos de milho contra 337 MM dólares via palha de milho.

Yao et al. (2017) coloca em questão a produção do ATJ via cana de açúcar, e, apesar de ser um estudo que não envolve uma simulação, concluiu em seu comparativo que a utilização da cana como matéria prima se apresenta como a alternativa mais acessível financeiramente frente ao milho em grãos. Como valores finais, trazidos a valor presente no ano de 2017, o combustível foi precificado a \$3,65/gal a partir da cana e \$3,84/gal a partir do milho, além de uma terceira alternativa precificada a \$5,21/gal a partir de biomassa *switchgrass*.

Em 2018, entretanto, Geleynse et al. (2018) questiona o uso do etanol como matéria prima para produção do ATJ, trazendo em seu estudo um comparativo entre a utilização do isobutanol frente ao etanol de milho. O artigo traz uma simulação com o *software Aspen* para estimar informações dos processos, descrevendo vantagens e desvantagens de cada processo. Como conclusão, o trabalho chega ao incremento de preço de \$0,86/gal para o etanol de milho e \$0,52/gal para o isobutanol em cima do preço do álcool correspondente a partir de uma escala de \$200 t/dia de álcool alimento. No caso de utilização do açúcar como matéria prima, em uma escala de \$435 t/dia de açúcar alimentado, chega-se ao preço de e \$2,84/gal a partir da fermentação do etanol e de \$2,23/gal a \$3,37/gal a partir da fermentação do isobutanol. O artigo deixa evidente que a vantagem econômica depende inevitavelmente do custo do álcool intermediário. Portanto, baratear essa geração é essencial para reduzir o custo do combustível final.

### 3 PREPARAÇÃO DO AMBIENTE DE SIMULAÇÃO

Neste trabalho, a simulação do processo de produção do bioquerosene de aviação ATJ foi realizada no simulador Aspen Plus<sup>®</sup> v12.1. Uma vez identificado o processo, conforme apresentado no capítulo anterior, e a capacidade produtiva, inicia-se a preparação do ambiente de simulação, que consiste na definição dos componentes envolvidos e suas propriedades, se necessário, e na escolha do pacote termodinâmico a ser utilizado.

#### 3.1 DEFINIÇÃO DA CAPACIDADE PRODUTIVA

No Brasil ainda não há produção industrial de bioquerosene de aviação por tecnologia *Alcohol-to-Jet*. Para definição da capacidade produtiva da planta a ser simulada neste trabalho, foi assumida a hipótese da criação de uma planta como previsto no plano estratégico da Petrobras no programa BioRefino (PETROBRAS, 2022). O projeto de construção de uma biorefinaria em Cubatão-SP ambiciona uma produção de 6.000 barris por dia de BioQAV, o que, considerando uma operação de 11 meses no ano em regime de 24 horas por dia, resulta em uma capacidade de 348 litros por hora. A Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis (ANP) estipula uma faixa de densidade de 765-780 kg/m<sup>3</sup> para o bioquerosene de aviação (ANP, 2014), de modo que a capacidade produtiva da planta seria de 30.704 kg/h de BioQAV em valores médios.

#### 3.2 COMPONENTES QUÍMICOS ENVOLVIDOS NO PROCESSO

Os componentes químicos participantes dessa simulação são, além do etanol, os produtos das três reações representativas deste processo: desidratação do etanol, oligomerização e hidrogenação das cadeias formadas. Na etapa de desidratação se fazem presentes o etanol, o etileno e a água (Coupard, et al., 2015). Já na reação de oligomerização, os produtos formados são as cadeias de alcenos (Lilga et al., 2016). É importante ressaltar que a referência utilizada não especifica em qual carbono as cadeias são oligomerizadas, porém há trabalhos que mostram que a oligomerização do etileno resulta em alfa-olefinas lineares (Singh; Naveen, 2017), sendo estas, portanto, consideradas na simulação nessa forma. A última etapa reacional do processo, por sua vez, tem como produtos os alcanos derivados dos alcenos da oligomerização, e demanda hidrogênio. Vale ressaltar que todos os componentes utilizados

nesta simulação foram encontrados no banco de dados do *software* e estão descritos na Tabela 2.

**Tabela 2 - Componentes químicos utilizados na simulação.**

<b>Reação Participante</b>	<b>Nome do componente</b>	<b>Fórmula</b>	<b>Número do CAS</b>
<b>Desidratação</b>	ÁGUA	H <sub>2</sub> O	7732-18-5
	ETANOL	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> O-2	64-17-5
	ETILENO	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	74-85-1
<b>Oligomerização</b>	CIS-2-BUTENO	C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> -2	590-18-1
	1-HEXENO	C <sub>6</sub> H <sub>12</sub> -3	592-41-6
	1-OCTENO	C <sub>8</sub> H <sub>16</sub> -16	111-66-0
	1-DECENO	C <sub>10</sub> H <sub>20</sub> -5	872-05-9
	1-DODECENO	C <sub>12</sub> H <sub>24</sub> -2	112-41-4
<b>Hidrogenação</b>	N-BUTANO	C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> -1	106-97-8
	N-HEXANO	C <sub>6</sub> H <sub>14</sub> -1	110-54-3
	N-OCTANO	C <sub>8</sub> H <sub>18</sub> -1	111-65-9
	N-DECANO	C <sub>10</sub> H <sub>22</sub> -1	124-18-5
	N-DODECANO	C <sub>12</sub> H <sub>26</sub>	112-40-3
	HIDROGÊNIO	H <sub>2</sub>	1333-74-0

Fonte: Autoria própria.

### 3.3 ESCOLHA DO PACOTE TERMODINÂMICO

A escolha do pacote termodinâmico é um dos pontos mais importantes na simulação, uma vez que ela pode influenciar diretamente na predição de propriedades dos sistemas, na modelagem das unidades do processo e no desempenho do processo. Para a escolha do pacote, convém observar o comportamento das misturas formadas. No caso da produção do bioquerosene de aviação ATJ, foi levada em consideração principalmente a presença de etanol e água – substâncias polares e associativas – na primeira etapa, e de diferentes tipos de hidrocarbonetos nas etapas finais. Portanto, para esta simulação foi utilizado o método UNIFAC, sendo a fase vapor modelada com a Equação de Peng Robinson (Fredenslund; Jones; Prausnitz, 1975). Vale acrescentar que há outros trabalhos semelhantes que também fizeram uso do modelo termodinâmico UNIFAC para simular a produção do biocombustível, como é o caso de Geleynse et al. (2018).

### 3.4 MODELAGEM DAS REAÇÕES

A rota ATJ baseia-se em três principais reações chamadas de desidratação, oligomerização e hidrogenação. Para simulação de cada uma dessas etapas, foram utilizadas referências individuais, visto que não foram encontradas patentes e artigos sobre o processo completo com o nível de detalhamento exigido na reprodução da simulação.

#### 3.4.1 Reação de Desidratação

A reação de desidratação consiste, nesse processo, em transformar a matéria-prima, etanol, em etileno a partir da remoção de uma molécula de água de sua estrutura. Para essa etapa foi utilizado como referência o segundo exemplo da patente da Coupard et al. (2015) no qual a corrente de alimentação de etanol passa por uma etapa de adequação de temperatura e pressão para entrar em uma sequência de dois reatores contendo leitos fixos de catalisadores de zeólitas. O primeiro reator converte 71,5% do etanol em etileno, enquanto a conversão no segundo reator é de 98%. O cálculo das conversões de etanol está descrito na Equação 3.1.

$$\text{Conversão (\%)} = \frac{(\text{Massa Inicial}_{\text{Etanol}} - \text{Massa Final}_{\text{Etanol}})}{\text{Massa Inicial}_{\text{Etanol}}} \quad (3.1)$$

Após a sequência de reações, obtém-se uma conversão total de 99,4%, como reportado por Coupard et al. (2015) e descrito na Tabela 3, em conjunto com as demais condições operacionais. Importante destacar o fato de as reações formarem água na mesma proporção que formam etileno. Assim, a quantidade de água na saída do reator resulta da soma entre a água gerada e a água da corrente de alimentação, visto que foi considerada como matéria-prima uma corrente aquosa de etanol 91.9 % m/m.

**Tabela 3 - Condições operacionais da etapa de desidratação.**

<b>Condições operacionais</b>	<b>1° Reator</b>	<b>2° Reator</b>
Temperatura	400°C	405°C
Pressão	5,83 atm	5,23 atm
Catalisador	Zeólita ZSM-5	Zeólita ZSM-5
Conversão	71,50%	97,80%

Fonte: Autoria própria, com base em Coupard et al. (2015).

### 3.4.2 Reação de Oligomerização

Oligomerização é o processo que transforma monômeros em cadeias de diversos tamanhos, os chamados oligômeros. No processo de produção do bioquerosene ATJ, essa etapa consiste na transformação do etileno formado na etapa anterior nos alcenos de maior tamanho descritos anteriormente. A partir da referência de Heveling (1998), foi possível mapear quais oligômeros são formados e suas proporções mássicas, conforme Tabela 4. Em Sydora (2017), foi possível observar que o estudo da seletividade da oligomerização apresentou proporções mássicas semelhantes as demonstradas em Heveling (1998), porém em outras condições operacionais essas proporções se modificam. Além das proporções, as condições operacionais da reação foram descritas na Tabela 5 também utilizando a referência de Lilga et al.(2016), na qual também foi possível observar como as condições operacionais e catalisadores alteram as proporções de cada componente que corroboram com o apresentado abaixo.

**Tabela 4 - Fração mássica dos oligômeros formados na reação de oligomerização.**

<b>Componentes</b>	<b>Fração Mássica</b>
CIS-2-BUTENO	0,27
1-HEXENO	0,176
1-OCTENO	0,25
1-DECENO	0,15
1-DODECENO	0,154

Fonte: Autoria própria, com base em Heveling (1998).

**Tabela 5 - Condições operacionais da etapa de oligomerização.**

<b>Condições operacionais</b>	<b>Reator de oligomerização</b>
Temperatura	85°C
Pressão	21,41 atm
Catalisador	<i>Ziegler-Natta</i> a base de complexo de níquel

Fonte: Autoria própria, com base em Lilga et al. (2016).

### 3.4.3 Reação de Hidrogenação

A hidrogenação, última etapa reacional do processo, consiste na adição de hidrogênio molecular aos compostos orgânicos insaturados formados na etapa anterior. Com isso, são gerados os compostos saturados correspondentes ao produto. Para a simulação desta reação,



assumiram-se as condições operacionais descritas na Tabela 6 com base no trabalho de Romero-Izquierdo et al., (2021). Deste também se retirou que a conversão foi de praticamente 100% nas reações.

**Tabela 6 - Condições operacionais da etapa de hidrogenação.**

<b>Condições operacionais</b>	<b>Reator de hidrogenação</b>
Temperatura	200°C
Pressão	35 atm
Conversão	100%
Catalisador	Zeólita ZSM-5

Fonte: Autoria própria, com base em Lilga et al (2016) e Romero-Izquierdo et al (2021).

### 3.5 SIMULAÇÃO DO PROCESSO

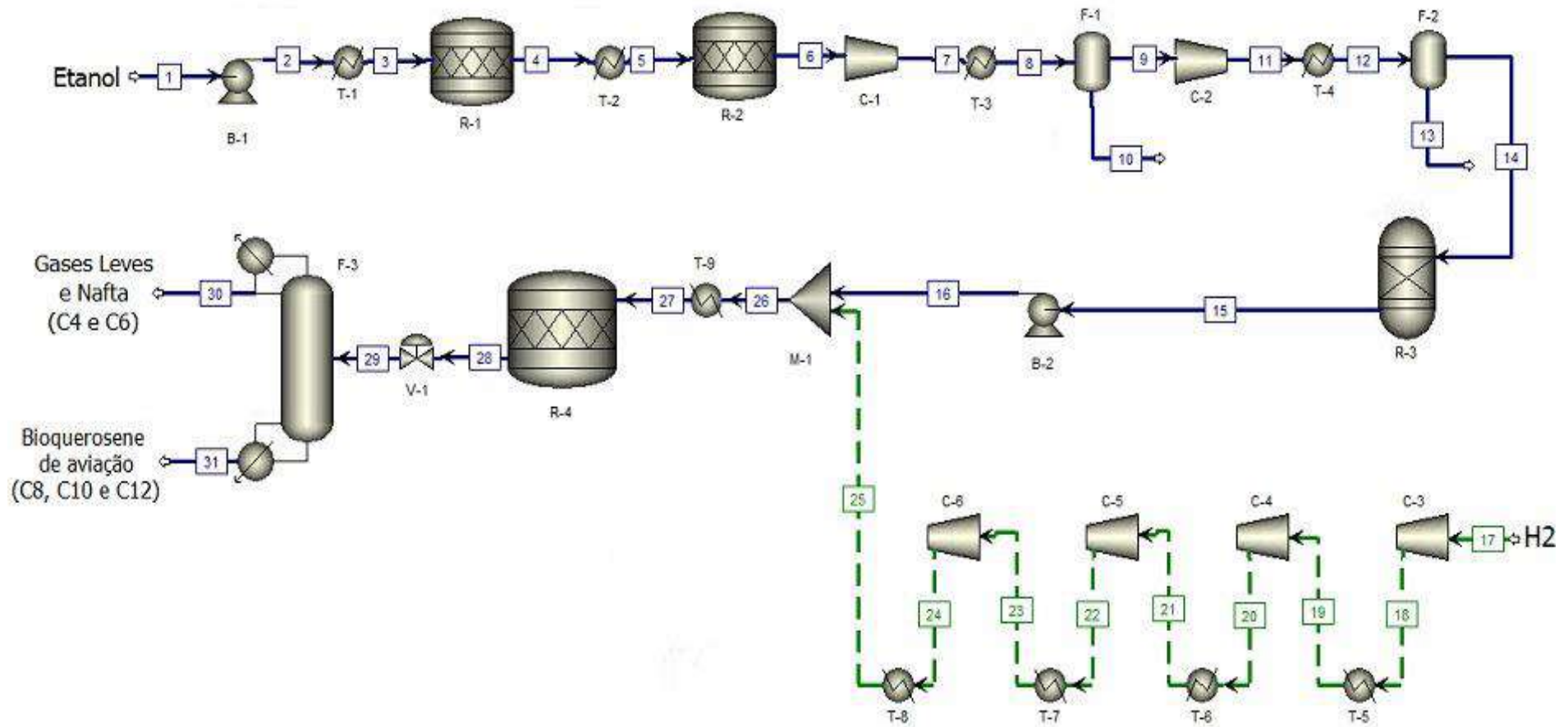
Essa seção tem por objetivo descrever o fluxograma do processo, os equipamentos utilizados e as correntes participantes da simulação. Ademais, há no Anexo 1 o detalhamento de todas as correntes aqui referenciadas. É possível observar na Tabela 7 o descritivo dos equipamentos utilizados no processo e a respectiva identificação de cada um deles no fluxograma. Em seguida, na Figura 7, está representado o fluxograma do processo construído no Aspen Plus® v12.1 para a produção do bioquerosene a partir do etanol.

