

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DE TECNOLOGIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA



**Otimização superestrutural de biorrefinaria de
cana-de-açúcar com hidrólise e gaseificação da biomassa
vegetal e biodigestão da vinhaça e do licor de pentoses**

Gabriel de Castro Fonseca

São Carlos - SP
Agosto de 2018

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DE TECNOLOGIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA



Otimização superestrutural de biorrefinaria de cana-de-açúcar com hidrólise e gaseificação da biomassa vegetal e biodigestão da vinhaça e do licor de pentoses

Gabriel de Castro Fonseca

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química da Universidade Federal de São Carlos como requisito parcial para obtenção do título de Doutor em Engenharia Química.

Universidade Federal de São Carlos

Orientador: Antonio José Gonçalves da Cruz
Co-orientadora: Caliane Bastos Borba da Costa

São Carlos - SP
Agosto de 2018

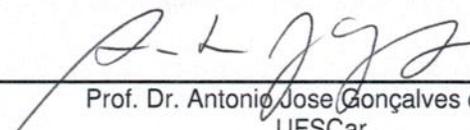


UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS

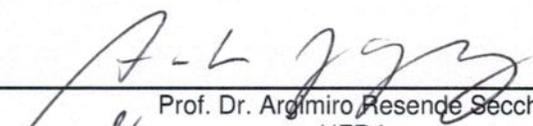
Centro de Ciências Exatas e de Tecnologia
Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química

Folha de Aprovação

Assinaturas dos membros da comissão examinadora que avaliou e aprovou a Defesa de Tese de Doutorado do candidato Gabriel de Castro Fonseca, realizada em 20/08/2018:



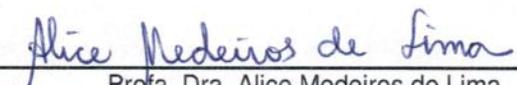
Prof. Dr. Antonio Jose Gonçalves da Cruz
UFSCar



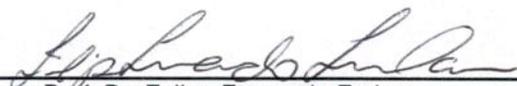
Prof. Dr. Argimiro Resende Secchi
UFRJ



Profa. Dra. Cássia Maria de Oliveira
IFSP - Matão

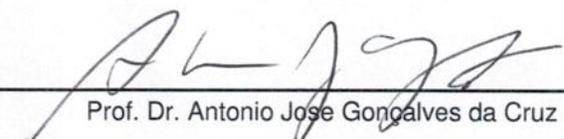


Profa. Dra. Alice Medeiros de Lima
UFSCar



Prof. Dr. Felipe Fernando Furlan
UFSCar

Certifico que a defesa realizou-se com a participação à distância do(s) membro(s) Argimiro Resende Secchi e, depois das arguições e deliberações realizadas, o(s) participante(s) à distância está(ao) de acordo com o conteúdo do parecer da banca examinadora redigido neste relatório de defesa.



Prof. Dr. Antonio Jose Gonçalves da Cruz

AGRADECIMENTOS

Agradeço aos meus pais, Dilermando e Neuza Fonseca, que me apoiaram desde que eu nasci e um pouco mais do que precisavam.

À minha esposa, Margarete Petri, por seu carinho e paciência por todos os dias que tive que trocá-la pelo trabalho.

Aos amigos e colegas de laboratório, Agnes, Anderson, Andrew, Andreza, Cássia, Erich, Felipe, Guilhermina, Harminder, João Paulo, Karina, Vítor, William, e todos os demais que contribuíram tornando as horas de trabalho mais prazerosas.

Agradeço a Anderson Lino, Andreza Longatti e Felipe Furlan ainda pelo trabalho compartilhado que foi fundamental para a elaboração desta tese.

Aos meus orientadores, Prof. Antonio Cruz e Prof.^a Caliane Costa pelo profissionalismo, dedicação e compreensão quando tive que me dividir entre a tese e a carreira.

Aos coordenadores do PPGEQ Prof. José Maria Bueno e Prof. Edson Silva por toda compreensão e apoio concedidos ao longo do meu doutorado.

A todos os professores do DEQ-UFSCar, que me formaram e serviram de exemplo profissional e humano dentro e fora da sala de aula.

Ao chefe do DQBIO-UFSJ, Prof. Dane Cestarolli, e ao Coordenador do curso de Engenharia de Bioprocessos, Prof. Edson Nucci, por me concederem o tempo necessário para conciliar a produção deste trabalho com as obrigações profissionais.

À FAI-UFSCar e CNPq pelo financiamento.

Finalmente, agradeço antecipadamente àqueles que esqueci de citar por perdoarem a minha falta memória. Quem sabe eu não me lembro no próximo doutorado?

SUMÁRIO

1	Introdução	23
1.1	Objetivos	25
2	Revisão da literatura	27
2.1	Cogeração a partir da combustão de biomassa	27
2.2	Gaseificação de biomassa	28
2.3	Etanol de segunda geração	30
2.4	Digestão anaeróbia de vinhaça	32
2.5	Análise técnico-econômica	34
2.5.1	Estimativa de custos	34
2.5.1.1	Fatores de escala, tempo e localização	35
2.5.2	Custos de capital	36
2.5.3	Custos de operação	37
2.5.4	Depreciação	38
2.5.5	Fluxo de caixa	38
2.5.6	Custos das alternativas de investimento	39
2.5.6.1	Custos do ciclo Rankine de cogeração	39
2.5.6.2	Custos do ciclo combinado com gaseificação integrada	41
2.5.6.3	Custos da hidrólise de biomassa	44
2.5.6.4	Custos da digestão anaeróbia de vinhaça	45
2.5.7	Decisão entre investimentos alternativos	47
2.5.8	Quantificação do risco: Método de Monte Carlo	48
2.6	Otimização superestrutural	48
2.7	Trabalhos relacionados	50
3	Metodologia	53
3.1	Superestrutura	53
3.2	Modelagem	54
3.2.1	Escala de produção	55
3.2.2	Modelagem da destilaria 1G	55
3.2.3	Modelagem do ciclo Rankine de cogeração	58
3.2.4	Modelagem do BIGCC	59
3.2.5	Modelagem da hidrólise de celulose	62
3.2.6	Modelagem da digestão anaeróbia	64
3.3	Análise Econômica	65
3.3.1	Custos de capital	66
3.3.1.1	Custos do ciclo Rankine de cogeração	66
3.3.1.2	Custos do ciclo combinado com gaseificação integrada	67
3.3.1.3	Custos da hidrólise de biomassa	68
3.3.1.4	Custos da digestão anaeróbia de vinhaça	69

3.3.2	Custos de operação	69
3.3.3	Preços de venda dos produtos	73
3.3.4	Tributação e depreciação	73
3.3.5	Análise de investimentos alternativos	73
3.3.6	Otimização econômica	75
3.3.7	Estudos de caso	75
3.3.8	Método de Monte Carlo	77
4	Resultados e Discussão	79
4.1	Caso Base	79
4.1.1	Resultados da otimização	79
4.1.2	Análise de Risco por Método de Monte Carlo	83
4.2	Estudos de caso	83
4.2.1	Caso 1: Altos preços de venda de etanol e eletricidade	83
4.2.2	Caso 2: Custos de investimento da hidrólise 30 % menores	84
4.2.3	Caso 3: Custos de investimento do sistema de cogeração Rankine 30 % menores	85
4.2.4	Caso 4: Custos de investimento do BIGCC 30 % menores	86
4.2.5	Caso 5: Custos de investimento da digestão anaeróbia 30 % maiores	87
4.2.6	Caso 6: Longo prazo	87
4.2.7	Caso 7: Longo prazo e altos preços de produtos	88
4.2.8	Caso 8: Redução de escala	89
4.2.9	Estudos de caso com parâmetros aleatórios	89
5	Conclusão	91
	Referências	93
	APÊNDICE A Superestrutura	101
	APÊNDICE B Método de Monte Carlo	125
B.1	Código EMSO	125
B.2	Código Python auxiliar	128
	APÊNDICE C Modelos utilizados	131
C.1	Duplicador e seletor de corrente	131
C.2	Secador de bagaço	136
C.3	Gaseificador	138
C.4	Compressor de gás	141
C.5	Turbina a gás	143

RESUMO

A produção de etanol em biorrefinarias de cana-de-açúcar gera grandes quantidades de subprodutos na forma de palha, bagaço e vinhaça. O objetivo deste trabalho foi desenvolver e implementar uma ferramenta para análise de investimentos no âmbito de uma biorrefinaria de etanol de cana-de-açúcar (E1G) projetada para aproveitar esses subprodutos na produção de etanol de segunda geração (E2G) e eletricidade. A combustão do bagaço em caldeiras de baixa pressão visando a autossuficiência energética do processo é uma tecnologia amplamente utilizada. Nem todas as destilarias, entretanto, adotam a tecnologia para produção de excedentes de eletricidade. Duas alternativas para produção desses excedentes foram examinadas: a combustão da palha e bagaço em caldeiras de alta pressão (ciclo Rankine) e a cogeração integrada à gaseificação da biomassa (BIGCC). Estudou-se ainda o impacto da produção de biogás por digestão anaeróbia da vinhaça na viabilidade tecno-econômica do processo, haja vista que a produção de etanol de segunda geração leva à produção de volumes de vinhaça ainda maiores que os observados nas destilarias convencionais. Considerou-se uma destilaria autônoma com capacidade para processar 3,84 milhões de toneladas de cana por safra e recuperação de 50 % da palha do campo. A análise econômica se baseou em estimativas fatoradas dos custos e otimização superestrutural para definir a fração ótima de bagaço hidrolisado e melhor processo para produção de energia. Estimou-se a incerteza relativa à análise econômica pelo método de Monte Carlo. Diferentes estudos de caso foram avaliados assumindo-se variações nos preços de produtos, redução nos custos de investimento devidos a efeitos de aprendizado tecnológico e expectativas para o cenário de longo prazo. Na maioria dos cenários a operação ótima envolveu a geração de eletricidade por combustão da biomassa em turbinas de alta pressão e em todos os cenários, o ótimo envolveu hidrólise de todo o bagaço e produção de biogás. Contudo, nas condições avaliadas neste trabalho, nenhum dos cenários avaliados se mostrou economicamente viável, o que sugere que essas tecnologias ainda não estão suficientemente maduras para uso comercial sem apoio do setor público.

Palavras-chaves: Biorrefinaria. Otimização Superestrutural. Etanol 2G. Cogeração. Gaseificação.

ABSTRACT

The production of ethanol in sugarcane biorefineries generates large amounts of by-products such as straw, bagasse and vinasse. The objective of this work was to develop and implement a tool for the analysis of investments within the framework of a sugarcane ethanol bio-refinery (E1G) designed to take advantage of all these by-products in the production of second generation ethanol (E2G) and electricity. The combustion of bagasse in low pressure boilers for energy self-sufficiency of the process is a widely used technology. Not all distilleries, however, adopt the technology to produce surplus electricity. Two alternatives for the production of these surpluses were examined: the combustion of straw and bagasse in high pressure boilers (Rankine cycle) and biomass integrated gasification combined cycle (BIGCC). The impact of biogas production by anaerobic digestion of vinasse on the techno-economical viability of the process was also investigated, since the production of second generation ethanol leads to vinasse throughputs even larger than those observed in traditional distilleries. An autonomous distillery with capacity to process 3.84 million tons of cane per harvest and recovery of 50 % of straw from the field was considered. The economic analysis was based on factored-cost estimates and on superstructural optimization in order to define the optimal fraction of hydrolyzed bagasse and the best process for energy production. The uncertainty regarding the economic analysis was estimated by the Monte Carlo method. Different case studies were evaluated assuming changes in product prices, reduction in investment costs due to technological learning effects and expectations for the long-term scenario. In most scenarios the optimal operation involved the generation of electricity by combustion of biomass in high pressure turbines and in all scenarios, the optimum involved the hydrolysis of all bagasse and the production of biogas. Nonetheless, under the conditions evaluated in this work, none of the scenarios evaluated were deemed economically feasible, suggesting that these technologies are not yet sufficiently mature for commercial use without support from the public sector.

Keywords: Biorefinery. Superstructural Optimization. Ethanol 2G. Cogeneration. Gasification.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 – Diagrama de blocos do sistema de cogeração BIGCC	30
Figura 2 – Exemplo de superestrutura (a) e de configuração ótima (b).	49
Figura 3 – Superestrutura proposta para problema de otimização desta tese.	54
Figura 4 – Biorrefinaria de etanol de primeira e segunda geração com cogeração de eletricidade implementada no EMSO	55
Figura 5 – Diagrama de blocos dos processos de extração e tratamento do caldo da cana-de-açúcar.	57
Figura 6 – Diagrama de blocos dos processos de concentração e fermentação do caldo.	57
Figura 7 – Diagrama de blocos do sistema de destilação e desidratação	58
Figura 8 – Diagrama de blocos do sistema de cogeração Rankine.	59
Figura 9 – Implementação do sistema de cogeração BIGCC no simulador	60
Figura 10 – Composição do gás de síntese em função da umidade do bagaço de cana-de-açúcar	61
Figura 11 – Poder calorífico inferior e temperatura do gás de síntese em função da umidade do bagaço de cana-de-açúcar	62
Figura 12 – Diagrama de blocos do sistema de pré-tratamento de bagaço	63
Figura 13 – Diagrama de blocos da etapa da hidrólise	63
Figura 14 – Diagrama de blocos do sistema de digestão anaeróbia	64
Figura 15 – Série de pagamentos considerando dois fluxos de caixa constantes: com depre- ciação linear por 10 anos e durante todo o tempo de vida do projeto de 25 anos.	74
Figura 16 – Variação na produção de etanol e de excedente de eletricidade em função da fração de bagaço hidrolisado.	82
Figura 17 – Variação da razão benefício/custo em função da fração de bagaço hidrolisado.	82
Figura 18 – Distribuição de razões benefício/custo em 1000 simulações com custos e preços aleatórios no caso base.	83
Figura 19 – Distribuição de razões benefício/custo em cenário com preços de produtos altos (Caso 1).	84
Figura 20 – Distribuição de razões benefício/custo em cenário com custos do pré-tratamento e hidrólise baixos (Caso 2).	85
Figura 21 – Distribuição de razões benefício/custo em cenário com custos do sistema de cogeração Rankine baixos (Caso 3).	86
Figura 22 – Distribuição de razões benefício/custo em cenário com custos do sistema BIGCC baixos (Caso 4).	86
Figura 23 – Distribuição de razões benefício/custo em cenário com custos do processo de digestão anaeróbia altos (Caso 5).	87
Figura 24 – Distribuição de razões benefício/custo em cenário de longo prazo (Caso 6).	88
Figura 25 – Distribuição de razões benefício/custo em cenário de longo prazo e condições econômicas favoráveis (Caso 7).	88

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Valores do <i>Chemical Engineering Plant Cost Index</i> entre 1990 e 2015.	36
Tabela 2 – Custos de investimento para diferentes setores de biorrefinaria 1G2G com capacidade para 4 Mt _c /ano.	39
Tabela 3 – Custos de investimento em plantas de cogeração.	40
Tabela 4 – Hipóteses para uso da palha.	40
Tabela 5 – Custo de capital (em dólares de 2001) de unidades de gaseificação.	42
Tabela 6 – Custo aproximado de BIGCC (em dólares de 1992) com gaseificador atmosférico produzindo 10 MW.	42
Tabela 7 – Custos de equipamentos para BIGCC com valores em dólares de 2001.	43
Tabela 8 – Custos de equipamentos para produção de etanol de segunda geração com valores em euros de 2003.	44
Tabela 9 – Custos de equipamentos para produção de etanol de segunda geração com valores em dólares de 2010.	45
Tabela 10 – Custos de capital de biorrefinaria de etanol de segunda geração em dólares de 2008.	45
Tabela 11 – Custos de equipamentos para biodigestão de vinhaça em uma fase e duas fases com valores dados em dólares de 2015.	46
Tabela 12 – Custos de equipamentos para BIGCC com valores em dólares atualizados para 2015 e localizados para o Brasil.	68
Tabela 13 – Custos de equipamentos para pré-tratamento e hidrólise atualizados para 2015 e localizados para o Brasil.	69
Tabela 14 – Correlações para estimativa de custos de operação	70
Tabela 15 – Custos de matérias primas e de utilidades (sinal negativo) e preços de venda de produtos (sinal positivo) com valores em dólares de 2015.	72
Tabela 16 – Escalas, receitas brutas e custos dos processos na condição ótima de operação.	80
Tabela 17 – Variação dos preços e custos de investimento em relação ao caso base em estudos de caso com parâmetros econômicos aleatórios (Parte 1).	90
Tabela 18 – Variação dos preços e custos de investimento em relação ao caso base em estudos de caso com parâmetros econômicos aleatórios (Parte 2).	90

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

1G	Etanol de primeira geração (fermentação da sacarose)
2G	Etanol de segunda geração (celulósico)
BIGCC	<i>Biomass Integrated Gasification Combined Cycle</i> Ciclo combinado integrado a gaseificação de biomassa
CEPCI	<i>Chemical Engineering Process Cost Index</i> Índice de custos de processo da revista <i>Chemical Engineering</i> .
CHP	<i>Combined Heat and Power</i> Sistema de cogeração de calor e potência.
CNTP	Condições normais de temperatura e pressão, 1 atm e 25 °C.
DQO	Demanda química de oxigênio
EMSO	<i>Environment for Modelling, Simulation and Optimization</i> Ambiente de modelagem, simulação e otimização (<i>software</i>)
FBH	Fração de Bagaço Hidrolisado
MI[N]LP	<i>Mixed Integer [Non] Linear Programming</i> Programação/otimização [não] linear inteira-mista
MMC	Método de Monte Carlo.
PCI	Poder Calorífico Inferior.
PSO	<i>Particle Swarm Optimization</i> Otimização por enxame de partículas
RBC	Razão benefício/custo.
TMA	Taxa mínima de atratividade
TIR	Taxa interna de retorno
UASB	<i>Upflow Anaerobic Sludge Blanket</i> Reator anaeróbico de fluxo ascendente

VP[L] Valor presente [líquido]

Unidades e Subscritos de Unidades

EtOH etanol (kg_{EtOH} , t_{EtOH} , L_{EtOH} , m^3_{EtOH})

kg_{enz} quilograma de enzima (celulase).

t_b tonelada de biomassa.

t_{bs} tonelada de biomassa seca.

t_c tonelada de cana-de-açúcar úmida.

vap vapor (kg_{vap} , t_{vap} , L_{vap} , m^3_{vap})

vça vinhaça ($\text{kg}_{\text{vça}}$, $t_{\text{vça}}$, $L_{\text{vça}}$, $\text{m}^3_{\text{vça}}$)

Códigos de equipamentos em fluxogramas de processo

Fontes de correntes:

MSS *main stream source*; fonte de corrente material (multicomponente).

WSS *water stream source*; fonte de corrente de água ou vapor puros.

PSS *power stream source*; fonte de potência.

QSS *heat stream source*; fonte de calor.

Trocadores de calor:

Hmq *heater main-heat*; aquecedor de corrente material.

Hwq *heater water-heat*; aquecedor de corrente de água/vapor.

Cmq *cooler main-heat*; resfriador de corrente material.

Cwq *cooler water-heat*; resfriador de corrente de água.

Xmm *heat exchanger main-main*; trocador de calor entre correntes materiais

Xmw *heat exchanger main-water*; trocador de calor entre corrente material e água/-vapor.

Xww *heat exchanger water-water*; trocador de calor entre correntes de água/vapor.

Misturadores e divisores:

[m,w]SP [*main, water*] *splitter*; Divisor de correntes de matéria ou de água.

[m,w]MX [main, water] mixer; Misturador de correntes de matéria ou de água.

mwm main-water mixer; Misturador de correntes de matéria e de água.

Trocadores de pressão:

[m,w]CP [main, water] compressor; Compressor de gás ou vapor.

[m,w]TB [main, water] turbine; Turbina a gás ou a vapor.

[m,w]IV [main, water] isenthalpic valve; Válvula isentálpica para corrente de matéria ou água/vapor.

[m,w]PP [main, water] pump; Bomba de corrente material ou água.

Reatores e tratamento:

ADG Anaerobic digester; digestor anaeróbio.

BLR Boiler; Caldeira.

GAS Gasifier; Gaseificador.

HLE Hydrolysis (empiric); Reator empírico de hidrólise de biomassa.

HLS Hydrolysis (stoichiometric); Reator estequiométrico de hidrólise de biomassa.

LTS Liming tank (stoichiometric); Tanque de calagem estequiométrico.

FMS Fermenter (stoichiometric); Reator estequiométrico de fermentação alcoólica.

RTS Reactor (stoichiometric); Reator estequiométrico geral.

STX Steam explosion; pré-tratamento por explosão a vapor.

Separadores:

ABT Absorption tower; Coluna de absorção.

CFG Centrifuge; Centrífuga.

COL Distillation column; Coluna de destilação.

DCL Dry Cleaning; limpeza a seco.

DEH Dehydration column; Coluna de desidratação.

DEC Decanter; Decantador.

DRB Bagasse dryer; Secador de bagaço.

EVP Evaporator; Evaporador.

[m,w]FL [main, water] flash drum; Tambor flash para corrente material ou água.

FLT *Filter*; Filtro.

MLL *Mill*; Moenda.

SEP *Separator*; Separador geral.

SIE *Sieve*; Peneira.

WCL *Water cleaning*; limpeza com água.

Acessórios:

TNK *Tank*; Tanque.

VLV *Valve*; Válvula.

Manipulação de correntes:

DUP *Duplicator*; Duplicador de corrente material (usado na criação de ramos da superestrutura).

LISTA DE SÍMBOLOS

A	Anuidade, série de pagamentos anual constante US\$·[T^{-1}].
A_d	Anuidade considerando a depreciação US\$·[T^{-1}].
B, B_0	Escala base para estimativa de custo, dimensão variável.
c	Custo por unidade de tempo, US\$·[T^{-1}].
c_{mo}	Custos de mão de obra.
c_{mp}	Custos de matérias primas.
c_{op}	Custos de operação.
c_{tr}	Custos de tratamento de resíduos.
c_{ut}	Custos de utilidades.
C, C_0	Custo de capital, US\$.
C_{Aux}	Custo com prédios auxiliares.
C_{BM}	Custo modular de equipamento (<i>bare module cost</i>).
C_{Cont}	Reserva de capital para contingências.
C_E	Custos com engenharia.
C_{Fee}	Custo de cota da empreiteira.
C_{FIT}	Custo de frete, seguros e taxas.
C_L	Custo de mão de obra para instalação.
C_M	Custo de materiais para instalação
C_O	Custos gerais de construção.
C_{Off}	Custo com <i>off-sites</i> e centrais de utilidades.
C_P, C_P^0	Custo de equipamentos (f.o.b.)
C_{TM}	Custo total de projeto de expansão de planta industrial.
CE	Carga enzimática, [M/M].
d	Depreciação, US\$·[T^{-1}].
F	Vazão, [M/T], [N/T] ou [L^3/T] conforme contexto. Valor futuro em dinheiro, US\$.
F_{BM}	Fator de custo modular (<i>bare module cost factor</i>).
i	Taxa de juros (desconto).

I, I_0	Índice de custo de equipamento em um ano determinado.
IA	Intensidade de agitação, $[T^{-1}]$.
K	Relação entre custo e escala de base para estimativa por lei de potência.
n	Fator de escala em estimativa de custos por lei de potência.
N	Número de itens em uma lista.
N_{MO}	Número total de operadores.
N_{np}	Número de equipamentos não envolvendo material particulado e sem contar bombas e tanques.
N_p	Número de equipamentos envolvendo material particulado.
N_T	Número de turnos cobertos por número de operadores.
p	Pressão, $[ML^{-1}T^{-2}]$.
P	Valor presente em dinheiro, US\$. Probabilidade, função de distribuição de probabilidades cumulativa.
R	Receitas, US $\cdot[T^{-1}]$.
ST	Fração de sólidos totais, $[M/M]$.
t	Tributos, US $\cdot[T^{-1}]$.
T	Temperatura, $[\Theta]$.
X_i	Percentual de umidade de substância i , $[M/M]$; ou fração de conversão de uma reação em relação ao componente limitante i .
y_i	Fração molar de substância i , $[N/N]$.
$Y_{P/S}$	Coefficiente global de rendimento de substrato a produto, $[L^3/M]$.

Letras Gregas

μ	Velocidade específica de crescimento celular, $[T^{-1}]$. Média, valor central de distribuição normal.
ν	Coefficiente estequiométrico.
σ	Desvio padrão de distribuição normal.
Φ	Razão de equivalência; relação entre ar utilizado e ar estequiométrico, $[N/N]$.

1 INTRODUÇÃO

Uma usina sucroalcooleira produz cerca de 140 kg de bagaço em base seca para cada tonelada de cana-de-açúcar processada (1). O aproveitamento do bagaço da cana é interessante por se tratar de um subproduto já encontrado no interior da destilaria, sem necessidade de transporte. Parte do bagaço é usada como combustível em caldeiras, onde se gera vapor a alta pressão e eletricidade visando suprir as demandas energéticas do processo. Destilarias modernas usam caldeiras de alta pressão que permitem a geração de excedentes de eletricidade, que podem ser vendidos para a rede elétrica em leilões públicos e pode ser um produto tão valioso quanto o próprio etanol (2). Ainda assim, se produz excedentes de bagaço que podem ser aproveitados para outros fins, o que tem estimulado pesquisas visando explorar possíveis aplicações para esse subproduto (3, 4, 5).

Outra importante fonte de biomassa lignocelulósica é a palha da cana, formada principalmente por folhas e copas da planta e produzida na proporção de $0,140 t_{bs}/t_c$ (6, 7). Existem benefícios agrônômicos em se deixar parte da palha sobre o solo uma vez que esse material forma um “cobertor” que o protege da erosão, aumenta o teor de matéria orgânica no solo e previne o crescimento de ervas daninhas. Estima-se, contudo, que um terço de todo o potencial energético da cultura da cana se encontra na palha, o que a torna uma matéria prima interessante para bioeletricidade, mas ao mesmo tempo impõe custos e desafios logísticos relativos à sua coleta. O *trade-off* entre os benefícios de manter a palha no campo e os de queimá-la tem motivado pesquisas sobre a proporção ótima de palha que poderia ser recolhida do campo (6).

O aproveitamento de biomassa lignocelulósica para produção de etanol de segunda geração é uma das linhas de pesquisa mais importantes para o aproveitamento de resíduos de biomassa. O processo consiste de um pré-tratamento do bagaço ou da palha da cana visando posterior hidrólise. A celulose é composta por hexoses, que podem ser fermentadas por leveduras *Saccharomyces cerevisiae*, enquanto que a hemicelulose é composta principalmente por pentoses, cuja fermentação é mais desafiadora. A fermentação de pentoses depende de microrganismos com difícil adaptação às condições industriais, de cepas geneticamente modificadas de *S. cerevisiae* ou da isomerização de xilose a xilulose (8).

A opção pela hidrólise da biomassa não exclui a tecnologia convencional de cogeração de energia e calor por ciclo Rankine, necessária para manter a unidade de produção autossuficiente energeticamente. Inclusive, a lignina removida durante o pré-tratamento e celulose não hidrolisada podem ser usadas como combustível nas caldeiras (2).

A gaseificação é um processo alternativo à combustão direta de biomassa que consiste na sua conversão termoquímica em gás de síntese (*syngas*, na abreviação em língua inglesa), uma mistura contendo principalmente hidrogênio e monóxido de carbono e com aplicações como reagente em diversas reações de importância para a indústria química ou como um combustível com poder calorífico superior ao da biomassa. Modelos termodinâmicos mostram que a queima do gás de síntese tem potencial de geração de eletricidade até sete vezes maior do que os ciclos combinados a baixa pressão usados em destilarias de etanol menos modernas. No entanto, a

tecnologia envolvida nesse ciclo de potência ainda enfrenta dificuldades como altos custos de operação e purificação do gás, além de aumentar a demanda de vapor do processo (9).

A vinhaça também é um subproduto de grande importância, produzida na proporção de dez a quinze litros para cada litro de etanol (10, 11). Sua principal aplicação está na fertirrigação devido ao seu alto conteúdo em matéria orgânica e nutrientes, principalmente potássio, um dos principais macronutrientes requeridos pela prática agrícola. Uma das principais dificuldades com a fertirrigação é o custo com o transporte da vinhaça até o campo e, além disso, sem tratamento adequado, a aplicação de vinhaça em grandes quantidades e por longos períodos de tempo está associada a uma série de riscos ambientais, como alterações nas características físico-químicas do solo, contaminação de águas superficiais e subterrâneas e emissão de gases estufa como o monóxido de dinitrogênio, cerca de 300 vezes mais danoso do que o gás carbônico (11, 12). Os problemas decorrentes do seu uso na fertirrigação podem ser mitigados recorrendo-se à digestão anaeróbia de seus componentes orgânicos antes da aplicação ao solo, gerando-se biogás como um bônus. O biogás é uma mistura gasosa rica em metano e gás carbônico.

Segundo Moraes et al. (13) a queima do biogás em caldeiras poderia liberar cerca de 12% do bagaço de uma usina para outras aplicações, como a geração de eletricidade ou de etanol celulósico. Os autores ressaltam, no entanto, que o redirecionamento dessa porção de bagaço para hidrólise resultaria na produção de mais etanol, que por sua vez estaria associada à produção de mais vinhaça, que contribuiria para a produção de um volume ainda maior de biogás, o que no entanto seria compensado em certa medida por uma maior demanda energética pelo próprio processo. Embora tenham concluído que o uso do biogás seja menos atrativo economicamente do que a queima do bagaço em destilarias de etanol de primeira geração, no trabalho citado eles não foram capazes de tirar conclusões a respeito de potencial econômico do biogás em destilarias integradas de etanol de primeira e segunda gerações. Estudar a viabilidade da biodigestão da vinhaça em conjunto com a hidrólise, gaseificação ou combustão do bagaço e da palha da cana é um dos objetivos deste trabalho.

A aplicação de técnicas de análise econômica para avaliar investimentos alternativos é prática comum na engenharia. Uma opção interessante é combiná-las com técnicas de otimização superestrutural. Uma superestrutura consiste de um arranjo que inclui um conjunto de possíveis configurações alternativas para um processo. Através da otimização é possível se identificar qual dessas configurações melhor satisfaz um critério econômico, ambiental e/ou social previamente definido, assim como possíveis restrições impostas ao problema (14).

A otimização superestrutural frequentemente recai em problemas de programação não linear inteira mista (MINLP na sigla em inglês), isto é, problemas de otimização que envolvem variáveis inteiras, frequentemente binárias, em conjunto com variáveis contínuas. A solução desse tipo de problema depende do uso de algoritmos especializados, tais como a decomposição generalizada de Benders (15), aproximação exterior (14, 16), *branch-and-bound* não linear (17) e algoritmos não determinísticos (18).

A vantagem de se utilizar a otimização superestrutural em conjunto com a análise econômica é a possibilidade de otimizar simultaneamente tanto a fração de bagaço de cana-de-açúcar direcionada para hidrólise (e conseqüentemente a fração complementar direcionada para a geração de potência), quanto avaliar qual é a melhor alternativa para geração de energia e ainda decidir se o volume de vinhaça produzido torna a digestão anaeróbia economicamente atrativa

ou não. Vários problemas complicados que deveriam ser resolvidos isoladamente podem ser resolvidos ao mesmo tempo.

1.1 Objetivos

O objetivo geral deste trabalho foi desenvolver uma ferramenta para avaliação da viabilidade econômica de biorrefinarias de etanol e eletricidade.

O objetivo específico foi utilizar métodos de engenharia econômica e otimização superestrutural para avaliar qual seria a melhor configuração para a expansão de uma destilaria de etanol de primeira geração (1G) para uma destilaria autônoma de etanol de primeira e segunda geração (1G2G) em diferentes cenários e respondendo às seguintes questões:

1. Qual o melhor método para geração de energia, a combustão de biomassa em caldeiras de alta pressão ou um ciclo combinado com gaseificação integrada de biomassa?
2. Que frações do excedente de biomassa devem ser destinadas à produção etanol 2G e de bioeletricidade?
3. Vale a pena investir na digestão anaeróbia da vinhaça visando a produção de biogás?

2 REVISÃO DA LITERATURA

2.1 Cogeração a partir da combustão de biomassa

Tipicamente processos químicos industriais podem ser divididos em três etapas: preparação de matérias primas, transformações (bio)químicas e purificação do produto. Cada uma dessas etapas geralmente demanda energia para ser concluída, seja na forma de trabalho ou de calor. Na indústria sucroalcooleira o trabalho é necessário, por exemplo, para o transporte de cana-de-açúcar ou de cristais de açúcar em esteiras, acionamento de moendas e bombas e agitação em tanques. Trocas de calor são necessárias em evaporadores, refervedores, cristalizadores, colunas de destilação, etc.

As destilarias brasileiras são autossustentáveis, produzindo internamente toda ou quase toda a energia necessária para funcionarem graças à queima de biomassa em caldeiras (19). O bagaço, subproduto sólido do processo de moagem da cana-de-açúcar, é utilizado como combustível pela indústria sucroalcooleira. Outros potenciais biocombustíveis são a palha, recolhida do campo e, em processos de segunda geração (etanol celulósico), a lignina removida no processo de pré-tratamento da biomassa lignocelulósica e celulose não hidrolisada (20).

