

SIMULAÇÃO E ANÁLISE TÉCNICO-ECONÔMICA DE UMA UNIDADE DE PRODUÇÃO DE METANOL A PARTIR DA GASEIFICAÇÃO DE BIOMASSA

K. Y. O. ALTOÉ¹, F. A. RODRIGUES¹

¹Universidade Federal de Viçosa, Departamento de Química
E-mail para contato: kinaltoe@hotmail.com, fabio.rodrigues@ufv.br

RESUMO- Neste trabalho foram avaliadas as etapas do ciclo de vida de uma planta de produção de metanol a partir da gaseificação do bagaço de cana. A síntese de rotas químicas, desenvolvimento de processos (modelagem termodinâmica e cinética) e engenharia de processos (definição dos equipamentos básicos para a avaliação econômica) foram investigados. Metanol foi escolhido devido às suas inúmeras utilizações. Assim, a gaseificação do bagaço de cana foi um estudo de caso simulado no software livre de processos químicos COCO. Considerando-se um consumo diário de 100 toneladas de bagaço de cana e um preço de venda de metanol U\$ \$ 2.00/kg, os resultados obtidos foram: produção anual de metanol de 13.600 toneladas, capital total investido de 39,269 milhões dólares; saldo líquido de venda U\$ \$ 27,21 milhões / ano, tempo de retorno de 2,9 anos; retorno de investimento de 20,6%/ano. Para essa condição a planta é viável economicamente, como referência o mercado com um retorno de investimento de 15%/ano e tempo de retorno de 3,6 anos.

1. INTRODUÇÃO

Simuladores de processos tornaram-se ferramentas necessárias aos engenheiros de design, processos e aos operadores de planta. Quando usado adequadamente, o simulador pode ajudar o engenheiro a tornar-se mais produtivo e criativo na realização de suas tarefas (BROWN *et al.*, 2006). O completo desenvolvimento do design de uma planta envolve a consideração de vários tópicos diferentes. Compreensivelmente, o quadro econômico global define se a instalação em questão será aprovada (PETERS e TIMMERHAUS, 2003).

A biomassa vem se afirmando como uma fonte de energia e matéria-prima, e exhibe potencial para complementar ou mesmo substituir os materiais fósseis e seus derivados. As tecnologias de gaseificação não são recentes, mas mostram-se capazes de suprir as demandas energéticas mundiais, de maneira sustentável e ambientalmente correta, em um futuro não distante (SCHLITTLER *et al.*, 2009). Assim, o objetivo deste trabalho foi a simulação no software livre COCO e a análise técnico-econômica, usando como caso de estudo, uma instalação industrial destinada à produção de metanol a partir da gaseificação de biomassa.

2. MATERIAIS E MÉTODOS

Segundo Lora e Venturini (2012 apud CIFRE e BADR, 2007), o processo de produção de metanol compreende as seguintes etapas: pré-tratamento de matérias-primas, gaseificação

de biomassa, tratamento de gás de síntese, reforma de hidrocarbonetos, ajuste da razão H_2/CO , síntese de metanol e destilação. Neste trabalho apenas gaseificação da biomassa, síntese de metanol e destilação foram considerados. As seguintes hipóteses foram feitas a em relação ao processo de gaseificação: processo isotérmico em estado estacionário e sem perda de carga; biomassa composta apenas por carbono e livre de água; produtos de gaseificação se comportam como gases ideais: CO , CO_2 , H_2 e CH_4 ; reações de gaseificação atingem o equilíbrio.

Para modelar o processo de gaseificação usou-se o modelo de reator de Gibbs e as condições de entrada assumidas por Tan e Zhong (2010): biomassa a 101,3 kPa e 288 K, vapor a 101,3 kPa e 673 K, gaseificador operando a 101,3 kPa e 973 K e uma razão molar vapor/biomassa alimentada ao gaseificador igual a 1. Devido a não-existência de carbono como um elemento simples na base de dados do COCO[®] usou-se o software UniSim R410[®] para simular o processo de gaseificação. Os dados obtidos foram inseridos ao simulador de processos químicos COCO[®].