**Tabela 7 - Identificação dos equipamentos do processo.**

<b>Equipamento</b>	<b>Identificação</b>
Bomba	B-1
	B-2
Compressor	C-1
	C-2
	C-3
	C-4
	C-5
	C-6
Separador	F-1
Separador	F-2
Coluna de destilação	F-3
Misturador	M-1
Reator de desidratação – Tipo conversão	R-1
	R-2
Reator de oligomerização – Tipo Rendimento	R-3
Reator de hidrogenação -Tipo conversão	R-4
Trocador de calor	T-1
	T-2
	T-3
	T-4
	T-5
	T-6
	T-7
	T-8
	T-9
Válvula	V-1

Fonte: Autoria própria.

Figura 7 - Fluxograma do processo de produção de BioQAV pelo processo ATJ no Aspen Plus® v12.1.



Fonte: Autoria própria.

Representado em azul, a simulação inicia-se com uma corrente única de etanol 97% (corrente 1) a temperatura e pressão ambiente, 25°C e 1 atm. Há, então, a adequação da pressão para 5,83 atm a partir de uma bomba (B-1), para se aproximar ao cenário encontrado no trabalho de referência (Coupard et al. 2015). Nesse sentido, a corrente passa por um trocador de calor (T-1), elevando a temperatura a 400°C (corrente 2), ambientando a corrente para a primeira etapa de reação do processo.

Após condicionamento da alimentação do reator (corrente 3) ocorre uma sequência de dois reatores (R-1 e R-2), separados por um trocador de calor (T-2). Os reatores foram simulados por meio do bloco RStoic. A primeira reação, de desidratação, possui uma conversão de 71,5% de etanol a etileno em condições operacionais de 400°C e 5,83 atm. O trocador de calor intermediário (T-2) opera com a corrente de saída a 405°C. No segundo reator há a conversão de 97,8% do etanol que o alimenta a etileno. A temperatura em ambos os reatores é mantida constante por meio da utilidade *Very High Temperature*.

A corrente de saída do reator R-2 (corrente 6) passa por um compressor isentrópico (C-1) que resulta na pressão final de 13,32 atm a 507°C. Em seguida, passa por um trocador de calor (T-3) que a resfria a 100°C (corrente 8), alimentando um vaso de separação gás/líquido (F-1). Nesse vaso, é separada uma corrente rica em água pelo fundo (corrente 10) e a corrente que rica em etileno pelo topo (corrente 9). Em seguida, a corrente de topo rica em etileno (corrente 9) é pressurizada por um compressor (C-2) a 21,41 atm e resfriada por um trocador de calor (T-4) a 85°C. O fluxo (corrente 12) segue para um segundo vaso de separação (F-2) para separar o etileno do etanol não reagido, água remanescente e gases ali presentes. Para conveniência do trabalho, foram desconsideradas as reações secundárias de aproximadamente 0,4% da massa total que representariam compostos oxidados e cadeias de carbono menores de 3 e 4 carbonos. A separação ocorre à temperatura de 85°C e pressão de 21,41 atm, e o produto segue para a segunda etapa deste processo.

Na etapa de oligomerização, a corrente 14 segue para o bloco do reator (R-3), representando o bloco de reatores desta etapa, onde a reação ocorre na temperatura de 85°C e 21,41 atm (Lilga et al. 2016). O artigo utilizado como base da simulação (Heveling, 1998) descreve as frações mássicas dos hidrocarbonetos formados.

A saída do bloco do reator R-3 (corrente 15) está aproximadamente composta pelas frações de 27% C<sub>4</sub>, 17,6% C<sub>6</sub>, 25% C<sub>8</sub>, 15% C<sub>10</sub> e 15,4% C<sub>12</sub>, considerando uma conversão de 100% do etileno nos hidrocarbonetos. O bloco R-3 foi simulado com o bloco R-Yield, e sua temperatura foi mantida constante por meio da utilidade *Cooling Water*. Sua

corrente de saída segue para uma bomba (B-2) que a pressuriza a 34,54 atm e a envia posteriormente para um misturador (M-1).

Para o início da terceira etapa, além da corrente anterior (corrente 16), uma segunda corrente (corrente 25) é adicionada ao misturador M-1. Esse processo, demonstrado em verde, representa a cadeia de pressurização do H<sub>2</sub>, que entra no processo em condições ambientes de 25°C e 1 atm a partir da corrente 17, cuja vazão foi definida estequiometricamente conforme os reagentes da corrente 16. Inicialmente, a corrente 17 passa por uma série de compressores e trocadores de calor a fim de comprimir o gás até uma pressão final de 34,54 atm e elevar o gás a 40°C. Isso ocorre de forma que a pressão tenha um aumento gradativo com a temperatura controlada. Misturadas as correntes, segue-se para um trocador de calor (T-9) que eleva a temperatura a 200°C para a próxima reação.

Ocorre, então, a hidrogenação no último reator (R-4), representando o bloco de reatores nesta etapa. O reator foi simulado com o bloco RStoic e sua temperatura foi mantida constante com o auxílio da utilidade *Cooling Water*. Na etapa de hidrogenação, foi utilizado como base o trabalho de Romero-Izquierdo et al. (2021), que reporta uma conversão de 100% dos alcenos provenientes da oligomerização. Após a reação de hidrogenação, a saída do reator R-4 (corrente 28) apresenta na sua composição somente os hidrocarbonetos combustíveis nas mesmas frações mássicas de 27% C<sub>4</sub>, 17,6% C<sub>6</sub>, 25% C<sub>8</sub>, 15% C<sub>10</sub> e 15,4% C<sub>12</sub>. Inicialmente, foi realizada uma simulação no bloco DSTWU para obter as especificações de razão de refluxo mínima, número mínimo de estágios e estágio ótimo de alimentação necessários no bloco de simulação RadFrac. A separação das frações ocorre em uma coluna de destilação (F-3), onde são separados os óleos leves e a nafta, ou seja, frações de C<sub>4</sub> e C<sub>6</sub> (corrente 30) no topo e frações de C<sub>8</sub>, C<sub>10</sub> e C<sub>12</sub> no fundo (corrente 31), assumidas neste trabalho como o bioquerosene de aviação.

## 4 DIMENSIONAMENTOS E CUSTOS DOS EQUIPAMENTOS

A partir da simulação e da capacidade produtiva determinada nos capítulos anteriores, é possível dimensionar os equipamentos e estimar os seus custos por meio das equações propostas por Seider et al., (2016). Uma vez calculados os custos dos equipamentos, o investimento fixo da planta pode ser estimado através do método de Lang, sendo as dimensões e os custos obtidos para cada equipamento encontrados no Anexo 2.

A aplicação da metodologia de Lang implica em obter os preços f.o.b (*free on board*) dos equipamentos, calculados por equações empíricas encontradas em Seider, et al. (2016). Ademais, faz-se necessário corrigi-las temporalmente visto que as correlações foram determinadas no passado. Para isso, multiplicou-se os valores obtidos pelo *Plant Cost Index*, fator divulgado pela *Chemical Engineering Magazine*, que, nesse trabalho utiliza a publicação de fevereiro de 2023 igual a 800,6.

Além disso, para a determinação do investimento fixo do projeto, foi utilizado a Equação 4.0.1 que considera um fator de transporte dos equipamentos até o local de instalação da planta de 1,05 e o fator de Lang de 5,04 ( $F_L$ ) além dos custos de aquisição dos equipamentos, que tem como referência o ano de 2013 e  $PCI_B$  igual a 567 em Seider, et al. (2016).

$$I_F = 1,05 \times F_L \times \sum_i \left( \frac{PCI}{PCI_B} \times C_i \right) \quad (4.0.1)$$

onde:

$I_F$  = investimento fixo;

$F_L$  = fator de Lang;

$PCI$  = Plant Cost Index para o ano de projeto;

$PCI_B$  = Plant Cost Index para o ano base;

$C_i$  = custo f.o.b. de aquisição do equipamento  $i$ .

### 4.1 REATORES

Para o dimensionamento de todos os reatores utilizados na simulação, levou-se em consideração a reação predominante em fase gasosa. Para esses casos, conforme Seider et al. (2016), recomenda-se o uso de PFR (*Plug Flow Reactor*) em detrimento do CSTR

(*Continuous Stirred-Tank Reactor*). Além disso, Coupard et al. (2015) citaram em sua patente o fato de a reação de desidratação do etanol ocorrer em um leito fixo e de forma adiabática, ou seja, sem trocas com o ambiente.

Para o cálculo das dimensões dos reatores foi utilizada a vazão volumétrica proveniente do resultado da simulação, os tempos de residência das reações encontradas na literatura e um fator de 20% de *headspace* para expansão térmica. Considerando o reator como formato cilíndrico e uma relação de 2:1 entre as dimensões de altura e comprimento, obtém-se os resultados pela Equação 4.1.1.

$$D = \left( \frac{4V}{2\pi} \right)^{1/3} \quad (4.1.1)$$

Para os cálculos dos custos e dimensionamento, considerou-se que os reatores são vasos horizontais pressurizados com recheio. A espessura do vaso é calculada pela Equação 4.1.2.

$$t_p = \frac{P_d D}{2SE - 1,2P_d} \quad (4.1.2)$$

Onde:

$P_d$  = Pressão de operação do vaso em psig;

$D$  = Diâmetro do vaso em in;

$S$  = Estresse máximo que o material resiste;

$E$  = Eficiência da solda.

A pressão de operação do vaso pode ser obtida através da Equação 4.1.3, para pressões de operação entre  $10 < P_o < 1.000$  psig.

$$P_d = \exp\{0,60608 + 0,91615[\ln(P_o)] + 0,0015655[\ln(P_o)]^2\} \quad (4.1.3)$$

Para este trabalho, foi adotado para os quatro reatores o valor de 15.000 psi para  $S$  considerando a metodologia de referência de Seider et al. (2016) e um valor para eficiência da solda de 1. Além disso, foi avaliado para todos os equipamentos se a espessura calculada atingia a espessura mínima sugerida pelos autores, conforme Tabela 8, para que se mantenha

a segurança baseada nos diâmetros. E, posteriormente, também por recomendação dos autores, por questões de corrosão do material, foram acrescidos 0,125 in à espessura.

**Tabela 8 - Espessura mínima conforme diâmetro interno em ft.**

Diâmetro Interno (ft)	Espessura mínima (in)
0-4	0,25
4-6	0,3125
6-8	0,375
8-10	0,4375
10-12	0,5
12-14	0,5625

Fonte: A autoria própria com base em Seider et al (2016)

Com os dados da espessura, diâmetro e altura do vaso é possível calcular o peso descrito na Equação 4.1.4.

$$W = \pi(D + t_s)(L_c + 0,8D)t_s\rho \quad (4.1.4)$$

Onde,

W = Peso em lb;

D = Diâmetro em in;

$t_s$  = espessura final em in;

$L_c$  = altura da coluna em in;

$\rho$  = densidade do aço inoxidável 304.