Normalmente, em processos de combustão consegue-se aproveitar entre 25 e 43 % da energia liberada por um combustível (i.e., seu poder calorífico inferior) para geração de trabalho na forma de energia mecânica ou elétrica através de um processo baseado no ciclo Rankine de vapor e o restante da energia é perdida como calor (21). Parte deste calor, no entanto, ainda pode ser transferido para fluidos com alta entalpia específica, como água (ou vapor de água), podendo ser reaproveitado em processos que demandem aquecimento de vasos ou correntes. Ciclos de potência que envolvem simultaneamente a produção de trabalho e aproveitamento de calor são chamados de ciclos de cogeração (22) ou CHP (*combined heat and power*).

Os sistemas de cogeração podem ser divididos em a montante (ou *topping*) e a jusante (ou *bottoming*) conforme a sequência do aproveitamento de energia. Na configuração a montante, a geração de trabalho elétrico ou mecânico ocorre anteriormente ao aproveitamento do calor no processo, enquanto que na a jusante é o calor residual do processo que é usado para gerar trabalho (21, 23).

A tecnologia usada tradicionalmente para o ciclo de cogeração de energia na indústria de açúcar e etanol se baseia na queima do bagaço da cana-de-açúcar (subproduto da moagem) em caldeiras. O calor liberado é usado para produzir vapor a pressões e temperaturas em torno de 20 bar e 300 °C. Esse vapor é usado para produzir trabalho de expansão em turbinas de contra-pressão, de onde sai saturado a 2,5 bar, suficiente para atender as demandas térmicas do processo (23).

Embora a tecnologia de cogeração com caldeiras seja capaz de garantir a autossuficiência energética do processo, a comercialização de excedentes de bioeletricidade só é possível em destilarias que empregam caldeiras de alta pressão (até 85 bar) e turbinas multiestágio mais eficientes. Esse processo permite uma produção de até 40 kWh/t_c contra 5 a 12 kWh/t_c atingidos em processos em processos com caldeiras de baixa pressão (23).

Outra alternativa tecnológica ainda mais eficiente é o ciclo de condensação e extração. No ciclo de potência tradicional a condensação do vapor de escape das turbinas ocorre após as trocas de calor no processo e antes de ser bombeado de volta para a caldeira, onde o ciclo é fechado. A desvantagem desse esquema é que a quantidade de vapor gerado pela caldeira fica limitada pelo volume de vapor que o processo é capaz de condensar. No ciclo de condensação e extração, um condensador é acoplado à exaustão da turbina, acabando com essa limitação. Além disso, parte do vapor é extraída de dentro da turbina em um ponto intermediário da expansão, permitindo ajustar a geração de vapor à demanda, tornando esse tipo de equipamento mais flexível, porém mais caro e complexo que a turbina de contra-pressão (23).

Em 2017 a capacidade instalada das unidades de geração de energia por biomassa no Brasil chegou a 14,63 GW, superior à da Usina Hidrelétrica de Itaipu e equivalente a 9 % do parque nacional de geração de eletricidade. O potencial de crescimento da participação do setor sucroalcooleiro ainda é muito grande, uma vez que somente 44 % das 378 usinas sucroalcooleiras do país comercializam excedentes de eletricidade e apenas 15 % do potencial da biomassa é aproveitado (24).

A implementação dos ciclos de potência de alta capacidade em destilarias pode ser realizada a partir do aperfeiçoamento de processos industriais já existentes (*retrofit*) ou pela construção de novas plantas (*greenfield*). No caso do *retrofit*, há limites para as modificações que podem ser introduzidas ao processo de forma viável. Embora instalações construídas “a partir do zero” possam obter maiores eficiências energéticas, é possível que a instalação de equipamentos mais modernos não seja economicamente viável (19).

2.2 Gaseificação de biomassa

A gaseificação é um processo por meio do qual matéria orgânica é parcialmente oxidada a altas temperaturas e com um suprimento limitado de oxigênio, visando a obtenção de um produto gasoso formado principalmente por monóxido de carbono, dióxido de carbono, metano e hidrogênio (25). No jargão industrial, que é o empregado neste trabalho, qualquer corrente gasosa originada de qualquer tipo de processo de gaseificação é chamada de “gás de síntese” ou *syngas*, embora definições mais rigorosas classifiquem como gás de síntese misturas gasosas contendo apenas monóxido de carbono e hidrogênio e derivadas de processos de gaseificação com oxigênio e vapor de água (26). O gás de síntese tem aplicações como biocombustível ou como reagente em diversos processos químicos, como na síntese de amônia, de metanol ou de hidrocarbonetos (processo Fischer-Tropsch).

A gaseificação é realizada em equipamentos chamados gaseificadores e se dá em três etapas: primeiramente ocorre a secagem da biomassa por aquecimento até 120 °C; em seguida há volatilização dos compostos leves até 350 °C e, finalmente, a temperaturas entre 800 °C e 900 °C ocorre a gaseificação da biomassa e as reações de reforma, que convertem metano, gás carbônico e vapor de água em monóxido de carbono e gás hidrogênio. A pirólise se distingue da gaseificação por ocorrer em meio inerte e produzir carvão, líquidos pirolíticos e gás combustível (4, 27).

Em comparação com outros resíduos agrícolas, o bagaço da cana-de-açúcar é uma fonte de biomassa atraente para produção de gás de síntese em razão de sua alta produtividade, cerca de 80 t/ha, ante 1,0 t/ha na cultura de trigo, 2,0 t/ha para o capim e 20 t/ha para árvores (3).

O bagaço já é amplamente utilizado em destilarias de etanol como combustível primário em caldeiras que alimentam turbinas a vapor. Se convertido a gás de síntese, que tem poder calorífico mais elevado, poderia também ser utilizado em turbinas a gás estacionárias, além de poder ser transformado em uma mistura de hidrocarbonetos combustíveis líquidos, como óleo diesel, por meio do processo Fischer-Tropsch (28, 29).

Existem, no entanto, grandes dificuldades técnicas que dificultam a aplicação em larga escala da gaseificação de biomassa em biorrefinarias. A principal delas está associada à limpeza do gás de síntese produzido no gaseificador. Impurezas como cinzas, compostos de enxofre, de cloro e de nitrogênio são liberadas na fase gasosa e a gaseificação incompleta produz alcatrão e carvão particulado (26). Esses materiais interferem negativamente no funcionamento dos equipamentos a jusante e precisam ser eliminados. Embora existam tecnologias maduras para a purificação de gás de síntese a alta temperatura, os custos adicionados ao processo podem tornar a gaseificação pouco atraente em comparação a outras alternativas para o aproveitamento do bagaço. Trabalhos recentes, todavia, relatam que os problemas tecnológicos relacionados à aplicação do gás de síntese derivado de biomassa estão superados e resolvidos (30).

A literatura científica oferece tanto modelos dinâmicos quanto estacionários para a simulação computacional de gaseificadores. Entre os estacionários, pode-se citar modelos de conversão estequiométrica e modelos de equilíbrio não estequiométricos. Os primeiros requerem conhecimento do mecanismo de reação, enquanto os últimos se baseiam na minimização da energia livre de Gibbs do sistema sem necessidade de especificar todas as reações (31).

As principais opções para geração de eletricidade a partir do gás de síntese são motores de combustão interna e turbinas a gás, sendo esta última opção a preferível para grandes volumes (32). O sistema de integração entre o processo de gaseificação de biomassa e as turbinas a gás é conhecido na literatura pelo acrônimo BIG-GT (*Biomass Integrated Gasification Gas Turbine*) e conta com algumas variações (23):

- BIG-STIG (*Biomass Integrated Gasification - Steam Injected Gas Turbine*): com injeção direta de vapor na turbina a gás;
- BIG-ISTIG (*Biomass Integrated Gasification - Intercooled Steam Injected Gas Turbine*): injeção direta de vapor com resfriamento de ar entre compressores;
- BIG-GTCC (*Biomass Integrated Gasification - Gas Turbine Cobined Cycle*): ciclo combinado que integra turbinas a gás, recuperadores de calor e turbinas a vapor.

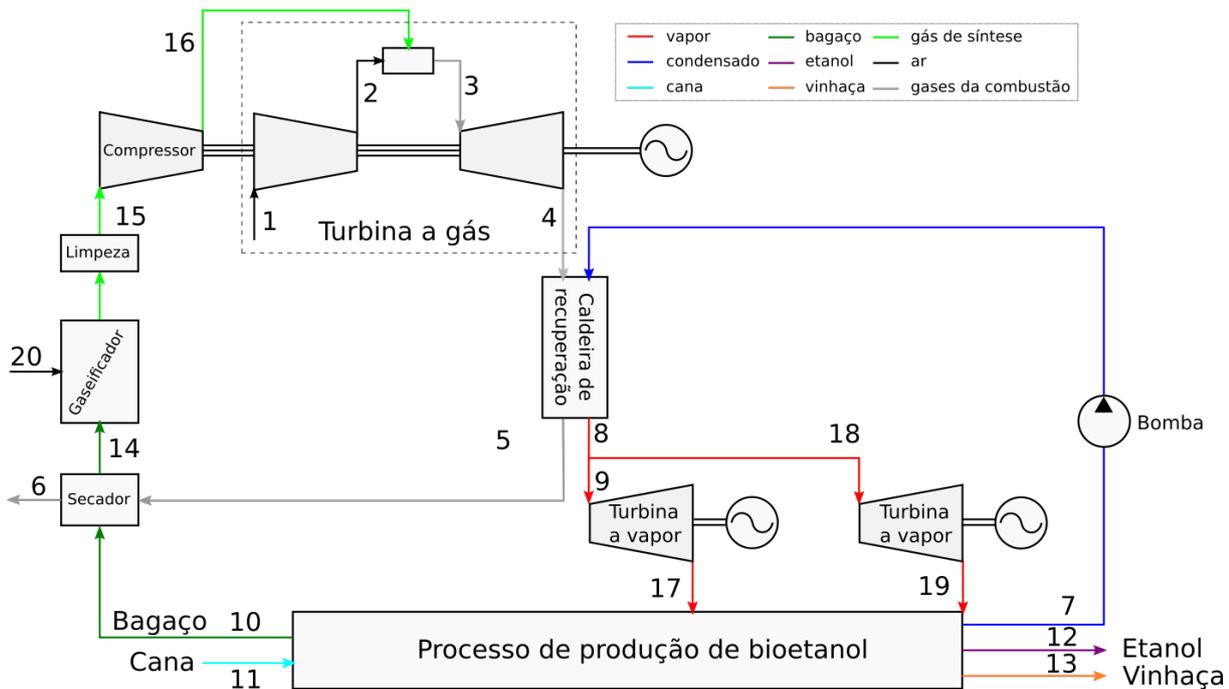
A injeção de água ou vapor na turbina a gás aumenta a potência gerada e diminui as emissões de óxidos de nitrogênio. Contudo esses sistemas carecem de um ciclo de condensação que possibilite o reaproveitamento da água, aumentando consideravelmente o consumo de recursos hídricos pelo processo, que já é muito intensivo na atividade sucroalcooleira (23).

O sistema BIG-GTCC, também conhecido simplesmente como BIGCC, é uma opção mais interessante para biorrefinarias. Nesse sistema, após ser devidamente purificado, o gás de síntese é queimado em uma câmara de combustão e seus fumos alimentam uma turbina a gás. Mesmo após expansão, esses gases ainda têm energia suficiente para alimentar caldeiras de recuperação onde se gera vapor a alta pressão capaz de mover turbinas de condensação.

O sistema BIGCC tem alta eficiência de conversão de energia, podendo atingir eficiências globais em torno de 55 a 60 %, e é usado em plantas com capacidade para gerar potências acima de 100 MW de eletricidade. Todavia, seu alto custo é um problema (32, 23).

O sistema, mostrado na Figura 1, consiste de um secador, um gaseificador, uma turbina a gás, uma caldeira de recuperação e duas turbinas a vapor para suprir as demandas de vapor do processo em dois níveis diferentes de pressão (33).

Figura 1 – Diagrama de blocos do sistema de cogeração BIGCC



Fonte: Adaptada de Dias et al. (33).

Nogueira (2000 apud Dantas(35), 2013) cita ainda outra opção para geração de eletricidade via gaseificação de biomassa: ciclos de ar quente, que consistem na queima do gás de síntese para aquecimento de ar em um trocador de calor. O ar quente move a turbina a gás, o que dispensa a necessidade de limpeza do gás de síntese, que é uma das principais dificuldades técnicas com o sistema BIGCC. Ainda assim, o autor reconhece que o sistema BIGCC é o mais promissor e aquele para o qual tem sido realizados os maiores esforços em pesquisa e desenvolvimento.

2.3 Etanol de segunda geração

Denomina-se etanol de segunda geração (2G) ao bioetanol produzido a partir de resíduos lignocelulósicos tais como a palha e o bagaço da cana-de-açúcar ou de outras culturas agrícolas, a serragem, o papel, macroalgas, etc. Materiais lignocelulósicos são formados por três componentes (1):

1. Celulose: polissacarídeo linear de hexoses com estrutura cristalina. É um componente estrutural da parede celular de vegetais com alta resistência mecânica, pouco solúvel e resistente à hidrólise.

2. Hemicelulose: heteropolímero formado principalmente por pentoses, com cadeias mais curtas que a celulose e estrutura amorfa. Facilmente diluído em ácidos, bases ou soluções com enzimas.
3. Lignina: polímero amorfo de álcoois aromáticos com função estrutural nos tecidos de plantas vasculares e associado à hemicelulose por ligações covalentes.

A hidrólise é importante para a despolimerização da celulose e da hemicelulose, processo que as converte em açúcares fermentáveis. O ataque de agentes hidrolíticos, no entanto, é comprometido pelo arranjo cristalino da celulose e pela presença da lignina. Assim sendo, a hidrólise requer uma etapa anterior de pré-tratamento para que a celulose e a hemicelulose sejam separadas da lignina e a hemicelulose solubilizada (1, 4).

O pré-tratamento, idealmente, deve satisfazer a certos requisitos, como baixo custo, baixa demanda energética, baixa formação de subprodutos da degradação inibitórios da hidrólise ou da fermentação, possibilidade de utilização de biomassa sem prévia redução do tamanho das partículas, alta digestibilidade da celulose e alta recuperação dos carboidratos (5, 36). Uma grande variedade de formas de pré-tratamento é descrita na literatura, com diferentes vantagens e desvantagens no atendimento de cada um dos requisitos supracitados. Esses pré-tratamentos podem ser divididos em três categorias: físicos, químicos e biológicos, sendo que alguns contêm elementos de mais que uma categoria.

Os pré-tratamentos químicos se baseiam na adição de substâncias que promovam a remoção da hemicelulose ou da lignina durante o tratamento e preferencialmente elevem o rendimento da recuperação de glicose. Comumente esses pré-tratamentos são realizados com ácidos, bases ou solventes orgânicos; pode-se citar como exemplos o hidrotérmico e a ozonólise. O tratamento biológico faz uso de microrganismos para degradar a lignina e a hemicelulose e liberar celulose amorfa (36). Por fim, processos físicos se baseiam na alteração da estrutura física da partícula sólida visando aumentar sua área superficial e facilitar os fenômenos de transferência de massa envolvidos na digestão da celulose cristalina. Exemplos de pré-tratamentos físicos incluem a cominuição e explosão a vapor, considerada atualmente um dos pré-tratamentos mais viáveis (37).

A eficiência da hidrólise da celulose é fortemente influenciada pelo tipo de pré-tratamento empregado e ela pode ser realizada utilizando-se enzimas ou ácidos. A hidrólise ácida tem como inconvenientes a operação a altas temperaturas, necessária para degradar a camada protetora de lignina. Além disso, pode causar degradação da glicose a hidroximetilfurfural e outros produtos indesejáveis que afetam o rendimento da fermentação (38). A hidrólise enzimática tem se mostrado uma abordagem mais promissora, embora o processo seja comparativamente mais lento e as celulasas tenham custo relativamente elevado (39).

Mesmo com as técnicas mais avançadas de pré-tratamento e hidrólise, a conversão de celulose e hemicelulose em açúcares simples é baixa. Resíduos sólidos formados principalmente por lignina removida no pré-tratamento e celulose não reagida podem ser alimentados a uma unidade de cogeração com o objetivo de produzir vapor e eletricidade para o processo (40).

Outro tópico de importância envolvendo a produção de etanol de segunda geração é o potencial de fermentação das pentoses obtidas da hidrólise da hemicelulose. Há microrganismos conhecidos com capacidade para fermentar pentoses, como *Pichia stipitis*, *Pachysolen tannophilus* e *Candida*

shehatae, todavia são pouco adaptáveis ao ambiente industrial, que exige alta produtividade, tolerância ao etanol e a uma faixa relativamente ampla de pH e temperatura. Um destino alternativo para as pentoses produzidas durante a hidrólise é o descarte juntamente com a vinhaça a ser tratada por digestão anaeróbia visando a produção de biogás (5, 41).

2.4 Digestão anaeróbia de vinhaça

A vinhaça é um líquido obtido como subproduto da destilação do etanol. Tem coloração marrom escura e odor desagradável, pH ácido (3,5 a 5,0) e alta demanda química de oxigênio (50 a 150 g/L) (11).

A carga orgânica da vinhaça *in natura* produzida por uma destilaria de etanol típica, autônoma ou anexa, é comparável à DQO de todo o esgoto doméstico de uma cidade com 2,7 milhões de habitantes, como Salvador-BA (42).

A matéria orgânica contida nesse efluente, no entanto, tem um grande potencial energético, atualmente desperdiçado. Com a digestão anaeróbica de um metro cúbico de vinhaça é possível gerar cerca de 14 m³ (CNTP) de metano (42) e estima-se que, investindo nessa tecnologia, uma única destilaria poderia gerar potência suficiente para abastecer uma cidade de cem mil habitantes (13). Sendo a eletricidade um produto importante nas biorrefinarias modernas, é válido investigar se a biodigestão da vinhaça poderia viabilizar ou até mesmo estimular a produção de etanol de segunda geração, que ao aumentar a produção de etanol contribui também com um aumento na produção de vinhaça.

A digestão anaeróbia ou biodigestão é a forma mais adequada de metanização da biomassa e se baseia na retenção de matéria orgânica biodegradável em um lodo contendo bactérias imobilizadas que o convertem em uma mistura gasosa de metano e dióxido de carbono conhecida como biogás. Os biodigestores mais comuns são os reatores anaeróbios de fluxo ascendente (ou reatores UASB – *Upflow Anaerobic Sludge Blanket*), uma torre que dispõe de um sistema de separação gás-sólido para isolar o produto gasoso do sedimento bacteriano; e os reatores de biofilme estacionário, que contêm uma película bacteriana fixada sobre um meio de suporte estrutural através do qual o efluente a ser tratado é distribuído (43).

A digestão anaeróbia é um processo metabólico que ocorre em quatro fases e depende da atividade de ao menos três grupos de microrganismos: as bactérias fermentativas (hidrolíticas e acidogênicas), bactérias acetogênicas (sintrópicas) e arqueias metanogênicas. A hidrólise é o primeiro estágio do processo e resulta na degradação de matéria orgânica complexa (carboidratos, lipídios e proteínas) em substâncias mais simples. A acidogênese é a etapa seguinte, onde ocorre degradação desses substratos intermediários em ácidos orgânicos, álcoois e cetonas. A acetogênese é uma reação não espontânea que, no entanto, ocorre naturalmente devido à interação com a metanogênese. Esta última etapa depende fortemente da disponibilidade do acetato formado pelas bactérias acetogênicas, a partir do qual 70 % do metano é formado (44).

Alguns modelos matemáticos simplificados e amplamente utilizados em aplicações de controle, otimização e análise matemática, contudo, consideram apenas duas reações, acidogênese e metanogênese, representadas pelas Equações (2.1) e (2.2). A hidrólise é tratada como parte

integrante da acidogênese e acetogênese como parte da metanogênese (45, 46).



Onde S_1 representa a concentração de substratos orgânicos, caracterizada por sua demanda química de oxigênio (g/L), S_2 representa a concentração total de ácidos carboxílicos voláteis e X_1 e X_2 são as populações de bactérias acidogênica e acetogênica/metanogênica respectivamente. Os parâmetros μ_i representam as taxas específicas de crescimento de cada população de células (46).

Uma consequência da cooperação de diferentes espécies de microrganismos para a conversão de matéria orgânica em biogás é que as condições ideais para cada microrganismo podem ser diferentes. Existem duas faixas de temperatura ótimas para se alcançar altas taxas de reação, a temperatura mesofílica e a termofílica ($\approx 30^\circ\text{C}$ e 50°C , respectivamente) (47). O potencial hidrogeniônico do meio também é de grande importância para o processo. A faixa ótima para o sistema fica entre 6,5 e 8,2 e deve ser controlada, uma vez que formam-se ácidos orgânicos como compostos intermediários do processo e a degradação de proteínas gera amônia e sais de ácidos orgânicos fracos. A adição de compostos alcalinos ao biodigestor aumenta sua capacidade tamponante (44).

O tratamento de águas residuárias com alta carga orgânica (*high strength wastewaters*) é mais eficiente quando realizado em duas fases, com hidrólise/acidogênese e acetogênese/metanogênese ocorrendo em reatores separados, cada um com as condições mais apropriadas para as populações bacterianas pertinentes (48), no entanto a necessidade de equipamentos adicionais eleva seus custos de investimento e manutenção, o que torna questionável seu custo-benefício sobre processos em um único reator (49).

Além da separação entre as diferentes etapas da biorreação, pode ocorrer também uma separação parcial entre as fases sólida e líquida das águas residuárias, com o primeiro estágio contendo alta carga sólida e o segundo estágio com baixa carga (configuração “seca-úmida”). Processos com baixa carga sólida em ambos os estágios (“úmida-úmida”) também são possíveis (50). A separação entre as fases permite conciliar tempos de retenção longos para os poluentes sólidos, o que favorece o rendimento da hidrólise; a tempos de retenção hidráulica curtos, o que aumenta a produtividade da metanogênese. O fato de a metanogênese ocorrer separada da acidogênese também reduz a necessidade de alcalinização do meio, reduzindo custos com insumos (51).

O biogás, produto gasoso da digestão anaeróbia, possui alto poder calorífico e pode ser queimado juntamente com o bagaço em caldeiras visando a cogeração ou juntamente com o gás de síntese na câmara de combustão de um ciclo combinado integrado à gaseificação de biomassa. Cerca de 12% do bagaço utilizado para suprir as demandas energéticas de uma biorrefinaria com capacidade para processar 2×10^6 t_c/safra poderiam ser liberados e aproveitados para outros fins se essa instalação produzir e queimar biogás (13).

2.5 Análise técnico-econômica

Uma das etapas mais importantes do projeto de instalações industriais é a análise econômica do processo. É durante esse estágio que se avalia a pertinência ou não de se criar, modificar ou expandir uma planta. Dois elementos fundamentais para fomentar a tomada de decisão são a estimativa de custos (Seção 2.5.1) e a adoção de um critério para avaliar os méritos relativos de diferentes alternativas de investimento (Seção 2.5.7).

2.5.1 Estimativa de custos

Estimativas de custos são técnicas para predizer de forma aproximada os custos associados à implementação de um projeto industrial. São uma parte essencial de qualquer avaliação de viabilidade econômica e devem ser realizadas ao longo de todas as etapas do projeto, desde os estudos preliminares que visam sondar a possibilidade de concepção, ampliação ou atualização de um processo industrial até a finalização do projeto.

Os custos de um processo podem ser divididos em duas categorias principais: custos de investimento (ou de capital) e custos de operação (ou de produção). Os custos de investimento estão relacionados ao capital total necessário para iniciar o projeto, incluindo compra e montagem de equipamentos, instrumentação, construção de edificações e serviços de utilidades, os custos de engenharia associados ao projeto, entre outras despesas. Os custos de operação são os custos permanentes associados à atividade produtiva, como compra de matérias-primas, gastos com energia, mão de obra, tratamento de resíduos, depreciação, impostos, entre outros (52, 53, 54, 55).

A qualidade da aproximação obtida de uma estimativa de custos depende da quantidade de informação disponível, que cresce conforme o projeto de engenharia é desenvolvido. Pode-se identificar cinco categorias de estimativas de custos relacionadas a diferentes estágios da evolução de um projeto. Essas categorias estão listadas a seguir, ordenadas do nível mais baixo para o nível mais alto de precisão da estimativa e de esforço despendido.

1. **Estimativas de ordem de grandeza**, também conhecidas como estimativas de proporção (em inglês *ratio estimate*) ou de factibilidade. Costuma se basear em dados de instalações já construídas. Utilizam-se fatores de escala e correções pela inflação para compensar as diferenças entre projetos antigos e novos. Tem como finalidade avaliar rapidamente se um projeto é factível (52, 53).
2. **Estimativa de estudo**, ou estimativa fatorada (em inglês, *factored estimate*). Baseia-se em informações sobre os equipamentos principais do processo (*e.g.* trocadores de calor, reatores, colunas de destilação, etc.). Os equipamentos são dimensionados de forma preliminar e a partir daí seus custos individuais são calculados. O custo de capital total é estimado como uma função do custo dos equipamentos. Tem como finalidade avaliar a factibilidade ou fazer um estudo conceitual de um projeto (52, 53).
3. **Projeto preliminar** ou estimativa de escopo. Requer dimensionamento mais detalhado dos equipamentos e um dimensionamento preliminar das tubulações, necessidades de instrumentação, eletrificação e de utilidades. Sua finalidade é reservar um orçamento preliminar para o prosseguimento do projeto, caso aprovado (52, 53).

4. **Estimativa definitiva** ou de controle do projeto. Requer a especificação de todos os equipamentos, utilidades, instrumentação, rede elétrica e unidades *off-site*. Acompanha a preparação do fluxograma de processo final e diagrama de tubulação e instrumentação (P&ID) preliminar, definição da localização, diagramas de elevação e balanços de utilidades. Tem como finalidade avaliar as ofertas de empreiteiras interessadas em executar a construção do projeto (52, 53).
5. **Estimativa detalhada** ou estimativa de empreiteira. Requer engenharia completa do processo e do sítio de construção e cotações de todos os itens. Após esse estágio de estimativa, a instalação está pronta para o estágio de construção (52, 53).

Segundo Turton et al. (53), estimativas de estudo e/ou de ordem de magnitude são utilizadas tipicamente como uma primeira triagem para analisar múltiplas alternativas diferentes para um processo. As estimativas preliminares e definitivas são realizadas para os processos mais promissores identificados na fase anterior e finalmente a estimativa detalhada é realizada após a escolha da alternativa superior e quando é tomada uma decisão final a favor da construção da planta.

2.5.1.1 Fatores de escala, tempo e localização

Os custos de investimento e operação de um processo têm relação direta com a sua escala. A realização da estimativa de custos simultaneamente a uma otimização torna esse fato ainda mais evidente, uma vez que diferentes subprocessos podem concorrer pelos mesmos recursos, o que torna necessário relacionar matematicamente o custo de capital de um equipamento ou subprocesso a alguma grandeza extensiva que o caracterize. É muito comum se utilizar fórmulas como

$$\frac{C}{C_0} = \left(\frac{B}{B_0} \right)^n \quad (2.3)$$

$$C = KB^n \quad (2.4)$$

Onde C_0 é o custo de compra conhecido do equipamento em uma base B_0 , uma grandeza extensiva. C é o custo de compra desconhecido do equipamento quando o valor da grandeza de referência é diferente do valor-base. $K = \frac{C_0}{B_0^n}$ é um parâmetro utilizado para escrever a Equação (2.3) de forma mais compacta. O expoente n é conhecido como fator de escala, um valor característico do equipamento ou subprocesso, geralmente tabelado e tipicamente próximo a 0,6, valor que costuma ser utilizado como primeira aproximação quando um fator de escala mais exato é desconhecido; o uso desse valor de aproximação é conhecido como regra dos seis décimos (53). Valores de n para equipamentos comuns em processos químicos podem ser encontrados em *Perry's Chemical Engineers' Handbook*, (56).

Assim como diferenças de escala, outro fator que dificulta estimativas de custos é o tempo decorrido entre o momento em que foi avaliado o custo de um investimento no passado e o presente. Inflação e inovações tecnológicas podem alterar significativamente o custo de um equipamento em alguns anos. Geralmente compare-se os custos de equipamentos no tempo pela expressão

$$C = C_0 \left(\frac{I}{I_0} \right) \quad (2.5)$$

onde C_0 é o custo do equipamento no ano base e C é uma aproximação do custo atualizado. I_0 e I são índices de custos, valores tabelados usados para estimar a variação média anual no preço de equipamentos usados na indústria química. Há diferentes índices de custos comumente utilizados.

O índice publicado pela revista *Chemical Engineering*, conhecido como CEPCI (*Chemical Engineering Plant Cost Index*), toma como base o ano de 1957 e define como 100 o índice deste ano. O acesso a índices recentes é difícil para não assinantes, mas eles podem ser encontrados em livros e artigos publicados. Os valores entre 1990 e agosto 2010 estão disponíveis em Dutta et al. (57). A edição de Junho de 2016 de *Chemical Engineering* (58) foi consultada e contém os dados de 2008 a 2015, além do valor final do índice para fevereiro de 2016, de 533,9. A Tabela 1 traz os valores do CEPCI entre o final de 1990 e o de 2015.

Tabela 1 – Valores do *Chemical Engineering Plant Cost Index* entre 1990 e 2015.

Ano	Índice	Ano	Índice	Ano	Índice
1990	357,6	1999	390,6	2008	575,4
1991	361,3	2000	394,1	2009	521,9
1992	358,2	2001	394,3	2010	550,8
1993	359,2	2002	395,6	2011	585,7
1994	368,1	2003	402,0	2012	584,6
1995	381,1	2004	444,2	2013	567,3
1996	381,7	2005	468,2	2014	576,1
1997	386,5	2006	499,6	2015	556,1
1998	387,5	2007	525,4		

Fonte: Adaptada de Dutta et al. (57) e *Chemical Engineering* (58).

Além do tempo, outro fator importante que afeta os custos de capital é o espaço. O preço de instalação de uma planta varia de país para país devido a diferenças logísticas, tributárias, etc. Essas diferenças podem ser aproximadas usando-se fatores de localização do investimento. Um fator de nacionalização comumente utilizado é produzido pela consultoria Intratec, que informa fatores multiplicadores para estimar o quanto os custos variam entre os Estados Unidos da América (cujo fator de nacionalização é definido como 1,00) e outros países.

2.5.2 Custos de capital

Os custos dos principais equipamentos em um processo são apenas uma fração do custo de capital total para a concepção ou expansão de uma planta química. Turton et al. (53) listam os seguintes fatores associados aos custos de capital de plantas

1. Custos diretos

- a) Equipamentos (f.o.b.), C_P ;
- b) Materiais para instalação C_M – inclui tubulações, instrumentação, suportes estruturais, etc.;
- c) mão de obra para instalação, C_L ;

2. Custos indiretos

- a) Frete, seguros e taxas, C_{FIT} ;
- b) Despesas gerais com construção, C_O – inclui salários e benefícios trabalhistas;
- c) Despesas com engenharia de empreiteira, C_E – inclui salários e benefícios de engenheiros e custos com projeto;

3. Contingências e cotas

- a) Contingência, C_{Cont} – reserva de capital para cobrir circunstâncias imprevistas;
- b) Cota da empreiteira, C_{Fee} – lucro da empresa contratada para realizar a obra.

4. Instalações auxiliares

- a) Prédios auxiliares, C_{Aux} – prédios de administração, oficinas, salas de controle, armazéns, serviços, etc.;
- b) *Off-sites* e utilidades, C_{Off} – instalações para recepção e armazenagem de matérias-primas, armazenagem de produtos, tratamento de resíduos, suprimento de utilidades, etc.

Peters e Timmerhaus (52) consideram os custos com instalações auxiliares como parte dos investimentos diretos e contingências e taxas como parte dos custos indiretos.

Independentemente da convenção utilizada, o custo de capital total com a execução de um projeto de engenharia é calculado como a somatória de todos esses custos. Infelizmente, a precificação acurada do investimento depende de uma grande quantidade de informações. Para os estágios preliminares do projeto é comum se utilizar uma estratégia modular que relaciona todos os custos de capital aos custos dos equipamentos principais em uma condição básica de operação.

O custo modular de um equipamento, C_{BM} (em inglês, *bare module equipment cost*) é o produto entre o custo de compra C_P^0 básico e um fator de custo modular $F_{BM} > 1$, que engloba os custos diretos, indiretos, contingências e cotas, mas não os custos com instalações auxiliares (53).

$$C_{BM} = F_{BM}C_P^0 \quad (2.6)$$

O sobrescrito 0 indica custo calculado para o material de construção mais comum para o equipamento (geralmente aço carbono) e operação à pressão atmosférica ou próxima à atmosférica. Correções quando esse não é o caso são incorporadas como correções ao valor de F_{BM} . Turton et al. (53) tem tabelas com correlações para o cálculo de C_P^0 e F_{BM} para capacidades variáveis de equipamentos comuns na indústria química e com as correções apropriadas quando o equipamento é utilizado a pressões diferentes da atmosférica e quando o material de construção é incomum.

2.5.3 Custos de operação

A estimativa de custos de operação, assim como a de capital, depende da qualidade dos dados disponíveis para ter boa exatidão. Infelizmente, o acesso a dados econômicos detalhados é limitado fora do âmbito industrial, onde há amplo acesso a planilhas econômicas de projetos passados.

Os custos de operação em processos químicos podem ser classificados como (53):

1. Custos diretos: diretamente proporcionais à taxa de produção.
2. Custos fixos: independentes da taxa de produção.
3. Custos gerais: relacionados a despesas administrativas e gerenciais.