Para o reator de metanol usou-se os dados fornecidos por Panahi *et al.* (2012): catalisador com massa específica de 1063 kg/m^3 e diâmetro de partícula de 0,04 m. De acordo com o trabalho de Yusup *et al.* (2010), observou-se uma grande discrepância entre o valor do diâmetro da partícula (0,006 m) e o utilizado (0,04 m). De modo a adaptar-se o último foi utilizado o valor de 0,004 m. Assim, utilizou-se um valor de porosidade do leito de 0,5.

Para a reação de metanol o modelo desenvolvido por Vanden Busschee Froment (1996) foi considerado, de acordo com as Reações 1 e 2 e suas respectivas taxas dadas pelas equações 1 e 2:



O pacote termodinâmico Peng Robinson foi utilizado para realizar as simulações.

Os gás de síntese obtido é comprimido até 5100 kPa (pressão do reator) passando por estágios intermediários de resfriamento. Adotou-se uma temperatura de saída de cada etapa de resfriamento de 373 K, uma relação de compressão igual a 3 e uma queda de pressão de 20 kPa para cada etapa de resfriamento, de acordo com Turton *et al.* (2009). Como praticamente todo H_2 foi consumido nas reações de formação de metanol não se verificou a necessidade de reciclo. O efluente do reator passa por um resfriador atingindo 353 K. Como há formação de fase líquida, uma queda de pressão de 10 kPa foi adotada na sequência de acordo com Turton *et al.* (2009). Esta corrente passa através de uma válvula, igualando sua pressão à atmosférica e atingindo um vaso de *flash* onde o metanol é separado.

Na Figura 1 encontra-se o diagrama de fluxo do processo desenvolvido no software livre COCO:

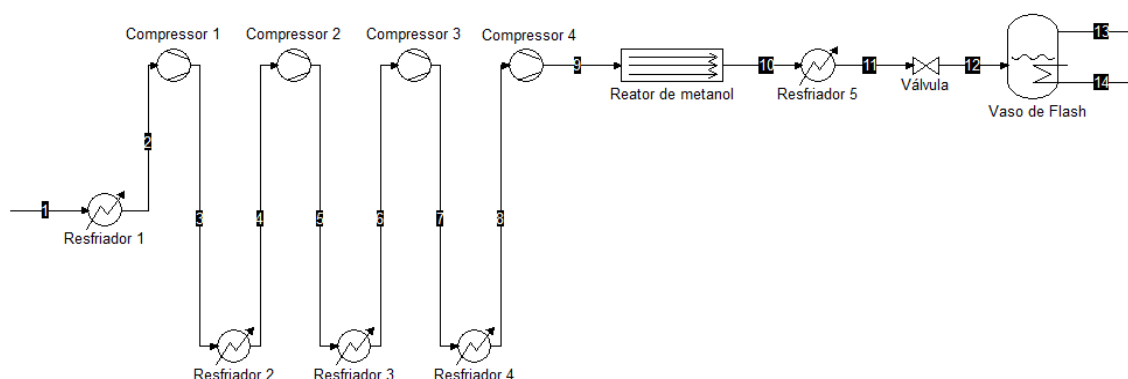


Figura 1 – Diagrama de fluxo do processo de produção do metanol.

O procedimento adotado para fazer a análise econômica foi realizado de acordo com a planilha em EXCEL proposta por Peters e Timmerhaus (2003) e é descrito a seguir: Estima-se o custo de compra de cada equipamento do processo, Na planilha “**Capital Inv**” entra-se com o custo total de compra dos equipamentos do processo para calcular o investimento de capital fixo e capital de giro, Na planilha “**Material & Labor**” entra-se com o preço de produtos e matérias-primas com suas respectivas vazões além da mão-de-obra requerida, Na planilha “**Utilities**” entra-se com as quantidades de utilidades anuais necessárias com as unidades apropriadas, A planilha “**Anual TOTAL PRODUCT COST**” calcula-se o custo total anual do produto e na planilha “**Evaluation**” estabelece-se o fluxo de caixa e calcula as medidas de rentabilidade comum, tais como, tempo de pagamento, retorno do investimento e retorno líquido.