Após a obtenção de W, calcula-se a parcela de custo do vaso do reator pela Equação 4.1.5 descrita em Seider et al. (2016) para vasos horizontais com o limite de  $1.000 < W < 920.000$  lb.

$$C_V = \exp\{5,6336 + 0,4599[\ln(W)] + 0,00582[\ln(W)]^2\} \quad (4.1.5)$$

Para o cálculo dos custos de escadas e plataformas foi utilizada a expressão 4.1.6.

$$C_{PL} = 2275(D_i)^2 \quad (4.1.6)$$

Por fim, o custo total dos reatores foi dado pela Equação 4.1.7, considerando  $F_M$  como 1,7 (fator material do aço inoxidável 304),  $C_V$  o custo dos vasos calculados anteriormente e  $C_{PL}$  o custo de plataformas e escadas.

$$C_P = F_M C_V + C_{PL} \quad (4.1.7)$$



## 4.2 VASO DE SEPARAÇÃO

Para o dimensionamento dos vasos *flash* presentes na simulação deste trabalho foi utilizada a metodologia de Towler e Sinnott et al. (2008), considerando-os vasos verticais. Para esse tipo de vaso, o diâmetro é calculado pela Equação 4.2.1, de forma a garantir área suficiente para reduzir a velocidade do gás de modo que as gotas se depositem.

$$D_v = \sqrt{\left(\frac{4V_v}{\pi u_s}\right)} \quad (4.2.1)$$

Onde:

$V_v$  = Vazão volumétrica do gás em m<sup>3</sup>/s;

$u_s$  = velocidade de separação das gotas em m/s;

A velocidade de separação é determinada pela a Equação 4.2.2.

$$u_s = 0,0105 \sqrt{\frac{(\rho_l - \rho_g)}{\rho_g}} \quad (4.2.2)$$

Onde:

$\rho_g$  = densidade da fase gasosa em kg/m<sup>3</sup>;

$\rho_l$  = densidade da fase líquida em kg/m<sup>3</sup>;

Para a altura do vaso, descrita na Equação 4.2.3, é considerada uma parcela na proporção do diâmetro do vaso da alimentação até o topo, uma parcela da metade do diâmetro na porção da altura de *hold up* do líquido até a alimentação e, por fim, uma parcela da altura do líquido acumulado no tempo de *hold up* de 10 min.

$$H_T = H_1 + H_2 + H_{liq} \quad (4.2.3)$$

Onde:

$H_1$  = altura da alimentação no vaso até o topo da coluna;

$H_2$  = altura entre a alimentação no vaso e altura do líquido;

$H_{liq}$  = altura do líquido acumulado no tempo de 10 min.

Os cálculos dos custos dos vasos *flash* seguem a mesma estrutura dos reatores. A espessura do vaso é calculada pela Equação 4.1.2 descrita anteriormente no dimensionamento do reator.

A pressão de operação do vaso corrigida pode ser obtida através da Equação 4.2.5. para pressões de operação entre  $10 < P_o < 1.000$  psig.

$$P_d = \exp\{0,60608 + 0,91615[\ln(P_o)] + 0,0015655[\ln(P_o)]^2\} \quad (4.2.5)$$

Para os dois vasos, também foi adotado o valor de 15.000 psi para S e um valor de 1 para eficiência de solda. À espessura calculada também foi adicionado 0,125 in.

Com os dados da espessura, diâmetro e altura do vaso, é possível calcular o peso descrito na Equação 4.1.4.

Após a obtenção de W, calcula-se a parcela de custo do vaso pela Equação 4.2.7 descrita em Seider et al. (2016) para vasos verticais com o limite de  $4.200 < W < 1.000.000$  lb.

$$C_V = \exp\{7,1390 + 0,18255[\ln(W)] + 0,02297[\ln(W)]^2\} \quad (4.2.7)$$

Para o cálculo dos custos de plataformas e escadas foi utilizada a expressão 4.2.8.

$$C_{PL} = 410(D_i)^{0,73960}(L)^{0,70684} \quad (4.2.8)$$

Por fim, o custo total dos separadores foi dado pela Equação 4.2.9, considerando  $F_M$  como 1,7 (fator material do aço inoxidável 304),  $C_V$  o custo dos vasos calculados anteriormente e  $C_{PL}$  o custo de escadas e plataformas dos separadores.

$$C_P = F_M C_V + C_{PL} \quad (4.2.9)$$

### 4.3 TROCADORES DE CALOR

Para dimensionamento e estimativa de custo dos trocadores de calor presentes na simulação deste trabalho, foi utilizada a metodologia de Seider et al. (2016). Seguindo as recomendações da referência, os trocadores que possuem uma área de troca térmica superior a 200 ft<sup>2</sup> foram projetados como trocadores do tipo casco e tubo, e aqueles que possuem área

de troca térmica inferior a 200 ft<sup>2</sup> como bitubular. O cálculo da área de troca térmica foi feito pela Equação 4.3.1

$$Q = UA_T \Delta T_{LM} \quad (4.3.1)$$

Onde:

Q = Taxa de transferência de calor em W;

U = coeficiente global de transferência de calor em W/m<sup>2</sup>°C;

A<sub>T</sub> = Área de troca térmica em m<sup>2</sup>;

ΔT<sub>LM</sub> = média logarítmica da diferença de temperaturas.

A taxa de transferência de calor é obtida através do simulador Aspen Plus<sup>®</sup> v12.1. O valor de U foi extraído de Seider et al. (2016), que apresentam faixas de valores típicas para diversos sistemas, já que o coeficiente global depende dos equipamentos e espécies envolvidas na troca térmica. Para o cálculo da média logarítmica da diferença das temperaturas, utilizou-se a Equação 4.3.2.

$$\Delta T_{LM} = \frac{(T_{EC} - T_{SC}) - (T_{ST} - T_{ET})}{\ln \left( \frac{T_{EC} - T_{SC}}{T_{ST} - T_{ET}} \right)} \quad (4.3.2)$$

Onde:

T<sub>EC</sub> = Temperatura de entrada no casco em °C;

T<sub>SC</sub> = Temperatura de saída no casco em °C;

T<sub>ET</sub> = Temperatura de entrada no tubo em °C;

T<sub>ST</sub> = Temperatura de saída no tubo em °C.

Com todos os componentes determinados no Anexo 1 e utilizando a Equação 4.3.1, foi possível calcular as áreas de troca térmica apresentadas na Tabela 9.

**Tabela 9 - Taxa de troca térmica, utilidade e área de troca nos trocadores de calor.**

<b>Equipamento</b>	<b>Q (MegaKJ/h)</b>	<b>Utilidade</b>	<b>A<sub>T</sub> (m<sup>2</sup>)</b>
T-1	13.582.278,09	<i>Fired Heater</i>	119,94
T-2	92.905,09	<i>Very High Temperature</i>	0,15
T-3	13.886.944,55	<i>Cooling Water</i>	196,66
T-4	577.985,41	<i>Cooling Water</i>	18,56
T-5	184.999,57	<i>Cooling Water</i>	8,97
T-6	215.342,24	<i>Cooling Water</i>	9,55
T-7	215.970,26	<i>Cooling Water</i>	9,54
T-8	45.258,15	<i>Cooling Water</i>	4,43
T-9	2.419.772,69	<i>Fired Heater</i>	19,02

Fonte: Aatoria própria.

O custo final dos trocadores de calor do tipo casco e tubo é dado pela Equação 4.3.3.

$$C_P = F_P F_M F_L C_B \quad (4.3.3)$$

O componente  $F_P$  é o fator de pressão, que é calculado pela expressão 4.3.4, válida quando  $100 < P < 2000$  psig e equivalente a 1 fora desse intervalo.  $F_M$  é o fator material, que pode ser obtido pela Equação 4.3.5. Foram calculados considerando os materiais do casco/tubo como aço carbono/aço inoxidável, para os quais a e b apresentam valores de 1,75 e 0,13, respectivamente. O fator  $F_L$  é uma correção que depende do comprimento dos tubos, assumindo o valor de 1 neste trabalho.  $C_B$  corresponde ao custo base dos trocadores, que no caso do casco e tubo é obtido pela expressão 4.3.6.

$$F_P = 0,9803 + 0,018 \left( \frac{P}{100} \right) + 0,0017 \left( \frac{P}{100} \right)^2 \quad (4.3.4)$$

$$F_M = a + \left( \frac{A}{100} \right)^b \quad (4.3.5)$$

$$C_B = \exp \{12,031 - 0,8709[\ln(A)] + 0,09005[\ln(A)]^2\} \quad (4.3.6)$$

O custo final dos trocadores de calor do tipo bitubular é dado pela Equação 4.3.7.

$$C_P = F_P F_M C_B \quad (4.3.7)$$

O componente  $F_P$  é o fator de pressão, que é calculado pela expressão 4.3.8, válida quando  $600 < P < 3000$  psig e equivalente a 1 fora desse intervalo.  $F_M$  é o fator material, igual a 2 considerando o material do tubo externo como aço carbono e o interno como aço

inoxidável.  $C_B$  corresponde ao custo base dos trocadores, que no caso do bitubular é obtido pela expressão 4.3.9.

$$F_p = 0,8510 + 0,1292 \left( \frac{P}{600} \right) + 0,0198 \left( \frac{P}{600} \right)^2 \quad (4.3.8)$$

$$C_B = \exp \{7,2718 - 0,16[\ln(A)]\} \quad (4.3.9)$$

#### 4.4 BOMBAS

As bombas utilizadas nesta simulação foram dimensionadas conforme direcionamento de Seider et al. (2016). A referência sugere o cálculo do fator tamanho ( $F_s$ ) e sua aplicação na correlação de custo proposto pela companhia Monsanto. O parâmetro  $F_s$  consiste no produto entre vazão (Q) em gpm e altura manométrica (H) em ft, e é determinado na Equação 4.4.1.

As bombas utilizadas nesta simulação foram dimensionadas conforme direcionamento de Seider et al. (2016). A referência calcula o fator tamanho ( $F_s$ ) e utiliza o método de correlação de custo praticado pela companhia Monsanto. O parâmetro  $F_s$  consiste no produto entre vazão (Q) em gpm e a altura manométrica (H) em ft, determinado na Equação 4.4.1.

$$F_s = Q(H)0,5 \quad (4.4.1)$$

Após a determinação do parâmetro  $F_s$ , é possível obter o custo base da bomba ( $C_B$ ) a partir da Equação 4.4.2.

$$C_B = \exp\{12,1656 - 1,1448[\ln(F_s)] + 0,0862 [\ln(F_s)]^2\} \quad (4.4.2)$$

Além de  $C_B$ , o preço f.o.b. do equipamento ( $C_P$ ) também está atrelado ao fator material ( $F_M$ ) e ao fator do tipo da bomba ( $F_T$ ), conforme Equação 4.4.3.

$$C_P = F_T \times F_M \times C_B \quad (4.4.3)$$

O fator do tipo de bomba está relacionado a questões mecânicas como número de rotores, taxa de rotação, orientação da divisão do invólucro da bomba (VSC/ HSC) e etc. Em

Seider et al. (2016) encontram-se algumas faixas típicas extraídas do trabalho de Corripio et al. (1982a) e, para este trabalho, utilizou-se como referência aquela cuja vazão estava na faixa de 50-3500 gpm e mais se aproximou do cenário simulado, resultando em um fator  $F_T$  igual a 1,5. Quanto ao material, selecionou-se o ferro fundido devido ao seu menor custo econômico, resultando em  $F_M$  igual a 1. Somado a este preço, houve o dimensionamento do motor elétrico requerido por cada uma das bombas. Para o cálculo deste custo associado, foi necessário determinar a eficiência da bomba, eficiência do motor e a potência requerida.

Para determinar a eficiência da bomba ( $\eta_P$ ), Corripio et al. (1982a) propõem a Equação 4.4.4 em função da taxa de fluxo volumétrico. O uso da Equação está limitado para vazões entre 50 e 5000 gpm, sendo utilizado o limite mínimo para vazões abaixo do limite inferior. Quanto à eficiência do motor ( $\eta_M$ ), esta é determinada a partir da Equação 4.4.5, para a qual  $P_B$  é calculada a partir da vazão, altura manométrica e massa específica na Equação 4.4.6.

$$\eta_P = -0,316 + 0,24015(\ln Q) - 0,01199 (\ln Q)^2 \quad (4.4.4)$$

$$\eta_M = 0,80 + 0,0319(\ln P_B) - 0,00182 (\ln P_B)^2 \quad (4.4.5)$$

$$P_B = \frac{Q \cdot H \rho}{33000 \cdot \eta_P} \quad (4.4.6)$$

Onde:

$Q$  = Vazão de entrada em galão por minuto;

$H$  = Altura manométrica em ft;

$\rho$  = massa específica em lb/galão.