Os custos de operação totais do processo correspondem à somatória de todos os custos associados a cada uma das categorias enumeradas. Na falta de dados contábeis detalhados, é possível fazer estimativas tomando como referência algumas correlações típicas entre um conjunto de custos conhecidos e os demais, desconhecidos. Os custos geralmente considerados conhecidos são os custos das matérias primas, das utilidades, do tratamento de resíduos, da mão de obra e o investimento de capital, que é estimado conforme descrito na Seção 2.5.2.

A título de exemplo, segundo Turton et al. (53) o custo com manutenção em uma planta química costuma estar na faixa entre 2 e 10% do custo de capital investido. Na falta de informações concretas, os autores sugerem que se utilize o valor médio de 6% do custo de capital. Naturalmente há grande incerteza em torno dessa escolha, de forma que as recomendações de outros autores podem ser diferentes. Perlingeiro (55), por exemplo, propõe estimar os custos com reparos como 4% do custo de capital investido em vez de 6%. Milanez et al. (7) usaram ainda o percentual de 3% especificamente para a modelagem econômica de uma biorrefinaria de etanol celulósico.

2.5.4 Depreciação

A depreciação representa o custo causado pela deterioração e obsolescência progressiva dos equipamentos adquiridos para o processo. Equipamentos novos perdem valor de revenda a cada ano de uso e esse custo pode ser deduzido dos impostos que incidem sobre a atividade industrial. Como a perda anual de valor de um objeto é um parâmetro de difícil mensuração, não existe um único método para computá-lo, mas sim um conjunto de métodos. No contexto dos custos operacionais de um processo, a depreciação é um artifício contábil que concede aos investidores uma redução tributária que lhes permita planejar a substituição dos equipamentos ao fim de sua vida útil. Existem regras para o cômputo da depreciação definidas pela autoridade fiscal do Estado, tanto relativas ao método de cálculo quanto ao tempo de substituição do objeto (54).

2.5.5 Fluxo de caixa

Chama-se de fluxo de caixa (A) ao balanço financeiro anual de um projeto. O fluxo de caixa pode ser computado conforme a Equação (2.7) para os anos em que a depreciação fiscal pode ser computada e segundo a Equação (2.8) para os demais anos.

$$A_d = (R - c_{op} - d) \cdot (1 - t) + d \quad (2.7)$$

$$A = (R - c_{op}) \cdot (1 - t) \quad (2.8)$$

R são as receitas das vendas; c_{op} são os custos operacionais, calculados conforme a Equação (3.21); d é a depreciação; e t são os tributos. Observe que o fluxo de caixa depreciado é

maior que o não depreciado, uma vez que $A_d - A = dt > 0$, o que evidencia a vantagem contábil adquirida com o cálculo da depreciação.

2.5.6 Custos das alternativas de investimento

A quantidade de informações disponível é determinante para a escolha de um método para estimativa de custos. Nesta subseção estão compiladas as informações encontradas na literatura sobre os custos relacionados aos processos alternativos a serem examinados neste trabalho. Embora exista uma grande quantidade de artigos contendo análises técnico-econômicas de diferentes alternativas de aproveitamento de biomassa lignocelulósica, apenas aqueles que equacionam explicitamente os custos de capital de equipamentos às suas escalas de capacidade ou de processamento são de interesse para este trabalho. Muitos trabalhos mais recentes fazem cotações diretas com fornecedores ou usam simuladores de processo comerciais que já contêm bibliotecas para estimativas de custos. Turton et al. (53) oferecem dados de estimativas de custos usados em algumas dessas bibliotecas e foi uma fonte valiosa para estimar os custos de muitos equipamentos comuns usados na indústria química cujos custos de capital não foram encontrados na literatura.

O trabalho de Junqueira et al. (59) é um exemplo de artigo recente que não informa fatores de escala que possam ser utilizados em uma análise de custos independente, no entanto trata-se de um trabalho recente que faz uma análise técnico-econômica de biorrefinarias 1G2G com capacidade para moagem de 4 milhões de toneladas de cana por ano. Os custos estimados nesse trabalho, considerando-se tecnologias que os autores classificaram como acessíveis no curto prazo, são mostrados na Tabela 2 (o custo da biodigestão foi aferido segundo o cenário de médio prazo porque não foi feita nenhuma cotação considerando tecnologias de curto prazo). A produção anual de etanol prevista pelo trabalho seria de $433,9 \times 10^3 \text{ m}^3/\text{ano}$ e a de excedente de energia de 274 GWh/ano no curto prazo.

Tabela 2 – Custos de investimento para diferentes setores de biorrefinaria 1G2G com capacidade para 4 Mt_c/ano.

Unidade	Custo/(1×10^6 US\$)
Ciclo Rankine de cogeração	116,4
Produção e aproveitamento do biogás	18,0
Pré-tratamento e separação de licor de pentoses	106,5
Hidrólise enzimática e separação de licor de hexoses	62,7
Total 2G (sem fermentação de pentoses)	169,2

Fonte: Junqueira et al. (59)

2.5.6.1 Custos do ciclo Rankine de cogeração

A Tabela 3 mostra os custos de investimento de plantas de cogeração em função da escala de moagem e foi compilada por Dantas (35) a partir de dados não publicados da Dedini S/A Indústrias de Base de 2010. As plantas em questão funcionam apenas no período da safra (200 dias por ano), utilizam caldeiras de 100 bar e 530 °C, vapor a 2,5 bar, consumo de 400 kg de vapor por tonelada de cana. O bagaço é extraído por moagem e não se considera a utilização de palha.

O custo de investimento total é obtido multiplicando-se o custo de investimento por watt pela potência instalada também em watts. A escala de 3,0 Mt/ano de cana moída também foi usada como caso base para avaliar os custos de investimento em função da fração de palha utilizada na cogeração, conforme mostra a Tabela 4, também compilada a partir de dados de 2010 da empresa Dedini (35).

Tabela 3 – Custos de investimento em plantas de cogeração.

Escala de moagem/(1×10^6 t/ano)	1,0	2,0	2,5	3,0
Potência instalada/MW	28	53	65	79
Potência exportável/MW	19	36	45	54
Custo de investimento/(R\$/W)	3,234	2,646	2,526	2,385

Fonte: Dantas (35)

Tabela 4 – Hipóteses para uso da palha.

	sem palha	20 % palha	50 % palha
Potência instalada/MW	79	97	122
Potência exportável/MW	54	72	97
Custo de investimento/(R\$/W)	2,385	2,196	2,054

Fonte: Dantas (35)

Em relação aos custos operacionais, a mesma referência cita R\$ 123,00 por kW instalado de acordo com dados da Dedini de 2011 (35).

Hamelinck, Hooijdonk e Faaij (60) estimaram o preço em euros de uma caldeira de 85 bar em valores de 2003 conforme a Equação (2.9).

$$\text{Custo (caldeira)} = 27,1 \times \left(\frac{\text{Calor trocado (PCS)}}{173 \text{ MW}} \right)^{0,73} \text{ milhões de euros} \quad (2.9)$$

O fator de instalação do equipamento é de 2,20 (ver Seção 2.5.2). Os custos incluem reator de combustão com leito fluidizado, alimentadores, pré-aquecedor e tambor de vapor, mas exclui turbina a vapor, cujo preço foi estimado pela Equação (2.10).

$$\text{Custo (turbinas)} = 5,36 \times \left(\frac{\text{Potência}}{10,3 \text{ MW}} \right)^{0,7} \text{ milhões de euros} \quad (2.10)$$

com fator de instalação 1,86.

Humbird et al. (61) publicaram relatório técnico do *National Renewable Energy Laboratory* (NREL, vinculado ao *United States Department of Energy*) sobre a produção de etanol de segunda geração combinada à cogeração de eletricidade e vapor. Segundo eles, as principais fontes de custo associados à cogeração são a caldeira (65 bar) e as turbinas, cujos valores em dólares de 2007 são dados respectivamente pelas Equações (2.11) e (2.12).

$$\text{Custo (caldeira)} = 28,55 \times \left(\frac{\text{Água vaporizada}}{238 \text{ 686 kg/h}} \right)^{0,6} \text{ milhões de dólares} \quad (2.11)$$

$$\text{Custo (turbinas)} = 9,5 \times \left(\frac{\text{Potência}}{42,2 \text{ MW}} \right)^{0,6} \text{ milhões de dólares} \quad (2.12)$$

Ambos têm fator de instalação igual a 1,80.

Jonker et al. (40) estimaram o custo de capital de um sistema completo de geração de calor e potência com caldeira de 22 bar pela Equação (2.13).

$$\text{Custo (sistema)} = 46,0 \times \left(\frac{\text{Calor trocado (PCS)}}{362 \text{ MW}} \right)^{0,75} \text{ milhões de dólares} \quad (2.13)$$

em valores de 2010 e com fator de instalação 1,4. Embora esse valor faça referência ao sistema de cogeração como um todo, a escala de custo básica assumida é o calor trocado na caldeira, que é o instrumento mais caro nesse subprocesso. Segundo os mesmos autores, para uma caldeira de 90 bar, o custo base seria 40 % maior.

2.5.6.2 Custos do ciclo combinado com gaseificação integrada

A gaseificação de biomassa é uma tecnologia inexplorada pela indústria sucroalcooleira, seja para geração de energia ou para conversão termoquímica do gás de síntese a etanol. É difícil, portanto, encontrar na literatura estimativas de custos de investimento e operação com alto grau de detalhe e precisão.

Dantas (35) estima os custos de investimento de uma unidade de geração de potência por turbina a gás em R\$ 4800 /kW e os de operação em R\$ 192 /kW instalados, em valores de 2010. O autor reconhece que há grande incerteza nessas cifras, o que é esperado, uma vez que estimativas lineares de custos em função da capacidade do projeto estão entre aquelas com menor grau de detalhe.

Segundo Basu (32), os custos da conversão de biomassa dependem dos seguintes fatores:

1. coleta da biomassa;
2. pré-processamento;
3. tipo de conversão (torrefação, pirólise, gaseificação ou combustão);
4. tratamento do produto (*e.g.*, limpeza do gás);
5. utilização do produto (produção de energia ou reação química).

Os custos com a coleta de biomassa estão relacionados com a logística de transporte da biomassa para o processo. Esses custos são consideráveis em comparação com o transporte de combustíveis fósseis devido à biomassa lignocelulósica ter menor densidade e poder calorífico por unidade de volume. Essas despesas, no entanto, já existem em uma biorrefinaria de cana-de-açúcar e não precisam ser contabilizados novamente.

O pré-processamento envolve a remoção de metais e detritos da biomassa recolhida do campo. Esse processo também existe na biorrefinaria independentemente de seus resíduos serem utilizados na gaseificação ou não. Um pré-processamento adicional que pode ser requerido, contudo, é a secagem do bagaço.

O custo da gaseificação depende da escala de produção e da tecnologia utilizada. A Tabela 5 mostra os custos de unidades de gaseificação para algumas unidades comerciais.

Bridgwater (62) estimou o custo de um ciclo combinado com gaseificação integrada de biomassa avaliado no Brasil. Para um projeto de 27 MW, a estimativa inicial de custos foi de

US\$ 2750 /kW em valores de 1992. Segundo ele, com um projeto cuidadoso e suficiente pesquisa e desenvolvimento, esse valor poderia cair para US\$ 1500 a 1600 /kW.

Escalonando a capacidade de geração de potência para 10 MW, o autor destrinchou os custos aproximados com as principais etapas do processo usando um gaseificador atmosférico. Seus resultados se encontram na Tabela 6.

Tabela 5 – Custo de capital (em dólares de 2001) de unidades de gaseificação.

Tipo de gaseificador	Capacidade (t_{bs}/dia)	Custo específico [US\$1000/(t_{bs}/dia)]	Custo específico [US\$1000/(GJ/h)]
Leito fluidizado borbulhante (biomassa)	170 – 960	13 – 45	21,6 – 54,9
Leito fluidizado circulante (biomassa)	740 – 910	24,5 – 28,4	33 – 48
Fluxo arrastado (carvão)	2200	37,3	1,4

Fonte: Basu (32)

Tabela 6 – Custo aproximado de BIGCC (em dólares de 1992) com gaseificador atmosférico produzindo 10 MW.

Item	$\times 10^6$ US\$	%
Recepção, armazenamento e manuseio	2,5	12,5
Cominuição e triagem	1,5	7,5
Secagem	2,5	12,5
Gaseificação	9,0	45,0
Recuperação de calor	1,5	7,5
Remoção do alcatrão	3,0	15,0
<i>Subtotal</i>	20,0	100,0
Geração de potência (turbinas a gás e a vapor)	15,0	
TOTAL	35,0	

Fonte: Bridgwater (62)

Bridgwater (62) estimou ainda o preço na Europa Ocidental de sistemas completos de gaseificação em função da biomassa alimentada. O sistema engloba desde a recepção da biomassa até a remoção das impurezas, incluindo custos de equipamentos e custos diretos e indiretos. Usando-se gaseificadores a pressão atmosférica e pressurizados, respectivamente, os custos de capital em valores de 1994 podem ser aproximados pelas Equações (2.14) e (2.15).

$$\text{Custo (atmosférico)} = 2,90 \times (\text{Biomassa em } t_b/h)^{0,70} \text{ milhões de dólares} \quad (2.14)$$

$$\text{Custo (pressurizado)} = 13,0 \times (\text{Biomassa em } t_b/h)^{0,64} \text{ milhões de dólares} \quad (2.15)$$

Rodrigues, Faaij e Walter (63) avaliaram os custos de investimento e operação no Brasil de ciclos combinados com co-combustão de gás natural misturado a gás de síntese obtido da

gaseificação de palha de cana-de-açúcar. O estudo concluiu que o aumento do gás natural na mistura gasosa resulta em maiores eficiências e menores custos de investimento. Outro fator importante é a economia de escala, que reduz significativamente o custo por megawatt de eletricidade gerada. Para o caso específico em que nenhum gás natural é utilizado, os autores estimam o custo de investimento total em um sistema BIGCC em US\$ 3600/kW para uma planta com capacidade de 20 MW e US\$ 1700/kW para uma de 300 MW. Os custos de operação foram estimados em US\$ 4/MWh para o ciclo combinado e mais US\$ 4/t_b. Os valores são em dólares de 2003.

Hamelinck e Faaij (64) estudaram a produção de metanol e hidrogênio e Hamelinck, Hooijdonk e Faaij (60) estudaram a produção de etanol a partir do gás de síntese. Em ambos os trabalhos, considera-se simultaneamente a geração de energia por BIGCC. Os custos levantados para os principais equipamentos relevantes para o BIGCC estão mostrados na Tabela 7. As vazões volumétricas são dadas nas condições normais de temperatura e pressão (normal metro cúbico).

Tabela 7 – Custos de equipamentos para BIGCC com valores em dólares de 2001.

Componente	Custo base/(10 ⁶ US\$)	Fator de escala	Escala base	Fator de instalação
Secador	7,6	0,65	33,5 t _b /h	1,86
Gaseificador atmosférico	16,3	0,65	68,8 t _{bs} /h	1,69
Gaseificador pressurizado	38,1	0,7	68,8 t _{bs} /h	1,69
Remoção do alcatrão	3,1	0,7	34,2 m ³ _N /s	1,86
Ciclones	2,6	0,7	34,2 m ³ _N /s	1,86
Trocador de calor de alta temperatura	7,0	0,6	39,2 kg _{vap} /s	1,84
Filtro	1,6	0,65	12,1 m ³ _N /s	1,86
Scrubber de condensação	2,6	0,7	12,1 m ³ _N /s	1,86
Compressor	11,1	0,85	13,2 MW	1,72
CC + TG + HRSG*	18,9	0,7	26,3 MW	1,86
Turbinas a vapor	5,1	0,7	10,3 MW	1,86

* Câmara de combustão + Turbina a gás + *Heat Recovery Steam Generator* (caldeira de recuperação)

Fonte: Adaptada de Hamelinck, Hooijdonk e Faaij (60) e Hamelinck e Faaij (64)

Relatórios técnicos do *National Renewable Energy Laboratory* (65, 57) também avaliaram a produção de etanol a partir de biomassa pela rota termoquímica com utilização de parte do gás de síntese na produção de calor e eletricidade (com turbinas a vapor e turbo-expansor) a fim de suprir as demandas energéticas do processo. Os custos de investimento (em valores de 2007) dos equipamentos mais custosos que são relevantes para o BIGCC foram estimados como:

- Gaseificação com aquecimento indireto e pressurizada mais reforma do alcatrão e limpeza do gás: US\$ 9,7 milhões para um equipamento com capacidade para 500 toneladas por dia. Pode ser escalonado por lei de potência usando um fator de escala $n = 0,6$. O fator de instalação do equipamento é 2,31. O custo base pode ficar até 15% menor com amadurecimento da tecnologia.
- Compressão em seis estágios de 160 t/h de gás de síntese de 1,54 a 204 atm¹, requerendo 47 MW de potência: US\$ 32,57 milhões. Fator de escala $n = 0,81$ (em relação à potência de acionamento). O fator de instalação é 1,80.

¹ A compressão do gás necessária para o BIGCC seria de apenas 1 atm a 18 atm.

- Turbinas a vapor e geradores produzindo 64,4 MW de eletricidade: US\$ 13,27 milhões² com fator de escala $n = 0,70$ e fator de instalação 1,80. Condensador da turbina: US\$ 6,2 milhões, $n = 1,00$ e fator de instalação 1,40.

O projeto como um todo tem fator de instalação 1,98 e fator relativo aos custos indiretos 1,23.

2.5.6.3 Custos da hidrólise de biomassa

O etanol de segunda geração tem sido foco de muito interesse de pesquisa nos últimos anos e algumas unidades industriais pioneiras já iniciaram operações. Por consequência, há uma grande quantidade de estudos econômicos disponíveis na literatura.

Os custos de capital e operação com a produção de etanol de segunda geração dependem do desenho da planta. Alguns fatores importantes são

- Escolha dos métodos de pré-tratamento e hidrólise da celulose.
- No caso do processo enzimático, compra ou fabricação própria de enzimas.
- Fermentação de hexoses e pentoses ou apenas hexoses; fermentação simultânea à hidrólise ou sequencial.

Hamelinck, Hooijdonk e Faaij (60) tabelaram os custos de equipamentos para produção de etanol celulósico considerando diferentes pré-tratamentos e hidrólise enzimática da celulose. Os custos dos componentes em valores de 2003 estão mostrados na Tabela 8.

Jonker et al. (40) estudaram os custos de processos de segunda geração e de primeira geração acoplada à segunda geração com alto nível de detalhe. Os parâmetros de custos de investimento dos principais componentes do processo de segunda geração estão sintetizados na Tabela 9 com valores em dólares de 2010. Alguns dados foram citados de Hamelinck, Hooijdonk e Faaij (60).

O *National Renewable Energy Laboratory* (NREL, EUA) publicou um relatório técnico sobre o projeto e economia da conversão de biomassa lignocelulósica a etanol usando pré-tratamento

² O projeto em questão visa gerar energia suficiente apenas para suprir as necessidades da operação.

Tabela 8 – Custos de equipamentos para produção de etanol de segunda geração com valores em euros de 2003.

Componente	Custo base/(10 ⁶ €)	Fator de escala	Escala base	F. de instalação	Válido até
<i>Pré-tratamento</i>					
Mecânico	4,44	0,67	83,3 t _{bs} /h	2,0	83,3 t _{bs} /h
Moinho	0,37	0,7	50 t _b /h	1,0	
Ácido diluído	14,1	0,78	83,3 t _{bs} /h	2,36	
Explosão a vapor	1,41	0,78	83,3 t _{bs} /h	2,36	
Hidrotérmico	5,62	0,78	83,3 t _{bs} /h	2,36	
Troca iônica	2,39	0,33	83,3 t _{bs} /h	1,88	
<i>Hidrólise e fermentação</i>					
Produção de celulase (FSS)	1,28	0,8	50 kg _{enz} /h	2,03	50 kg _{enz} /h
Fermentação de pentoses (FSS)	0,67	0,8	1,04 t _{EtOH} /h	2,20	3,53 t _{EtOH} /h
Hidrólise-fermentação (FSS)	0,67	0,8	1,04 t _{EtOH} /h	1,88	1,04 t _{EtOH} /h
CFSS	0,67	0,8	1,04 t _{EtOH} /h	1,88	1,04 t _{EtOH} /h
<i>Ampliação</i>					
Destilação e purificação	2,96	0,7	18,466 t _{EtOH} /h	2,75	18,466 t _{EtOH} /h

FSS: Fermentação e sacarificação simultâneas; CFSS: Cofermentação e sacarificação simultâneas.

Fonte: Hamelinck, Hooijdonk e Faaij (60)

Tabela 9 – Custos de equipamentos para produção de etanol de segunda geração com valores em dólares de 2010.

Componente	Custo base/(10 ⁶ US\$)	Fator de escala	Escala base	Fator de instalação	Válido até
Manejo da alimentação	6,50	0,6	110 t _{bs} /h	1,81	110 t/h
Explosão a vapor	1,70	0,78	83 t _{bs} /h	2,36	83 t _{bs} /h
Hidrotérmico	3,06	0,78	83 t _{bs} /h	2,36	83 t _{bs} /h
Produção de enzima <i>in loco</i>	2,62	0,8	50 kg _{enz} /h	2,36	83 t _{bs} /h
Reator CFSS	0,80	0,8	1,04 t _{EtOH} /h	1,89	
Reator BPC	0,80	0,8	1,04 t _{EtOH} /h	1,89	
Destilação	35,69	0,68	44 m ³ _{EtOH} /h	1,51	
Separação de sólidos	1,30	0,65	10,1 t _{bs} /h	2,2	10,1 t _{bs} /h
Outras utilidades	6,00	1			

CFSS: Cofermentação e sacarificação simultâneas; BPC: Bioprocesso consolidado (produção de enzimas no biorreator).

Fonte: Jonker et al. (40)

com ácido diluído, hidrólise enzimática da palha do milho e cofermentação com *Zymomonas mobilis* (61).

Os custos de capital dos equipamentos instalados nos diferentes setores do processo estão expressos na Tabela 10 em dólares de 2007 e tomando como referência uma unidade com capacidade para processar 2000 t_{bs}/dia.

2.5.6.4 Custos da digestão anaeróbia de vinhaça

Os custos associados diretamente à implementação de um sistema de digestão anaeróbia em uma biorrefinaria dependem de fatores como separação de fases e esquema de alcalinização empregado.

Hamelinck, Hooijdonk e Faaij (60) estimaram o custo do biodigestor em função da quantidade de vinhaça processada a partir da Equação 2.16, valores de 2001.

$$\text{Custo (biodigestor)} = 1,54 \times \left(\frac{\text{Vinhaça tratada (t}_{v\text{ça}}/\text{h})}{43 \text{ t}_{v\text{ça}}/\text{h}} \right)^{0,6} \text{ milhões de dólares} \quad (2.16)$$

Jonker et al. (40) estimam o custo do tratamento de vinhaça, incluindo digestão, em uma planta de etanol de segunda geração em valores de 2010 como

$$\text{Custo (biodigestor)} = 1,83 \times \left(\frac{\text{Águas residuárias (t/h)}}{400 \text{ t/h}} \right)^{0,51} \text{ milhões de dólares} \quad (2.17)$$

com fator de instalação 1,4.

Tabela 10 – Custos de capital de biorrefinaria de etanol de segunda geração em dólares de 2008.

Componente	Custo/(10 ⁶ US\$)
Pré-tratamento	29,9
Neutralização/Condicionamento	3,0
Sacarificação	31,2
Produção de enzimas <i>in situ</i>	18,3
Destilação e recuperação de sólidos	22,3
Tratamento de águas residuárias	49,4
Armazenagem	5,0
Caldeira/Turbogerador	66,0
Utilidades	6,9

Fonte: Humbird et al. (61)

Fuess et al. (66) fizeram uma análise econômica de diferentes unidades de digestão anaeróbia da vinhaça em destilarias de etanol de grande escala. Foram consideradas configurações com digestão anaeróbia em uma fase e em duas fases e aplicando diferentes estratégias de alcalinização, incluindo aplicação de compostos químicos (NaOH ou NaHCO₃) e recirculação de efluentes. Os custos de produção de eletricidade a partir do biogás foram estimados considerando a geração de potência a partir de motores de combustão interna.

A base de cálculo de Fuess et al. (66) foi uma biorrefinaria anexa com capacidade de moagem de $4 \times 10^6 t_c$ por safra (232 dias). Consideraram a produção de etanol equivalente a 53,4L/ t_c (920,7 m³/dia) e a produção de vinhaça dez vezes maior que a de etanol.

A conclusão dos autores foi de que a economia de escala torna a biodigestão em duas fases economicamente competitiva com a reação em fase única, apesar de seus custos de capital mais elevados. Quanto à estratégia de alcalinização, o hidróxido de sódio com ou sem recirculação de efluente é superior ao bicarbonato de sódio. O esquema ótimo obteve custos de produção de eletricidade pela metade do preço de venda para a rede elétrica. Os preços dos principais equipamentos usados na implementação de plantas de tratamento de vinhaça em uma fase e em duas fases estão mostrados na Tabela 11.

Tabela 11 – Custos de equipamentos para biodigestão de vinhaça em uma fase e duas fases com valores dados em dólares de 2015.

Componente	Qtd. × Capacidade	Custo/(US\$)
Uma fase		
Tanques de equalização	3 × 1051,25 m ³	1 065 967,50
Reatores de Leito Estruturado	6 × 1820 m ³	3 690 960,00
Bombas centrífugas (alimentação)	7 × 63,94 m ³ /h	15 641,40
Bombas centrífugas (recirculação)	7 × 959,1 m ³ /h	234 621,00
Material de suporte (reator)	436,8 m ³	227 136,00
Tela para retenção de suporte	3360 m ²	174 720,00
Outros		28 646,96
Total (sem recirculação)*		6 243 688,63
Total (com recirculação)*		6 525 233,63
Dois fases		
<i>Fase acidogênica</i>		
Tanques de equalização	3 × 1051,25 m ³	1 065 967,50
Reatores de Leito Recheado	3 × 1820 m ³	1 845 480,00
Bombas centrífugas (alimentação)	4 × 127,87 m ³ /h	17 875,19
Material de suporte (reator)	1875,9 m ³	975 468,00
Tela para retenção de suporte	1560 m ²	81 120,00
Outros		15 340,00
<i>Fase metanogênica</i>		
Tanque de equalização	1 × 3062,46 m ³	1 035 111,48
Reatores de Leito Estruturado	5 × 1820 m ³	3 075 800,00
Bombas centrífugas (alimentação)	6 × 76,72 m ³ /h	16 087,67
Bombas centrífugas (recirculação)	6 × 1150,80 m ³ /h	241 299,28
Material de suporte (reator)	338 m ³	175 760,00
Tela para retenção de suporte	2600 m ²	135 200,00
Outros		22 100
<i>Totais</i>		
Total (sem recirculação)*		10 160 006,88
Total (com recirculação)*		10 449 566,02

* Inclui fator de instalação.

Fonte: Fuess et al. (66)

2.5.7 Decisão entre investimentos alternativos

A análise econômica na engenharia é um processo racional de tomada de decisões para problemas que são essencialmente econômicos, como por exemplo a escolha entre dois equipamentos alternativos ou a decisão entre construir ou não uma fábrica. Essa decisão é tomada conforme algum critério objetivo após a formulação de um modelo matemático que permita prever a viabilidade econômica de cada alternativa (54).

Existem diferentes critérios para a avaliação econômica de um investimento. Como o processo decisório depende de previsões sobre o futuro, que naturalmente são incertas, o que distingue cada critério são as considerações embutidas em cada metodologia analítica (52).

Alguns dos métodos mais comuns de análise econômica são:

- taxa interna de retorno;
- método do valor presente;
- razão benefício/custo;
- método do fluxo de caixa anual;
- tempo de retorno do investimento.

O primeiro método é provavelmente o mais utilizado na indústria por fornecer como resultado uma cifra única de pronto entendimento (54), a **taxa interna de retorno** (TIR). Essa cifra representa a taxa de juros que tornaria os benefícios do investimento equivalentes aos seus custos ao longo do tempo de vida do projeto. Esse conceito de “equivalência” entre as quantias deve levar em consideração o valor variável do dinheiro ao longo do tempo, ou seja, duas quantias são equivalentes se o investidor aceitar trocar um montante P pago no presente por valor um F pago no futuro, ou ainda, uma série de pagamentos que totalize esse valor. Já está prevista na taxa de interna de retorno, portanto, a remuneração esperada sobre o investimento (54).

Avalia-se a viabilidade de um projeto comparando-se sua TIR a uma taxa mínima de atratividade (TMA), isto é, a taxa de retorno que o investidor estaria disposto a aceitar tendo em vista o risco do investimento e o custo de oportunidade de outras alternativas de investimentos (52, 54).

Uma abordagem diferente é o **método do valor presente líquido**, o VPL, que pode ser compreendido como a diferença em dinheiro entre o valor presente dos fluxos de caixa anuais de um projeto ao longo de toda a sua vida e o valor inicial do investimento para uma dada taxa de juros (52, 54).

A **razão benefício/custo** (RBC) é uma variante do método do valor presente líquido que calcula, em vez da diferença, a razão entre o valor presente dos fluxos de caixa (benefícios) e o valor inicial do investimento (custo). Essa abordagem tem como vantagem permitir uma comparação imediata entre projetos com grande diferença de investimento inicial.

O **método do fluxo de caixa anual** consiste em transformar o valor presente do investimento inicial em uma série de pagamentos uniforme de valor equivalente pelo período de vida do projeto e descontá-lo do fluxo de caixa anual. Se a diferença entre os benefícios e os custos anuais uniformes equivalentes for positiva, o investimento é aceitável (54).

O método do **tempo de retorno do investimento** computa não um valor financeiro ou uma taxa de retorno, mas o tempo mínimo necessário para o investimento inicial ser recuperado com o fluxo de caixa não depreciado do projeto incluindo os juros. Quanto menor o tempo de pagamento, mais cedo o investidor terá um lucro líquido sobre o investimento (52).

Existem ainda outras técnicas de análise de investimentos, algumas delas variações das previamente citadas. Pode-se mencionar, por exemplo, o método do valor futuro, método dos custos capitalizados e método dos investimentos incrementais (54).

2.5.8 Quantificação do risco: Método de Monte Carlo

Quando estimativas de custos têm alto grau de incerteza, é importante se quantificar de forma aproximada o risco associado à tomada de decisão econômica. Essa quantificação pode ser feita de diversas maneiras, como análise de cenários, testes de sensibilidade paramétrica ou o método de Monte Carlo (53).

Métodos de Monte Carlo (MMC) são técnicas matemáticas experimentais baseadas na análise de um grande número de simulações envolvendo variáveis aleatórias. Problemas de natureza probabilística são aqueles que podem ser resolvidos de forma mais simples pelo método, e por isso são conhecidos como “Monte Carlo direto”, em oposição a problemas de “Monte Carlo sofisticado”, em que um problema de natureza determinística deve ser representado de forma engenhosa por um conjunto de problemas probabilísticos (67).

No contexto da análise de risco econômico, o problema a ser resolvido é de natureza puramente probabilística e de aplicação direta: dado um parâmetro econômico cujo valor seja duvidoso, é possível se atribuir uma distribuição de probabilidades dentro da qual espera-se que o valor verdadeiro do parâmetro esteja situado. O algoritmo utilizado para estimar o risco de um investimento pode ser resumido em cinco passos (68):

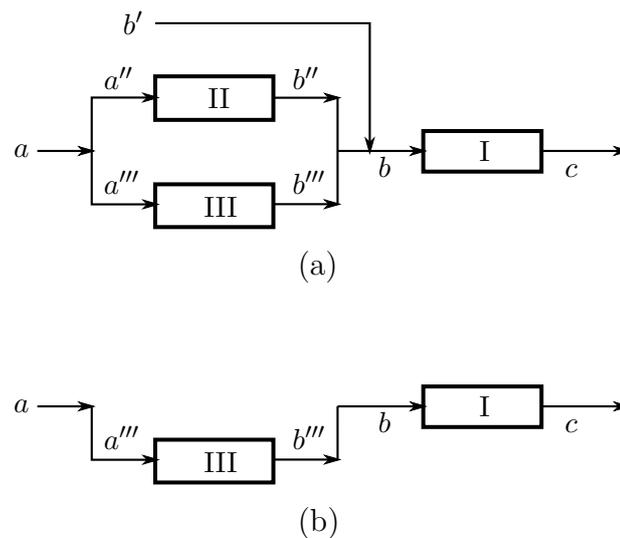
1. Criar um modelo paramétrico $y = f(x_1, x_2, \dots, x_n)$;
2. Gerar um conjunto aleatório de dados $x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{in}$;
3. Calcular e armazenar os resultados y_i ;
4. Repetir os passos 2 e 3 múltiplas vezes (quanto mais repetições, melhores resultados);
5. Analisar os resultados com histogramas, distribuição de probabilidade acumulada, intervalos de confiança ou outro indicador estatístico.