O custo de compra dos equipamentos pode ser estimado pela Equação 3, considerando pressão de 1 atm e de aço de carbono como material de construção:

$$\log(C_P^0) = K_1 + K_2 \log(A) + K_3 (\log(A))^2 \quad (3)$$

sendo A o tamanho ou capacidade do equipamento e os parâmetros K_1 , K_2 e K_3 suas constantes características, podendo ser encontrados no trabalho de Turton *et al.* (2009).

O fator de material (F_M) é responsável pelo ajuste do custo do equipamento referente ao seu material de construção enquanto o fator de condição (F_P) ajusta o custo do equipamento para as condições de operação de temperatura e pressão. A partir dos valores de C_P^0 , F_P e F_M pode-se calcular o custo *bare module* (C_{BM}), através da Equação 4:

$$C_{BM} = C_P^0 F_{BM} = C_P^0 (B_1 + B_2 F_M F_P) \quad (4)$$

sendo F_{BM} o fator *bare module* e as constantes B_1 e B_2 específicas de cada tipo de equipamento, de acordo com Turton *et al.* (2009). Ajusta-se o valor do custo de capital no tempo mediante índices específicos da indústria de acordo com a Equação 5:

$$C_2 = C_1 \left(\frac{I_2}{I_1} \right) \quad (5)$$

onde C_1 e I_1 representam, respectivamente, o custo e o índice de inflação do ano base e C_2 e I_2 do ano em questão. Neste trabalho foi usado o índice CEPCI (Chemical Engineering Plant Cost Index), considerando-se o ano-base de 2001 (397) e no ano em questão de 2012 (572,7).

3. RESULTADOS

Os dados obtidos foram comparados com os dados publicados por Tan e Zhong (2012) e encontram-se na Tabela 1:

Tabela 1 – Composição do gás de síntese em base seca (% vol)

Componente	H ₂	CO	CO ₂	CH ₄
Tan e Zhong (2012)	61,17	18,86	19,42	0,49
Simulação	45,37	48,68	2,15	3,8

As discrepâncias entre os valores podem ser explicados pelo modelo de reator de Gibbs com as reações pré-definidas utilizadas por Tan e Zhong (2012), dispostas na Tabela 2, e pela composição mássica da biomassa adotada pelos autores: 45,76 % carbono, 6,74 % hidrogênio, 0,07 % nitrogênio e 47,42 % oxigênio.

Tabela 2 – Reações de gaseificação

$3C + 2O_2 \rightarrow 2CO + CO_2$	(6)
$C + H_2O \rightarrow CO + H_2$	(7)
$CO + H_2O \rightarrow CO_2 + H_2$	(2)
$C + CO_2 \rightarrow 2CO$	(8)
$C + 2H_2 \rightarrow CH_4$	(9)
$CH_4 + H_2O \rightarrow CO + 3H_2$	(10)
$CH_4 + 2H_2O \rightarrow CO + 4H_2$	(11)

Os dados obtidos para a reação de metanol foram comparados com os dados publicados por Panahi *et al.* (2012). Avaliou-se o rendimento de metanol em relação ao conteúdo de hidrogênio e carbono de acordo com as seguintes equações:

$$Y_{CH_3OH/H_2} = \frac{F_{CH_3OH}}{F_{H_2}^0} \times 100 \quad (12)$$

$$Y_{CH_3OH/CO+CO_2} = \frac{F_{CH_3OH}}{F_{CO}^0 + F_{CO_2}^0} \times 100 \quad (13)$$

onde F_{CH_3OH} é o fluxo molar de metanol na saída do reator e $F_{H_2}^0$, F_{CO}^0 e $F_{CO_2}^0$ são, respectivamente, os fluxos molares de entrada de hidrogênio, monóxido e dióxido de carbono.