O custo do motor associado ( $C_{BM}$ ), portanto, é determinado pela Equação 4.4.7, na qual o termo  $P_c$  é relativo à potência consumida em HP, determinada pela Equação 4.4.8.

$$C_{BM} = \exp\{5,9332 + 0,16829[\ln(P_c)] - 0,110056 [\ln(P_c)]^2 + 0,071413 [\ln(P_c)]^3 - 0,0063788 [\ln(P_c)]^4\} \quad (4.4.7)$$

$$P_c = \frac{P_B}{\eta_M} \quad (4.4.8)$$

#### 4.5 COMPRESSORES

A dimensão e o custo dos compressores estão atrelados a fatores como a potência de operação, vazão de alimentação do equipamento e acréscimo de pressão. Considerando motor elétrico e uma construção de ferro fundido ou aço carbono, a curva do preço de um compressor centrífugo é representada em Seider et al. (2016) pela Equação 4.5.1, a qual depende da potência da bomba em HP e tem seu uso limitado à potências de 200 a 30.000 HP.

$$C_B = \exp\{9.1553 + 0.63[\ln(P_C)]\} \quad (4.5.1)$$

#### 4.6 COLUNA DE DESTILAÇÃO

A metodologia utilizada para dimensionar este equipamento foi baseada na determinação do diâmetro interno da coluna ( $D_i$ ) a partir da média dos diâmetros nos estágios de topo, meio e fundo do equipamento. Para o cálculo do diâmetro foi utilizada a Equação 4.6.1, que depende da vazão da fase gasosa, densidade da fase gás e da velocidade de inundação ( $U_f$ ), estimada pela Equação 4.6.2, considerando uma taxa típica de fluxo de gás de 70% ( $f$ ). Além disso,  $F_p$  é o fator de empacotamento, que depende do material, tamanho e tipo do recheio, sendo utilizado neste trabalho  $F_p = 27$ , um recheio de anéis metálicos de Pall de 2 in de diâmetro.

$$D_i = \left( \frac{4G}{(f \cdot U_f)\pi \rho_g} \right)^{1/2} \quad (4.6.1)$$

$$U_f = \left( \frac{Y \cdot g \cdot \rho_{H2O}}{F_p \cdot \rho_g \cdot f\{\rho_g\} \cdot f\{\mu\}} \right)^{1/2} \quad (4.6.2)$$

Para o cálculo da velocidade de inundação ( $U_f$ ) foi necessário ainda o cálculo dos intermediários função viscosidade -  $f\{\mu\}$ , função densidade -  $f\{\rho\}$ , fator  $Y$  e fator  $F_{LG}$ . Estes foram calculados pelas equações 4.6.3 a 4.6.6, onde para a aceleração da gravidade ( $g$ ) foi considerado o valor de 32,2 ft/s<sup>2</sup>.

$$f\{\mu\} = 0,96 \cdot \mu^{0,19} \quad (4.6.3)$$

$$f\{\rho\} = -0,8787 + 2,6776 \left( \frac{\rho_{H2O}}{\rho_l} \right) - 0,6313 \left( \frac{\rho_{H2O}}{\rho_l} \right)^2 \quad (4.6.4)$$

$$Y = \exp[-3,7121 - 1,0371(\ln F_{LG}) - 0,1501(\ln F_{LG})^2 - 0,007544 (\ln F_{LG})^3] \quad (4.6.5)$$

$$F_{LG} = \left( \frac{L}{G} \right) \cdot \left( \frac{\rho_g}{\rho_l} \right)^{1/2} \quad (4.6.6)$$

Onde:

L = vazão da fase líquida em Kg/s;

G = vazão da fase gasosa em Kg/s;

$\rho_l$  = densidade da fase líquida em Kg/ft<sup>3</sup>;

$\rho_g$  = densidade da fase gás em Kg/ft<sup>3</sup>;

$\mu_l$  = viscosidade Fase Líquida em cP;

g = aceleração da gravidade;

$\rho_{H2O}$  = densidade da água em Kg/ft<sup>3</sup>.

A Equação 4.4.7 foi utilizada para se determinar a altura equivalente de prato teórico (HETP) em ft.

$$HETP = 1,5DP \quad (4.6.7)$$

Assim, portanto, consegue-se estimar a altura do recheio multiplicando-se a HETP pelo número de estágios, excluindo condensador e refeedor. Para determinar a altura total da coluna, somou-se além da altura do recheio o tamanho de um diâmetro para o refeedor e três quartos de diâmetro para o condensador.

Para a espessura da parede, utilizou-se o mesmo procedimento descrito no dimensionamento dos reatores assim como o cálculo do peso da coluna (W).

Dada as dimensões, os cálculos de custo podem ser realizados conforme Equação 4.6.9.  $C_P$  representa o custo total. Na primeira parcela,  $F_M$  representa o fator material multiplicado pelo custo do vaso,  $C_V$ . Somado a isso,  $C_{PL}$  representa custo das plataformas e escadas, enquanto  $V_P$  é o volume de recheio multiplicado pelo seu custo,  $C_{PK}$ .

$$C_P = F_M \cdot C_V + C_{PL} + V_P \cdot C_{PK} \quad (4.6.8)$$

$$C_v = \exp \{10,5449 - 0,4672[\ln(W)] + 0,05482[\ln(W)]^2\} \quad (4.6.9)$$



## 5 CUSTOS DE PRODUÇÃO

Para determinar o Custo Total de Produção, é necessário levar em consideração a soma dos custos diretos e indiretos e outras despesas apresentadas na Tabela 10. Para os custos diretos, os fatores dependem da produção, como as despesas de matéria-prima, catalisadores, mão de obra, utilidades, energia, manutenção e reparos, patentes e *royalties*, entre outros. Já os custos indiretos estão relacionados a itens que não são diretamente atrelados à produção, como instalações de apoio, impostos e seguros. Por fim, nas despesas gerais incluem-se os custos administrativos, distribuição e venda dos produtos e pesquisa e desenvolvimento.

O custo da mão de obra é derivado da Equação 5.1, seguindo metodologia padrão de engenharia química Turton et al., (2018). No caso deste processo, o número de equipamentos que operam com sólidos corresponde a zero, portanto P é igual a zero. Além disso, foi considerado um fator de 4,2 equipes, para o qual se considera uma jornada de trabalho de 40 h semanais para um período de 168 h de operação da planta na semana. O salário médio do operador industrial brasileiro foi considerado como R\$ 2.187 (GLASSDOOR, 2023). De modo a garantir um cenário conservador em relação a estes custos foi utilizado um fator de 2 vezes a média de salário da referência uma vez que a indústria química costumeiramente possui uma maior média salarial. Sobre o calculado, ainda se efetuou o aumento de 50%, representando os encargos trabalhistas. Por fim, para anualizar o custo, multiplicou-se por 13 meses, seguindo as normas trabalhistas do mercado brasileiro.

$$C_{MDO} = 4,2 * (S_m) * 13 * \left( \sqrt{6,29 + 31,7P^2 + 0,23N_{np}} \right) \quad (5.1)$$

Onde:

$C_{MDO}$  = Custo anualizado da mão de obra ;

$S_m$  = Salário médio do operador;

P = Número de equipamentos que operam com sólidos;

$N_{np}$  = Número de equipamentos que não operam com sólidos.

**Tabela 10 - Correlações percentuais para os elementos dos custos diretos, custos indiretos e despesas gerais.**

<b>Custos</b>	<b>Correlações</b>
<b><i>Custos Diretos</i></b>	
Supervisão Técnica	0,18 da Mão de Obra
Manutenção e Reparos	0,06 do Investimento Fixo
Suprimentos Operacionais	0,009 do Investimento Fixo
Encargos de Laboratórios	0,15 da Mão de Obra
Patentes e <i>Royalties</i>	0,03 do Custo de Produção
<b><i>Custos Indiretos</i></b>	
Instalações de Apoio	0,708 da Mão de Obra + 0,036 do Investimento Fixo
Impostos e Seguros	0,032 do Investimento Fixo
<b><i>Despesas Gerais</i></b>	
Custos Administrativos	0,177 da Mão de Obra + 0,009 do Investimento Fixo
Distribuição e Vendas	0,11 do Custo de Produção
Pesquisa e Desenvolvimento	0,05 do Custo de Produção

Fonte: Autoria Própria com base em Turton et al. (2018).

Para o cálculo dos custos de produção foi utilizado como premissa neste trabalho um fator de produção de 7.920 h/ano, considerando 30 dias no ano para manutenção da planta. Na Tabela 11 estão descritos os preços unitários que foram considerados para análise assim como as fontes onde eles foram encontrados. Para todos os preços encontrados em real neste trabalho foi realizada uma conversão para dólar utilizando a cotação de 4,96 R\$/US\$. Os preços referentes às utilidades foram retirados do Aspen Plus® v12.1. Para os catalisadores, os custos são extraídos de Markham et al. (2016), que simulou a produção de biocombustível a partir de etanol proveniente de cianobactérias, mantendo os processos de oligomerização com *Ziegler-Natta* e hidrogenação com ZSM-5. Este último catalisador também é utilizado neste trabalho durante o processo de desidratação, por isso o preço encontrado é replicado para esta etapa. Quanto ao tempo de troca dos catalisadores, para o *Ziegler-Natta* foi considerado 1 ano e para a zeólita ZSM-5 foi determinado neste trabalho de 3 anos (Markham et al., 2016).

O hidrogênio foi precificado como uma média do estudo de caso de Parkinson et al. (2019), que avaliou técnico e economicamente 12 tipos diferentes de rotas para produção de hidrogênio comparando além do preço a fração de descarbonização, sendo obtido um valor de 1,59 US\$/kg. O preço do etanol foi estimado a partir de dados do CEPEA (2023), a partir dos quais foi feita uma média entre os preços semanais do ano de 2023.

Para cotar o preço da eletricidade, utilizou-se dados fornecidos pela Agência Nacional de Energia Elétrica (ANEEL, 2023), com as tarifas da modalidade azul das concessionárias que reajustaram preço até maio de 2023. Para uma estimativa real, considerou-se 90 horas mensais de horário de ponta e 630 fora-ponta. Com isso, foi possível calcular a tarifa final que se deu pela Tarifa de Energia (TE) multiplicada pelas horas mensais ponderadas, somada ao valor médio fixo da Tarifa do Uso do Sistema de Distribuição (TUSD).

Ademais, avaliou-se o preço do querosene a partir de uma base de dados da ANP (2023), como a média dos preços praticados por produtores e importadores no ano de 2023. Importante ressaltar que não foi encontrado preço para o bioquerosene no Brasil, portanto além do preço do querosene, avaliou-se também o preço dele no mercado internacional a partir da referência GlobalAir (2023) a nível de comparação, resultando em um valor de referência de US\$ 2,71/L.

Por fim, o GLP e a Nafta, subprodutos do processo, foram precificados também a partir de ANP (2023). Para estimar esse preço, foi feita uma média ponderada de suas composições na corrente 30, mesmo que os produtos ainda tenham que ser separados.

**Tabela 11 - Preços unitários de materiais e utilidades.**

<b>Matéria-prima</b>	<b>Preço (US\$/kg)</b>	<b>Fonte</b>
Etanol	0,70	Cepea (2023)
Hidrogênio	1,59	Parkinson, B (2019)
<b>Catalisadores</b>	<b>Preço (US\$/kg)</b>	<b>Fonte</b>
Catalisador ZSM-5	8,62	Markham, J (2016)
Catalisador Zigler Natta	6,04	Markham, J (2016)
<b>Utilidades</b>	<b>Preço (US\$/kg)</b>	<b>Fonte</b>
Fired Heater	$2,55 \times 10^{-3}$	Aspen Plus® v12.1
Very High Temperature	$8,90 \times 10^{-6}$	Aspen Plus® v12.1
Cooling Water	$4,43 \times 10^{-6}$	Aspen Plus® v12.1
<b>Produto</b>	<b>Preço (US\$/kg)</b>	<b>Fonte</b>
Querosene de Aviação	1,18	ANP (2023)
Gases Leves e Nafta	0,77	ANP (2023)
<b>Disposição de Efluentes</b>	<b>Preço (US\$/m3)</b>	<b>Fonte</b>
	0,04	Turton et al. (2009)
<b>Eletricidade</b>	<b>Preço (US\$/KWh)</b>	<b>Fonte</b>
	0,10	ANEEL (2021)

Fonte: Autoria Própria com base em Turton (2018).

## 6 FLUXO DE CAIXA E ANÁLISE ECONÔMICA

Calculados os custos, é possível analisar o balanço entre o fluxo de entrada e saída de capital da empresa ao longo do tempo. Para isso, assim como os custos, leva-se em consideração as receitas. Corrigindo o fluxo de caixa no tempo a partir da taxa de atratividade mínima (TMA), considerada 10 obtém-se o valor presente líquido (VPL) do empreendimento.

Para este trabalho foi considerado um tempo de operação de 20 anos enquanto o tempo de construção foi de 3 anos. Para esses três primeiros anos foi considerado que o investimento fixo foi gasto na proporção de 30% no primeiro ano, 40% no segundo e 30% no terceiro. A partir disso inicia-se o período de operação da planta, que leva em consideração o capital de giro, sendo representado nesse caso por 15% do investimento total e é deduzido no primeiro ano de operação.

Para análise de lucratividade, é necessário corrigir as receitas conforme impostos incidido em território brasileiro, como a Contribuição Social sobre o Lucro Líquido e o Imposto de Renda.

O VPL, calculado pela Equação 6.1 é uma medida da viabilidade da planta. Quando positivo significa que a planta é viável do ponto de vista econômico. Quando negativo significa que o investimento não é retornado pelo fluxo de caixa, de modo que o empreendimento não é viável economicamente. O cálculo desse indicador é feito a partir do somatório do fluxo de caixa corrigido ao longo dos anos de construção e operação, onde o fluxo de caixa é representado pela subtração entre as entradas e saídas corrigido anualmente pela TMA sob forma de juros compostos.

$$Fluxo\ de\ caixa = \sum_{t=1}^{t_{op}} \frac{[fluxo\ de\ caixa]_t}{(1 + TMA)^t} \quad (6.1)$$

Onde:

$t_{op}$  = Tempo de operação da planta + Tempo de construção (23 anos);

TMA = Taxa mínima de atratividade (10%);

$[fluxo\ de\ caixa]_t$  = saídas subtraídas das entradas no tempo  $t$ ;

Por fim, um dos indicadores mais importantes para um investidor é o tempo de retorno do investimento, ou *payback*. É importante destacar que *payback* muito alto não atrai

investidores, uma vez que há outras opções no mercado com retorno mais rápido, portanto para a análise de viabilidade da planta foi determinado um *payback* de 5 anos como limite de viabilidade, que julgou-se ser atrativo para os investidores dentro do contexto em que este trabalho se insere.