2.6 Otimização superestrutural

A síntese de processos químicos é um procedimento que consiste na seleção e no arranjo de unidades de processo, bem como na definição de suas condições de operação visando conceber o projeto que maximize a lucratividade da operação e ao mesmo tempo satisfaça a critérios ambientais, sociais e de segurança. É natural, portanto, que no decorrer dessa tarefa apareçam problemas de otimização. Para definir não apenas as melhores especificações para o processo, mas também que escolhas de equipamentos ou subprocessos fornecem os melhores resultados, postula-se o conceito de superestrutura, que consiste em um fluxograma do processo que inclui

todas as alternativas consideradas. A síntese do processo ótimo resulta da otimização dessa superestrutura, que frequentemente requer a solução de um problema de otimização inteira-mista não linear (MINLP – *Mixed-Integer Non-Linear Programming*). A Figura 2a é um exemplo no qual é mostrada uma superestrutura onde existe a possibilidade de se utilizar o subprocesso II ou III e de se utilizar ou não a corrente b' a fim de se obter o produto c . A Figura 2b representa a configuração ótima com a escolha do conjunto de subprocessos que otimiza a função objetivo (14).

Figura 2 – Exemplo de superestrutura (a) e de configuração ótima (b).



Fonte: Adaptada de Kocis e Grossmann (14).

Na maioria dos problemas de síntese de processos o MINLP é caracterizado pela existência de diversas variáveis com valores binários (zero ou um) associadas à presença ou não de um segmento da superestrutura na configuração ótima do processo. Além disso, essas variáveis binárias tendem a aparecer em equações lineares, enquanto que as variáveis contínuas aparecem tanto em equações lineares quanto não lineares (14).

Existem alguns métodos para a solução de problemas dessa natureza. Uma alternativa é a solução iterativa, transformando-se o problema principal em uma sequência alternada de problemas de otimização não linear (NLP – *Non-Linear Programming*), nos quais as variáveis binárias do MINLP original têm seus valores fixados temporariamente; e um problema mestre de otimização inteira-mista linear (MILP – *Mixed-Integer Linear Programming*), que corresponde a uma linearização do problema original, se ele já não for linear em relação a suas variáveis binárias. Dois métodos tiram proveito dessa abordagem (69), a decomposição generalizada de Benders (GBD – *Generalized Benders Decomposition*) e a aproximação exterior (OA – *Outer-Approximation*) (14, 15). Outro método importante é o *branch-and-bound* não linear, mais adequado para problemas em que a busca pelas variáveis binárias é significativamente custosa em relação à resolução do problema NLP (70).

As alternativas descritas acima são determinísticas. Uma alternativa não determinística é o algoritmo de enxame de partículas (PSO – *Particle Swarm Optimization*). Este método se baseia na criação de várias instâncias de uma partícula que registra sua própria posição no espaço das

variáveis de otimização, o valor da função objetivo nesse ponto e o melhor valor da função objetivo que ela e suas vizinhas encontraram. Essas partículas também têm certa inércia e velocidade, ajustadas de forma a balancear a robustez e o desempenho do algoritmo. Tradicionalmente usado com variáveis contínuas, com algumas adaptações esse método é utilizável também com variáveis discretas. No espaço binário, pode-se entender o movimento das partículas como a transição de um bit (isto é, um valor de 0 ou 1) em uma sequência binária. Nesse contexto, a velocidade de uma partícula pode ser interpretada como o número de bits alterados a cada iteração do algoritmo e a inércia como a probabilidade que cada bit se mantenha em seu estado atual (18).

2.7 Trabalhos relacionados

A viabilidade técnico-econômica de biorrefinarias de etanol celulósico e bioeletricidade foi estudada por vários pesquisadores empregando diferentes metodologias. Esta seção lista alguns trabalhos importantes publicados nesta década, do mais antigo para o mais recente.

Schaidle, Moline e Savage (71) fizeram um estudo comparativo entre uma biorrefinaria de etanol de origem amilácea, etanol de origem celulósica e biodiesel produzido pelo processo Fischer-Tropsch usando gás de síntese originado de biomassa. Embora o etanol de grão tenha sido considerado o mais vantajoso do ponto de vista estritamente econômico, ao avaliar também critérios ambientais e sociais, o etanol celulósico teve o melhor desempenho entre os três combustíveis líquidos no cômputo geral.

Dias et al. (72) estudaram nove diferentes cenários para a competição entre o etanol 2G e bioeletricidade. Análises econômicas preliminares mostraram que seria vantajoso dedicar a planta industrial totalmente à produção de um único produto, ou excedentes de eletricidade ou etanol 2G. A produção de etanol celulósico se tornaria atraente apenas quando usadas tecnologias sofisticadas (alto rendimento, baixa carga de sólidos na hidrólise e fermentação de pentoses), os preços das enzimas fossem baixos e uma porção de palha de cana fosse hidrolisada. Contudo, mesmo sem acesso a tecnologias sofisticadas, a produção integrada de etanol 1G2G era capaz de reduzir os custos de produção do álcool, resultado que foi reiterado em estudo posterior (41). Em novo trabalho de 2013, Dias et al. (73) concluíram que biorrefinarias flexíveis tinham melhor taxa interna de retorno do que dedicadas à produção exclusiva de etanol 2G ou bioeletricidade, mas essa variável econômica era muito sensível ao preço do etanol (mais do que ao preço da eletricidade) e, em caso de aumentos no seu preço, a operação fixa utilizando biomassa para produção exclusivamente de etanol celulósico se tornaria mais atraente.

Furlan et al. (74) simularam três estudos de caso: produção de etanol 1G e de eletricidade; produção de etanol 1G2G; e biorrefinaria flexível, isto é, capaz de produzir etanol 1G e alternar entre a produção de etanol 2G e eletricidade conforme a situação do mercado. A conclusão alcançada foi de que para a situação econômica da época (preços cotados em 2012), nem mesmo a biorrefinaria produtora de etanol 1G tradicional era atraente, mas a produção de etanol de cana combinada à de etanol celulósico (1G2G) era a que estaria mais próxima da viabilidade. A viabilidade econômica de uma biorrefinaria se mostrou altamente dependente do preço de venda do etanol, cujo valor é altamente volátil. O estudo concluiu que embora biorrefinarias flexíveis

tenham a virtude de melhor se adaptarem a flutuações sazonais dos preços, o investimento adicional necessário para instalá-las torna essa opção pouco atraente.

Gnansounou, Vaskan e Pachón (75) analisaram um conjunto de quatro cenários alternativos para biorrefinarias produtoras de etanol 1G e 2G, açúcar, melão para alimentação animal e eletricidade no contexto brasileiro. O cenário mais vantajoso do ponto de vista econômico foi aquele que apresentava máxima produção de etanol e o aproveitamento de resíduos para produção de etanol 2G tinha impacto ambiental positivo, apesar de requerer maiores investimentos.

Khatiwada et al. (76) otimizaram um problema de programação linear inteira mista visando avaliar em diferentes cenários a tecnologia mais atraente economicamente para a expansão de uma destilaria tradicional de etanol de cana-de-açúcar: uma biorrefinaria que o utilizasse totalmente para produção de bioeletricidade ou uma biorrefinaria que utilizasse toda biomassa disponível para produção de etanol 2G. Neste último caso, avaliaram ainda as opções de utilizar o etanol como combustível veicular no Brasil ou exportá-lo para a União Europeia. No cenário de referência, que correspondia às circunstâncias econômicas do ano de 2010, observaram que a produção integral de etanol celulósico visando exportação era a alternativa mais vantajosa.

Carpio e Souza (77) conceberam um modelo de otimização bi-objetivo para decidir que porcentagem do bagaço de cana-de-açúcar disponível deveria ser alocada para a produção de etanol 2G ou de bioeletricidade de forma a maximizar o retorno do investimento e ao mesmo tempo minimizar o risco relacionado à volatilidade dos preços dos produtos. Foram investigados quatro cenários diferentes considerando-se diferentes preços de operação para ambos os processos e em todos eles a conclusão foi de que a maior parte do bagaço deveria ser destinado à produção de etanol 2G, com porcentagens variando entre 64% e 91%.

Em relação à competição entre geração de bioeletricidade por combustão direta de biomassa (Rankine) e combustão de gás de síntese, isto é, biomassa gaseificada (BIGCC), há poucos trabalhos recentes tratando especificamente da indústria sucroalcooleira.

Deshmukh et al. (9) compararam sistemas de cogeração Rankine avançados ao BIGCC em uma planta piloto de açúcar e álcool em 2013 instalada na Indonésia, quando, segundo eles, a tecnologia BIGCC ainda se encontrava em estágios iniciais de desenvolvimento e ainda não havia sistemas comerciais aplicados nessa indústria. Embora o BIGCC tivesse maior potencial de geração de receitas que o Rankine, ele carecia de uma quantidade maior de bagaço para atender às demandas de vapor a baixa pressão da destilaria. Os autores concluíram que o sistema Rankine provavelmente seria a opção mais viável para o futuro próximo.

Pedroso et al. (78) avaliaram a viabilidade técnica da incorporação do ciclo BIGCC na indústria sucroalcooleira. Segundo eles, esse sistema seria capaz de produzir mais energia por unidade de biomassa consumida do que o ciclo Rankine convencional, entretanto sua instalação seria pouco conveniente para destilarias com grande demanda de vapor devido ao grande tamanho da turbina a gás e da ilha de gaseificação necessárias. Além disso os autores reportaram que o manejo e alimentação de grandes volumes de bagaço ao gaseificador foi problemática em testes realizados com a tecnologia. Uma alternativa proposta para solucionar esse problema é a torrefação do bagaço como forma de pré-tratamento antes da gaseificação visando aumentar a densidade de energia da biomassa e reduzir o volume requerido para as instalações a jusante. A análise econômica realizada no trabalho, todavia, se limitou ao projeto de um sistema BIGCC sem torrefação, concluindo que essa tecnologia ainda não é atraente o bastante para competir

com os sistemas de cogeração Rankine.

Utilizando uma análise econômica menos detalhada, Fonseca, Costa e Cruz (79) usaram técnicas de otimização superestrutural para avaliar simultaneamente o melhor sistema de geração de bioeletricidade e a fração ótima de bagaço a ser hidrolisada, chegando à conclusão de que o BIGCC seria mais atrativo que o Rankine.

3 METODOLOGIA

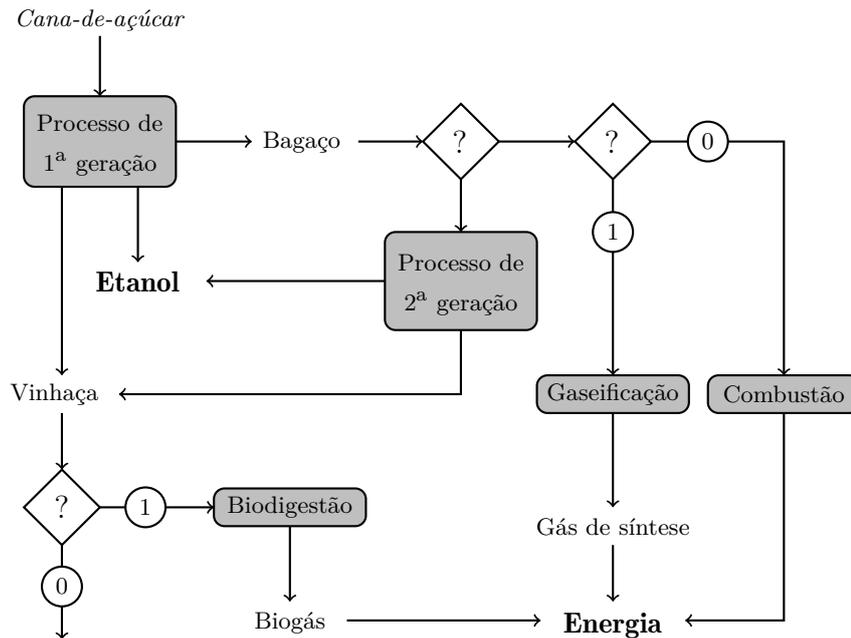
3.1 Superestrutura

A destilaria convencional de etanol, juntamente com os sistemas de biodigestão da vinhaça e gaseificação e hidrólise do bagaço foram modelados com o simulador de processos EMSO, uma ferramenta para modelagem, simulação e otimização de processos dinâmicos e estacionários com arquitetura de resolução de modelos orientada a equações (80, 81). Neste *software*, a otimização superestrutural pode ser tratada através do pacote de algoritmos determinísticos Bonmin (70) ou do não determinístico libPSO (82). O Bonmin oferece os algoritmos de aproximação externa, *branch-and-bound* não linear e um híbrido entre os dois, no entanto problemas de otimização que envolvem restrições de igualdade atualmente só podem ser resolvidos através do método *branch-and-bound* não linear. O libPSO implementa o algoritmo do enxame de partículas (*Particle Swarm Optimization*, PSO) e pode lidar com restrições de igualdade.

A Figura 3 exibe a superestrutura concebida para a otimização. Diferentes estudos podem ser realizados com diferentes funções objetivo, como minimização dos custos, minimização da produção de vinhaça, maximização da produção de etanol ou maximização da produção de eletricidade, por exemplo. As diferentes alternativas a serem avaliadas para a obtenção do projeto de biorrefinaria, que estão associadas às variáveis de otimização, são:

- A vinhaça será biodigerida? O tratamento apropriado da vinhaça antes da fertirrigação é uma questão importante, mas é preciso avaliar se a digestão anaeróbia é uma alternativa viável economicamente diante da alternativa de aplicá-la diretamente ao campo *in natura* o que pode ser traduzido em termos de um problema de otimização inteira.
- Quanto bagaço de cana será hidrolisado? A hidrólise converte celulose em hexoses fermentáveis, contribuindo para o aumento na produção de etanol e também de vinhaça, o que interfere na decisão sobre a biodigestão. A decisão sobre a fração do total de bagaço a ser hidrolisado é um problema de otimização contínua.
- Como converter biomassa em energia? A cogeração de potência e calor armazenado como vapor de água é uma necessidade para o processo ser autossustentável. O excesso de eletricidade produzido ainda pode ser exportado para a rede elétrica, aumentando a lucratividade da biorrefinaria. A quantidade de biomassa utilizada para produção de energia depende da decisão sobre a fração de bagaço hidrolisada, que é um problema de otimização contínua. As opções para cogeração envolvem combustão ou gaseificação associadas a um ciclo de potência e a escolha entre essas duas rotas é um problema de otimização inteira.

Figura 3 – Superestrutura proposta para problema de otimização desta tese.



Fonte: Elaborada pelo autor.

3.2 Modelagem

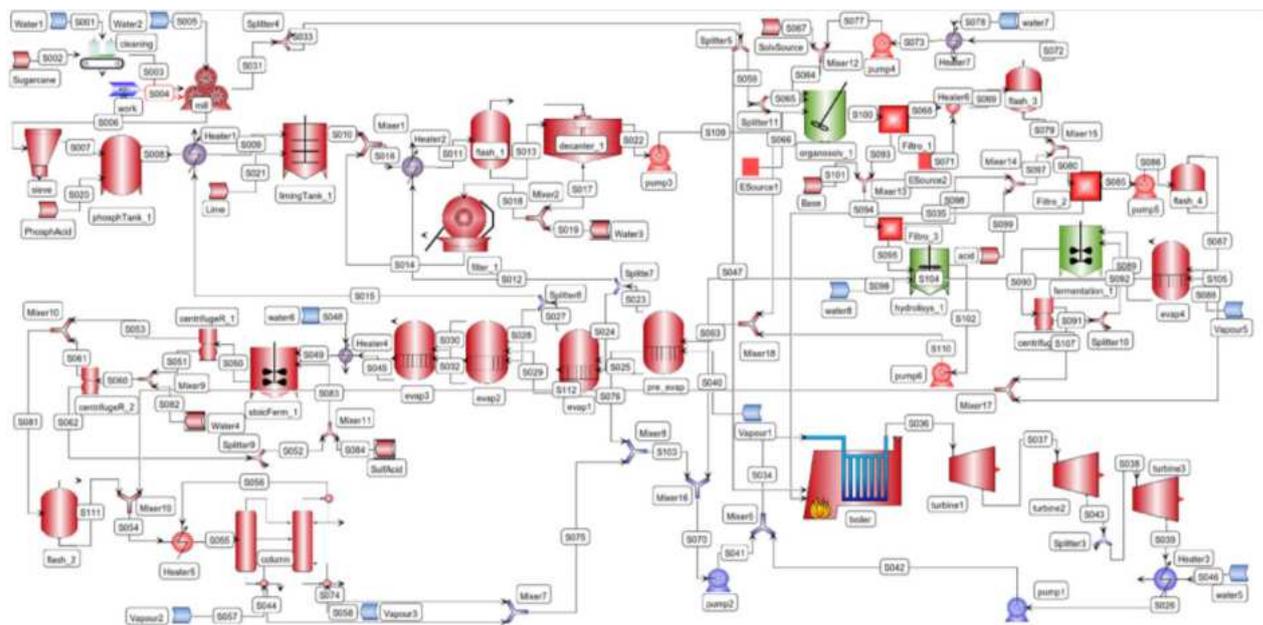
O desenvolvimento dos modelos usados para a biorrefinaria de etanol de primeira e segunda geração com cogeração de eletricidade através da queima do bagaço foi realizado a partir do trabalho colaborativo de vários pesquisadores no laboratório Kyatera do grupo de pesquisa do Laboratório de Desenvolvimento e Automação de Bioprocessos (LaDABio) do Departamento de Engenharia Química da Universidade Federal de São Carlos (DEQ-UFSCar). Trabalhos que utilizaram esses modelos incluem, por exemplo, Furlan et al. (82, 74), Longati et al. (83) e Fonseca, Costa e Cruz (84). Informações detalhadas sobre a modelagem e as especificações da maior parte do processo descrito neste trabalho podem ser encontradas nos apêndices desta tese e em Furlan (85).

A biorrefinaria foi modelada em dois níveis, o nível das etapas individuais (fermentação, destilação, cogeração, gaseificação, etc.) e o nível do processo. No nível das etapas individuais, a modelagem é mais detalhada, contendo por exemplo, mais trocadores de calor, bombas e equipamentos multiestágio. No nível do processo como um todo, alguns equipamentos foram omitidos visando tornar a resolução do problema de otimização mais rápida. Este trabalho foi construído sobre o modelo simplificado a nível de processo, mas sempre que necessário foram usadas os modelos das etapas individuais como base para cálculo de custos dos diferentes subprocessos.

A Figura 4 mostra o fluxograma de processo implementado no EMSO que serviu como base para este trabalho (82). Na figura faltam os sistemas de gaseificação e biodigestão da vinhaça (o que inclui o licor de pentoses). Além da implementação dessas unidades, o trabalho envolveu ainda o levantamento dos custos de investimento e operação do processo e a formulação do problema de otimização superestrutural, com a definição da função custo a ser minimizada

Os equipamentos de gaseificação e biodigestão são essencialmente reatores químicos e foram representados por modelos de conversão. Os próprios reatores de fermentação são tratados dessa maneira para evitar a formulação de um problema de otimização dinâmica, com custo computacional muito elevado.

Figura 4 – Biorrefinaria de etanol de primeira e segunda geração com cogeração de eletricidade implementada no EMSO



Fonte: Furlan et al. (82).

3.2.1 Escala de produção

A base de cálculo assumida no trabalho foi uma biorrefinaria com capacidade para moer $800 t_c/h$ durante 200 dias de safra, o que corresponde a $3,84 \times 10^6 t_c/safra$. Considerou-se também a coleta de 50% da palha produzida no campo ($30,65 t_b/h$ em média) para produção de calor e potência.

3.2.2 Modelagem da destilaria 1G

A destilaria autônoma de etanol de primeira geração modelada consistiu das etapas de extração e tratamento do caldo da cana-de-açúcar, concentração e fermentação com reciclo de células e destilação e desidratação. Esses processos estão representados respectivamente nas Figuras 5, 6 e 7 nas suas formas mais detalhadas. Os códigos para os nomes dos equipamentos nos fluxogramas de processo estão mostrados na Lista de Abreviaturas e Siglas. Detalhes sobre a modelagem de cada equipamento podem ser encontrados no apêndice da tese de Furlan (85) e as especificações utilizadas na simulação conduzida neste trabalho estão disponíveis nos apêndices deste trabalho.

Na versão usada com a biorrefinaria completa, as principais simplificações em relação às figuras foram o uso de uma única moenda em vez de cinco no processo de extração (MLL105 a MLL109 na Figura 5), omissão da torre de absorção de etanol dos gases de exaustão da

fermentação (ABT209 na Figura 6) e uso de evaporador em quatro estágios em vez de simples estágio (EVP202 na Figura 6).

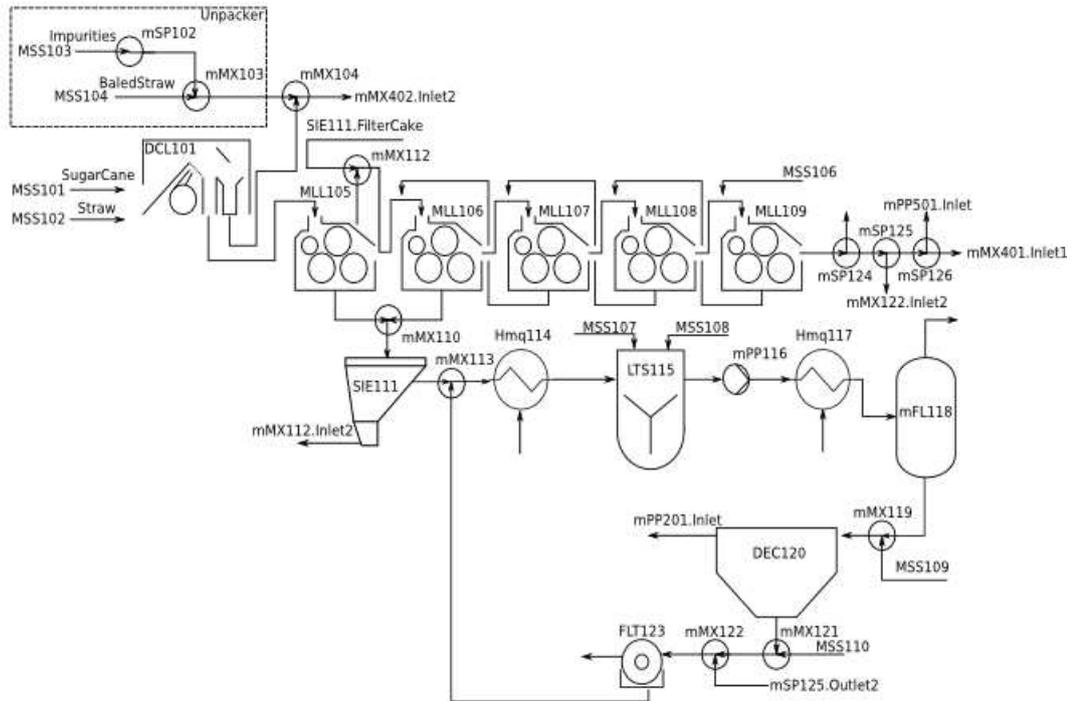
As demandas de vapor do processo a 2,5 bar e 6 bar são calculadas em função das necessidades do evaporador e das colunas de destilação e desidratação neste subprocesso. Equipamentos em outros subprocessos, como o reator de explosão a vapor, também são contabilizados. O vapor de processo é descontado do montante disponível para produção de eletricidade.

A maior parte dos modelos que envolvem separação de componentes são “caixas pretas” baseadas em balanços de massa e energia e em correlações empíricas ou semi-empíricas. Uma notável exceção é o modelo das colunas de destilação, COL303 e DEH304 na Figura 7, baseados em interpoladores multilineares. Os simuladores de processo podem ser classificados entre os sequenciais modulares e os orientados a equações. O EMSO, utilizado neste trabalho, pertence ao último grupo, que se caracteriza por solucionar todas as equações que modelam o processo ao mesmo tempo, em vez de resolver o problema sequencialmente. Uma desvantagem dessa abordagem é a dificuldade em implementar estratégias específicas para facilitar a convergência de problemas complexos, como é o caso da destilação. O interpolador multilinear é um *plugin* adicionado ao EMSO que aproxima o comportamento das colunas de destilação a partir de dados obtidos separadamente de forma experimental ou utilizando modelos mais rigorosos. A implementação desse interpolador é discutida detalhadamente em Furlan (85). Embora a desidratação do etanol esteja representada no modelo, por simplicidade considerou-se na análise econômica apenas a venda de etanol hidratado. Os custos adicionais com a desidratação não foram contabilizados.

A fermentação alcoólica foi representada por um modelo de conversão estequiométrica no equipamento RTS207 da Figura 6, onde ocorrem cinco reações paralelas: conversão de sacarose a glicose (conversão de 100 %) e de glicose a etanol (90,48 %), glicerol (2,67 %), ácido acético (1,19 %) e massa celular (1,37 %).

Embora a destilaria de primeira geração tenha sido implementada na superestrutura em conjunto com os outros processos, não foi feita nenhuma análise de custos de investimento ou operação para ela. Assumiu-se por hipótese que a destilaria autônoma já existe e contém um sistema de cogeração de baixa pressão que não foi aproveitado na expansão. Foi feita uma análise de investimento visando encontrar a melhor alternativa para expansão do processo utilizando todo o bagaço e toda a vinhaça gerados para produzir etanol ou energia.

Figura 5 – Diagrama de blocos dos processos de extração e tratamento do caldo da cana-de-açúcar.



Fonte: Adaptada de Anderson R.A. Lino com autorização. Não publicada.

Figura 6 – Diagrama de blocos dos processos de concentração e fermentação do caldo.

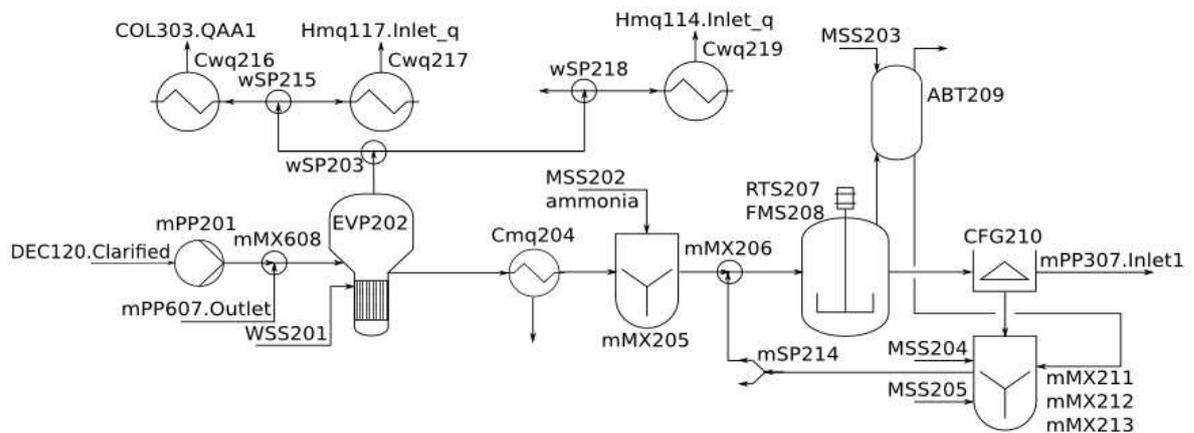
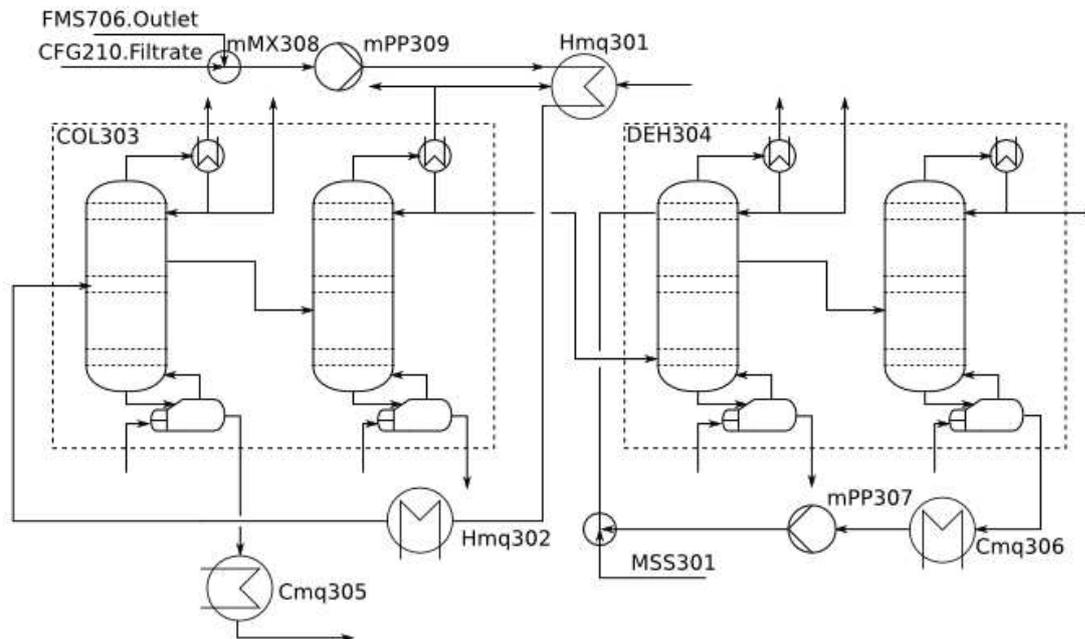


Figura 7 – Diagrama de blocos do sistema de destilação e desidratação



Fonte: Adaptada de Anderson R.A. Lino com autorização. Não publicada.

3.2.3 Modelagem do ciclo Rankine de cogeração

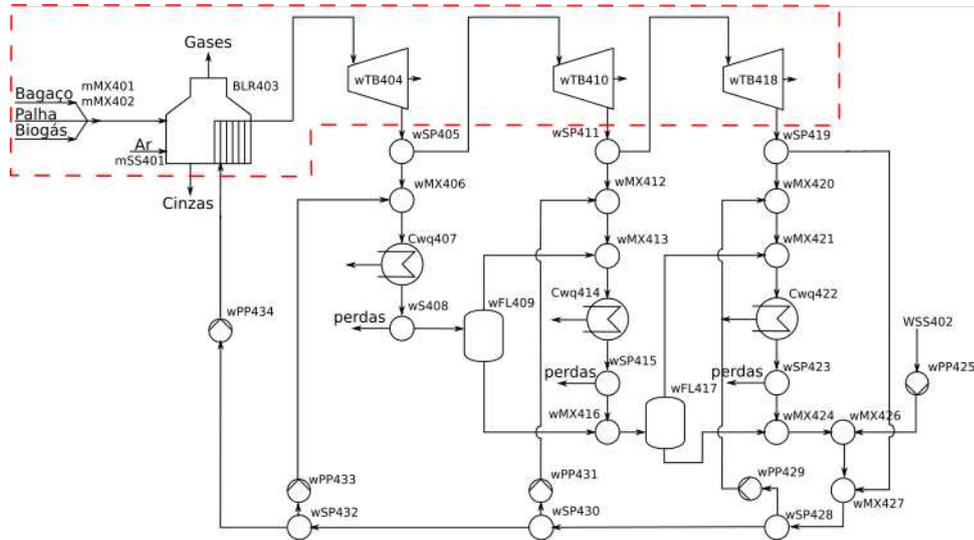
O modelo do sistema de cogeração Rankine foi implementado conforme mostra a Figura 8, com uma caldeira de alta pressão (BLR403) e três turbinas (wTB404, wTB410 e wTB418), além de um sistema de trocadores de calor visando o aproveitamento de vapor (Cwq407, Cwq414, Cwq422). Na simulação da biorrefinaria completa não foi feita nenhuma tentativa de integrar o processo energeticamente, de modo que foi implementado apenas o sistema de geração de potência representado pelo interior da área tracejada na figura. A opção de evitar a integração energética se deve a complexidade do trocas energéticas entre diferentes processos em uma superestrutura na qual vários subprocessos têm escala variável e podem não existir no processo final. A remoção do sistema de trocadores de calor também contribuiu com a velocidade da convergência do problema de otimização.

A caldeira opera a pressão de 65 bar e as turbinas são de contra-pressão sem condensação. Este não é o único esquema possível para um sistema de cogeração Rankine. O uso de turbinas de extração com condensação teria maior potencial de geração de eletricidade, contudo teria custo de investimento maior.

A primeira turbina reduz a pressão do vapor de 65 bar para 6 bar, a segunda de 6 a 2,5 bar e a terceira de 2,5 a 1 bar. O ciclo de vapor não foi fechado e a autossuficiência de vapor do processo não está garantida neste estágio do projeto.

Os trocadores de calor presentes na simulação avulsa do processo foram especificados com médias logarítmicas das diferenças de temperatura iguais a 10 K e coeficientes globais de transferência de calor iguais a $0,6 \text{ kW m}^{-2} \text{ K}^{-1}$.

Figura 8 – Diagrama de blocos do sistema de cogeração Rankine.



Fonte: Adaptada de Anderson R.A. Lino com autorização. Não publicada.