A Equação 12 mostra a percentagem de hidrogênio convertido em metanol enquanto a Equação 13 a percentagem de carbono convertido em metanol. Os valores obtidos a partir das equações 12 e 13 por Panahi *et al.* (2012) foram, respectivamente, 7,052 e 73,17. A simulação obteve 51,82 e 46,26, respectivamente.

Para entender melhor os resultados obtidos, as composições molares de entrada e as condições reacionais foram analisadas e encontram-se na Tabela 3:

Tabela 3 – Dados reacionais

Panahi <i>et al.</i> (2012)	T _{ent}	498 K	P _{ent}	8200 kPa	Composição (% mol)	80 H ₂ ; 4,76 CO; 2,95 CO ₂ ; 11,92 CH ₄ ; 0,06 H ₂ O
	T _{sai}	528 K	P _{sai}	8200 kPa		
Simulação	T _{ent}	524,96 K	P _{ent}	5100 kPa	Composição (% mol)	44,64 H ₂ ; 47,89 CO; 2,11 CO ₂ ; 3,74 CH ₄ ; 1,62 H ₂ O
	T _{sai}	524,96 K	P _{sai}	5098 kPa		

Em relação ao trabalho de Panahi *et al.* (2012), menores valores de rendimento de metanol em comparação com o teor de hidrogênio e valores mais elevados em comparação com o teor de carbono podem ser explicados pela alta pressão, elevado teor de hidrogênio e baixo teor de CO e CO₂.

A simulação apresenta um baixo conteúdo de H₂ e CO₂ e um alto teor de CO. Por conseguinte, um elevado rendimento de metanol em relação ao teor de hidrogênio e um baixo rendimento em relação ao teor de carbono são explicados.

Para efetuar-se o cálculo de compra dos equipamentos, os mesmos foram modelados da seguinte forma: gaseificador como aquecedor de água quente, os compressores como do tipo rotatório sendo aço-carbono seu material de construção, o reator foi como encamisado agitado com 3 m de comprimento e 1 m diâmetro (estas dimensões foram adotadas apenas para executar a simulação).

O vaso de *flash* foi modelado de acordo com Turton *et al.* (2009).

Para o vaso de *flash* foram obtidos um diâmetro de 1,255 m e comprimento de 0,8166 m. Sua configuração foi considerada vertical e aço inoxidável seu material de construção. Para os resfriadores, um fluxo mássico de água de 63,4916 kg/s foi calculado considerando um aumento de temperatura de 15°C e um calor específico de 4,2 kJ/kg°C.

Considerando todos os dados de dimensionamento apresentados anteriormente calculou-se o custo de aquisição dos equipamentos: US\$ 4.172.830,59 para o ano de 2001.

Corrigindo esse valor para o ano de 2012 de acordo com a Equação 7, um valor de US\$ 6.019.597,18 foi obtido.

A partir dos dados de custo dos equipamentos, considerando que biomassa e vapor foram obtidos sem custos, o consumo anual de água de resfriamento foi de 1.919.986 m³, o preço de venda do metanol de US\$ 2,00/kg, o ciclo de vida da planta de 10 anos e 350 dias/ano de operação utilizou-se a planilha desenvolvida por Peters e Timmerhaus (2003), para calcular os dados econômicos. Estes podem ser encontrados na Tabela 4:

Tabela 4 – Dados econômicos

Consumo de biomassa (ton/dia)	100	Capital total investido (milhões US\$)	39,269
Produção de metanol (ton/ano)	13.600	Lucro líquido (milhões US\$/ano)	2,28
Capital fixo investido (milhões US\$)	33,375	Tempo de retorno (anos)	2,9
Capital de giro (milhões US\$)	5,894	Retorno sobre investimento (%)	20,6

Assim sendo, o investimento na construção de tal projeto é rentável uma vez que o retorno do investimento obtido foi de 20,6% e o tempo de retorno de 2,9 anos, superior aos 15% e 3,6 anos recomendado por Peters e Timmerhaus (2003), respectivamente.