A viabilidade do processo estudado neste trabalho foi avaliada em função dos preços do bioquerosene e do etanol, em comparação com os preços de mercado observados. Análise semelhante para o preço do etanol foi realizada por Geleynse et al. (2018), que concluíram em seu artigo que a economia do processo depende inevitavelmente do custo do álcool.

## 7 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Nesta seção, foi aplicada a metodologia descrita anteriormente a fim de determinar o investimento inicial, custos totais e receitas geradas em diferentes cenários, para então se analisar os fatores de maior influência na viabilidade econômica do processo *Alcohol-to-Jet*.

### 7.1 INVESTIMENTO INICIAL

Após o dimensionamento dos equipamentos presentes no processo, com os resultados detalhados no Anexo 2, foi possível calcular o investimento inicial da planta, que encontra-se detalhado na Tabela 12.

**Tabela 12 - Investimento Total.**

<b>Investimento Inicial</b>	<b>Valor (US\$)</b>
Custo dos equipamentos	13.611.231,01
<i>Trocadores de Calor</i>	484.038,66
<i>Bombas e Compressores</i>	6.315.948,90
<i>Reatores</i>	4.973.999,78
<i>Vasos e Coluna de destilação</i>	1.837.243,67
Investimento Fixo	72.030.634,49
Capital de Giro	12.711.288,44
<b>Investimento Total</b>	<b>84.741.922,93</b>

Fonte: Autoria própria

Em relação aos custos dos equipamentos, os maiores custos estão relacionados aos compressores, que representam cerca de 46%. Em seguida, os reatores presentes no processo representam cerca de 37% dos custos dos equipamentos, principalmente devido às dimensões definidas para a capacidade produtiva determinada.

### 7.2 CUSTOS TOTAIS E RECEITA GERADA

Neste trabalho foi considerado como receita gerada a venda do bioquerosene de aviação e das frações de GLP e nafta que são formados como subprodutos das reações, atingindo uma receita anual. Os preços considerados para análise da receita foram retirados da ANP (2023), considerando para a corrente de Gases Leves e Nafta a proporção de 60% e 40%, respectivamente. Para o BioQAV, foram feitas análises de preços de equilíbrio.

Para a análise dos custos totais, foram realizados os cálculos de cada parcela como descrito no Capítulo 6, determinando assim os custos diretos, indiretos e despesas gerais, como apresentado na Tabela 13.

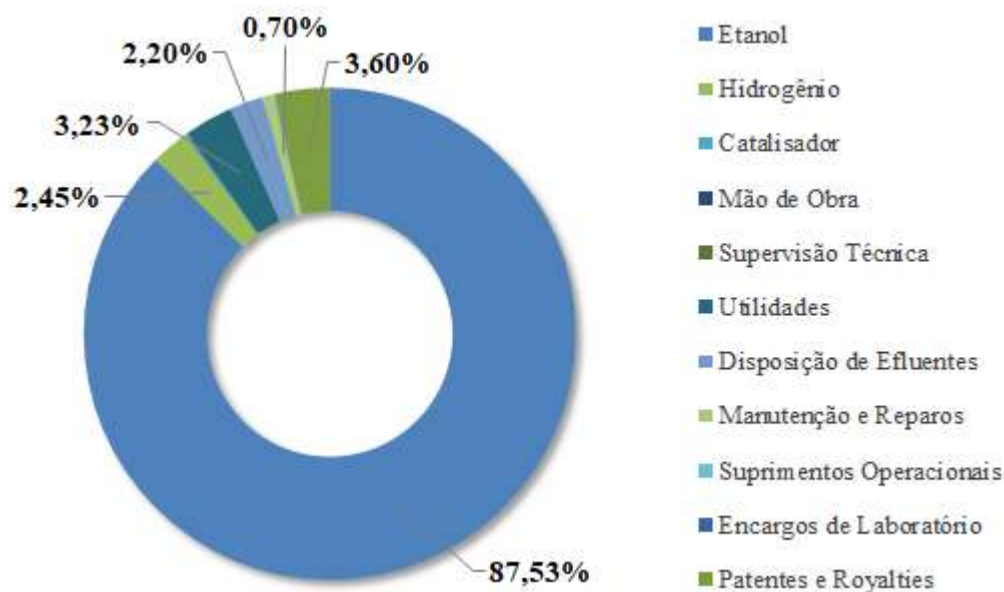
**Tabela 13 - Distribuição do custo total.**

<b><i>Custos Diretos</i></b>	<b><i>618.357.220,39</i></b>
<b>Matéria-Prima</b>	<b>556.390.084,86</b>
Etanol	541.238.123,66
Hidrogênio	15.151.961,20
<b>Outros</b>	<b>881.086,62</b>
Catalisador 1 (Zeólita ZSM-5)	77.159,33
Catalisador 2 (Ziegler-Natta)	224.285,35
Catalisador 3 (Zeólita ZSM-5)	579.641,95
<b>Mão de Obra</b>	<b>228.049,22</b>
<b>Supervisão Técnica</b>	<b>41.048,86</b>
<b>Utilidades</b>	<b>19.942.562,00</b>
<i>Very High Temperature</i>	13.477.056,80
<i>Cooling Water</i>	722.188,01
Eletricidade	5.743.317,19
<b>Disposição de Efluentes</b>	<b>13.580.589,00</b>
<b>Manutenção e Reparos</b>	<b>4.321.838,07</b>
<b>Suprimentos Operacionais</b>	<b>648.275,71</b>
<b>Encargos de Laboratório</b>	<b>34.207,38</b>
<b>Patentes e Royalties</b>	<b>22.289.478,67</b>
<b><i>Custos Indiretos</i></b>	<b><i>5.059.541,99</i></b>
<b>Instalações de Apoio</b>	<b>2.754.561,69</b>
<b>Impostos Locais + Seguro</b>	<b>2.304.980,30</b>
<b><i>Despesas-Gerais</i></b>	<b><i>119.565.860,00</i></b>
<b>Custos Administrativos</b>	<b>688.640,42</b>
<b>Distribuição e Venda dos Produtos</b>	<b>81.728.088,46</b>
<b>Pesquisa e Desenvolvimento</b>	<b>37.149.131,12</b>
<b><i>Custo Total</i></b>	<b><i>742.982.622,38</i></b>

Fonte: Autoria Própria

A partir dos valores presentes na Tabela 13, foi analisada a influência dos custos diretos no valor final do custo total, representando cerca de 83%. Quando este é analisado individualmente, percebe-se, pela Figura 8, que a matéria-prima é o componente de maior relevância.

**Figura 8 - Análise de custo percentual dos componentes do custo direto.**



Fonte: Autoria própria

### 7.3 LUCRATIVIDADE E RETORNO DO INVESTIMENTO

A partir dos resultados encontrados com a base de preços e dados encontrados pela simulação e pesquisa, foi possível obter o lucro líquido anual após as taxas (LLAT), considerando as taxas (CSLL e IR) existentes atualmente no mercado brasileiro, na Tabela 14.

Tabela 14 – Determinação do lucro líquido anual considerando os impostos.

<b>Análise de Lucro</b>	<b>Valor (US\$)</b>
Lucro Líquido Anual	-296.489.740,13
Impostos (CSLL + IR)	0,00
<b>Lucro Líquido Após Taxas (LLAT)</b>	<b>-296.489.740,13</b>

Fonte: Autoria própria

Mesmo com a geração da receita pelo BioQAV e pela corrente do GLP e Nafta, ainda assim este processo não apresentou um cenário de lucratividade. Além disso, considerando o tempo de construção de 3 anos e um tempo de operação de 20 anos, a planta apresentou um VPL de US\$ -1.964.830.805,01.

O preço de equilíbrio do bioquerosene e do etanol foram determinados em cinco cenários de lucratividade e retorno do investimento, onde os cenários de lucro zero representam o ponto de nivelamento, no qual a receita se iguala ao custo total. Além dos



cenários simulados com os preços de etanol no mercado atual também foi simulado com o etanol proveniente do milho afim de analisar a dependência do preço de equilíbrio do bioquerosene com outras fontes desta matéria prima.

- **Cenário 1:** Preço do bioquerosene para viabilizar o *payback* em 5 anos de operação, com etanol a preço de mercado.
- **Cenário 2:** Preço do etanol para viabilizar o *payback* em 5 anos de operação, com bioquerosene a preço de mercado nacional.
- **Cenário 3:** Preço do bioquerosene para lucro zero, com etanol a preço de mercado.
- **Cenário 4:** Preço do etanol para lucro zero, com bioquerosene a preço de mercado nacional.
- **Cenário 5:** Preço do bioquerosene para lucro zero, com preço de etanol proveniente do milho.

### 7.3.1 Cenário 1

Neste cenário foi avaliado o preço do bioquerosene de aviação para que a planta obtenha um *payback* em 5 anos. Essa análise foi realizada determinando o preço para que o VPL seja igual a zero após os primeiros 5 anos de operação (sem contar os 3 anos de construção da mesma). O preço encontrado para equilibrar os custos com o investimento foi de US\$ 2,57 por kg. Esse valor é aproximadamente 2,18 vezes maior do que o preço praticado atualmente para o querosene de aviação no Brasil (ANP, 2023). Devido à escassez de dados dos preços do bioquerosene de aviação no mercado brasileiro, o preço de equilíbrio resultante deste cenário foi comparado com o preço no mercado americano. A média do preço dos SAF's obtido pela empresa GlobalAir (2023) foi de US\$ 2,7084 por kg, ou seja, o preço de equilíbrio calculado é cerca de 5,15% menor do que o praticado para os combustíveis de aviação sustentáveis naquele país. Avaliando o preço do bioquerosene de aviação como sendo o preço médio de SAF's praticado nos EUA, o resultado seria mais promissor, obtendo um *payback* em 3 anos de operação e um VPL em 20 de operação de US\$ 226.040.729,83. Desse modo, pode-se concluir que, embora ainda não seja competitivo com o querosene convencional, o preço para o bioquerosene ATJ no Brasil seria compatível com os valores observados para outros SAF's no mercado internacional.

### 7.3.2 Cenário 2

Neste cenário foi avaliado o preço do etanol para que a planta obtenha um *payback* em 5 anos, mantendo o preço do bioquerosene de aviação competitivo com o seu derivado petroquímico a nível nacional. O preço encontrado para compensar os custos totais de investimento nesse caso foi de US\$ 0,35 por kg (R\$ 1,74 por kg). Esse valor é cerca de 50% menor do que o preço de mercado atual (CEPEA, 2023). Dessa forma, ainda que o álcool seja parcela preponderante nos custos de produção, o seu barateamento ou a facilitação de aquisição para a produção de BioQAV, seriam necessários para tornar este processo competitivo no Brasil pela perspectiva do investimento em uma nova planta.

### 7.3.3 Cenário 3

Neste cenário foi avaliado o preço do BioQAV para que a planta obtenha lucro zero, ou seja, para que as receitas se igualem aos custos de produção anuais. Esse cenário pressupõe uma planta já em operação - cujo investimento já foi compensado. Eventualmente, poderia-se pensar na conversão de uma planta antes usada para um outro propósito, desprezando, evidentemente, os custos de conversão. O preço encontrado foi de US\$ 2,42 por kg. Esse valor é aproximadamente 10,76% menor do que o preço atual praticado nos Estados Unidos para os combustíveis de aviação sustentáveis (GlobalAir, 2023) e 2,05 vezes maior que o preço praticado do querosene no Brasil (ANP, 2023). Desse modo, as conclusões não são muito diferentes das obtidas com o Cenário 1.