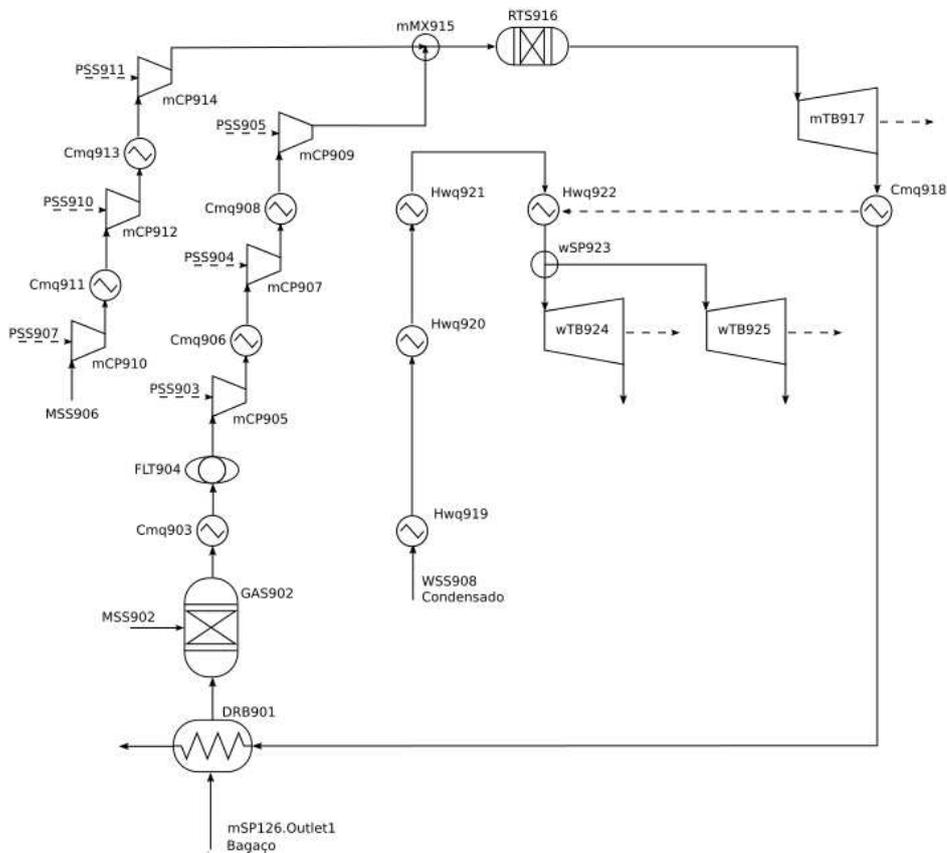
3.2.4 Modelagem do BIGCC

O sistema de cogeração baseado em ciclo combinado com gaseificação integrada de biomassa (BIGCC) para a destilaria é baseado no projeto publicado em Dias et al. (33) (Figura 1) e sua implementação no simulador de processos está mostrada na Figura 9. Consiste de um modelo de secador de bagaço (DRB901), de gaseificador (GAS902), filtro (FLT904), um conjunto de compressores em três estágios para o gás de síntese (mCP905, mCP907 e mCP909) e outro para o ar (mCP910, mCP912, mCP914), trocadores de calor (Cmq9xx e Hmq9xx), câmara de combustão (RTS916), turbina a gás (mTB917) e turbinas a vapor (wTB924 e wTB925). Os principais equipamentos para esse processo foram modelados durante este trabalho e a implementação dos seus modelos são mostrados no Apêndice C.

A modelagem da gaseificação (28, 29, 86) e da secagem (87, 88) do bagaço da cana podem ser extremamente complicados, envolvendo conceitos de fenômenos de transporte, equações de equilíbrio e mecanismos de reação complexos. Todavia, as técnicas de otimização superestrutural a serem empregadas neste trabalho exigem a utilização de modelos tão simplificados quanto possível, a fim de evitar a inclusão de funções que não sejam pelo menos pseudoconvexas.

O modelo do gaseificador se baseia em um modelo não estequiométrico de equilíbrio proposto por Pellegrini e Oliveira Jr. (28) e reproduzido por Dias et al. (33) na Figura 10, que mostra a composição do gás de síntese produzido a partir da gaseificação de bagaço de cana com ar atmosférico em função da umidade do bagaço. A razão de equivalência (razão combustível/ar utilizada em relação à razão combustível/ar estequiométrica) utilizada é $\Phi = 0,25$, valor que favorece a formação de gás de síntese com alto conteúdo energético (28). A dependência entre a composição do gás de síntese e a umidade da biomassa é praticamente linear para umidades entre 0% e 40% em massa. As Equações 3.1 a 3.6 expressam as frações molares de cada componente

Figura 9 – Implementação do sistema de cogeração BIGCC no simulador



Fonte: Elaborada pelo autor.

do gás (y_i) em função do percentual de umidade (X_{H_2O}) dentro dessa faixa.

$$y_{CH_4} = 0,05 \quad (3.1)$$

$$y_{CO_2} = 0,0671 + 0,00328 \cdot X_{H_2O} \quad (3.2)$$

$$y_{H_2O} = 0,0782 + 0,00325 \cdot X_{H_2O} \quad (3.3)$$

$$y_{H_2} = 0,1187 + 0,00200 \cdot X_{H_2O} \quad (3.4)$$

$$y_{CO} = 0,2951 - 0,00590 \cdot X_{H_2O} \quad (3.5)$$

$$y_{N_2} = 0,3907 - 0,00253 \cdot X_{H_2O} \quad (3.6)$$

O modelo supracitado desconsidera a formação de cinzas e impurezas na corrente gasosa, por isso foram usados valores empíricos para estimar suas vazões. Assumiu-se que 15,8% do bagaço

é carbono fixo e um valor de 2,9% da vazão mássica de gás de síntese corresponde a cinzas (4). Outras impurezas, como compostos de cloro, enxofre e nitrogênio foram desconsideradas da composição da corrente. A remoção desses compostos é importante para o processo, uma vez que eles contribuem com a corrosão dos equipamentos, mas para efeitos de simulação os custos associados a esse procedimento foram adicionados aos da remoção das cinzas no filtro.

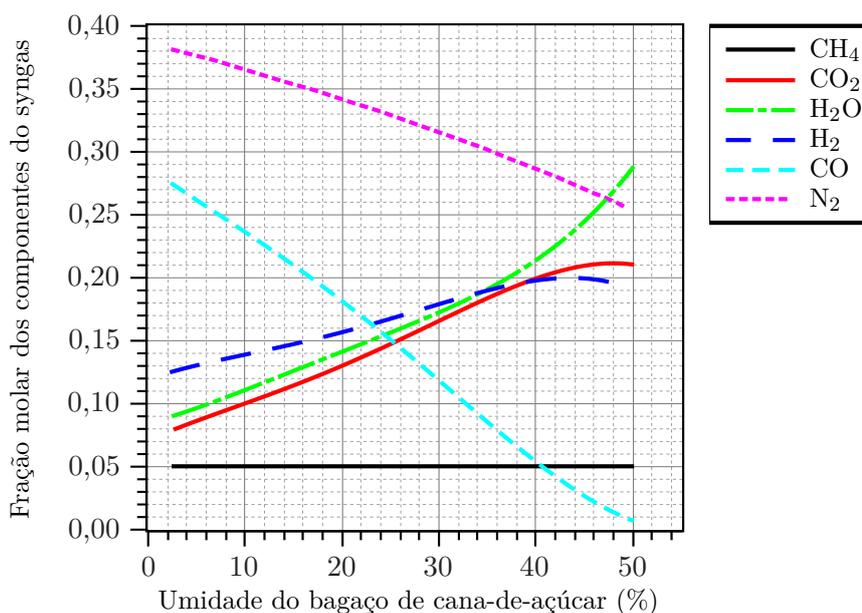
A temperatura e o poder calorífico inferior (PCI ou, em inglês, *Lower Heating Value*, LHV) do gás de síntese também podem ser tratados como funções lineares da umidade do bagaço para percentuais de umidade de até 50%, como pode-se observar na Figura 11. As Equações 3.7 e 3.8 mostram as regressões lineares que aproximam os valores dessas variáveis em função da umidade.

$$PCI(\text{kJ/kg}) = 6254,7 - 46,51 \cdot X_{\text{H}_2\text{O}} \quad (3.7)$$

$$T(^{\circ}\text{C}) = 1241,0 - 17,22 \cdot X_{\text{H}_2\text{O}} \quad (3.8)$$

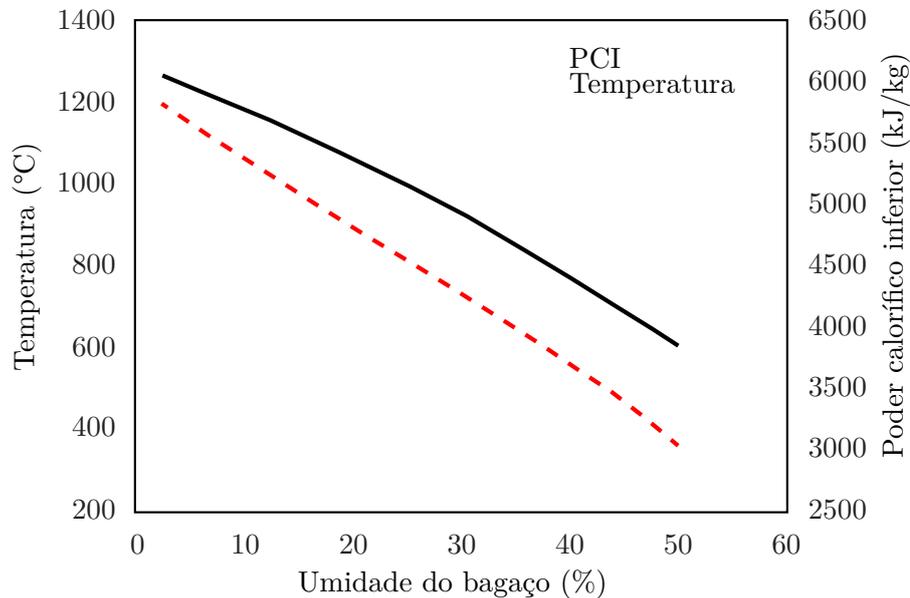
O modelo de secador pneumático consiste apenas de balanços de massa e energia nos quais o usuário especifica apenas o calor transferido dos gases a alta temperatura para o bagaço a baixa temperatura (15,35 MW) e qual é a taxa de evaporação da água do bagaço para a corrente gasosa (22,0 t/h).

Figura 10 – Composição do gás de síntese em função da umidade do bagaço de cana-de-açúcar



Fonte: Adaptada de Dias et al. (33).

Figura 11 – Poder calorífico inferior e temperatura do gás de síntese em função da umidade do bagaço de cana-de-açúcar



Fonte: Adaptada de Dias et al. (33).

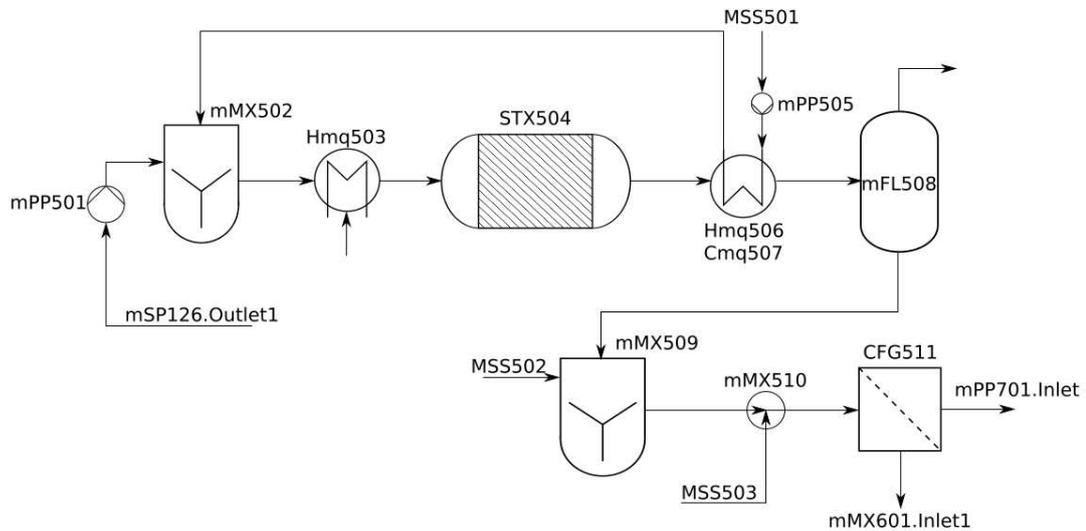
Os modelos dos compressores e das turbinas são considerados adiabáticos sem mudança de fase no fluido e operam em regime permanente (22). O usuário deve especificar os valores das eficiências isentrópicas e a mudança de pressão nos equipamentos. Os valores especificados para as eficiências isentrópicas foram de 0,85 para os compressores, 0,92 para a turbina a gás e 0,9 para as turbinas a vapor. A compressão ocorre em três estágios com resfriamento do gás entre os estágios intermediários e razão de compressão de $2,62 \approx \sqrt[3]{18}$, levando os gases de 1 atm a 18 atm. Na câmara de combustão ocorre conversão total do gás de síntese, cujos fumos alimentam uma turbina a gás onde realiza-se expansão de 18 atm até 1,0 atm. Recupera-se calor dos fumos a alta temperatura para gerar vapor a 80,0 bar, expandido nas turbinas a vapor até 6,0 bar e 2,5 bar.

3.2.5 Modelagem da hidrólise de celulose

Os fluxogramas dos processos de pré-tratamento e hidrólise da biomassa estão representados pelas Figuras 12 e 13 respectivamente.

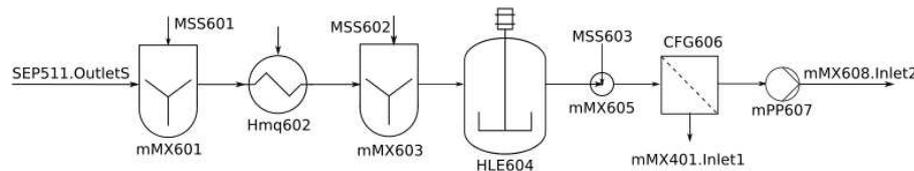
Optou-se pelo método de pré-tratamento por explosão a vapor seguido pela hidrólise enzimática. A explosão a vapor, representada pelo equipamento STX504 na Figura 12, tem características vantajosas como a independência de matérias primas além de água e a possibilidade de reaproveitamento de energia térmica da corrente de bagaço pré-tratado, o que reduz o consumo de vapor pressurizado.

Figura 12 – Diagrama de blocos do sistema de pré-tratamento de bagaço



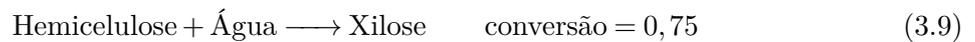
Fonte: Adaptada de Anderson R.A. Lino com autorização. Não publicada.

Figura 13 – Diagrama de blocos da etapa da hidrólise



Fonte: Adaptada de Anderson R.A. Lino com autorização. Não publicada.

Considera-se que ocorrem duas reações no reator de explosão a vapor:



A hidrólise enzimática, apesar de mais lenta é mais seletiva que a ácida, evitando degradação da glicose em componentes indesejáveis, como o hidróximetilfurfural (HMF). Essa propriedade garante maior rendimento da fermentação subsequente (1).

A reação representada na Equação (3.10) acontece também no reator de hidrólise enzimática, porém com maior conversão. Para a modelagem do reator de hidrólise, equipamento HLE604 na Figura 13, considerou-se um modelo empírico baseado no trabalho de Ramos et al. (89), que correlaciona a conversão da celulose na hidrólise (X_H) com a carga enzimática (CE , $\text{kg}_{\text{enzima}}/\text{kg}_{\text{biomassa}}$), a fração de sólidos totais (ST , $\text{kg}_{\text{sólidos}}/\text{kg}_{\text{solução}}$) e a intensidade da agitação (IA , rpm). A correlação foi calculada para tempos de hidrólise de 24 h e 72 h e é válida para $0,025 < CE < 0,100$ e para $0,05 < ST < 0,20$.

$$X_H(24h) \cdot 100\% = 24,94 + 8,34ST + 4,27IA + 9,98CE - 0,46CE^2 - 5,42ST^2 + 0,40IA^2 + 5,18CE \cdot ST + 3,06CE \cdot IA + 3,20ST \cdot IA \quad (3.11)$$

$$X_H(72h) \cdot 100\% = 35,67 + 13,28ST + 6,19IA + 11,65CE - 5,96CE^2 - 4,72ST^2 + 3,02IA^2 + 5,15CE \cdot ST + 4,32CE \cdot IA + 5,14ST \cdot IA \quad (3.12)$$

Considerou-se na simulação tempo de reação (tempo espacial ou de batelada) de 72 h, velocidade de rotação de 175 rpm, carga enzimática de 0,085 kg/kg e fração de sólidos de 0,20 kg/kg, o que resulta em conversão próxima a 65 %.

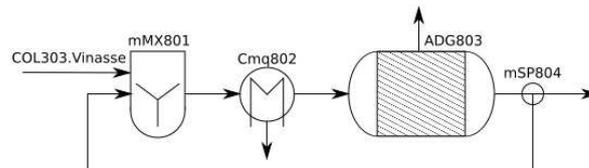
A sacarose da unidade 1G e as hexoses obtidas da hidrólise da biomassa foram co-fermentadas. As pentoses foram descartadas com a vinhaça, que pode passar por um processo de digestão anaeróbia ou ser aplicada na fertirrigação da lavoura.

Na modelagem do processo completo, o tambor *flash* mFL508 na Figura 12 e todos os trocadores de calor foram omitidos, mas seus custos de capital ainda foram contabilizados.

3.2.6 Modelagem da digestão anaeróbia

A Figura 14 mostra o diagrama de blocos do processo implementado. A digestão anaeróbia da vinhaça consiste de um reator estequiométrico representando uma unidade de biodigestão termofílica em uma única fase, equipamento ADG803 na figura. A carga de demanda química de oxigênio do biorreator é ajustada misturando-se vinhaça *in natura* com parte da vinhaça tratada (83), cujo excedente é purgado do processo – em uma biorrefinaria real, poderia ser usada para fertirrigação. As pentoses produzidas após a hidrólise da hemicelulose fazem parte da vinhaça.

Figura 14 – Diagrama de blocos do sistema de digestão anaeróbia



Fonte: Adaptada de Anderson R.A. Lino com autorização. Não publicada.

A modelagem do reator foi estequiométrica, e não cinética. Foram consideradas taxas de conversão iguais para a matéria orgânica solúvel em todas as reações (83), produzindo-se biogás com 40 % dióxido de carbono e 60 % metano (90).

O modelo do biodigestor requer a especificação das seguintes variáveis, mostradas ao lado dos valores considerados para cada uma (83, 90):

- conversão do reagente limitante de cada reação: 72 % para todas as reações.
- tempo de retenção hidráulica: 27,3 h.
- coeficiente de rendimento de substrato a produto: $Y_{P/S} = 0,234 \text{ m}^3/\text{kg}$ (CNTP).

3.3 Análise Econômica

A estimativa de custos desenvolvida neste trabalho pode ser categorizada como uma estimativa de estudo (Seção 2.5.1). Esse nível de detalhamento é apropriado para a finalidade de comparar diferentes alternativas para o projeto de um processo antes de se tomar uma decisão final e prosseguir com um projeto mais detalhado da alternativa considerada mais viável nesse estágio inicial do projeto. Pode-se esperar que os custos estimados por esta técnica estejam dentro de uma margem de erro de até $\pm 70\%$ do valor verdadeiro (53).

O ano de referência para todos os preços considerados neste estudo foi 2015, por se tratar do ano mais recente para o qual foram encontrados índices de custo de plantas (CEPCI), conforme mostrado na Tabela 1. Em relação ao fator de localização, nenhuma referência direta recente foi encontrada, por isso foi adotado o valor de 1,25 para o Brasil em 2015, conforme encontrado na referência Wiesberg et al. (91). Assim como os produtos cotados nos EUA, produtos cotados na Europa também foram multiplicados por esse mesmo fator neste trabalho, por falta de informações mais precisas. A taxa de câmbio utilizada para converter entre dólares, euros e reais foi a cotação média para o ano de 2015: US\$ 1,00 = R\$ 3,33 (92) e € 1,00 = R\$ 3,69 (93).

Considerou-se que todos os equipamentos sempre utilizam o material de construção mais comum e, para equipamentos cujos custos não tenham sido encontrados na literatura consultada, a estimativa de custo foi realizada usando-se o Apêndice A do livro *Analysis, Synthesis, and Design of Chemical Processes*, de Turton et al. (53). Os custos fornecidos são dados em dólares de 2001 segundo a Equação (3.13).

$$\log_{10} C_P^0 = K_1 + K_2 \log_{10}(A) + K_3 [\log_{10}(A)]^2 \quad (3.13)$$

onde K_1 , K_2 e K_3 são constantes tabeladas que variam com o tipo de equipamento e A é um atributo relacionado à sua escala de operação ou capacidade, por exemplo, volume, área, potência ou vazão dado em uma unidade tabelada.

A correção do custo do equipamento devido a operação em altas pressões vem da Equação (3.14).

$$\log_{10} F_p = C_1 + C_2 \log_{10}(p) + C_3 [\log_{10}(p)]^2 \quad (3.14)$$

onde C_1 , C_2 e C_3 são constantes tabeladas que variam com o equipamento e p deve ser informado em atmosferas. O fator de custo modular considerando a correção pela pressão (mas não pelo material) é dado pela Equação (3.15).

$$F_{BM} = B_1 + B_2 \cdot F_p \quad (3.15)$$

onde B_1 e B_2 também são constantes tabeladas que variam com o equipamento.

Os fatores de instalação informados na literatura geralmente consideram apenas custos diretos. Para convertê-los em fatores de custo modulares, eles foram multiplicados por 1,65. Esse número é uma relação média aproximada entre esses dois fatores de custo no contexto de expansões de plantas químicas de processamento sólido-fluido já existentes. Esse valor foi inferido da Tabela 6.17 da quarta edição de *Plant Design and Economy for Chemical Engineers*, Peters e Timmerhaus (52). Dutta et al. (57), em relatório técnico do *National Renewable Energy Laboratory*, usam um multiplicador semelhante de 1,60 para relacionar custos diretos de instalação com custos indiretos, contingências e cotas em um projeto de gaseificação.

A construção das unidades de produção de etanol de segunda geração, digestão da vinhaça e geração de energia com caldeiras de alta pressão ou ciclo com gaseificação integrada foram consideradas como expansões em uma planta industrial de primeira geração já existente. O módulo de custo total do projeto C_{TM} , que inclui os custos com instalações auxiliares é dado pela Equação (3.16).

$$C_{TM} = 1,18 \sum_{i=1}^n C_{BM,i} \quad (3.16)$$

3.3.1 Custos de capital

A estimativa dos custos de investimento para os diferentes processos analisados neste trabalho foi baseada em um método de estimativa fatorada. O custo de investimento total foi calculado em função dos custos dos principais equipamentos. Essa estimativa tem precisão limitada, uma vez que a necessidade de equipamentos adicionais pode ser descoberta apenas mais tarde, conforme o projeto se torna mais detalhado ou equipamentos podem ser eliminados melhorando-se a integração energética.

3.3.1.1 Custos do ciclo Rankine de cogeração

A cogeração com caldeiras de alta pressão e turbinas de contra-pressão, ilustrado na Figura 8 é composto por

- 1 caldeira de 65 bar;
- 3 turbinas;
- 3 trocadores de calor;
- 2 tambores *flash*;
- 4 bombas.

Foram contabilizados apenas os custos de capital dos trocadores de calor, da caldeira e das turbinas. Para os trocadores utilizaram-se as correlações disponíveis em Turton et al. (53), enquanto que para as caldeiras e turbinas utilizaram-se as Equações (3.17) e (3.18), que equivalem às Equações (2.11) e (2.12) com seus valores atualizados para dólares de 2015 e localizadas para o Brasil.

$$C_P^0 \text{ (caldeira)} = 37,8 \times \left(\frac{\text{Água vaporizada}}{238\,686 \text{ kg/h}} \right)^{0,6} \text{ milhões de dólares} \quad (3.17)$$

$$C_P^0 \text{ (turbinas)} = 12,6 \times \left(\frac{\text{Potência}}{42,2 \text{ MW}} \right)^{0,6} \text{ milhões de dólares} \quad (3.18)$$

Os fatores de custo modular em ambos os casos valem 2,97.

3.3.1.2 Custos do ciclo combinado com gaseificação integrada

O ciclo combinado com gaseificação integrada de biomassa, ilustrado na Figura 9, é o processo cujos preços são os mais incertos entre os estudados neste trabalho, uma vez que sua aplicação em escala comercial ainda é incipiente. O sistema é composto pelos seguintes equipamentos principais:

- 1 secador;
- 1 gaseificador atmosférico;
- 1 sistema de remoção de impurezas;
- 6 compressores com razão de compressão de 2,6;
- 1 câmara de combustão a 18 atm;
- 1 turbina a gás;
- 2 turbinas a vapor;
- 1 gerador de vapor por recuperação de calor;
- 9 trocadores de calor.

O modelo de secador utilizado é uma caixa preta que calcula apenas o balanço de energia entre as correntes de entrada e saída do equipamento, uma vez que as temperaturas de saída e umidade desejada para o bagaço sejam especificadas. Existem correlações para os custos do equipamento na literatura (94, 95, 96), mas o modelo caixa-preta não se adapta bem a elas, pois dependem da área efetiva de troca térmica. Como esse valor não é calculado com precisão no modelo de secador implementado, foi usada em vez disso a estimativa de Hamelinck e Faaij (64), que correlaciona o preço do secador à quantidade de bagaço úmido processada, Equação (3.19). O valor do custo base do secador na Tabela 7 deve ser multiplicado por $\left(\frac{556,1}{394,3}\right) \times 1,25$ para atualizá-los para valores de 2015 e importá-los para o Brasil. O fator de instalação também foi multiplicado por 1,65 para aproximá-lo ao fator de custo modular.

$$C_P^0 = 13,4 \times \left(\frac{\text{Vazão de biomassa úmida}}{33,5 \text{ t}_b/\text{h}} \right)^{0,65} \text{ milhões de dólares} \quad (3.19)$$

com fator de custo modular $F_{BM} = 3,07$.

As referências (64) e (60) são relativamente antigas, com custos dados em valores de 2001. Os autores observam ainda que os custos compilados correspondem à primeira geração de plantas comerciais e uma redução significativa dos custos de capital seria esperada devido a efeitos de aprendizado. Ainda assim, ela foi a principal fonte para as estimativas dos custos da gaseificação, apenas corrigida pela inflação. Isso porque muitas referências mais recentes consultadas também citam preços cotados nas décadas de 1990 e início de 2000, como Basu (32), ou analisam processos com diferenças significativas para o estudado neste trabalho, como Dutta et al. (57). A estimativa de custos realizada é provavelmente conservadora em relação à viabilidade da gaseificação e cenários mais favoráveis foram explorados nos testes de sensibilidade paramétrica.

A Tabela 12 apresenta os dados da Tabela 7 atualizados para dólares de 2015 e os localiza para o Brasil. O custo de compra básico foi calculado aplicando-se a Equação (2.3) sobre a tabela.

Tabela 12 – Custos de equipamentos para BIGCC com valores em dólares atualizados para 2015 e localizados para o Brasil.

Componente	Custo base/(10 ⁶ US\$)	Fator de escala	Escala base	F_{BM}
Secador	13,4	0,65	33,5 t _b /h	3,07
Gaseificador atmosférico	28,7	0,65	68,8 t _{bs} /h	2,79
Remoção do alcatrão	5,5	0,7	34,2 m ³ _N /s	3,07
Ciclones	4,6	0,7	34,2 m ³ _N /s	3,07
Trocador de calor de alta temperatura	12,0	0,6	39,2 kg _{vap} /s	3,03
Filtro	2,8	0,65	12,1 m ³ _N /s	3,07
Scrubber de condensação	4,6	0,7	12,1 m ³ _N /s	3,07
Compressores	19,6	0,85	13,2 MW	2,84
CC + TG + HRSG*	33,3	0,7	26,3 MW	3,07
Turbinas a vapor	9,0	0,7	10,3 MW	3,07

* Câmara de combustão + Turbina a gás + *Heat Recovery Steam Generator* (caldeira de recuperação)

Fonte: Adaptada de Hamelinck, Hooijdonk e Faaij (60) e Hamelinck e Faaij (64)

Apenas o trocador de calor a jusante do gaseificador precisar ser considerado um trocador de calor a alta temperatura, de custo mais elevado. A temperatura do gás de síntese nessas condições pode ultrapassar os 1200 K. O gás na saída da câmara de combustão também tem temperatura elevada, mas o custo do sistema câmara de combustão/turbina a gás/caldeira de recuperação é computado em conjunto.

Os demais trocadores de calor tiveram seus custos estimados a partir da Equação (3.13). Considerando-se os trocadores do tipo casco e tubos, utiliza-se os parâmetros $K_1 = 2,7652$, $K_2 = 0,7282$ e $K_3 = 0,0783$. A unidade de capacidade do equipamento é a área A em m², cujo valor é obtido da simulação fixando as médias logarítmicas das diferenças de temperatura no valor de 10 K.

Dos oito trocadores restantes, dois operam à pressão de 2,6 atm, dois a 6,9 atm e quatro a 80 atm. Segundo Turton et al. (53), para esse tipo de trocador de calor, apenas para pressões acima de 40 bar é necessário aplicar um fator de correção. O fator de custo modular para os trocadores que operam a pressões mais baixas é 3,29 e para os quatro demais vale 3,59.

3.3.1.3 Custos da hidrólise de biomassa

Os esquemas de pré-tratamento e hidrólise de biomassa implementados, ilustrados nas Figuras 12 e 13 respectivamente, são compostos pelos seguintes equipamentos principais:

- 2 bombas;
- 4 trocadores de calor;
- 1 reator de explosão a vapor;
- 2 centrífugas;
- 1 reator de hidrólise.

O custo do reator de explosão a vapor (pré-tratamento) foi avaliado de acordo com a referência mais recente, Jonker et al. (40). O modelo considerou hidrólise de biomassa em um reator à parte. Na falta de dados de custos para essa situação, considerou-se o preço do reator de hidrólise-fermentação como estimativa para o preço deste reator. Além disso, neste trabalho foi considerado que as enzimas são compradas, e não produzidas *in loco*, portanto o custo das enzimas foi contabilizado com os custos operacionais. O trabalho de Jonker et al. (40) tem como foco a indústria brasileira, e por isso não foi aplicado o fator de localização na correção dos preços. Os dados utilizados estão mostrados na Tabela 13.

Tabela 13 – Custos de equipamentos para pré-tratamento e hidrólise atualizados para 2015 e localizados para o Brasil.

Componente	Custo base/(10 ⁶ US\$)	Fator de escala	Escala base	F_{BM}
Manejo da alimentação	6,58	0,6	110 t _{bs} /h	2,99
Explosão a vapor	1,72	0,78	83 t _{bs} /h	3,89
Reator de Hidrólise	0,81	0,8	1,04 t _{EtOH} /h	3,12
Ampliação da destilaria	36,11	0,68	34,7 t _{EtOH} /h	2,49
Separação de sólidos	1,32	0,65	10,1 t _{bs} /h	3,63

Fonte: Adaptada de Hamelinck, Hooijdonk e Faaij (60) e Jonker et al. (40).

Os custos dos trocadores de calor, bombas e centrífugas foram estimados de acordo com a Equação (3.13), sendo que os trocadores são os equipamentos com custos mais significativos.

3.3.1.4 Custos da digestão anaeróbia de vinhaça

O sistema de digestão anaeróbia é constituído principalmente pelo biorreator e por um trocador de calor. Para a estimativa de custos do sistema de digestão anaeróbia utilizou-se a Equação (3.20), resultante da atualização do custo estimado por Hamelinck, Hooijdonk e Faaij (60) para valores de 2015.

$$C_P^0 = 2,13 \times \left(\frac{\text{Vinhaça tratada (t}_{v\text{ca}}/\text{h})}{43 \text{ t/h}} \right)^{0,6} \text{ milhões de dólares} \quad (3.20)$$

O fator de custo modular considerado foi 3,22.

3.3.2 Custos de operação

Os custos de operação foram estimados utilizando-se correlações consideradas típicas entre as fontes de custos diretos, fixos e gerais, conforme a literatura.

A Tabela 14 mostra as correlações utilizadas para estimativa dos custos operacionais. A referência para todas as correlações é Turton et al. (53), exceto no caso específico da manutenção, que foi retirado de Milanez et al. (7).

A somatória dos custos apresentados na Tabela 14 (com exceção da depreciação, discutida na Seção 3.3.4) resulta na Equação (3.21).

$$c_{op} = c_{mp} + c_{tr} + c_{ut} + 2,215 c_{mo} + 0,19 c_{op} + \frac{0,089}{\text{ano}} C_{TM}$$

$$c_{op} = 1,23 (c_{mp} + c_{tr} + c_{ut}) + 2,73 c_{mo} + \frac{0,11}{\text{ano}} C_{TM} \quad (3.21)$$

A completa especificação dos custos de operação depende, portanto, do conhecimento dos custos com mão de obra, matérias primas, tratamento e utilidades.

Tabela 14 – Correlações para estimativa de custos de operação

Fonte de custo	Valores típicos	Correlação usada
1. Custos diretos		
(a) Matérias primas	c_{mp}	Ver Seção 3.3.2
(b) Tratamento de resíduos	c_{tr}	Ver Seção 3.3.2
(c) Utilidades	c_{ut}	Ver Seção 3.3.2
(d) Mão de obra operacional	c_{mo}	Ver Seção 3.3.2
(e) Trabalho de escritório	$(0,10 \text{ a } 0,25) \cdot c_{mo}$	$0,18c_{mo}$
(f) Manutenção e reparos	$(0,02 \text{ a } 0,10/\text{ano}) \cdot C_{TM}$	$0,03C_{TM}$
(g) Suprimentos para manutenção	$(0,1 \text{ a } 0,2) \cdot (f)$	$0,0045C_{TM}$
(h) Encargos de laboratório	$(0,1 \text{ a } 0,2) \cdot c_{mo}$	$0,15c_{mo}$
(i) Patentes e royalties	$(0,00 \text{ a } 0,06) \cdot c_{op}$	$0,03c_{op}$
2. Custos fixos		
(j) Depreciação	d	Ver Seção 3.3.4
(k) Taxas locais e seguros	$(0,014 \text{ a } 0,050/\text{ano}) \cdot C_{TM}$	$0,032C_{TM}$
(l) Custos de <i>overhead</i>	$(0,5 \text{ a } 0,7) \cdot [c_{mo} + (e) + (f)]$	$0,708c_{mo} + 0,018C_{TM}$
3. Custos gerais		
(m) Custos administrativos	$0,15 \cdot [c_{mo} + (e) + (f)]$	$0,177c_{mo} + 0,0045C_{TM}$
(n) Custos de distribuição	$(0,02 \text{ a } 0,20) \cdot c_{op}$	$0,11c_{op}$
(o) Pesquisa e desenvolvimento	$0,05c_{op}$	$0,05c_{op}$

Fonte: Adaptada de Turton et al. (53) e Milanez et al. (7).