4. CONCLUSÃO

A partir dos dados financeiros obtidos pode-se concluir que a implementação do projeto considerado neste trabalho tem viabilidade econômica uma vez que o retorno do investimento obtido foi de 20,6% e o tempo de retorno igual a 2,9 anos. Tais perspectivas devem, no entanto, ser relativizadas devido às suposições efetuadas (preço de venda do metanol produzido e o custo das matérias-primas) e às limitações técnicas do simulador de processos químicos COCO[®] (banco de dados limitado e algoritmos menos robustos, por exemplo), o que tende a restringir o grau de aproximação entre os dados de simulação e os do processo real.

5. AGRADECIMENTO

Os autores agradecem a empresa HONEYWELL pelo fornecimento do software UNISIMTM e a FAPEMIG pelo apoio financeiro.

6. NOMENCLATURA

A	Parâmetro de capacidade/tamanho	-
B ₁ , B ₂	Constante do fator <i>bare module</i>	-
D	Diâmetro	m
F	Fluxo molar	mol/s
F _M	Fator de material	-
F _P	Fator de pressão	-
f _s	Fator de segurança	-
I	Índice de inflação	-
K ₁ , K ₂ , K ₃	Parâmetro de capacidade/tamanho	-
k	Coefficiente de velocidade máxima	m/s
L	Comprimento	m
P	Pressão	kPa
T	Temperatura	K
v	Volume específico molar	m ³ /mol
V	Volume	m ³
Y	Rendimento de metanol em relação a um componente	-
t _L	Tempo de residência do líquido	s
ρ	Massa específica	kg/m ³

7. REFERÊNCIAS

- BROWN, W. G.; OCHS, L.; VARNER, J. W. *Using process simulators will make your plant more productive and efficient*. Gas Processors Association, 2006.
- CIFRE, P. G.; BADR, O. Renewable hydrogen utilization for the production of methanol. *En. Conv. and Mgmt*, v. 48, n. 2, p. 519-527, 2007.
- LORA, E. E. S.; VENTURINI, O. J. *Biocombustíveis*. 1. ed. Rio de Janeiro: Interciência, 2012. v. 1.
- PANAHI, P. N.; MOUSAVI, S. M.; NIAEI, A.; FARZI, A.; SALARI, D. Simulation of methanol synthesis from synthesis gas in fixed bed catalytic reactor using mathematical modeling and neural networks. *IJSER*, v. 3, n. 2, 2012.
- PETERS, M. S.; TIMMERHAUS, K. D. *Plant design and economics for chemical engineers*. 5 ed. New York: McGraw-Hill, 2003.
- SCHLITTLER, L. A. F. S.; GOMES, E. B.; ANTUNES, A. M. S.; JÚNIOR, N. P. Gaseificação de biomassa. *Diálogos & Ciência*, n. 11, 2009.
- TAN, W.; ZHONG, Q. Simulation of hydrogen production in biomass gasifier by ASPEN PLUS. In: *Power and Energy Engineering Conference (APPEEC)*, 2010 Asia-Pacific, 2, 2010, China.

TURTON, R.; BAILIE, R. C.; WHITING, W. B.; SHAEIWITZ, J. A. *Analysis, synthesis, and design of chemical processes*. 3. ed. New York: Prentice Hall, 2009. 1068 p.

UNISim HONEYWELL, <www.honeywell.com>

VANDEN BUSSCHE, K. M.; FROMENT, G. F. A Steady-state kinetic model for methanol synthesis and the water gas shift reaction on a commercial Cu/ZnO/Al₂O₃ catalyst. *J. of Catal.*, n. 161, p. 1-10, 1996.

YUSUP, S.; ANH, N. P.; ZABIRI, H. A simulation study of an industrial methanol reactor based on simplified steady state methanol. *IJRRAS*, v. 5, n. 3, 2010.