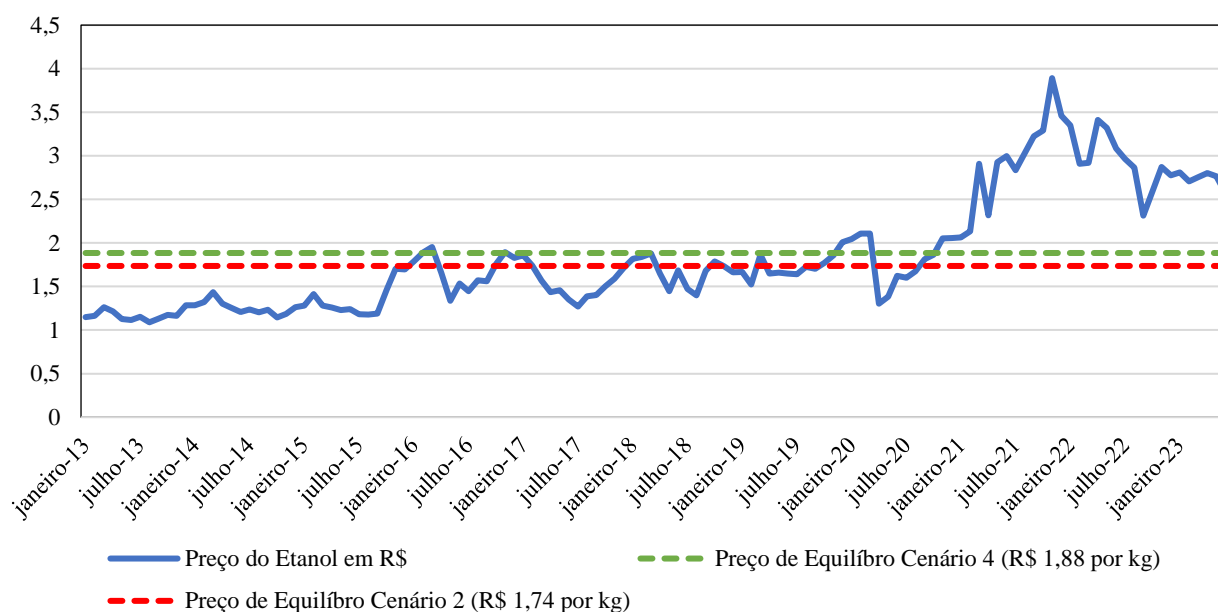
### 7.3.4 Cenário 4

Neste cenário foi avaliado o preço do etanol para que a planta obtenha lucro zero. O preço encontrado foi de US\$ 0,39 por kg. Esse valor é aproximadamente 44% menor do que o preço atual praticado para essa matéria-prima no Brasil (CEPEA, 2023), de modo que se tem uma situação um pouco mais favorável do que foi observado no Cenário 2. Ou seja, uma vez que o investimento na planta de BioQAV já tenha sido compensado, esse cenário seria absolutamente viável em um cenário de baixa no preço de mercado de etanol ou por meio de incentivos para a sua produção.

Nesse ponto, é interessante analisar a série histórica no preço do etanol nos últimos 10 anos, mostrada na Figura 9 (CEPEA, 2023). Como pode-se observar, antes de novembro de 2020 - quando se vivenciava uma escalada dos efeitos da pandemia de COVID-19 - era

comum o preço estar abaixo de US\$ 0,39 por kg (R\$ 1,88 por kg). Desse modo, pode-se concluir que a produção de bioquerosene por tecnologia *Alcohol-to-Jet* se tornaria competitiva no Brasil se o preço do etanol retornasse aos patamares pré-pandemia.

**Figura 9 - Série histórica do preço do etanol no Brasil.**



Fonte: Autoria própria, com base em CEPEA (2023).

### 7.3.5 Cenário 5

Neste cenário foi avaliado o preço do bioquerosene para que a planta obtenha lucro zero, considerando o preço do etanol proveniente do milho. Segundo trabalho da Luz et al. (2023), antevê-se uma participação cada vez maior do etanol de milho no mercado nacional, o que resultaria em uma possível redução do preço médio do álcool no país. As simulações e análises propostas pelos autores resultaram em preços de etanol de US\$ 0,56 por kg quando proveniente do milho, o que corresponde a uma redução de 20% com relação ao valor considerado neste trabalho (CEPEA, 2023). Dessa maneira, o preço de equilíbrio do BioQAV neste trabalho seria de US\$ 1,86 por kg e, portanto 58% maior do que o preço atual praticado para o querosene de aviação, o que é um resultado bastante superior ao observado nos Cenários 1 e 3. Quando comparado com o mercado externo, o preço obtido foi cerca de 31% menor do que os SAF's comercializados nos EUA.

Isso significa que a perspectiva atual para o mercado de etanol brasileiro também é favorável à entrada do bioquerosene de aviação via tecnologia *Alcohol-to-Jet*. Desse modo,

o Brasil apresenta todas as condições para assegurar o seu papel de vanguarda na produção de biocombustíveis também neste setor, fundamentando investimentos em uma indústria em crescimento (combustíveis de aviação sustentáveis) a partir de uma indústria bem estabelecida (sucroalcooleira).

## 8 CONCLUSÃO

Neste trabalho avaliou-se a viabilidade da construção de uma planta de bioquerosene de aviação no Brasil por meio do processo *Alcohol-to-Jet*, utilizando o etanol como matéria-prima. A metodologia empregada passou pelo estudo da capacidade produtiva, onde levantou-se dados para a simulação no *software Aspen Plus® v12.1*. Nessa etapa foram definidos os componentes e o pacote termodinâmico utilizados, os equipamentos e suas condições de operação, e foram resolvidos os balanços de massa e energia do processo. Em sequência, os equipamentos foram dimensionados e o custo de investimento foi estimado por meio do método de Lang. A partir disso, foram feitas análises econômicas em que as variáveis colocadas em pauta foram o preço do etanol como matéria-prima e o preço do produto principal, o bioquerosene de aviação. A viabilidade do empreendimento foi avaliada em cenários, com *payback* de 5 anos e ou lucro zero.

O cenário 1 retrata uma das expectativas mais promissoras para se avaliar a viabilidade do processo. Estimou-se um preço de US\$ 2,57 para o bioquerosene quando fixado um *payback* de 5 anos. Ao simular com preço no mercado exterior do SAF's de US\$ 2,70 esse retorno reduz para 3 anos. Os cenários 3 e 5 trouxeram resultados ainda mais promissores visto que o preço do combustível foi estimado em US\$ 2,42 e US\$ 1,86 respectivamente, produto entre 10% e 31% abaixo do valor de mercado encontrado. Ao analisar o preço do etanol, os cenários convergem para uma mesma conclusão. O cenário 2 e 4 abordam que a viabilidade da planta seria possível por meio do barateamento da matéria-prima a partir do patamar de US\$ 0,35 por kg (R\$ 1,74 por kg) e US\$ 0,39 por kg (R\$ 1,88 por kg) respectivamente. Este preço, apesar de estar abaixo do praticado no mercado em 2023, a precificação histórica do etanol no Brasil demonstra que a matéria-prima esteve abaixo do patamar apresentado como promissor em períodos pré-pandemia COVID-19, configurando a conclusão de que a baixa no preço de mercado do etanol e incentivos para a sua produção podem tornar a produção do bioquerosene de aviação viável no território brasileiro. No entanto, é importante que a viabilidade do processo não esteja essencialmente dependente das flutuações do preço do etanol. Nesse contexto, vislumbrando a obtenção da matéria-prima a partir do custo de fabricação é necessário que ela faça parte da cadeia de suprimentos, indicando a integração de planta de etanol a uma biorrefinaria para inclusão do processo de bioquerosene de aviação.

## 9 REFERÊNCIA BIBLIOGRÁFICA

FREDENSLUND, AAGE; JONES, R. L.; PRAUSNITZ, J. M. Group-Contribution Estimation of Activity Coefficients in Nonideal Liquid Mixtures. **AIChE Journal**, vol. 21, p. 1086–1099, nov. 1975.

ANEEL – Agência Nacional de Energia Elétrica. Base de Dados das Tarifas das Distribuidoras de Energia Elétrica. 2023. Disponível em: [www.portalrelatorios.aneel.gov.br/luznatarifa/basestarifas](http://www.portalrelatorios.aneel.gov.br/luznatarifa/basestarifas). Acessado em: 7 jun. 2023.

ANP – Agência Nacional de Petróleo. Biocombustíveis de aviação. 2020. Disponível em: <https://www.gov.br/anp/pt-br/assuntos/qualidade-de-produtos/biocombustiveis-de-aviacao>. Acessado em: 18 mar. 2023.

ANP – Agência Nacional de Petróleo. Levantamento de Preços de Combustíveis. 2023. Disponível em: <https://www.gov.br/anp/pt-br/assuntos/precos-e-defesa-da-concorrenca/precos/levantamento-de-precos-de-combustiveis-ultimas-semanas-pesquisadas>. Acessado em: 27 maio 2023.

ANP – Agência Nacional de Petróleo. Anuário Estatístico. 2021. Disponível em: <https://www.gov.br/anp/pt-br/centrais-de-conteudo/publicacoes>. Acessado em: 18 maio 2023.

ASSIS, G. N. C. M. de; ANDRADE, L. F. da C. Simulação e análise econômica de diferentes matérias-primas para produção de Bioquerosene de Aviação pelo processo HEFA no cenário brasileiro. Trabalho de Conclusão de Curso - Univerdidade Federal do Rio de Janeiro: 1-114.

BROOKS, K.P.; SNOWDEN-SWAN, L.J.; JONES, S.B.; BUTCHER, M.G.; LEE, G.-S.J.; ANDERSON, D.M.; FRYE, J.G.; HOLLADAY, J.E.; OWEN, J.; HARMON, L.; BURTON, F.; PALOU-RIVERA, I.; PLAZA, J.; HANDLER, R.; SHONNARD, D. Low-Carbon Aviation Fuel Through the Alcohol to Jet Pathway. **Biofuels for Aviation**. Elsevier, 2016. p. 109–150. <https://doi.org/10.1016/b978-0-12-804568-8.00006-8>.

CEPEA/ESALQ – Centro de Estudos Avançados em Economia Aplicada. Indicador Semanal do Etanol Hidratado Combustível CEPEA/ESALQ – São Paulo. 2023. Disponível em: [www.cepea.esalq.usp.br/br/indicador/etanol.aspx](http://www.cepea.esalq.usp.br/br/indicador/etanol.aspx). Acessado em: 8 jun. 2023.

COUPARD, V.; TOUCHAIS, N.; FLEURIER, S.; PENAS, H. G.; VERMEIREN, W.; MINOUX, D.; DE SMEDT, P.; ADAM, C. **Process for dehydration of ethanol into ethylene with low energy consumption**. US009085502B2. Depósito: 20 jul. 2012. Concessão: 21 jul. 2015.

DA LUZ, R. F.; MELHORIM, L. O.; CAVALCANTE, R. M.; YOUNG, A. F. Process Simulation Applied to the Prediction of the Impact of Corn Incorporation as Raw Material on the Brazilian Ethanol Market. **ACS Sustainable Chem. Eng.** 2023. DOI 10.1021/acssuschemeng.3c01339.

GELEYNSE, S.; BRANDT, K.; GARCIA-PEREZ, M.; WOLCOTT, M.; ZHANG, X.. The Alcohol-to-Jet Conversion Pathway for Drop-In Biofuels: Techno-Economic Evaluation. **ChemSusChem**, vol. 11, nº 21, p. 3728–3741, 9 nov. 2018. <https://doi.org/10.1002/cssc.201801690>.

GLASSDOOR. Salários de Cargo de Operador Industrial - Brasil. 2023. Disponível em: [https://www.glassdoor.com.br/Sal%C3%A1rios/operador-de-produ%C3%A7%C3%A3o-sal%C3%A1rioSRCH\\_KO0,20.htm#:~:text=O%20sal%C3%A1rio%20m%C3%A9dio%20nacional%20de,cargo%20de%20Operador%20De%20Produ%C3%A7%C3%A3o](https://www.glassdoor.com.br/Sal%C3%A1rios/operador-de-produ%C3%A7%C3%A3o-sal%C3%A1rioSRCH_KO0,20.htm#:~:text=O%20sal%C3%A1rio%20m%C3%A9dio%20nacional%20de,cargo%20de%20Operador%20De%20Produ%C3%A7%C3%A3o).

Acessado em: 27 maio 2023.

GLOBALAIR. Aviation & Aircraft Fuel Map – Search FBO Fuel Prices For Surrounding Airports. 2023. Disponível em: <https://www.globalair.com/airport/fuelmap.aspx>. Acessado em: 1 jun. 2023.

HEVELING, J; NICOLAIDES, C P. Catalysts and conditions for the highly efficient, selective and stable heterogeneous oligomerisation of ethylene. 1998.

IATA – *International Air Transportation Association*. **Net zero 2050: sustainable aviation fuels Fact sheet**. 2022. Disponível em: [www.iata.org/flynetzero](http://www.iata.org/flynetzero).

ICAO - *International Civil Aviation Organization*. Carbon Offsetting and Reduction Scheme for International Aviation (CORSIA). 2016. Disponível em: <https://www.icao.int/environmental-protection/CORSIA/Pages/default.aspx>. Acessado em: 27 out. 2022.

JANG, B. W. L.; GLÄSER, R.; DONG, M.; LIU, C. J. Fuels of the future. **Energy and Environmental Science**, vol. 3, nº 3, p. 253, 2010. <https://doi.org/10.1039/c003390c>.

LEE, D. S.; FAHEY, D. W.; SKOWRON, A.; ALLEN, M. R.; BURKHARDT, U.; CHEN, Q.; DOHERTY, S. J.; FREEMAN, S.; FORSTER, P. M.; FUGLESTVEDT, J.; GETTELMAN, A.; DE LEÓN, R. R.; LIM, L. L.; LUND, M. T.; MILLAR, R. J.; OWEN, B.; PENNER, J. E.; PITARI, G.; PRATHER, M. J.; WILCOX, L. J. The contribution of global aviation to anthropogenic climate forcing for 2000 to 2018. **Atmospheric Environment**, vol. 244, 1 jan. 2021. <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2020.117834>.