O custo de mão de obra pode variar consideravelmente de acordo com a área geográfica em função de diferenças salariais. Outro fator muito importante é o número de trabalhadores necessário para operação da planta. Alkhatay e Gerrard (1984 apud Turton et al.(53), 2008, p.226–227) estimaram o número de operadores (N_{MO}) em uma empresa química pela Equação (3.22).

$$N_{MO} = N_T \cdot (6,29 + 31,7N_p^2 + 0,23N_{np})^{0,5} \quad (3.22)$$

onde N_T é o número de turnos que a empresa precisa cobrir por operador, N_p é o número de etapas do processo que envolvem a manipulação de sólidos particulados e N_{np} é o número de etapas de processamento que não envolvem sólidos particulados. Em geral, N_{np} equivale à somatória do número de equipamentos excetuando-se bombas e tanques de enchimento ou mistura. Em uma empresa que funciona 365 dias por ano com 3 turnos por dia e onde operadores trabalham 49 semanas por ano, 5 turnos por semana, $N_T = \frac{365 \times 3}{49 \times 5} \approx 4,5$. Assumiu-se neste trabalho que a safra tem duração de 200 dias, todavia os funcionários da destilaria tipicamente não são demitidos, mas sim realocados para outras atividades, como manutenção de equipamentos.

Para computar os custos de mão de obra utilizaram-se os dados de Mussatto et al. (98), segundo os quais o salário médio de um operador de cervejaria no Brasil valia US\$ 4,76/h. A conversão para valores de 2015 foi feita considerando-se esse valor constante entre 2012 e 2015 e corrigindo-se o valor médio do dólar, que saltou no período de US\$ 1,00 = R\$ 1,95 em 2012 (99) para US\$ 1,00 = R\$ 3,33 em 2015 (92) em 2015. Assim, o custo médio de um operador foi estimado neste trabalho como US\$ 2,79/h.

O custo das utilidades corresponde aos custos de capital e operação dos sistemas necessários para fornecimento de eletricidade, ar, água, vapor, combustível, refrigeração, entre outras demandas do processo. Esse pode ser muito complicado, particularmente para grandes instalações (53).

Processos fortemente integrados podem reduzir significativamente os custos de utilidades reciclando eficientemente correntes de processo para reduzir a demanda de recursos exteriores ao processo. Em compensação, esse nível de integração torna a estimativa desses custos especialmente desafiadora nos estágios iniciais do projeto, antes que o projeto de eletrificação e uma proposta de integração energética cuidadosa sejam realizados.

Outro fator complicador é a técnica de otimização superestrutural escolhida para a realização deste trabalho. Se por um lado essa metodologia permite encontrar ao mesmo tempo a alternativa ótima de projeto de processo e seu ponto de operação ótimo, por outro lado a superestrutura torna muito mais complicada a tarefa de projetar uma rede de trocadores de calor integrando diferentes seções do processo. Por essa razão, o cálculo dos custos de utilidades aqui descrito foi bastante simplificado e algumas considerações precisaram ser realizadas.

A indústria sucroalcooleira é caracterizada pela sua autossuficiência em vapor e eletricidade e, em alguns casos, também em água. De fato, o maior incentivo para o projeto de uma biorrefinaria moderna está em aumentar os excedentes de eletricidade comercializáveis junto à rede elétrica, e não apenas reduzir o consumo de utilidades. Como este trabalho parte da premissa de que uma destilaria de etanol 1G previamente existente foi expandida para uma biorrefinaria de etanol e energia 1G2G, foi considerado que o processo tradicional já é bem integrado energeticamente e tem suas necessidades de energia e vapor satisfeitas. Apenas as necessidades de utilidades inseridas pelas novas unidades foram contabilizadas neste trabalho, embora as necessidades energéticas do processo 1G não necessariamente se mantenham constantes após a integração ao processo 2G. A mistura do xarope de glicose obtido da hidrólise ao caldo de cana ou ao melão incrementa as necessidades de vapor dos evaporadores, por exemplo, e seria importante avaliar com cuidado em uma etapa posterior do projeto se as demandas energéticas do processo podem ser atendidas adequadamente.

Foram considerados como custos de utilidades as despesas relacionadas ao suprimento de ar, água de resfriamento e vapor. Embora vapor seja produzido durante o processo, as demandas térmicas do processo foram contabilizadas como um custo de utilidades devido às dificuldades supracitadas com a integração energética do processo. As necessidades de eletricidade foram subtraídas da potência gerada pelas turbinas para efeito de cálculo do excedente de eletricidade comercializável. Considera-se o consumo de eletricidade no processo como 30 kWh/t de cana processada para a destilaria autônoma 1G e 24 kWh/t de biomassa lignocelulósica para o processo 2G (41).

O tratamento de águas residuárias (vinhaça) foi considerado apenas na hipótese de ser realizada digestão anaeróbia e seu custo está embutido nos custos operacionais desse processo.

Os insumos de maior custo são as enzimas usadas no processo de produção de etanol celulósico. A literatura recente dá preços em torno de US\$ 0,11 /L (41) e US\$ 0,13 /L (7). Outra fonte de custo importante está relacionada ao transporte de palha do campo para a fábrica. Esse custo foi estimado em US\$ 20 /t de palha seca (59).

Os custos das matérias primas e utilidades estão mostrados na Tabela 15 em valores atualizados pelo *CEPCI* (58).

Tabela 15 – Custos de matérias primas e de utilidades (sinal negativo) e preços de venda de produtos (sinal positivo) com valores em dólares de 2015.

Item	Valor (US\$)	Referência
Ar (25 °C, 1 atm)	-0,00477 /m ³	(53)
Água de resfriamento	-0,33 /m ³	(65)
Água de processo	-0,499 /GJ	(53)
Vapor (2,5 bar)	-0,0945 /m ³	(53)
	-41,00 /t	(53)*
	-19,70 /GJ	
Vapor (6 bar)	-41,45 /t	(53)*
	-20,15 /GJ	
Vapor (13 bar)	-41,80 /t	(53)*
	-21,10 /GJ	
Vapor de processo	-9,57 /t	(65)
Coleta e transporte da palha	≈ -20 /t	(59)
Enzimas	-0,11 /L _{EtOH}	(41)
Etanol Hidratado	+0,4940 /L	(100)
Elettricidade	+78,47 /MWh	(101)

* valores encontrados por regressão de dados para pressões de 5, 10 e 41 bar.

Forma de cálculo das utilidades

Algumas etapas do processo (sistema de cogeração Rankine, pré-tratamento e hidrólise) foram implementadas apenas de forma parcial na simulação da biorrefinaria completa visando aumentar a robustez e a velocidade de convergência da simulação, características importantes para a otimização. Isso levou principalmente à omissão de trocadores de calor e à simplificação de alguns processos, trocando evaporadores de múltiplo efeito por um de único efeito, por exemplo. Trocadores de calor são particularmente problemáticos, sobretudo quando modelam a interação entre duas correntes, em vez de simplesmente calcularem a quantidade de calor transferida para que uma única corrente material experimente uma mudança de temperatura especificada. A razão para isso é que durante a otimização da fração de bagaço hidrolisado as vazões alimentadas a diferentes subprocessos variam amplamente, podendo levar a mudanças de fase em correntes onde elas não eram esperadas, ou invertendo a posição prevista para as correntes quentes e as correntes frias em trocadores de calor.

A simulação de alguns processos em dois níveis de detalhe, mais detalhados quando simulados individualmente e menos detalhados na simulação da biorrefinaria completa, tem a desvantagem importante de não permitir avaliar diretamente as necessidades de utilidades do processo. Essas necessidades foram estimadas simulando-se as etapas individuais com correntes de alimentação especificadas de modo a reproduzir os valores esperados quando a fração de bagaço hidrolisado da biorrefinaria completa tivesse os valores de 0,15, 0,30, 0,50, 0,70 e 0,85. A partir daí, calculou-se a quantidade total de calor trocado em todos os trocadores em função dessa fração e criou-se um modelo de regressão linear correlacionando as duas variáveis. O custo de água de resfriamento em função do calor trocado no processo é mostrado na Tabela 15.

O processo de gaseificação foi implementado integralmente na simulação da biorrefinaria completa já evitando trocas de calor entre pares de correntes de processo.

3.3.3 Preços de venda dos produtos

A Tabela 15 também mostra o preço do etanol hidratado combustível pago ao produtor e o preço de venda de eletricidade em leilões públicos. Esses valores foram obtidos respectivamente da base de dados do Centro de Estudos Avançados em Economia Aplicada da ESALQ/USP e dos resultados dos leilões públicos de energia divulgados pela Agência Nacional de Energia Elétrica. Embora os custos considerados neste trabalho tomem como base o ano de 2015, este foi um ano de crise no setor sucroalcooleiro, quando os preços pagos ao produtor atingiram valores atipicamente baixos, média anual de US\$ 0,4107 /L. Em comparação, o preço médio do etanol entre janeiro de 2016 e abril de 2018 foi de US\$ 0,4940 /L com desvio padrão de US\$ 0,065 /L e considerando-se a média apenas entre janeiro e abril de 2018, o preço alcançou US\$ 0,5916 /L com desvio padrão de US\$ 0,011 /L (100). Optou-se por utilizar a média entre 2016 e 2018 em um cenário de referência (“caso base”) e a média em 2018 em um estudo de caso (ver Seção 3.3.7 para descrição dos cenários avaliados).

A média dos preços nos leilões de eletricidade em 2016 e 2017 foi de US\$ 78,47 /MW com desvio padrão de US\$14,40 /MW e no último leilão (05/2017 A-6) chegou a US\$ 85,73 /MW em média, com desvio padrão de US\$ 5,12 MW (101). Igualmente, usou-se a média de 2016 e 2017 como referência para o cenário de referência e o valor do leilão mais recente de 2017 em um estudo de caso.

3.3.4 Tributação e depreciação

Uma vez conhecidos os custos operacionais e as receitas, o cálculo do fluxo de caixa do projeto requer ainda a definição de dois parâmetros, a tributação e a depreciação. No primeiro caso considerou-se uma carga de 34 % (7).

Em relação à depreciação, atualmente ela é calculada pelo chamado “sistema de recuperação acelerada de custos” e equipamentos de processos químicos costumam ter seu tempo de vida avaliado em nove anos e meio (54), mas foi feita uma opção consciente de se simplificar o cálculo dessa variável considerando-a linear ao longo de dez anos, com valor de sucata (*scrap value*) de 10 %.

$$d = \frac{0,9 \cdot C_{TM}}{10} \quad (3.23)$$

3.3.5 Análise de investimentos alternativos

Inicialmente planejou-se utilizar o método da taxa interna de retorno para a análise dos investimentos. Essa escolha decorre de se tratar de uma técnica simples que retorna um valor de fácil entendimento e por dispensar a estipulação de uma taxa de desconto, cuja escolha pode ser difícil e controversa. Infelizmente, mesmo testando-se diferentes *solvers* não lineares, o *software* utilizado apresentou muitos problemas de convergência para encontrar o valor da taxa de juros i na Equação (3.24).

$$P - A \left[\frac{(1+i)^n - 1}{i(1+i)^n} \right] = 0 \quad (3.24)$$

em que P é o valor presente do investimento inicial, A é o fluxo de caixa representado como uma série de pagamentos anual uniforme e n é o tempo de vida do investimento, considerado 25 anos.

Houve mais sucesso no cálculo do valor presente líquido definindo-se previamente o valor da taxa de retorno como $i = 0,12$, valor da taxa mínima de atratividade para uma destilaria 2G sugerido por Milanez et al. (7).

O VPL é calculado pela Equação (3.25)

$$VPL = A \left[\frac{(1+i)^n - 1}{i(1+i)^n} \right] - P \quad (3.25)$$

O método do VPL, todavia, não é apropriado para comparação entre projetos com diferentes custos de investimento, uma vez que fornece apenas uma cifra monetária como resultado, sem considerar o investimento necessário para esse retorno ser obtido. Uma variante do método do valor presente mais adequada para os objetivos deste trabalho é a razão benefício/custo (RBC), definida como a razão entre o valor presente dos benefícios e o valor presente dos custos do processo. Por serem sempre positivos, os fluxos de caixa anuais A foram considerados como os benefícios (embora haja custos embutidos nos mesmos) e o investimento inicial P foi considerado o custo, conforme a Equação (3.26)

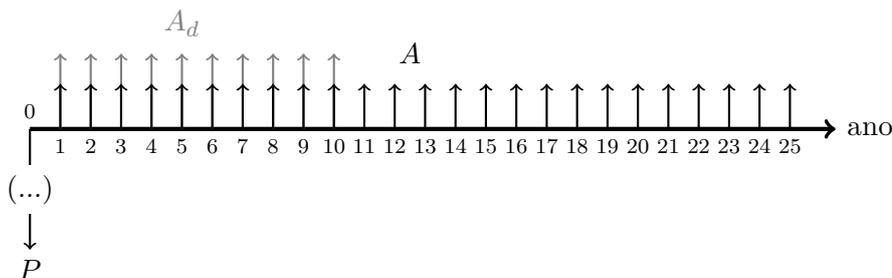
$$RBC = \frac{A}{P} \left[\frac{(1+i)^n - 1}{i(1+i)^n} \right] \quad (3.26)$$

Se $RBC > 1$ um investimento pode ser considerado atraente e quanto maior a relação, melhor o investimento, independentemente do capital inicial despendido. Se $0 < RBC < 1$, o processo tem fluxo de caixa positivo, mas não suficiente para o investimento ser considerado atraente. Finalmente, se $RBC < 0$, além de o projeto não ser atraente, seu fluxo de caixa é negativo isto é, perde-se dinheiro ano a ano.

Observe que uma vez que o tempo de vida considerado para a planta é de 25 anos, mas a depreciação do investimento se dá em dez anos, há na verdade dois fluxos de caixa computados respectivamente pelas Equações (2.7) e (2.8). O cálculo da RBC nesse caso pode ser calculado pela Equação (3.27). A série de pagamentos efetuada está representadas na Figura 15.

$$RBC = \frac{1}{iP} \left[(A_d - A) \cdot \frac{(1+i)^{10} - 1}{(1+i)^{10}} + A \cdot \frac{(1+i)^{25} - 1}{(1+i)^{25}} \right] \quad (3.27)$$

Figura 15 – Série de pagamentos considerando dois fluxos de caixa constantes: com depreciação linear por 10 anos e durante todo o tempo de vida do projeto de 25 anos.



Fonte: Elaborada pelo autor.

3.3.6 Otimização econômica

A análise econômica dos projetos estudados foi feita simultaneamente à resolução de um problema de maximização do valor da RBC de cada configuração possível da biorrefinaria (superestrutura), caracterizada pela fração de bagaço hidrolisado, pelo processo usado para geração de eletricidade (ciclo de potência com combustão ou com gaseificação de biomassa) e da produção ou não de biogás por digestão anaeróbia da vinhaça.

A fração de bagaço hidrolisada precisou obedecer a duas restrições: em primeiro lugar, observou-se que a simulação da biorrefinaria não convergia quando a fração de bagaço hidrolisada era exatamente igual a 1,00 (100%), no entanto o mesmo problema não era observado quando a fração era ligeiramente menor; por isso o valor de 0,99999 foi usado como limite superior de otimização. Observou-se, em segundo lugar, que a simulação não convergia para frações de bagaço inferiores a 0,15, possivelmente devido a problemas resultantes da integração entre correntes no processo de hidrólise da celulose e no de fermentação do caldo; por isso foi imposto ao problema de otimização como limite inferior a necessidade de alocar ao menos 15% do bagaço para a hidrólise.

Utilizou-se otimização por enxame de partículas (PSO), disponível no simulador de processos EMSO, com oito partículas e oito iterações. Os parâmetros de inércia usados tinham valores de 0,5 e 0,9 e os parâmetros de aprendizado valiam 2. A experiência com o *software* mostrou que esses parâmetros foram suficientes para garantir resultados consistentes entre diferentes otimizações num tempo relativamente curto.

3.3.7 Estudos de caso

O caso base estudado nos resultados consistiu nos custos de capital e de operação calculados exatamente conforme a metodologia previamente descrita nas Seções 3.3.1 e 3.3.2. Os preços de venda de produtos considerados foram os informados na Subseção 3.3.3.

Além do caso base, foram avaliados vinte e oito estudos de caso onde os valores de um ou mais parâmetros foram perturbados a fim de se testar diferentes cenários econômicos. Para os oito primeiros estudos de caso priorizou-se a escolha de cenários que pudessem alterar os resultados encontrados na otimização superestrutural. Os vinte restantes foram definidos de forma aleatória para evitar a influência de vieses do experimentador. Análises de quantificação de risco pelo Método de Monte Carlo foram realizadas em todos os estudos de caso.

Nos casos 1 e 7 são considerados preços de venda mais altos para os produtos. Os preços do etanol e da eletricidade passaram por grandes variações entre 2016 e 2018 (100). No ano de 2017, em particular, os valores pagos ao produtor de etanol chegaram a um mínimo de US\$ 0,3910/L, puxando a média do período para baixo. Em 2018 houve uma recuperação, o preço médio entre 2 de janeiro e 29 de março deste ano foi de US\$ 0,5916/L com desvio padrão de US\$ 0,011/L. No caso da eletricidade, o último leilão realizado em 2017 pagou valor médio de US\$ 85,73/MW de eletricidade e desvio padrão de US\$ 5,12/MW. Estes valores mais recentes foram usados nestes estudos de caso para analisar uma situação onde o cenário econômico para uma biorrefinaria é mais favorável sem deixar de ser realista.

Os casos 2 a 5 envolvem alterações nos custos de investimento de algum dos subprocessos estudados mantendo-se os preços de venda dos produtos iguais aos do caso base. Não houve

alteração direta nos custos de operação, mas o custo de investimento afeta esse parâmetro de forma indireta, como pode-se observar na Equação (3.21).

- Caso 2: Custos de capital da etapa de pré-tratamento e hidrólise considerados 30 % menores.
- Caso 3: Custos de capital do ciclo de cogeração por combustão do bagaço 30 % menores.
- Caso 4: Custos de capital do ciclo de cogeração integrado à gaseificação do bagaço 30 % menores.
- Caso 5: Custos de capital do sistema de digestão anaeróbia 30 % maiores.

Nos casos 2 a 4, foi proposta a redução nos custos de investimento de cada subprocesso, enquanto que no caso 5 foi analisado um aumento. Essa escolha foi uma consequência de os resultados para a digestão anaeróbia terem se mostrado economicamente favoráveis em todos os cenários estudados, por isso foi tomada a decisão de testar se essa conclusão se manteria válida na hipótese de os custos desse subprocesso terem sido subestimados por este trabalho.

Os casos 6 e 7 envolvem a redução dos custos de investimento de todos os subprocessos e baixos custos das enzimas usadas no processo 2G (US\$ 0,06 /L em vez de US\$ 0,11 /L). Esses cenários visavam estudar possíveis cenários de “longo prazo” nos quais efeitos de aprendizagem tecnológica facilitassem a inserção das tecnologias pesquisadas. Os custos de investimento dos processos de hidrólise, BIGCC e biodigestão foram considerados 30 % menores. Para o processo de cogeração Rankine assumiu-se uma redução ainda maior, de 50 %. Essa redução visava compensar a possibilidade de o custo desse processo ter sido superestimado neste trabalho, como sugere a comparação entre a Tabela 2, baseada no trabalho de Junqueira et al. (59), e a Tabela 16, descrita na Subseção 4.1.1. A diferença entre os casos 6 e 7 é que este último considera os preços de venda dos produtos mais elevados, conforme explicado anteriormente.

O caso 8 se trata de uma redução da escala do processo em 50 %, isto é, em comparação com o caso base, apenas metade do bagaço e da palha são processados neste cenário. Este estudo de caso visava verificar o efeito da economia de escala sobre a atratividade do processo. Dificuldades com a convergência das simulações impediram a simulação e otimização das condições de operação propostas. Por esse motivo optou-se por realizar uma estimativa para o valor da razão benefício/custo do processo no caso de metade da biomassa estarem disponíveis para o processo. Reduziu-se pela metade o excedente de eletricidade, a produção de etanol celulósico, os custos de matéria prima e de utilidades. Para os custos de investimento usou-se uma lei de potência conforme a Equação (2.3) e a regra dos seis décimos para aproximar o expoente. Isso significa que os custos de investimento foram multiplicados por $0,5^{0,6} \approx 0,660$. A redução nos custos de investimento foi propagada indiretamente para a aproximação dos custos de operação.

Finalmente, os casos A.1 a A.20 são estudos de caso nos quais os preços de venda dos produtos e os custos de investimento de cada subprocesso foram multiplicados por um número aleatório normalmente distribuído com valor médio igual à unidade e desvios-padrão proporcionais aos desvios para cada variável nos demais estudos de caso (razão entre desvio padrão e média de cada variável mantida constante). Nenhum fator multiplicador foi usado para custos de operação, afetados indiretamente pelos custos de investimento. Cada cenário foi otimizado e teve seu risco quantificado por MMC. Embora vinte cenários constituam uma amostra muito pequena para

permitir tirar conclusões gerais sobre o processo, um procedimento sistemático com um número muito grande de cenários seria muito custoso em tempo computacional.

3.3.8 Método de Monte Carlo

A otimização realizada se baseia em muitos dados incertos relativos às estimativas de custos de investimento e de operação e às variações nos preços dos produtos. A incerteza na precisão do resultado ótimo foi estimada utilizando-se o Método de Monte Carlo.

Embora exista alguma incerteza também em relação aos valores de parâmetros técnicos do processo, como por exemplo os rendimentos do pré-tratamento ou da hidrólise, assumiu-se que eles teriam uma influência pequena sobre as conclusões deste trabalho em comparação com a incerteza sobre os parâmetros econômicos, e por isso não foram incluídos nas análises.

As simulações mantiveram as condições de operação ótima em cada cenário estudado, mas substituíram os valores de seis variáveis (preços do etanol e da eletricidade e custos de investimento do pré-tratamento/hidrólise, digestão anaeróbia e de ambos os métodos de cogeração) por seis conjuntos com mil valores aleatórios em cada um.

Como o simulador de processos EMSO não dispõe de uma função geradora de números aleatórios, essas variáveis foram geradas a partir de um *script* em Python, impressas em um arquivo e, finalmente, utilizadas como um *array* no EMSO a partir do qual os valores de RBC foram calculados. A fim de diminuir o esforço computacional, optou-se por não levar em conta os custos da digestão anaeróbia na análise, uma vez que eles são significativamente menores que os custos dos outros processos.

O resultado obtido da simulação de Monte Carlo é uma distribuição do número de simulações nas quais se encontra valores de RBC dentro de uma determinada faixa. A partir desses dados é possível se estimar a probabilidade de prejuízo de um projeto como a razão entre o número de simulações nas quais se obteve $RBC < 1,0$ e o número total de simulações.

O método foi aplicado assumindo-se que os custos reais de cada processo (de investimento e de operação) teriam uma probabilidade de cerca 95 % de estar localizado em uma faixa entre 30 % e 170 % do valor estimado. A escolha desse intervalo decorre da imprecisão para as estimativas de estudo de custos tipicamente ser de até $\pm 70\%$ (53). Supôs-se que a distribuição dos custos possíveis seria gaussiana (distribuição normal). Essa suposição pode ser justificada pelo Teorema Central do Limite, segundo o qual a soma de um grande número de variáveis aleatórias independentes tende a uma distribuição normal mesmo que cada uma dessas variáveis a princípio não obedeça a uma distribuição normal (102). No caso deste trabalho, a soma de variáveis aleatórias vem das contribuições de custos fatoriais e dos cálculos de custos com matérias primas, utilidades, mão-de-obra e investimento, conforme mostrado nas Equações (3.16) e (3.21) respectivamente. Embora o custo correto de cada fonte de custos não seja uma variável aleatória, a estimativa desses custos varia de forma aleatória em torno do valor correto.

A distribuição gaussiana pode ser representada pela Equação (3.28).

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp \left[-\frac{(x - \mu)^2}{2\sigma^2} \right] \quad (3.28)$$

μ é o valor médio da distribuição (estimativa inicial do custo) e σ é o desvio padrão. É bem conhecido que em uma distribuição normal há cerca de 68,3 % de probabilidade de que um

resultado esteja a um desvio padrão da média; 95,4 % de probabilidade de estar a até dois desvios padrão da média; e 99,7 % de probabilidade de estar a até três desvios padrão da média (102). Assumiu-se que uma variação de 70 % em relação às estimativas iniciais de cada custo estaria a dois desvios padrão da média, ou seja, $\sigma = \frac{70\%}{2}\mu = 0,35\mu$.

No caso dos preços do etanol e da eletricidade foram utilizados dados de anos recentes para os cálculos da média e do desvio padrão conforme explicado na Seção 3.3.3 e a partir daí foram concebidas as curvas normais usadas para gerar os valores pseudoaleatórios para os preços na implementação do método de Monte Carlo.

As distribuições de RBC foram representadas graficamente na forma de um histograma normalizado. A normalização consistiu de tornar a área do histograma unitária. Uma suavização do histograma também foi representada graficamente utilizando-se uma estimativa de densidade da distribuição considerando-se um *kernel* gaussiano. A função estimativa de densidade é calculada conforme a Equação (3.29).

$$f(x) = \frac{1}{nh} \sum_{i=1}^n K\left(\frac{x - x_i}{h}\right) \quad (3.29)$$

Em que n é o número de barras do histograma, h é um parâmetro de suavização conhecido como largura de banda, x_i a altura de cada barra e K é o *kernel*, uma função distribuição de densidade de probabilidade, que neste caso é a distribuição normal, dada pela Equação (3.28). O valor da largura de banda foi definido de forma automática pelos algoritmos do pacote de visualização de dados estatísticos Seaborn do Python.

Além do histograma normalizado e da estimativa de densidade, foi graficada também a distribuição cumulativa, que corresponde à integral da estimativa de densidade e tem forma sigmoideal. O valor da distribuição cumulativa quando $RBC = 1$ (o limiar de viabilidade econômica) representa a probabilidade estimada de que o projeto não seja atrativo. Esse valor corresponde à proporção das simulações nas quais o valor da razão benefício/custo foi menor ou igual à unidade.

Reciprocamente, a probabilidade de um projeto ser considerado atrativo pode ser estimada como a fração de simulações para as quais encontrou-se $RBC \geq 1$. Por exemplo, se 60 simulações entre mil tiveram esse resultado, pode-se estimar que a probabilidade de o investimento ser atrativo está em torno de 6,0 %. Em alguns casos não se encontrou uma única simulação com razão benefício/custo superior a um; nesses cenários a probabilidade de o projeto ser atrativo foi considerada um valor desconhecido inferior a 0,1 %.

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

4.1 Caso Base

O caso base é o cenário de referência para o qual os custos de investimento e operação e os preços de venda dos produtos foram calculados conforme discutido nas Seções 3.3.1 e 3.3.2.

4.1.1 Resultados da otimização

A otimização do caso base resultou no máximo para a função objetivo (RBC) de 0,1805 quando as variáveis de otimização valiam:

- fração de bagaço hidrolisado (FBH): 0,99999.
- processo usado para geração de eletricidade: 0 (ciclo de potência com combustão do bagaço).
- geração de biogás: 1 (há produção de biogás).

O problema resultante teve um total de 22419 variáveis e 21755 equações, e portanto, 664 graus de liberdade. A otimização, usando método PSO, convergiu após 1796 segundos em um computador com processador Intel Core™ Duo CPU T6670 @ 2,20 GHz×2 usando-se o *EMSO academic beta version 0.10.9*. Essa versão do *software* tem disponível além do PSO outra biblioteca viável para resolução de MINLP baseada no pacote livre *Bonmin*. Pretendia-se utilizar o algoritmo de *branch-and-bound* não linear disponível no pacote a fim de se comparar a diferença entre os tempos de convergência, no entanto todas as tentativas resultaram em falhas de segmentação que levaram o *EMSO* a fechar. Foi feito um teste com um outro problema de otimização inteira mista, mais simples, rodando na versão mais recente do *EMSO* e em outra mais antiga na qual o *Bonmin* foi adicionado manualmente e constatou-se que na versão nova aquele problema também resulta em fechamento do *EMSO*, enquanto que na mais antiga ele funciona normalmente, de onde conclui-se que o problema é com a versão mais recente do *software*. Infelizmente, não se pôde transferir o código da superestrutura examinada neste trabalho para a versão mais antiga do *EMSO*, uma vez que a implementação faz uso de recursos mais novos do programa, como o uso de dois arquivos de estimativas iniciais, então não houve oportunidade de comparar os dois métodos.

Uma vez que a razão benefício/custo ótima tem valor inferior à unidade, mas superior a zero, pode-se concluir que, apesar de lucrativo, o retorno obtido com o empreendimento não recompensa o alto investimento inicial à taxa de retorno esperada. O projeto não é, portanto, economicamente atrativo.

A condição ótima envolve a hidrólise de todo o bagaço produzido visando a produção de etanol lignocelulósico. Observe que mesmo nesse cenário, ainda há a coleta de palha do campo e o aproveitamento de lignina e de biogás visando a geração de calor e potência. No ótimo operacional ainda são produzidos 35,12 MW de excedente de eletricidade.

Os custos associados a cada processo no projeto de expansão de uma destilaria anexa na condição ótima encontrada estão mostrados na Tabela 16. Observa-se que os processos mais dispendiosos são os de cogeração, sendo que o sistema BIGCC têm custos quase cinco vezes mais altos que o sistema de cogeração tradicional.

Tabela 16 – Escalas, receitas brutas e custos dos processos na condição ótima de operação.

Subprocesso	Escala de processamento	Escala de produção	Receita bruta (US\$)	Custo (US\$) de capital	Custo (US\$) de operação
Hidrólise	88 t_{bs}/h	16,5 m^3/h	18,61 / t_c	132,5 mi	2390 /h
Rankine	120 t_{bs}/h	35 MW ^a	6,27 / t_c	267,2 mi	2563 /h
BIGCC ^b	120 t_{bs}/h	199 MW ^a	35,65 / t_c	1282,4 mi	11 097 /h
Biodigestão	2040 $t_{vça}/h$	30,3 MW	5,37 / t_c	19,5 mi	311,5 /h
Total para o caso base	$3,84 \times 10^6 t_c/safra$			494,6 ^c	5886,99 ^d

a - excedentes de eletricidade.

b - não contabilizada no custo total do caso base.

c - custo total do projeto, Equação (3.16)

d - inclui custo de coleta da palha, US\$ 20 / t_b .

É possível fazer uma comparação entre as estimativas de custo da Tabela 16 e as mostradas na Tabela 2, da autoria de Junqueira et al. (59), uma vez que as tecnologias utilizadas e as escalas adotadas em ambos os trabalhos são próximas. A diferença mais significativa está na estimativa de custo de investimento do sistema de cogeração por combustão da biomassa (Rankine), com a ressalva de que o trabalho citado não precificou o sistema BIGCC. O custo do sistema de cogeração Rankine na referência citada é cerca de metade do valor estimado neste trabalho. A estimativa de custos da referência foi produzida a partir de um banco de dados interno do Laboratório Nacional de Ciência e Tecnologia do Etanol (CTBE), presumivelmente com maior precisão do que a análise de custos preliminar conduzida neste trabalho, mas baseada em parâmetros econômicos confidenciais que restringem a capacidade de reprodução de seus resultados por terceiros. A diferença observada entre as duas análises é previsível, dada a grande margem de erro da aproximação adotada neste trabalho, mas naturalmente pode levar a conclusões diferentes sobre o melhor investimento.

Mesmo o sistema de cogeração mais barato é um investimento cerca de duas vezes mais custoso que o processo de hidrólise e pré-tratamento do bagaço, apesar de o custo de operação ser quase equivalente. Essa diferença constitui uma hipótese plausível para a preferência por se hidrolisar todo o bagaço, uma vez que os custos do sistema de cogeração ficariam ainda maiores em relação aos da hidrólise se uma fração do bagaço fosse desviada para produção de eletricidade. A implementação do processo de produção de digestão anaeróbia se mostrou a menos custosa, com investimento cerca de quinze vezes menor que o sistema de cogeração Rankine e sete vezes mais barato que o processo de hidrólise.

A escala dos processos de cogeração na condição ótima operacional, em que todo o bagaço é hidrolisado (mas biogás, palha, lignina e biomassa retida em torta de filtro de alguns processos de separação são aproveitadas para produção de energia) é de aproximadamente 120 t_{bs}/h gerando cerca de 51 MW de eletricidade no caso do processo de cogeração Rankine e com excedente de 35 MW. Com esse excedente vendido a US\$ 78,47 /MWh e processamento de $3,84 \times 10^6 t_c/ano$, pode-se calcular o rendimento e a receita bruta com a venda de eletricidade por

esse processo respectivamente como 79,9 kWh/t_c e US\$ 6,27 /t_c. Esse rendimento é compatível com o encontrado por Junqueira et al. (59) para biorrefinarias 1G2G, 68,4 kWh/t_c no cenário de curto prazo.