- LILGA, M.; HALLEN, R.; ALBRECHT, K.; COOPER, A.; FRYE, J. **Systems and Process for conversion of ethylene feedstocks to hydrocarbon fuels**. WO 2016/067033 A1. Depósito: 30 out. 2014. Concessão: 06 mai. 2016.
- MARKHAM, J. N.; TAO, L.; DAVIS, R.; VOULIS, N.; ANGENENT, L. T.; UNGERER, J.; YU, J. Techno-economic analysis of a conceptual biofuel production process from bioethylene produced by photosynthetic recombinant cyanobacteria. **Green Chemistry**, vol. 18, nº 23, p. 6266–6281, 2016. <https://doi.org/10.1039/c6gc01083k>.
- MAWHOOD, R.; GAZIS, E.; DE JONG, S.; HOEFNAGELS, R.; SLADE, R. Production pathways for renewable jet fuel: a review of commercialization status and future prospects. **Biofuels, Bioproducts and Biorefining**, vol. 10, nº 4, p. 462–484, 1 jul. 2016. <https://doi.org/10.1002/bbb.1644>.
- MME – Ministério de Minas e Energias. Sancionada lei que estabelece o Programa Nacional do Bioquerosene. 2021. Disponível em: <https://www.gov.br/mme/pt-br/assuntos/noticias/sancionada-lei-que-estabelece-o-programa-nacional-do-bioquerosene>. Acessado em: 14 out. 2022.
- PARKINSON, B.; BALCOMBE, P.; SPEIRS, J. F.; HAWKES, A. D.; HELLGARDT, K. Levelized cost of CO<sub>2</sub> mitigation from hydrogen production routes. **Energy and Environmental Science**, vol. 12, nº 1, p. 19–40, 1 jan. 2019. <https://doi.org/10.1039/c8ee02079e>.
- PECHSTEIN, J.; NEULING, U.; GEBAUER, J.; KALTSCHMITT, M. Alcohol-to-Jet (AtJ). **Biokerosene: Status and Prospects**. Berlin: Springer Berlin Heidelberg, 2017. p. 543–574. [https://doi.org/10.1007/978-3-662-53065-8\\_21](https://doi.org/10.1007/978-3-662-53065-8_21).
- PETROBRAS. Plano de Negócios e Gestão 2023 – 2027. **Plano Estratégico 2023 - 2027**. Brasil, 2022.
- RADICH, T. The Flight Paths for Biojet Fuel. **U.S. Energy Information Administration**. 2015. Disponível em: [www.eia.gov](http://www.eia.gov).
- ROMERO-IZQUIERDO, A. G.; GÓMEZ-CASTRO, F. I.; GUTIÉRREZ-ANTONIO, C.; HERNÁNDEZ, S.; ERRICO, M. Intensification of the alcohol-to-jet process to produce renewable aviation fuel. **Chemical Engineering and Processing - Process Intensification**, vol. 160, 1 mar. 2021. <https://doi.org/10.1016/j.cep.2020.108270>.
- SEIDER, WARREN D.; LEWIN, DANIEL R.; SEADER, J.D.; WIDAGDO, SOEMANTRI; GANI, RAFIQU; NG, KA MING. **Product and process design principles**. 4ª Edição. New York: John Wiley & Sons Inc, 2016.



SINGH, T.; NAVEEN, S. M. A review paper on production of linear alpha-olefins by undergoing oligomerization of ethylene. **International Journal of Engineering Applied Sciences and Technology**, vol. 2, n° 4, p. 83–86, 1 mar. 2017. Disponível em: <http://www.ijeast.com>.

SUN, J.; WANG, Y. Recent advances in catalytic conversion of ethanol to chemicals. **ACS Catalysis**, vol. 4, n° 4, p. 1078–1090, 4 abr. 2014. <https://doi.org/10.1021/cs4011343>.

TAO, L.; MARKHAM, J. N.; HAQ, Z.; BIDDY, M. J. Techno-economic analysis for upgrading the biomass-derived ethanol-to-jet blendstocks. **Green Chemistry**, vol. 19, n° 4, p. 1082–1101, 2017. <https://doi.org/10.1039/c6gc02800d>.

SYDORA, O. L. Selective Ethylene Oligomerization. **Organometallics**, vol. 38, n° 5, p. 997–1010, 2019. <https://doi.org/10.1021/acs.organomet.8b00799>.

TAYLOR, J. D.; JENNI, M. M.; PETERS, M. W. Dehydration of fermented isobutanol for the production of renewable chemicals and fuels. 53., set. 2010. **Topics in Catalysis**. set. 2010. vol. 53, p. 1224–1230. <https://doi.org/10.1007/s11244-010-9567-8>.

TOWLER, Gavin; SINNOTT, Ray. **Chemical Engineering Design - Principles, Practice and Economics of Plant and Process Design**. Amsterdam: Elsevier Inc, 2008. Disponível em: <http://elsevier.com>.

TURTON, R.; SHAEIWITZ, J. A.; BHATTACHARYYA, D.; WHITING, W. B. **Analysis, Synthesis, and Design of Chemical Processes**. 5ª Edição. Upper Saddle River, NJ: Prentice Hall, 2018.

WANG, W.; TAO, L.; MARKHAM, J.; ZHANG, Y.; TAN, E.; BATAN, L.; WARNER, E.; BIDDY, M. **Review of Biojet Fuel Conversion Technologies**. United States, 2016. Disponível em: [www.nrel.gov/publications](http://www.nrel.gov/publications).

WASHINGTON, D C; MENOTTI, A. **LanzaJet Sugarcane Ethanol to Renewable Jet Fuel and Renewable Diesel Pathway Determination under the RFS Program**. United States, 2023.

YAO, G.; STAPLES, M. D.; MALINA, R.; TYNER, W. E. Stochastic techno-economic analysis of alcohol-to-jet fuel production. **Biotechnology for Biofuels**, vol. 10, n° 1, 19 jan. 2017. <https://doi.org/10.1186/s13068-017-0702-7>.

ZHANG, M.; YU, Y. Dehydration of ethanol to ethylene. **Industrial and Engineering Chemistry Research**, vol. 52, n° 28, p. 9505–9514, 17 jul. 2013a. <https://doi.org/10.1021/ie401157c>.

FINIELS, A.; FAJULA, F; HULEA, V. Nickel-based solid catalysts for ethylene oligomerization – a review. **Catalysis Science & Technology**, p. 2412–2426, 16 abr. 2014. <https://doi.org/10.1039/c4cy00305e>.

## ANEXO 1 – Caracterização das correntes do processo

**Tabela 15 - Caracterização das correntes do processo**

<b>Corrente</b>		<b>1</b>	<b>2</b>	<b>3</b>	<b>4</b>
Fração de vapor		0,00	0,00	1,00	1,00
Temperatura	°C	25,00	25,14	400,00	400,00
Pressão	bar	1,01	5,90	5,90	5,90
Entalpia específica	cal/gm	-1.630,28	-1.630,09	-1.200,57	-1.040,89
Densidade	g/cm <sup>3</sup>	0,81	0,81	0,00	0,00
Vazão volumétrica	l/min	2.007,29	2.007,68	373.314,78	595.368,44
Vazão molar	kmol/hr	2.392,70	2.392,70	2.392,70	3.788,81
Vazão mássica	kg/hr	97.883,00	97.883,00	97.883,00	97.883,00
ÁGUA		7.928,52	7.928,52	7.928,52	33.079,84
ETANOL		89.954,48	89.954,48	89.954,48	25.637,03
ETILENO		0,00	0,00	0,00	39.166,14
HIDROGENIO		0,00	0,00	0,00	0,00
CIS-2-BUTENO		0,00	0,00	0,00	0,00
1-HEXENO		0,00	0,00	0,00	0,00
1-OCTENO		0,00	0,00	0,00	0,00
1-DECENO		0,00	0,00	0,00	0,00
1-DODECENO		0,00	0,00	0,00	0,00
N-BUTANO		0,00	0,00	0,00	0,00
N-HEXANO		0,00	0,00	0,00	0,00
N-OCTANO		0,00	0,00	0,00	0,00
N-DECANO		0,00	0,00	0,00	0,00
N-DODECANO		0,00	0,00	0,00	0,00
<b>Corrente</b>		<b>5</b>	<b>6</b>	<b>7</b>	<b>8</b>
Fração de vapor		1,00	1,00	1,00	0,58
Temperatura	°C	405,00	405,00	507,19	100,00
Pressão	bar	5,90	5,30	13,50	13,50
Entalpia específica	cal/g	-1.037,95	-975,68	-914,98	-1.354,14
Densidade	g/cm <sup>3</sup>	0,00	0,00	0,00	0,02
Vazão volumétrica	l/min	599.882,31	764.940,97	344.793,92	77.316,51
Vazão molar	kmol/hr	3.788,81	4.333,06	4.333,06	4.333,06
Vazão mássica	kg/hr	97.883,00	97.883,00	97.883,00	97.883,00
ÁGUA		33.079,84	42.884,63	42.884,63	42.884,63
ETANOL		25.637,03	564,01	564,01	564,01
ETILENO		39.166,14	54.434,36	54.434,36	54.434,36
HIDROGENIO		0,00	0,00	0,00	0,00
CIS-2-BUTENO		0,00	0,00	0,00	0,00
1-HEXENO		0,00	0,00	0,00	0,00
1-OCTENO		0,00	0,00	0,00	0,00

Fonte: Autoria Própria.

**Tabela 15 - Caracterização das correntes do processo (continuação).**

<b>Corrente</b>		<b>5</b>	<b>6</b>	<b>7</b>	<b>8</b>
1-DECENO		0,00	0,00	0,00	0,00
1-DODECENO		0,00	0,00	0,00	0,00
N-BUTANO		0,00	0,00	0,00	0,00
N-HEXANO		0,00	0,00	0,00	0,00
N-OCTANO		0,00	0,00	0,00	0,00
N-DECANO		0,00	0,00	0,00	0,00
N-DODECANO		0,00	0,00	0,00	0,00
<b>Corrente</b>		<b>9</b>	<b>10</b>	<b>11</b>	<b>12</b>
Fração de vapor		1,00	0,00	1,00	0,98
Temperatura	°C	100,00	100,00	155,79	110,00
Pressão	bar	13,50	13,50	30,00	30,00
Entalpia específica	cal/g	269,17	-3.625,69	291,64	260,30
Densidade	g/cm <sup>3</sup>	0,01	0,90	0,02	0,03
Vazão volumétrica	l/min	76.563,48	753,03	38.879,23	32.865,18
Vazão molar	kmol/hr	2.091,58	2.241,48	2.091,58	2.091,58
Vazão mássica	kg/hr	57.086,97	40.796,03	57.086,97	57.086,97
ÁGUA		3.057,50	39.827,13	3.057,50	3.057,50
ETANOL		291,28	272,74	291,28	291,28
ETILENO		53.738,20	696,16	53.738,20	53.738,20
HIDROGENIO		0,00	0,00	0,00	0,00
CIS-2-BUTENO		0,00	0,00	0,00	0,00
1-HEXENO		0,00	0,00	0,00	0,00
1-OCTENO		0,00	0,00	0,00	0,00
1-DECENO		0,00	0,00	0,00	0,00
1-DODECENO		0,00	0,00	0,00	0,00
N-BUTANO		0,00	0,00	0,00	0,00
N-HEXANO		0,00	0,00	0,00	0,00
N-OCTANO		0,00	0,00	0,00	0,00
N-DECANO		0,00	0,00	0,00	0,00
N-DODECANO		0,00	0,00	0,00	0,00
<b>Corrente</b>		<b>13</b>	<b>14</b>	<b>15</b>	<b>16</b>
Fração de vapor		0,00	1,00	0,00	0,00
Temperatura	°C	110,00	110,00	85,00	85,81
Pressão	bar	30,00	30,00	21,70	35,00
Entalpia específica	cal/g	-3.511,17	329,35	-331,04	-330,37
Densidade	g/cm <sup>3</sup>	0,87	0,03	0,64	0,64
Vazão volumétrica	l/min	19,61	32.845,57	1.461,62	1.463,54
Vazão molar	kmol/hr	55,81	2.035,77	718,57	718,57
Vazão mássica	kg/hr	1.026,43	56.060,54	56.060,54	56.060,54

Fonte: Autoria Própria.

**Tabela 15 - Caracterização das correntes do processo (continuação).**

<b>Corrente</b>		<b>13</b>	<b>14</b>	<b>15</b>	<b>16</b>
ÁGUA		974,95	2.082,54	2.082,54	2.082,54
ETANOL		10,33	280,95	280,95	280,95
ETILENO		41,15	53.697,05	0,00	0,00
HIDROGENIO		0,00	0,00	0,00	0,00
CIS-2-BUTENO		0,00	0,00	14.498,20	14.498,20
1-HEXENO		0,00	0,00	9.450,68	9.450,68
1-OCTENO		0,00	0,00	13.424,26	13.424,26
1-DECENO		0,00	0,00	8.054,56	8.054,56
1-DODECENO		0,00	0,00	8.269,35	8.269,35
N-BUTANO		0,00	0,00	0,00	0,00
N-HEXANO		0,00	0,00	0,00	0,00
N-OCTANO		0,00	0,00	0,00	0,00
N-DECANO		0,00	0,00	0,00	0,00
N-DODECANO		0,00	0,00	0,00	0,00
<b>Corrente</b>		<b>17</b>	<b>18</b>	<b>19</b>	<b>20</b>
Fração de vapor		1,00	1,00	1,00	1,00
Temperatura	°C	25,00	177,86	40,00	200,27
Pressão	bar	1,00	3,00	3,00	9,00
Entalpia específica	cal/g	0,12	527,53	51,60	606,34
Densidade	g/cm <sup>3</sup>	0,00	0,00	0,00	0,00
Vazão volumétrica	l/min	246.747,80	124.505,69	86.485,91	43.672,28
Vazão molar	kmol/hr	596,87	596,87	596,87	596,87
Vazão mássica	kg/hr	1.203,22	1.203,22	1.203,22	1.203,22
ÁGUA		0,00	0,00	0,00	0,00
ETANOL		0,00	0,00	0,00	0,00
ETILENO		0,00	0,00	0,00	0,00
HIDROGENIO		1.203,22	1.203,22	1.203,22	1.203,22
CIS-2-BUTENO		0,00	0,00	0,00	0,00
1-HEXENO		0,00	0,00	0,00	0,00
1-OCTENO		0,00	0,00	0,00	0,00
1-DECENO		0,00	0,00	0,00	0,00
1-DODECENO		0,00	0,00	0,00	0,00
N-BUTANO		0,00	0,00	0,00	0,00
N-HEXANO		0,00	0,00	0,00	0,00
N-OCTANO		0,00	0,00	0,00	0,00
N-DECANO		0,00	0,00	0,00	0,00
N-DODECANO		0,00	0,00	0,00	0,00

Fonte: Autoria Própria.