No caso do sistema BIGCC, a geração de eletricidade seria de 294 MW, com excedente de 199 MW, o que implica em uma receita bruta de US\$ 35,65 /t_c.

A escala do processo de pré-tratamento por explosão a vapor é de 109 t_{bs}/h, da qual 88 t_{bs}/h é hidrolisada (contribuindo com 16,5 m³/h de etanol 2G, ou 21,8% do total produzido). A receita bruta é de US\$ 18,61 /t_c e o rendimento de 187,5 L/t_{bs}, menor que o encontrado em Junqueira et al. (59), de 237,5 L/t_{bs} no cenário de curto prazo.

No caso da digestão anaeróbia, cerca de 2040 t/h de vinhaça (misturada a pentoses) são consumidas para produção de biogás, produzindo 20,7 t/h e cerca de 30,3 MW de energia. Observa-se que o biogás sozinho gera 86% do excedente de eletricidade da biorrefinaria com sistema Rankine. Uma vez que o processo de produção de etanol 2G demanda muita energia (cerca de 24 kWh/t_{bs} (41)), a biodigestão é uma etapa fundamental para sua viabilidade. A receita bruta do processo é de US\$ 5,37 /t_c.

Observe que mesmo optando-se pela hidrólise de todo o bagaço, ainda utiliza-se mais biomassa no processo de cogeração (120 t_{bs}/h) do que na produção de etanol celulósico (109 t_{bs}/h).

A Figura 16 mostra como a produção de etanol e de excedente de eletricidade variam em função da fração de bagaço hidrolisado (FBH) no processo modelado de forma detalhada. Pode-se observar uma relação linear entre as variáveis obedecendo às Equações (4.1) e (4.2).

$$\text{produção de etanol} = (58,9 + 16,7 \cdot FBH) \text{ m}^3/\text{h} \quad (4.1)$$

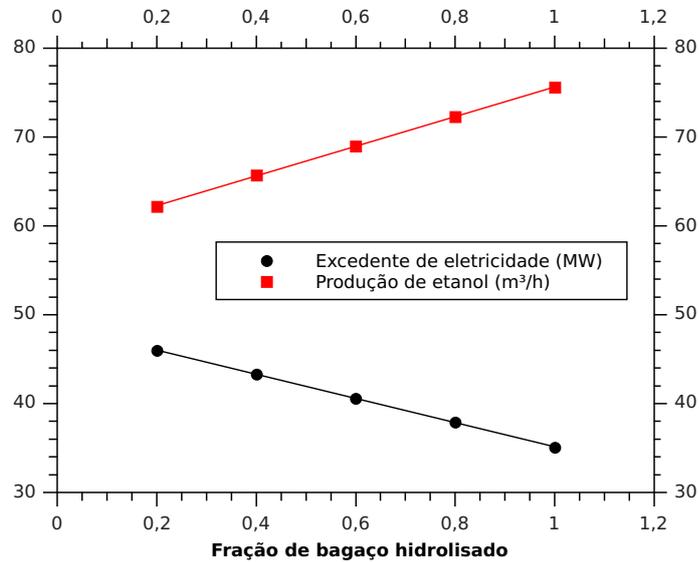
$$\text{excedente de eletricidade} = (48,7 - 13,6 \cdot FBH) \text{ MW} \quad (4.2)$$

A razão benefício/custo do processo também segue uma relação linear com a fração de bagaço hidrolisado, dada pela Equação (4.3) e pela Figura 17.

$$RBC = -0,057 + 0,240 \cdot FBH \quad (4.3)$$

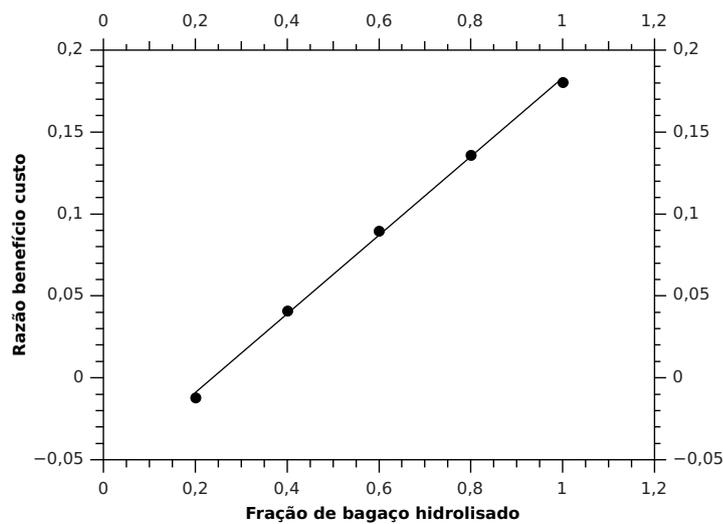
As taxas têm uma dependência linear em relação à fração de bagaço hidrolisado porque essa variável controla a vazão de biomassa destinada a cada ramo da superestrutura e os modelos utilizados para os principais equipamentos são lineares ou aproximadamente lineares em relação à escala de produção, embora não necessariamente em relação a outras variáveis. Essa é uma possível explicação para o fato de o ponto ótimo estar localizado em um extremo de fração de bagaço hidrolisado, uma vez que problemas de otimização linear têm como solução pontos que pertencem à fronteira da região factível.

Figura 16 – Variação na produção de etanol e de excedente de eletricidade em função da fração de bagaço hidrolisado.



Fonte: Elaborada pelo autor.

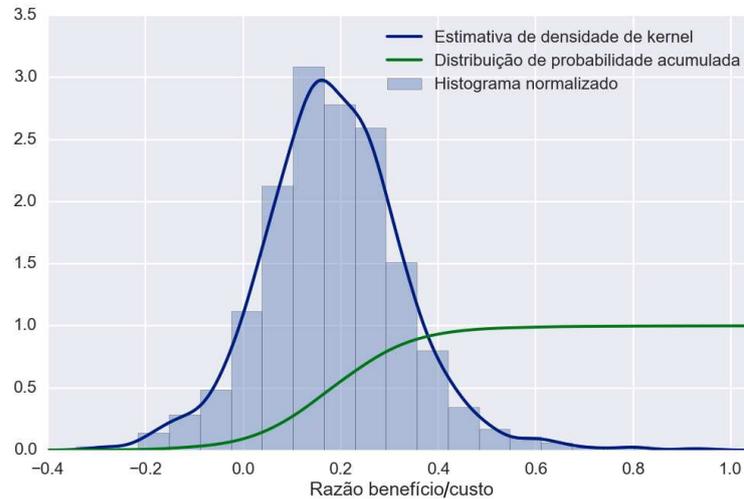
Figura 17 – Variação da razão benefício/custo em função da fração de bagaço hidrolisado.



Fonte: Elaborada pelo autor.

4.1.2 Análise de Risco por Método de Monte Carlo

Figura 18 – Distribuição de razões benefício/custo em 1000 simulações com custos e preços aleatórios no caso base.



Fonte: Elaborada pelo autor.

A avaliação de risco pelo MMC resultou em um problema com 41 389 variáveis, 30 724 equações e 10 665 graus de liberdade. Apesar de ter mais variáveis que o problema de otimização, esse problema levou um tempo muito menor para ser resolvido, apenas 19,188 s. Isso se deve ao fato de as variáveis adicionais estarem todas contidas em *arrays* sobre os quais as mesmas operações são executadas, demandando menos esforço computacional que um método estocástico de otimização.

A distribuição de razões benefício/custo obtida após mil simulações é apresentada na Figura 18. O valor da distribuição de probabilidade acumulada quando a RBC = 1 é de 1,000; ou seja, em mil simulações não houve nenhum cenário no qual o projeto fosse viável. Isso sugere que a probabilidade de o projeto ser atrativo provavelmente é inferior a uma chance em mil (0,1 %).

A distribuição obtida teve valor médio $\mu = 0,1849$, valor próximo respectivamente ao RBC ótimo do caso base, 0,1805, e desvio padrão de $\sigma = 0,1467$.

4.2 Estudos de caso

4.2.1 Caso 1: Altos preços de venda de etanol e eletricidade

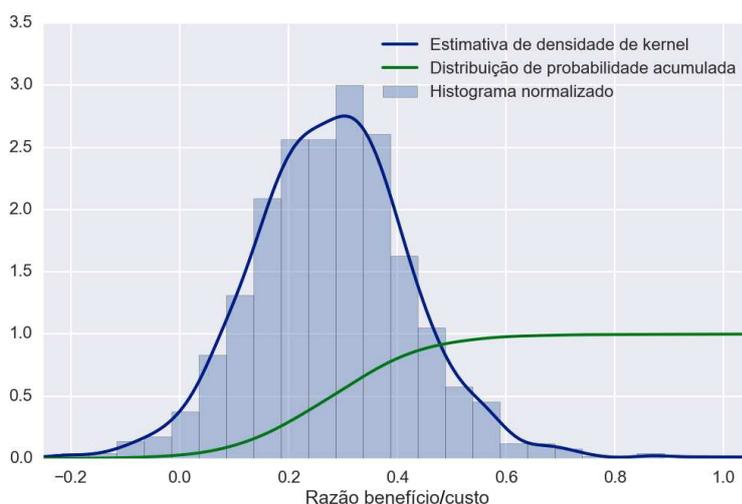
A otimização da superestrutura resultou no máximo para a função objetivo (RBC) de 0,2741 quando as variáveis de otimização valiam:

- fração de bagaço hidrolisado (FBH): 0,99999 (máximo valor permitido).
- processo usado para geração de eletricidade: 0 (ciclo de potência com combustão do bagaço).
- geração de biogás: 1 (há produção de biogás).

As condições ótimas não mudaram entre o caso base e este estudo de caso, no entanto observou-se um aumento no valor da razão benefício/custo. Esse aumento não foi suficiente para tornar o investimento economicamente atrativo considerando-se uma taxa de retorno de 12 %, contudo. Oscilações normais no cenário econômico podem levar a grandes mudanças na RBC do projeto. Trata-se de um projeto arriscado, portanto, o que justifica a escolha das biorrefinarias reais de diversificarem sua produção fabricando açúcar ou outros produtos.

A análise pelo método de Monte Carlo pode ser visualizada na Figura 19. O resultado médio obtido para a razão benefício/custo foi de 0,2612 com desvio padrão de 0,4681. Este foi o maior desvio padrão entre todos os estudos de caso, presumivelmente porque o modelo econômico é mais sensível aos preços dos produtos do que aos custos dos subprocessos. Como a análise de risco foi realizada considerando-se as condições de operação ótimas, embora com os parâmetros econômicos variáveis, é esperado que o valor médio da distribuição esteja próximo à RBC ótima (0,2741). A probabilidade de obter lucro com o projeto foi de aproximadamente 0,1 % neste cenário, isto é, em mil simulações, apenas uma resultou em $RBC > 1$.

Figura 19 – Distribuição de razões benefício/custo em cenário com preços de produtos altos (Caso 1).



Fonte: Elaborada pelo autor.

4.2.2 Caso 2: Custos de investimento da hidrólise 30 % menores

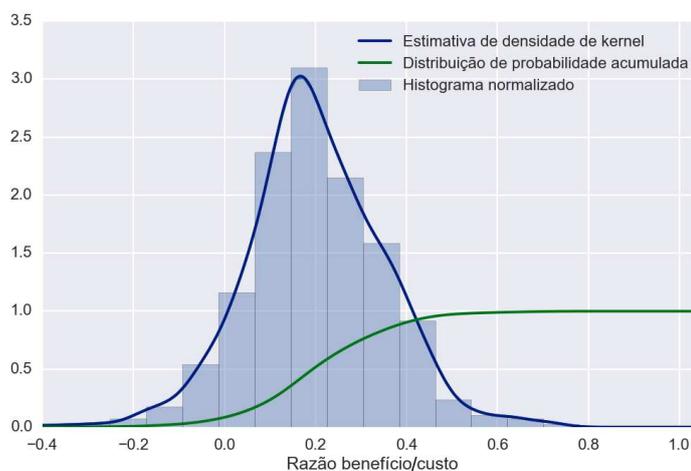
Os estudos de caso a partir deste são especulativos. Este cenário avaliou as consequências de uma redução de 30 % nos custos de investimento dos processos de pré-tratamento e hidrólise da celulose, o que levou a uma redução de aproximadamente 10 % nos custos de operação desses subprocessos.

A modificação introduzida neste estudo de caso torna a produção de etanol celulósico ainda mais vantajosa em relação ao caso base, de forma que a condição ótima não sofre alteração, uma vez que já requer a hidrólise do máximo de bagaço possível. As decisões sobre o método de cogeração utilizado e uso da biodigestão também foram similares às do caso base. A razão

benefício/custo ótima encontrada neste cenário foi 0,2050.

A análise de risco do investimento pelo método de Monte Carlo, ilustrada na Figura 20, foi feita assumindo-se que os valores estimados para os custos de investimento do pré-tratamento e hidrólise fossem 30 % menores e os de operação 10 % menores, mas ainda com imprecisão na faixa de $\pm 70\%$ em torno do valor do custo de investimento. Encontrou-se RBC média de 0,2021 com desvio padrão de 0,1562. A estimativa da probabilidade de o projeto ser atraente continuou em 0,1 %.

Figura 20 – Distribuição de razões benefício/custo em cenário com custos do pré-tratamento e hidrólise baixos (Caso 2).



Fonte: Elaborada pelo autor.

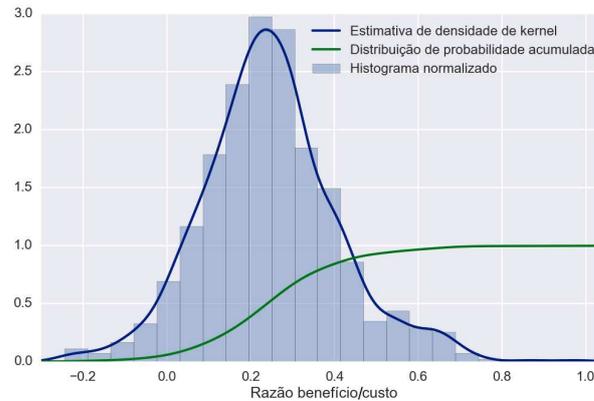
4.2.3 Caso 3: Custos de investimento do sistema de cogeração Rankine 30 % menores

Em consequência da redução nos custos de investimento, os custos de operação neste cenário são cerca de 21,5 % menores em relação ao caso base. A condição ótima não se alterou em função da redução do custo de investimento no sistema de cogeração, o ciclo Rankine já era mais vantajoso que o BIGCC e naturalmente isso continuou verdade. Todavia, ainda foi mais vantajoso hidrolisar todo o bagaço do utilizar alguma fração dele para gerar energia.

Neste cenário a RBC teve valor de 0,2448, um resultado que mostra que o alto custo estimado para a construção do sistema de cogeração Rankine é um fator extremamente importante para a viabilidade do projeto, mesmo que a maior parte do bagaço seja hidrolisado.

A RBC média encontrada no MMC foi de 0,2481 com desvio padrão de 0,1668. Apesar do grande aumento na RBC, a probabilidade de o investimento ser atraente nessas circunstâncias pouco se alterou em relação aos cenários anteriores, sendo estimada em 0,2 %. A síntese dos resultados pode ser observada na Figura 21.

Figura 21 – Distribuição de razões benefício/custo em cenário com custos do sistema de cogeração Rankine baixos (Caso 3).



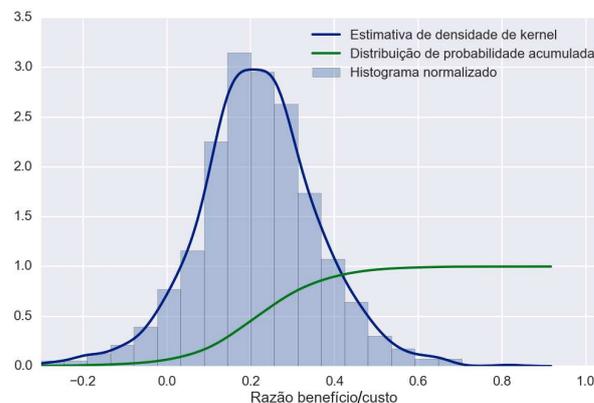
Fonte: Elaborada pelo autor.

4.2.4 Caso 4: Custos de investimento do BIGCC 30 % menores

A redução de 30 % nos custos de investimento levaram a custos de operação 23,8 % menores. A otimização superestrutural resultou novamente na decisão de que deve-se hidrolisar todo o bagaço e deve-se fazer biodigestão da vinhaça. No entanto, neste cenário o investimento em produção de energia através de BIGCC foi mais atrativo do que a cogeração pelo sistema baseado em combustão.

A vantagem competitiva do BIGCC não foi, no entanto, suficiente para tornar o processo economicamente atrativo, uma vez que a função objetivo encontrada teve o valor de $RBC = 0,2182$. O probabilidade de viabilidade do projeto, conforme estimado pelo método de Monte Carlo, é muito pequena, isto é, $< 0,1\%$. A análise pode ser visualizada na Figura 22, onde a distribuição tem média 0,2164 e desvio padrão 0,1472.

Figura 22 – Distribuição de razões benefício/custo em cenário com custos do sistema BIGCC baixos (Caso 4).



Fonte: Elaborada pelo autor.

4.2.5 Caso 5: Custos de investimento da digestão anaeróbia 30 % maiores

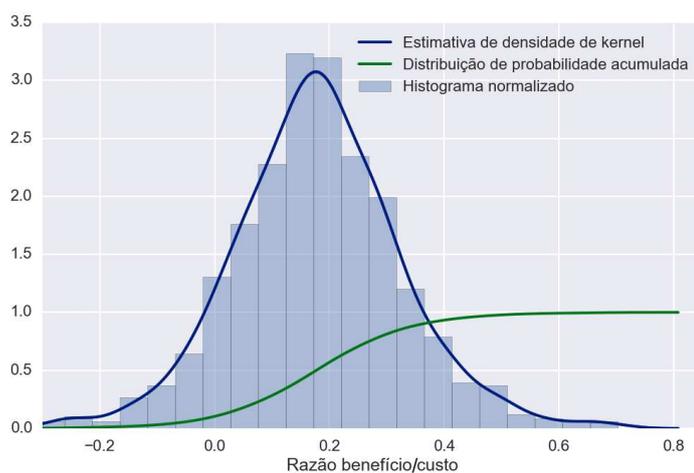
O uso da digestão anaeróbia foi considerado vantajoso no caso base e em todos os estudos de caso. Este cenário investiga a possibilidade de seu custo de capital ter sido subestimado e o fixa em um patamar 30 % maior. Os custos de operação, em consequência disso, se tornaram 12,9 % maiores.

Nessas circunstâncias, a opção por utilizar biogás ainda se mostrou mais vantajosa que a opção por não utilizá-lo. A fração ótima de bagaço hidrolisado e a opção para cogeração de energia tampouco se alteram em relação ao caso base.

O valor da máxima razão benefício/custo atingível no cenário de maior custo para a produção de biogás é $RBC = 0,1767$, uma ligeira redução ante o valor de $0,1805$ obtido no caso base.

A probabilidade de o projeto ser atraente ainda é estimada como $< 0,1\%$, com base em 1000 simulações. A média das RBC obtida pelo MMC foi de $0,1785$ com desvio padrão de $0,1460$. A análise está representada graficamente na Figura 23.

Figura 23 – Distribuição de razões benefício/custo em cenário com custos do processo de digestão anaeróbia altos (Caso 5).



Fonte: Elaborada pelo autor.

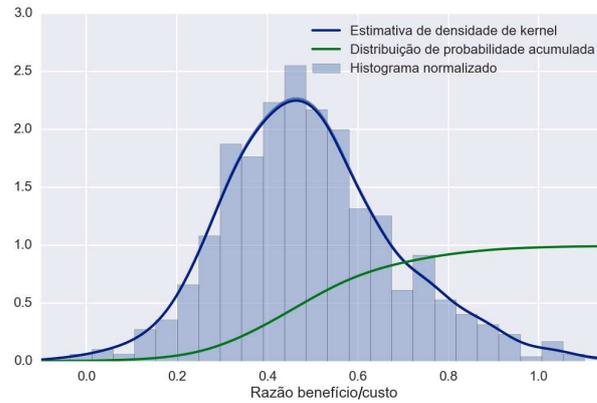
4.2.6 Caso 6: Longo prazo

Os custos de operação neste estudo de caso são afetados não apenas pela redução nos custos de investimento de cada subprocesso, mas também pela redução no custo das celulases por litro de etanol produzido, que foi considerado como US\$ 0,06 (41, 59), em vez de US\$ 0,11 como nos cenários anteriores. As reduções nos custos operacionais foram de 33 % no caso do pré-tratamento e hidrólise, 36 % no caso da cogeração Rankine, 24 % no BIGCC e 13 % na digestão anaeróbia.

A condição ótima neste cenário ainda envolveu a combustão de todo o bagaço, uso da digestão anaeróbia e cogeração por ciclo Rankine. A razão benefício/custo, todavia, aumentou para $0,4608$ neste caso. Considerando-se que os custos reais do processo a longo prazo podem variar em $\pm 70\%$ em ambas as direções em relação às previsões deste trabalho, a análise de risco pelo método de Monte Carlo dá uma RBC média de $0,4979$ para o projeto e desvio padrão de $0,1989$.

A probabilidade de o projeto ser atraente aumentou consideravelmente, embora ainda seja muito baixa: foi encontrada uma cifra de 1,9%. Essa análise encontra-se ilustrada na Figura 24.

Figura 24 – Distribuição de razões benefício/custo em cenário de longo prazo (Caso 6).

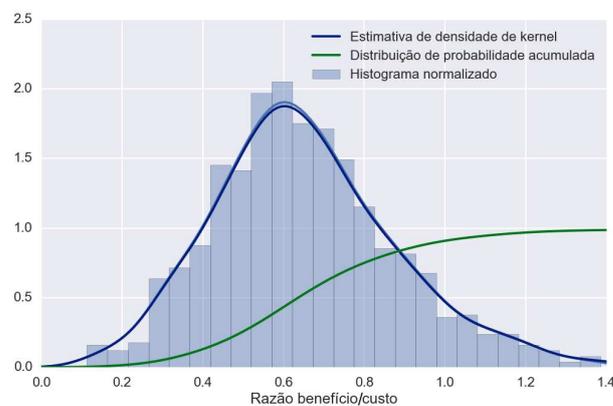


Fonte: Elaborada pelo autor.

4.2.7 Caso 7: Longo prazo e altos preços de produtos

O resultado da otimização manteve as condições de operação do cenário de longo prazo da seção anterior, que por sua vez eram semelhantes às condições encontradas no caso base. Neste caso encontrou-se $RBC = 0,6209$. A análise de risco por MMC, ilustrada na Figura 25 retornou RBC média de 0,6684 com desvio padrão de 0,2920. A probabilidade de lucro do processo foi estimada em 8,4%, o maior valor entre todos os cenários avaliados até o momento, mas ainda pequeno demais para justificar o investimento.

Figura 25 – Distribuição de razões benefício/custo em cenário de longo prazo e condições econômicas favoráveis (Caso 7).



Fonte: Elaborada pelo autor.

4.2.8 Caso 8: Redução de escala

Os resultados obtidos no caso base e nos estudos de caso até este ponto foram desfavoráveis ao investimento em uma biorrefinaria com aproveitamento da totalidade do bagaço e 50 % da palha do campo para produção de etanol e energia. Embora o fluxo de caixa anual do projeto seja positivo, ele não é suficiente para compensar o alto investimento inicial requerido. Este cenário investiga os efeitos de uma redução na escala de produção (e conseqüentemente no custo de investimento) sobre a viabilidade do processo.

Considerando a operação ótima encontrada no caso base (hidrólise de todo o bagaço, cogeração Rankine e uso de biodigestão), o valor da RBC nesse cenário foi de 0,1037; isto é, há uma redução na RBC em relação ao caso base. Esse resultado é esperado, uma vez que a economia de escala é um fator bem conhecido que prevê o ganho de vantagens econômicas quando há aumento na escala de produção.

Este estudo de caso não pôde ser simulado devido a problemas de convergência com a simulação, de modo que estes resultados se baseiam em estimativas realizadas em planilha eletrônica e provavelmente são mais incertos do que os outros resultados obtidos no trabalho.

4.2.9 Estudos de caso com parâmetros aleatórios

As Tabelas 17 e 18 mostram os fatores pelos quais os preços de produtos e custos de investimento dos diferentes processos foram multiplicados em cada estudo de caso. As tabelas mostram também os resultados das otimizações para cada estudo de caso. Esses resultados incluem a forma preferível de cogeração, opção pela digestão anaeróbia, fração de bagaço a ser hidrolisada e a razão benefício/custo. Finalmente, a última linha da tabela mostra a probabilidade de lucro estimada pelo MMC considerando-se o valor de cada parâmetro econômico para um dado estudo de caso como o valor central de uma distribuição normal.

Pode-se observar que em todos os estudos de caso analisados se mostrou preferível a produção de biogás e hidrólise de todo o bagaço, mesmo em cenários muito favoráveis à produção de eletricidade, como por exemplo o caso A.15 (Tabela 18). Por outro lado, em dezesseis dos vinte estudos de caso, a cogeração a partir da combustão da biomassa se mostrou preferível em relação à cogeração integrada à gaseificação. Em três dos cenários em que o BIGCC foi superior, o preço desse sistema foi reduzido significativamente em relação ao custo do sistema Rankine. O quarto desses cenários é exatamente o caso A.15, em que a redução no custo do sistema Rankine foi maior que a redução no custo do BIGCC, mas o preço de venda da eletricidade era tão alto que a opção pela tecnologia com produção de maior excedente se tornou mais vantajosa.

Tabela 17 – Variação dos preços e custos de investimento em relação ao caso base em estudos de caso com parâmetros econômicos aleatórios (Parte 1).

Custo de capital	Fatores de multiplicação									
	A.1	A.2	A.3	A.4	A.5	A.6	A.7	A.8	A.9	A.10
P. Etanol	1,051	1,069	0,932	0,960	1,041	1,011	1,131	0,930	0,886	1,016
P. Eletricidade	1,227	1,063	0,926	1,069	0,880	0,950	0,941	0,775	0,647	1,020
I. CHP	1,524	1,369	1,080	0,758	1,076	1,277	1,015	1,266	0,879	1,240
I. BIGCC	0,644	1,267	0,945	0,945	1,773	1,258	0,920	1,097	0,966	0,739
I. Hidrólise	0,552	0,423	0,793	0,561	1,410	1,255	0,685	1,204	0,856	0,516
I. Biodigestão	0,955	0,993	0,924	1,594	0,902	1,691	0,903	0,785	0,932	0,725
Resultado										
Cogeração	G	C	C	C	C	C	C	C	C	G
Biogás	Sim	Sim	Sim	Sim	Sim	Sim	Sim	Sim	Sim	Sim
FBH	0,99999	0,99999	0,99999	0,99999	0,99999	0,99999	0,99999	0,99999	0,99999	0,99999
RBC	0,3950	0,2020	0,1466	0,2695	0,1404	0,1176	0,2590	0,0818	0,1103	0,2699
PL (%)	3,7	0,7	0,1	0,3	0,1	0,0	0,7	0,0	0,0	1,5

P.: Preço; I.: Investimento; C: Combustão de bagaço; G: Gaseificação de bagaço; PL: Probabilidade de lucro

Tabela 18 – Variação dos preços e custos de investimento em relação ao caso base em estudos de caso com parâmetros econômicos aleatórios (Parte 2).

Custo de capital	Fatores de multiplicação									
	A.11	A.12	A.13	A.14	A.15	A.16	A.17	A.18	A.19	A.20
P. Etanol	1,017	0,976	1,012	1,013	0,872	0,966	0,988	1,211	1,193	0,936
P. Eletricidade	1,156	0,704	0,806	0,927	1,402	0,959	1,061	0,776	1,141	0,836
I. CHP	1,228	1,023	1,694	1,305	0,536	1,582	1,254	0,937	0,858	0,482
I. BIGCC	1,254	1,324	0,096	1,416	0,746	1,482	1,197	0,970	1,124	0,899
I. Hidrólise	1,059	0,996	1,590	0,978	1,031	0,069	0,381	0,577	0,916	1,001
I. Biodigestão	1,014	1,288	0,670	1,469	0,815	0,753	1,294	0,688	0,929	0,819
Resultado										
Cogeração	C	C	G	C	G	C	C	C	C	C
Biogás	Sim	Sim	Sim	Sim	Sim	Sim	Sim	Sim	Sim	Sim
FBH	0,99999	0,99999	0,99999	0,99999	0,99999	0,99999	0,99999	0,99999	0,99999	0,99999
RBC	0,1665	0,1239	0,7770	0,1294	0,3351	0,1454	0,1896	0,3149	0,3296	0,2627
PL (%)	0,1	0,0	25,5	0,0	2,2	0,1	0,5	1,0	1,1	0,6

P.: Preço; I.: Investimento; C: Combustão de bagaço; G: Gaseificação de bagaço; PL: Probabilidade de lucro

5 CONCLUSÃO

O objetivo deste trabalho envolveu o desenvolvimento e a implementação de uma ferramenta computacional capaz de simular e avaliar economicamente diferentes propostas para uma biorrefinaria de etanol de segunda geração e eletricidade. Isso foi alcançado através de um trabalho de modelagem da biorrefinaria, levantamento de dados econômicos e a construção de uma superestrutura envolvendo subprocessos alternativos a serem escolhidos para o projeto final da planta. Por meio de técnicas de otimização superestrutural foi possível tomar decisões sobre o projeto ótimo da biorrefinaria e sua viabilidade econômica.

Na avaliação do caso base (cenário de referência) foi chegado-se às seguintes conclusões:

1. a receita bruta obtida com a produção de etanol (US\$ 18,61 / t_c) é cerca de três vezes maior que a obtida com produção de eletricidade com sistema Rankine (US\$ 6,27 / t_c);
2. embora as receitas obtidas com o BIGCC (US\$ 35,64 / t_c) sejam as maiores, o custo de investimento exigido para a construção desse sistema é cerca de dez vezes mais elevado que o do processo de produção de etanol 2G e quase cinco vezes maior que o ciclo Rankine;
3. os custos de operação do sistema BIGCC também são muito altos, entre quatro e cinco vezes maiores que os do ciclo Rankine e do processo de produção de etanol 2G.

Para a totalidade dos cenários estudados, inclusive o caso base, a condição ótima de operação envolvia a hidrólise de todo bagaço obtido da moagem e digestão anaeróbia da vinhaça e licor de pentoses associada à queima do biogás nas caldeiras. A digestão anaeróbia se revelou muito mais barata do que os outros processos ($\approx 20\%$ do custo do pré-tratamento/hidrólise), apesar de contribuir com um alto poder energético e uma receita bruta de aproximadamente US\$ 5,37 / t_c .

Na ampla maioria dos cenários, a cogeração de eletricidade via combustão de resíduos sólidos de biomassa foi preferível em relação ao ciclo integrado à gaseificação. A preferência pela hidrólise não comprometeu a autossuficiência energética da biorrefinaria uma vez que considerou-se que 50 % da palha produzida no campo seria recolhida e tanto a lignina removida pelo pré-tratamento do bagaço quanto os resíduos de torta de filtro seriam queimados nas caldeiras. Com efeito, mais biomassa foi utilizada para cogeração de energia do que para hidrólise.

As grandes disparidades entre os custos de capital, operação e as receitas brutas de cada processo contribuíram para que as condições de operação ótima tenham se mantido relativamente estáveis. As conclusões sobre a viabilidade econômica do projeto também foram consistentes para todos os cenários estudados: embora a razão benefício/custo do empreendimento tenha variado significativamente em função dos parâmetros econômicos do projeto, ela se manteve sempre abaixo do limiar de atratividade e mesmo as estimativas da incerteza dessas conclusões revelaram pequena probabilidade de o investimento render o retorno esperado. Mesmo no estudo de caso mais otimista planejado (Seção 4.2.7), estimou-se em apenas 8,4 % a probabilidade de o investimento ser atrativo. Nos estudos de caso com fatores econômicos aleatórios, essa probabilidade foi de no máximo 25,5 %, devido a uma situação improvável em que o custo de investimento real do sistema BIGCC seria cerca de 90 % menor do que foi estimado no caso base.

Dessa maneira, este trabalho não permite recomendar o emprego da tecnologia de produção de etanol 2G combinada à cogeração de eletricidade visando a venda de excedentes de eletricidade. Não é possível tirar conclusões sobre a viabilidade de um projeto voltado exclusivamente para a produção de bioeletricidade, uma vez que dificuldades de convergência das simulações relacionadas à integração entre correntes pertencentes a diferentes partes do processo impuseram a restrição de que ao menos 15 % de todo o bagaço deveria estar disponível para a produção de etanol 2G, o que não apenas limitava a quantidade máxima de eletricidade alcançável, como também introduzia uma taxa de consumo de eletricidade. A digestão anaeróbia da vinhaça de mostrou uma tecnologia mais promissora, aumentando a razão benefício/custo em todos os casos.

Os estudos de caso mostraram ainda uma alta sensibilidade do investimento aos preços do etanol e da eletricidade, particularmente a comparação entre o Caso 5 e o Caso 6. Esses parâmetros são susceptíveis a grandes variações ao longo do tempo, o que indica a necessidade estratégica de diversificar a produção investindo-se por exemplo na produção de açúcar, que infelizmente não pôde fazer parte do escopo deste trabalho.