**Tabela 15 - Caracterização das correntes do processo (continuação).**

<b>Corrente</b>		<b>21</b>	<b>22</b>	<b>23</b>	<b>24</b>
Fração de vapor		1,00	1,00	1,00	1,00
Temperatura	°C	40,00	200,53	40,00	73,81
Pressão	bar	9,00	27,00	27,00	35,00
Entalpia específica	cal/g	52,35	610,27	54,66	172,14
Densidade	g/cm <sup>3</sup>	0,00	0,00	0,00	0,00
Vazão volumétrica	l/min	28.929,32	14.675,62	9.744,72	8.355,54
Vazão molar	kmol/hr	596,87	596,87	596,87	596,87
Vazão mássica	kg/hr	1.203,22	1.203,22	1.203,22	1.203,22
ÁGUA		0,00	0,00	0,00	0,00
ETANOL		0,00	0,00	0,00	0,00
ETILENO		0,00	0,00	0,00	0,00
HIDROGENIO		1.203,22	1.203,22	1.203,22	1.203,22
CIS-2-BUTENO		0,00	0,00	0,00	0,00
1-HEXENO		0,00	0,00	0,00	0,00
1-OCTENO		0,00	0,00	0,00	0,00
1-DECENO		0,00	0,00	0,00	0,00
1-DODECENO		0,00	0,00	0,00	0,00
N-BUTANO		0,00	0,00	0,00	0,00
N-HEXANO		0,00	0,00	0,00	0,00
N-OCTANO		0,00	0,00	0,00	0,00
N-DECANO		0,00	0,00	0,00	0,00
N-DODECANO		0,00	0,00	0,00	0,00
<b>Corrente</b>		<b>25</b>	<b>26</b>	<b>27</b>	<b>28</b>
Fração de vapor		1,00	0,08	0,62	0,28
Temperatura	°C	40,00	69,03	200,00	200,00
Pressão	bar	35,00	35,00	35,49	35,49
Entalpia específica	cal/g	55,71	-322,26	-191,46	-521,29
Densidade	g/cm <sup>3</sup>	0,00	0,09	0,05	0,19
Vazão volumétrica	l/min	7.552,52	10.509,67	20.370,30	5.081,15
Vazão molar	kmol/hr	596,87	1.315,44	1.315,44	718,57
Vazão mássica	kg/hr	1.203,22	57.263,76	57.263,76	57.263,76
ÁGUA		0,00	2.082,54	2.082,54	2.082,54
ETANOL		0,00	280,95	280,95	280,95
ETILENO		0,00	0,00	0,00	0,00
HIDROGENIO		1.203,22	1.203,22	1.203,22	0,00
CIS-2-BUTENO		0,00	14.498,20	14.498,20	0,00
1-HEXENO		0,00	9.450,68	9.450,68	0,00
1-OCTENO		0,00	13.424,26	13.424,26	0,00
1-DECENO		0,00	8.054,56	8.054,56	0,00
1-DODECENO		0,00	8.269,35	8.269,35	0,00

Fonte: Autoria Própria.

**Tabela 15 - Caracterização das correntes do processo (continuação).**

<b>Corrente</b>	<b>25</b>	<b>26</b>	<b>27</b>	<b>28</b>
N-BUTANO	0,00	0,00	0,00	15.019,11
N-HEXANO	0,00	0,00	0,00	9.677,05
N-OCTANO	0,00	0,00	0,00	13.665,42
N-DECANO	0,00	0,00	0,00	8.170,31
N-DODECANO	0,00	0,00	0,00	8.368,38
<b>Corrente</b>	<b>29</b>	<b>30</b>	<b>31</b>	
Fração de vapor	0,89	0,00	0,00	
Temperatura	°C	129,39	5,25	144,72
Pressão	bar	1,01	1,00	1,00
Entalpia específica	cal/g	-521,29	-848,82	-439,64
Densidade	g/cm <sup>3</sup>	0,00	0,66	0,62
Vazão volumétrica	l/min	365.074,71	679,87	814,32
Vazão molar	kmol/hr	718,57	492,40	226,17
Vazão mássica	kg/hr	57.263,76	27.063,64	30.200,13
ÁGUA	2.082,54	2.082,54	0,00	
ETANOL	280,95	280,95	0,00	
ETILENO	0,00	0,00	0,00	
HIDROGENIO	0,00	0,00	0,00	
CIS-2-BUTENO	0,00	0,00	0,00	
1-HEXENO	0,00	0,00	0,00	
1-OCTENO	0,00	0,00	0,00	
1-DECENO	0,00	0,00	0,00	
1-DODECENO	0,00	0,00	0,00	
N-BUTANO	15.019,11	15.019,11	0,00	
N-HEXANO	9.677,05	9.667,37	9,68	
N-OCTANO	0,00	0,00	0,00	
N-DECANO	0,00	0,00	0,00	
N-DODECANO	0,00	0,00	0,00	

Fonte: Autoria Própria.

## ANEXO 2 – Propriedades e custos dos equipamentos

**Tabela 16 - Dados gerais dos equipamentos da simulação e seus dimensionamentos.**

<b>Trocadores de Calor</b>			
<b>T-1</b>		<b>T-2</b>	
Calor Trocado (MegaKJ/h)	13.582.278,09	Calor Trocado (MegaKJ/h)	92.905,09
Área de Troca Térmica (m <sup>2</sup> )	119,94	Área de Troca Térmica (m <sup>2</sup> )	0,15
Coef. Global de Transf. De Calor (KJ/°C-m <sup>2</sup> -h)	3.068,63	Coef. Global de Transf. De Calor (KJ/°C-m <sup>2</sup> -h)	3.068,63
Vazão de Utilidade (Kg/h)	5.411,70	Vazão de Utilidade (Kg/h)	22.210,16
Custo (US\$)	147.829,98	Custo (US\$)	4.393,50
<b>T-3</b>		<b>T-4</b>	
Calor Trocado (MegaKJ/h)	13.886.944,55	Calor Trocado (MegaKJ/h)	577.985,41
Área de Troca Térmica (m <sup>2</sup> )	196,66	Área de Troca Térmica (m <sup>2</sup> )	18,56
Coef. Global de Transf. De Calor (KJ/°C-m <sup>2</sup> -h)	4.091,50	Coef. Global de Transf. De Calor (KJ/°C-m <sup>2</sup> -h)	4.091,50
Vazão de Utilidade (Kg/h)	8.156,89	Vazão de Utilidade (Kg/h)	6.007,60
Custo (US\$)	195.628,76	Custo (US\$)	9.485,21
<b>T-5</b>		<b>T-6</b>	
Calor Trocado (MegaKJ/h)	184.999,57	Calor Trocado (MegaKJ/h)	215.342,24
Área de Troca Térmica (m <sup>2</sup> )	8,97	Área de Troca Térmica (m <sup>2</sup> )	9,55
Coef. Global de Transf. De Calor (KJ/°C-m <sup>2</sup> -h)	4.091,50	Coef. Global de Transf. De Calor (KJ/°C-m <sup>2</sup> -h)	4.091,50
Vazão de Utilidade (Kg/h)	320,48	Vazão de Utilidade (Kg/h)	321,75
Custo (US\$)	8.443,86	Custo (US\$)	8.529,05
<b>T-7</b>		<b>T-8</b>	
Calor Trocado (MegaKJ/h)	215.970,26	Calor Trocado (MegaKJ/h)	45.258,15
Área de Troca Térmica (m <sup>2</sup> )	9,54	Área de Troca Térmica (m <sup>2</sup> )	4,43
Coef. Global de Transf. De Calor (KJ/°C-m <sup>2</sup> -h)	4.091,50	Coef. Global de Transf. De Calor (KJ/°C-m <sup>2</sup> -h)	4.091,50
Vazão de Utilidade (Kg/h)	320,69	Vazão de Utilidade (Kg/h)	318,22
Custo (US\$)	8.527,82	Custo (US\$)	7.543,16
<b>T-9</b>			
Calor Trocado (MegaKJ/h)	2.419.772,69		
Área de Troca Térmica (m <sup>2</sup> )	19,02		
Coef. Global de Transf. De Calor (KJ/°C-m <sup>2</sup> -h)	3.068,63		
Vazão de Utilidade (Kg/h)	964,13		
Custo (US\$)	93.657,32		

Fonte: Autoria Própria



**Tabela 16 - Dados gerais dos equipamentos da simulação e seus dimensionamentos (continuação).**

<b>Bomba e Compressores</b>			
<b>B-1</b>		<b>B-2</b>	
Vazão Volumétrica (m <sup>3</sup> /h)	120,44	Vazão Volumétrica (m <sup>3</sup> /h)	87,70
Acréscimo de Pressão (Kpa)	488,70	Acréscimo de Pressão (Kpa)	1.330,25
Potência (HP)	34,36	Potência (HP)	70,00
Eletricidade (KW)	25,62	Eletricidade (KW)	52,20
Custo (US\$)	18.072,50	Custo (US\$)	24.243,02
<b>C-1</b>		<b>C-2</b>	
Vazão Volumétrica (m <sup>3</sup> /h)	45.896,46	Vazão Volumétrica (m <sup>3</sup> /h)	4.593,81
Acréscimo de Pressão (Kpa)	820,00	Acréscimo de Pressão (Kpa)	1.650,00
Potência (HP)	7.061,64	Potência (HP)	1.524,96
Eletricidade (KW)	5.265,87	Eletricidade (KW)	1.137,17
Custo (US\$)	3.554.180,17	Custo (US\$)	1.353.263,06
<b>C-3</b>		<b>C-4</b>	
Vazão Volumétrica (m <sup>3</sup> /h)	14.804,87	Vazão Volumétrica (m <sup>3</sup> /h)	5.189,15
Acréscimo de Pressão (Kpa)	200,00	Acréscimo de Pressão (Kpa)	600,00
Potência (HP)	754,30	Potência (HP)	78,70
Eletricidade (KW)	562,49	Eletricidade (KW)	58,69
Custo (US\$)	868.527,10	Custo (US\$)	209.120,70
<b>C-5</b>		<b>C-6</b>	
Vazão Volumétrica (m <sup>3</sup> /h)	1.735,76	Vazão Volumétrica (m <sup>3</sup> /h)	584,68
Acréscimo de Pressão (Kpa)	1.800,00	Acréscimo de Pressão (Kpa)	800,00
Potência (HP)	79,72	Potência (HP)	16,35
Eletricidade (KW)	59,45	Eletricidade (KW)	12,19
Custo (US\$)	210.827,60	Custo (US\$)	77.714,75
<b>Vasos</b>			
<b>R-1</b>		<b>R-2</b>	
Quantidade de Reatores	1	Quantidade de Reatores	1
Comprimento / Diâmetro do Vaso (m)	7,24 / 3,62	Comprimento / Diâmetro do Vaso (m)	8,49 / 4,24
Custo Total (US\$)	146.332,45	Custo Total (US\$)	187.840,82
<b>R-3</b>		<b>R-4</b>	
Quantidade de Reatores	4	Quantidade de Reatores	2
Comprimento / Diâmetro do Vaso (m)	11,46 / 5,73	Comprimento / Diâmetro do Vaso (m)	10,76 / 5,38
Custo Total (US\$)	3.108.643,76	Custo Total (US\$)	1.531.182,75

Fonte: Autoria própria.

**Tabela 16 - Dados gerais dos equipamentos da simulação e seus dimensionamentos (continuação).**

<b>Colunas de destilação e separação</b>			
<b>F-1</b>		<b>F-2</b>	
Comprimento / Diâmetro do Vaso (m)	6,94 / 4,28	Comprimento / Diâmetro do Vaso (m)	5,26 / 3,49
Custo Total (US\$)	506.596,05	Custo Total (US\$)	532.959,19
<b>F-3</b>			
Temperatura - Topo/Fundo (°C)	32,51 / 136,08		
Pressão - Topo/Fundo (Kpa)	100 / 100		
Altura/Diâmetro (m)	20,09 / 2,6		
Número de Estágios Teóricos	17,00		
Razão de Refluxo (molar)	0,50		
Custo (US\$)	797.688,43		

Fonte: Aatoria própria.