Evidentemente, as conclusões sobre a viabilidade econômica dos processos estudados neste trabalho, individualmente ou em conjunto, estão limitadas pela precisão das estimativas de custos realizadas. Conforme explicado no decorrer do trabalho, estas são estimativas de estudo com alto nível de imprecisão. Estimativas de custo mais precisas requerem acesso a uma grande base de dados atualizada e frequentemente confidencial. Ainda que se tivesse acesso a esses dados, é importante destacar que uma das tecnologias estudadas neste trabalho, a BIGCC, é de uso incipiente na indústria sucroalcooleira, o que dificulta em muito uma avaliação correta de seus custos, inclusive da sua ordem de grandeza. Optou-se então pela utilização de um mesmo método de estimativa econômica tanto para este quanto para os outros subprocessos, afinal faz pouco sentido combinar dados altamente precisos com outros sem tanta precisão.

Mais valiosas que as conclusões econômicas, provavelmente são aquelas concernindo o método empregado para a síntese do processo. A técnica de otimização superestrutural se mostrou promissora para as etapas preliminares da síntese de processos, a fim de se fazer uma triagem dos subprocessos mais atraentes. Sua implementação pode ser muito desafiadora, todavia, em processos altamente integrados. Nesse caso cada ramo da superestrutura concebida precisaria de sua própria proposta de integração energética, alterando a distribuição de trocadores de calor pela fábrica toda e aumentando a complexidade do projeto.

Como sugestão para trabalhos futuros, propõe-se a inclusão da usina de açúcar no modelo da biorrefinaria completa e também a adição de outras alternativas tecnológicas, como diferentes pré-tratamentos da biomassa a ser hidrolisada, fermentação de pentoses e produção de etanol via rota termoquímica usando-se o gás de síntese, a fim de verificar se esse processo torna a gaseificação mais atrativa em certos cenários. A ferramenta desenvolvida neste trabalho pode se prestar ainda para a inclusão de outros objetivos de otimização, como critérios ambientais, bastando para isso a formulação de uma função objetivo apropriada.

Análises de sensibilidade de parâmetros técnicos importantes, como o rendimento da hidrólise, também seriam um aperfeiçoamento valioso com potencial para modificar algumas das conclusões a que este trabalho chegou, servindo como complemento às análises de risco envolvendo parâmetros econômicos aqui realizadas.

REFERÊNCIAS

- 1 CARDONA, C.; QUINTERO, J.; PAZ, I. Production of bioethanol from sugarcane bagasse: Status and perspectives. *Bioresource Technology*, v. 101, n. 13, p. 4754 – 4766, 2010. ISSN 0960-8524. Special Issue on Lignocellulosic Bioethanol: Current Status and Perspectives.
- 2 PELLEGRINI, L. F.; OLIVEIRA JR., S. Combined production of sugar, ethanol and electricity: Thermo-economic and environmental analysis and optimization. *Energy*, v. 36, n. 6, p. 3704 – 3715, 2011. ISSN 0360-5442. {ECOS} 2009.
- 3 PANDEY, A.; SOCCOL, C. R.; NIGAM, P.; SOCCOL, V. T. Biotechnological potential of agro-industrial residues. i: sugarcane bagasse. *Bioresource Technology*, v. 74, n. 1, p. 69 – 80, 2000.
- 4 KIRUBAKARAN, V.; SIVARAMAKRISHNAN, V.; NALINI, R.; SEKAR, T.; PREMALATHA, M.; SUBRAMANIAN, P. A review on gasification of biomass. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, v. 13, n. 1, p. 179 – 186, 2009. ISSN 1364-0321.
- 5 GUPTA, A.; VERMA, J. P. Sustainable bio-ethanol production from agro-residues: A review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, v. 41, n. 0, p. 550 – 567, 2015. ISSN 1364-0321.
- 6 LEAL, M. R. L.; GALDOS, M. V.; SCARPARE, F. V.; SEABRA, J. E.; WALTER, A.; OLIVEIRA, C. O. Sugarcane straw availability, quality, recovery and energy use: A literature review. *Biomass and Bioenergy*, v. 53, p. 11 – 19, 2013. ISSN 0961-9534. 20th European Biomass Conference. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0961953413001396>>.
- 7 MILANEZ, A.; NYKO, D.; VALENTE, M.; SOUSA, L.; BONOMI, A.; JESUS, C. *De promessa a realidade: como o etanol celulósico pode revolucionar a indústria da cana-de-açúcar – uma avaliação do potencial competitivo e sugestões de política pública*. [S.l.], 2015.
- 8 HAHN-HÄGERDAL, B.; KARHUMAA, K.; FONSECA, C.; SPENCER-MARTINS, I.; GORWA-GRAUSLUND, M. F. Towards industrial pentose-fermenting yeast strains. *Applied microbiology and biotechnology*, Springer, v. 74, n. 5, p. 937–953, 2007.
- 9 DESHMUKH, R.; JACOBSON, A.; CHAMBERLIN, C.; KAMMEN, D. Thermal gasification or direct combustion? comparison of advanced cogeneration systems in the sugarcane industry. *Biomass and Bioenergy*, v. 55, p. 163 – 174, 2013. ISSN 0961-9534.
- 10 CAVALETTI, O.; JUNQUEIRA, T. L.; DIAS, M. O.; JESUS, C. D.; MANTELATTO, P. E.; CUNHA, M. P.; FRANCO, H. C.; CARDOSO, T. F.; MACIEL FILHO, R.; ROSSELL, C. E.; BONOMI, A. Environmental and economic assessment of sugarcane first generation biorefineries in Brazil. *Clean Technologies and Environmental Policy*, Springer-Verlag, v. 14, n. 3, p. 399–410, 2012. ISSN 1618-954X.
- 11 CHRISTOFOLETTI, C. A.; ESCHER, J. P.; CORREIA, J. E.; MARINHO, J. F. U.; FONTANETTI, C. S. Sugarcane vinasse: Environmental implications of its use. *Waste Management*, v. 33, n. 12, p. 2752 – 2761, 2013. ISSN 0956-053X.
- 12 HERMANN, B.; DEBEER, L.; WILDE, B. D.; BLOK, K.; PATEL, M. To compost or not to compost: Carbon and energy footprints of biodegradable materials' waste treatment. *Polymer Degradation and Stability*, v. 96, n. 6, p. 1159 – 1171, 2011. ISSN 0141-3910.

- 13 MORAES, B. S.; JUNQUEIRA, T. L.; PAVANELLO, L. G.; CAVALETT, O.; MANTELATTO, P. E.; BONOMI, A.; ZAIAT, M. Anaerobic digestion of vinasse from sugarcane biorefineries in Brazil from energy, environmental, and economic perspectives: Profit or expense? *Applied Energy*, v. 113, n. 0, p. 825 – 835, 2014. ISSN 0306-2619.
- 14 KOCIS, G. R.; GROSSMANN, I. E. Relaxation strategy for the structural optimization of process flow sheets. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, v. 26, n. 9, p. 1869–1880, 1987.
- 15 BENDERS, J. Partitioning procedures for solving mixed-variables programming problems. *Numerische Mathematik*, Springer-Verlag, v. 4, n. 1, p. 238–252, 1962. ISSN 0029-599X.
- 16 VISWANATHAN, J.; GROSSMANN, I. A combined penalty function and outer-approximation method for MINLP optimization. *Computers & Chemical Engineering*, v. 14, n. 7, p. 769 – 782, 1990. ISSN 0098-1354.
- 17 QUESADA, I.; GROSSMANN, I. An LP/NLP based branch and bound algorithm for convex MINLP optimization problems. *Computers & Chemical Engineering*, v. 16, n. 10–11, p. 937 – 947, 1992. ISSN 0098-1354. An International Journal of Computer Applications in Chemical Engineering.
- 18 KENNEDY, J.; EBERHART, R. A discrete binary version of the particle swarm algorithm. In: *Systems, Man, and Cybernetics, 1997. Computational Cybernetics and Simulation., 1997 IEEE International Conference on*. [S.l.: s.n.], 1997. v. 5, p. 4104–4108 vol.5. ISSN 1062-922X.
- 19 SALLES FILHO, S.; SICSÚ, A.; BINA, A. et al. *Futuros do Bioetanol: Brasil na liderança*. [S.l.]: Rio de Janeiro: Elsevier, 2015.
- 20 MARTÍNEZ, J.; LORA, E.; GONZÁLEZ, L. *Bioenergía: Fuentes, conversión y sustentabilidad*. José María Rincón Martínez, Electo Eduardo Silva Lora, 2015. ISBN 9789585888005. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=YpnxCAAAQBAJ>>.
- 21 CASTELLS, X. *La recuperación de la energía. Cogeneración, intercambiadores y regeneradores de energía: Tratamiento y valorización energética de residuos*. Editorial Díaz de Santos, S.A., 2012. ISBN 9788499691367. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=AVrkBTkPtYAC>>.
- 22 BORGNACKE, C.; SONNTAG, R. *Fundamentals of Thermodynamics, 8th Edition*. Wiley, 2012. ISBN 9781118476581. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=HUUcAAAAQBAJ>>.
- 23 CORRÊA NETO, V.; RAMON, D. Análises de opções tecnológicas para projetos de co-geração no setor sucro-alcooleiro. *Contract NO. DE-AC36-99GO10337, Brasília, DF*, 2002.
- 24 UDOP. *Cana que gera luz*. 2018. Acessado em 2 de agosto de 2018. Disponível em: <<http://www.udop.com.br/index.php?item=noticias&cod=1161969>>.
- 25 GOYAL, H.; SEAL, D.; SAXENA, R. Bio-fuels from thermochemical conversion of renewable resources: A review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, v. 12, n. 2, p. 504 – 517, 2008. ISSN 1364-0321.
- 26 WOOLCOCK, P. J.; BROWN, R. C. A review of cleaning technologies for biomass-derived syngas. *Biomass and Bioenergy*, v. 52, p. 54 – 84, 2013. ISSN 0961-9534.
- 27 SAXENA, R.; SEAL, D.; KUMAR, S.; GOYAL, H. Thermo-chemical routes for hydrogen rich gas from biomass: A review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, v. 12, n. 7, p. 1909 – 1927, 2008. ISSN 1364-0321.

- 28 PELLEGRINI, L. F.; OLIVEIRA JR., S. Exergy analysis of sugarcane bagasse gasification. *Energy*, v. 32, n. 4, p. 314 – 327, 2007. ISSN 0360-5442. ECOS 05. 18th International Conference on Efficiency, Cost, Optimization, Simulation, and Environmental Impact of Energy Systems ECOS 05.
- 29 AHMED, I.; GUPTA, A. Sugarcane bagasse gasification: Global reaction mechanism of syngas evolution. *Applied Energy*, v. 91, n. 1, p. 75 – 81, 2012. ISSN 0306-2619.
- 30 SHABBIR, I.; MIRZAEIAN, M. Feasibility analysis of different cogeneration systems for a paper mill to improve its energy efficiency. *international journal of hydrogen energy*, Elsevier, v. 41, n. 37, p. 16535–16548, 2016.
- 31 PUIG-ARNAVAT, M.; BRUNO, J. C.; CORONAS, A. Review and analysis of biomass gasification models. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, v. 14, n. 9, p. 2841 – 2851, 2010. ISSN 1364-0321.
- 32 BASU, P. *Biomass Gasification, Pyrolysis and Torrefaction: Practical Design and Theory*. 2nd. ed. Cambridge, Massachusetts: Elsevier Science, 2013. ISBN 9780080961620. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=QSypbUSdkikC>>.
- 33 DIAS, M. O.; MODESTO, M.; ENSINAS, A. V.; NEBRA, S. A.; FILHO, R. M.; ROSSELL, C. E. Improving bioethanol production from sugarcane: evaluation of distillation, thermal integration and cogeneration systems. *Energy*, Elsevier, v. 36, n. 6, p. 3691–3703, 2011.
- 34 NOGUEIRA, L. *Dendroenergia: fundamentos e aplicações*. Brasília: Agência Nacional de Energia Elétrica (Brasil), 2000. ISBN 9788587491039.
- 35 DANTAS, G. A. *Alternativas de investimento do setor sucroenergético brasileiro para aproveitamento de bagaço e de palha*. Tese (Doutorado) — Programa de Pós-Graduação em Planejamento Energético, COPPE, UFRJ, Rio de Janeiro-RJ, 2013.
- 36 MOSIER, N.; WYMAN, C.; DALE, B.; ELANDER, R.; LEE, Y.; HOLTZAPPLE, M.; LADISCH, M. Features of promising technologies for pretreatment of lignocellulosic biomass. *Bioresource Technology*, v. 96, n. 6, p. 673 – 686, 2005. ISSN 0960-8524.
- 37 JUNQUEIRA, T. L.; DIAS, M. O.; CAVALETT, O.; JESUS, C. D.; CUNHA, M. P.; ROSSELL, C. E.; FILHO, R. M.; BONOMI, A. Economic and environmental assessment of integrated 1st and 2nd generation sugarcane bioethanol production evaluating different 2nd generation process alternatives. In: *Computer Aided Chemical Engineering*. [S.l.]: Elsevier, 2012. v. 30, p. 177–181.
- 38 LAVARACK, B.; GRIFFIN, G.; RODMAN, D. The acid hydrolysis of sugarcane bagasse hemicellulose to produce xylose, arabinose, glucose and other products. *Biomass and Bioenergy*, v. 23, n. 5, p. 367 – 380, 2002. ISSN 0961-9534.
- 39 ADSUL, M.; GHULE, J.; SHAIKH, H.; SINGH, R.; BASTAWDE, K.; GOKHALE, D.; VARMA, A. Enzymatic hydrolysis of delignified bagasse polysaccharides. *Carbohydrate Polymers*, v. 62, n. 1, p. 6 – 10, 2005. ISSN 0144-8617.
- 40 JONKER, J. G. G.; HILST, F. van der; JUNGINNGER, H.; CHAGAS, O. C. C.; FAAIJ, A. P. C. Outlook for ethanol production custos in brazil up to 2030, for different biomass crops and industrial technologies. *Applied Energy*, 2015.
- 41 DIAS, M. O.; JUNQUEIRA, T. L.; CAVALETT, O.; CUNHA, M. P.; JESUS, C. D.; ROSSELL, C. E.; FILHO, R. M.; BONOMI, A. Integrated versus stand-alone second generation ethanol production from sugarcane bagasse and trash. *Bioresource Technology*, v. 103, n. 1, p. 152 – 161, 2012.

- 42 SALOMON, K. R.; LORA, E. E. S. Estimate of the electric energy generating potential for different sources of biogas in Brazil. *Biomass and Bioenergy*, v. 33, n. 9, p. 1101 – 1107, 2009. ISSN 0961-9534.
- 43 RAJESHWARI, K.; BALAKRISHNAN, M.; KANSAL, A.; LATA, K.; KISHORE, V. State-of-the-art of anaerobic digestion technology for industrial wastewater treatment. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, v. 4, n. 2, p. 135 – 156, 2000. ISSN 1364-0321.
- 44 MORAES, B. S.; ZAIAT, M.; BONOMI, A. Anaerobic digestion of vinasse from sugarcane ethanol production in Brazil: Challenges and perspectives. *Renewable and Sustainable energy reviews*, Elsevier, v. 44, p. 888–903, 2015.
- 45 DONOSO-BRAVO, A.; MAILIER, J.; MARTIN, C.; RODRÍGUEZ, J.; ACEVES-LARA, C. A.; WOUWER, A. V. Model selection, identification and validation in anaerobic digestion: A review. *Water Research*, v. 45, n. 17, p. 5347 – 5364, 2011. ISSN 0043-1354.
- 46 BERNARD, O.; HADJ-SADOK, Z.; DOCHAIN, D.; GENOVESI, A.; STEYER, J.-P. Dynamical model development and parameter identification for an anaerobic wastewater treatment process. *Biotechnology and Bioengineering*, John Wiley & Sons, Inc., v. 75, n. 4, p. 424–438, 2001. ISSN 1097-0290.
- 47 FAIR, G. M.; MOORE, E. W. Time and rate of sludge digestion, and their variation with temperature. *Sewage Works Journal*, JSTOR, p. 3–13, 1934.
- 48 KARTHIKEYAN, O.; HEIMANN, K.; MUTHU, S. *Recycling of Solid Waste for Biofuels and Bio-chemicals*. Springer Singapore, 2016. (Environmental Footprints and Eco-design of Products and Processes). P. 109. ISBN 9789811001505. Disponível em: <https://books.google.com.br/books?id=fl_SDAAAQBAJ>.
- 49 STREZOV, V.; EVANS, T. *Biomass Processing Technologies*. Taylor & Francis, 2014. ISBN 9781466566163. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=AePMAwAAQBAJ>>.
- 50 WONG, J.; TYAGI, R.; PANDEY, A. *Current Developments in Biotechnology and Bioengineering: Solid Waste Management*. Elsevier Science, 2016. ISBN 9780444636751. Disponível em: <https://books.google.com.br/books?id=X3R_CwAAQBAJ>.
- 51 FUESS, L. T.; KIYUNA, L. S. M.; FERRAZ, A. D. N.; PERSINOTI, G. F.; SQUINA, F. M.; GARCIA, M. L.; ZAIAT, M. Thermophilic two-phase anaerobic digestion using an innovative fixed-bed reactor for enhanced organic matter removal and bioenergy recovery from sugarcane vinasse. *Applied Energy*, Elsevier, v. 189, p. 480–491, 2017.
- 52 PETERS, M. S.; TIMMERHAUS, K. D. *Plant Design and Economics for Chemical Engineers*. 4th. ed. Singapore: McGraw-Hill, 1991.
- 53 TURTON, R.; BAILIE, R.; WHITING, W.; SHAEIWITZ, J. *Analysis, Synthesis and Design of Chemical Processes*. [S.l.]: Pearson Education, 2008. (Prentice Hall International Series in the Physical and Chemical Engineering Sciences). ISBN 9780132459181.
- 54 NEWMAN, D. G.; ESCHENBACH, T. G.; LAVELLE, J. P. *Engineering Economic Analysis*. 9th. ed. New York: Oxford University Press, 2004.
- 55 PERLINGEIRO, C. A. *Engenharia de Processos: Análise, simulação, otimização e síntese de processos químicos*. São Paulo: Edgard Blücher, 2005.
- 56 PERRY, R.; GREEN, D. *Perry's Chemical Engineers' Handbook, Eighth Edition*. New York City: McGraw-Hill Education, 2008. (McGraw Hill professional, v. 8,pt. 2008). ISBN 9780071422949.

- 57 DUTTA, A.; HENSLEY, M. T.; WORLEY, M.; DUDGEON, D.; BARTON, D.; GROENENDIJK, P.; FERRARI, D.; STEARS, B.; SEARCY, E.; C.T.WRIGHT; HESS, J. *Process design and economics for conversion of lignocellulosic biomass to ethanol: Thermochemical pathway by indirect gasification and mixed alcohol synthesis*. National Renewable Energy Laboratory (NREL). Golden, Colorado, 2011.
- 58 CHEMICAL ENGINEERING. *Economic Indicators*. 2016. Chem. Eng. v. 123 n. 6, p. 76.
- 59 JUNQUEIRA, T. L.; CHAGAS, M. F.; GOUVEIA, V. L.; REZENDE, M. C.; WATANABE, M. D.; JESUS, C. D.; CAVALETT, O.; MILANEZ, A. Y.; BONOMI, A. Techno-economic analysis and climate change impacts of sugarcane biorefineries considering different time horizons. *Biotechnology for biofuels*, BioMed Central, v. 10, n. 1, p. 50, 2017.
- 60 HAMELINCK, C. N.; HOOIJDONK, G. V.; FAAIJ, A. P. Ethanol from lignocellulosic biomass: techno-economic performance in short-, middle-and long-term. *Biomass and bioenergy*, Elsevier, v. 28, n. 4, p. 384–410, 2005.
- 61 HUMBIRD, D.; DAVIS, R.; TAO, L.; KINCHIN, C.; HSU, D.; ADEN, A.; SCHOEN, P.; LUKAS, J.; OLTHOF, B.; WORLEY, M.; SEXTON, D.; DUDGEON, D. *Process design and economics for biochemical conversion of lignocellulosic biomass to ethanol. Dilute-acid pretreatment and enzymatic hydrolysis of corn stover*. National Renewable Energy Laboratory (NREL). Golden, Colorado, 2011.
- 62 BRIDGWATER, A. The technical and economic feasibility of biomass gasification for power generation. *Fuel*, Elsevier, v. 74, n. 5, p. 631–653, 1995.
- 63 RODRIGUES, M.; FAAIJ, A. P.; WALTER, A. Techno-economic analysis of co-fired biomass integrated gasification/combined cycle systems with inclusion of economies of scale. *Energy*, v. 28, n. 12, p. 1229 – 1258, 2003. ISSN 0360-5442. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0360544203000884>>.
- 64 HAMELINCK, C. N.; FAAIJ, A. P. Future prospects for production of methanol and hydrogen from biomass. *Journal of Power Sources*, Elsevier, v. 111, n. 1, p. 1–22, 2002.
- 65 SWANSON, R. M.; SATRIO, J. A.; BROWN, R. C.; PLATON, A.; HSU, D. D. *Techno-economic analysis of biofuels production based on gasification*. National Renewable Energy Laboratory (NREL). Golden, Colorado, 2010.
- 66 FUESS, L. T.; ARAÚJO JÚNIOR, M. M. de; GARCIA, M. L.; ZAIAT, M. Designing full-scale biodigestion plants for the treatment of vinasse in sugarcane biorefineries: How phase separation and alkalization impact biogas and electricity production costs? *Chemical Engineering Research and Design*, Elsevier, v. 119, p. 209–220, 2017.
- 67 HAMMERSLEY, J. M.; HANDSCOMB, D. C. General principles of the Monte Carlo Method. In: _____. *Monte Carlo Methods*. Dordrecht: Springer Netherlands, 1964. p. 50–75. ISBN 978-94-009-5819-7. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/978-94-009-5819-7_5>.
- 68 PLATON, V.; CONSTANTINESCU, A. Monte Carlo method in risk analysis for investment projects. *Procedia Economics and Finance*, Elsevier, v. 15, p. 393–400, 2014.
- 69 BIEGLER, L.; GROSSMANN, I.; WESTERBERG, A. *Systematic methods of chemical process design*. [S.l.]: Prentice Hall PTR, 1997. (Prentice-Hall international series in the physical and chemical engineering sciences). ISBN 9780134924229.

- 70 BONAMI, P.; BIEGLER, L. T.; CONN, A. R.; CORNUÉJOLS, G.; GROSSMANN, I. E.; LAIRD, C. D.; LEE, J.; LODI, A.; MARGOT, F.; SAWAYA, N.; Wächter, A. An algorithmic framework for convex mixed integer nonlinear programs. *Discrete Optimization*, v. 5, n. 2, p. 186 – 204, 2008. ISSN 1572-5286. In Memory of George B. Dantzig.
- 71 SCHAIDLE, J. A.; MOLINE, C. J.; SAVAGE, P. E. Biorefinery sustainability assessment. *Environmental Progress & Sustainable Energy*, v. 30, n. 4, p. 743–753, 2011. Disponível em: <<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/ep.10516>>.
- 72 DIAS, M. O.; CUNHA, M. P.; JESUS, C. D.; ROCHA, G. J.; PRADELLA, J. G. C.; ROSSELL, C. E.; MACIEL FILHO, R.; BONOMI, A. Second generation ethanol in brazil: can it compete with electricity production? *Bioresource technology*, Elsevier, v. 102, n. 19, p. 8964–8971, 2011. ISSN 0960-8524.
- 73 DIAS, M. O.; JUNQUEIRA, T. L.; CAVALETT, O.; PAVANELLO, L. G.; CUNHA, M. P.; JESUS, C. D.; MACIEL FILHO, R.; BONOMI, A. Biorefineries for the production of first and second generation ethanol and electricity from sugarcane. *Applied energy*, Elsevier, v. 109, p. 72–78, 2013.
- 74 FURLAN, F. F.; TONON FILHO, R.; PINTO, F. H. P. B.; COSTA, C. B. B.; CRUZ, A. J. G.; GIORDANO, R. L. C. G.; GIORDANO, R. C. Bioelectricity versus bioethanol from sugarcane bagasse: is it worth being flexible? *Biotechnology for Biofuels*, v. 6, n. 142, p. 1–12, 2013.
- 75 GNANSOUNOU, E.; VASKAN, P.; PACHÓN, E. R. Comparative techno-economic assessment and lca of selected integrated sugarcane-based biorefineries. *Bioresource technology*, Elsevier, v. 196, p. 364–375, 2015.
- 76 KHATIWADA, D.; LEDUC, S.; SILVEIRA, S.; MCCALLUM, I. Optimizing ethanol and bioelectricity production in sugarcane biorefineries in brazil. *Renewable Energy*, Elsevier, v. 85, p. 371–386, 2016.
- 77 CARPIO, L. G. T.; SOUZA, F. S. de. Optimal allocation of sugarcane bagasse for producing bioelectricity and second generation ethanol in Brazil: Scenarios of cost reductions. *Renewable Energy*, Elsevier, v. 111, p. 771–780, 2017.
- 78 PEDROSO, D. T.; MACHIN, E. B.; PÉREZ, N. P.; BRAGA, L. B.; SILVEIRA, J. L. Technical assessment of the biomass integrated gasification/gas turbine combined cycle (big/gtcc) incorporation in the sugarcane industry. *Renewable Energy*, Elsevier, v. 114, p. 464–479, 2017.
- 79 FONSECA, G. C.; COSTA, C. B.; CRUZ, A. J. Superstructural economic optimization of sugarcane bagasse exploitation in an ethanol distillery connected to rankine cycle, bigcc system and second generation ethanol process. In: *Computer Aided Chemical Engineering*. [S.l.]: Elsevier, 2017. v. 40, p. 889–894.
- 80 SOARES, R. P.; SECCHI, A. R. EMSO: A new environment for modeling, simulation and optimisation. *Computer Aided Chemical Engineering*, v. 14, p. 947–952, 2003.
- 81 RODRIGUES, R.; SOARES, R. P.; SECCHI, A. R. Teaching chemical engineering using EMSO simulator. *Computer Applications in Engineering Education*, v. 18, p. 607–618, 2010.
- 82 FURLAN, F. F.; COSTA, C. B. B.; FONSECA, G. C.; SOARES, R. P.; SECCHI, A. R.; CRUZ, A. J. G.; GIORDANO, R. C. Assessing the production of first and second generation bioethanol from sugarcane through the integration of global optimization and process detailed modeling. *Computers & Chemical Engineering*, v. 43, n. 0, p. 1 – 9, 2012. ISSN 0098-1354.

- 83 LONGATI, A. A.; LINO, A. R. A.; GIORDANO, R. C.; FURLAN, F. F.; CRUZ, A. J. G. Impact of vinasse biogas on different sugarcane biorefinery configurations. 2017.
- 84 FONSECA, G. C.; COSTA, C. B.; CRUZ, A. J. Comparing a dynamic fed-batch and a continuous steady-state simulation of ethanol fermentation in a distillery to a stoichiometric conversion simulation. *Brazilian Journal of Chemical Engineering*, v. 34, n. 04, p. 1–12, October-December 2017.
- 85 FURLAN, F. F. *Metodologia para guiar o desenvolvimento e implementação industrial de novas tecnologias unindo engenharia econômica e engenharia de (bio)processos e sistemas: aplicação à produção de etanol de segunda geração*. Tese (Doutorado) — UFSCar, São Carlos - SP, Março 2016.
- 86 BHATTACHARYA, A.; MANNA, D.; PAUL, B.; DATTA, A. Biomass integrated gasification combined cycle power generation with supplementary biomass firing: Energy and exergy based performance analysis. *Energy*, Elsevier, v. 36, n. 5, p. 2599–2610, 2011.
- 87 SILVA, M. A.; NEBRA, S. Numerical simulation of drying in a cyclone. *Drying technology*, Taylor & Francis, v. 15, n. 6-8, p. 1731–1741, 1997.
- 88 ARNAO, J. H. S. *Caldeiras aquatubulares de bagaço - Estudo do sistema de recuperação de energia*. Tese (Doutorado) — Universidade Estadual de Campinas, Campinas - SP, 2008.
- 89 RAMOS, L. P.; SILVA, L.; BALLEM, A. C.; PITARELO, A. P.; CHIARELLO, L. M.; SILVEIRA, M. H. L. Enzymatic hydrolysis of steam-exploded sugarcane bagasse using high total solids and low enzyme loadings. *Bioresource technology*, Elsevier, v. 175, p. 195–202, 2015.
- 90 FERRAZ JR., A. D. N.; KOYAMA, M. H.; ARAÚJO JÚNIOR, M. M.; ZAIAT, M. Thermophilic anaerobic digestion of raw sugarcane vinasse. *Renewable Energy*, Elsevier, v. 89, p. 245–252, 2016.
- 91 WIESBERG, I. L.; MEDEIROS, J. L. de; ALVES, R. M.; COUTINHO, P. L.; ARAÚJO, O. Q. Carbon dioxide management by chemical conversion to methanol: Hydrogenation and bi-reforming. *Energy Conversion and Management*, v. 125, p. 320 – 335, 2016. ISSN 0196-8904. Sustainable development of energy, water and environment systems for future energy technologies and concepts. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0196890416302813>>.
- 92 X-RATES. *Exchange Rate Average (US Dollar, Brazilian Real)*. 2018. Acessado em 22 de janeiro de 2018. Disponível em: <<http://www.x-rates.com/average/?from=USD&to=BRL&amount=1&year=2015>>.
- 93 X-RATES. *Exchange Rate Average (Euro, Brazilian Real)*. 2018. Acessado em 22 de janeiro de 2018. Disponível em: <<http://www.x-rates.com/average/?from=EUR&to=BRL&amount=1&year=2015>>.
- 94 LI, H.; CHEN, Q.; ZHANG, X.; FINNEY, K. N.; SHARIFI, V. N.; SWITHEENBANK, J. Evaluation of a biomass drying process using waste heat from process industries: A case study. *Applied Thermal Engineering*, v. 35, p. 71 – 80, 2012. ISSN 1359-4311. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1359431111005473>>.
- 95 BRAMMER, J.; BRIDGWATER, A. The influence of feedstock drying on the performance and economics of a biomass gasifier–engine chp system. *Biomass and Bioenergy*, Elsevier, v. 22, n. 4, p. 271–281, 2002.
- 96 BADGER, P. C. *Processing cost analysis for biomass feedstocks*. ORNL Oak Ridge National Laboratory (US), 2002.

- 97 ALKHAYAT, W.; GERRARD, A. Estimating manning levels for process plants. *AACE Transactions*, I, 1984.
- 98 MUSSATTO, S. I.; MONCADA, J.; ROBERTO, I. C.; CARDONA, C. A. Techno-economic analysis for brewer's spent grains use on a biorefinery concept: The Brazilian case. *Bioresource Technology*, v. 148, p. 302 – 310, 2013. ISSN 0960-8524. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0960852413012765>>.
- 99 X-RATES. *Exchange Rate Average (US Dollar, Brazilian Real)*. 2018. Acessado em 13 de fevereiro de 2018. Disponível em: <<http://www.x-rates.com/average/?from=USD&to=BRL&amount=1&year=2012>>.
- 100 CEPEA-ESALQ/USP. *Consulta ao banco de dados do site - Centro de Estudos Avançados em Economia Aplicada*. 2018. Disponível em: <<https://www.cepea.esalq.usp.br/br/consultas-ao-banco-de-dados-do-site.aspx>>.
- 101 ANEEL. *Resultado de Leilões - Agência Nacional de Energia Elétrica*. 2018. Disponível em: <<http://www.aneel.gov.br/resultados-de-leiloes>>.
- 102 MONTGOMERY, D. C.; RUNGER, G. C. *Estatística Aplicada e Probabilidade para Engenheiros*. 6. ed. [S.l.]: LTC, 2016.

APÊNDICE A – SUPERESTRUTURA

Este apêndice mostra o código em linguagem de modelagem EMSO para implementação da superestrutura usada neste trabalho. Parte do código foi construído automaticamente a partir de um **Diagram** previamente existente, isto é, a interface gráfica de usuário para construção de fluxogramas do EMSO. Contém os ambientes **FlowSheet** e **Optimization**.

superBio.mso

```

1  #*-----
2  * FlowSheet generated automatically by EMSO-GUI
3  *-----*#
4
5  using "main_stream.mso";
6  using "energy_stream.mso";
7  using "water_stream.mso";
8  using "accessories/duplicator_and_selector";
9  using "separators/dry_cleaning.mso";
10 using "separators/mill.mso";
11 using "pressure_changers/pump_m.mso";
12 using "separators/sieve.mso";
13 using "reactors/phosph_tank.mso";
14 using "mixers_and_splitters/mixer_and_splitter_m.mso";
15 using "mixers_and_splitters/mixer_and_splitter_w.mso";
16 using "pressure_changers/turbine_w.mso";
17 using "heat_exchangers/heatex_mw.mso";
18 using "reactors/liming_tank.mso";
19 using "separators/decanter.mso";
20 using "reactors/pre_treatment.mso";
21 using "mixers_and_splitters/mixer_w_m.mso";
22 using "separators/centrifuge.mso";
23 using "reactors/enz_hydrolysis.mso";
24 using "separators/evaporator.mso";
25 using "reactors/fermenter.mso";
26 using "separators/column.mso";
27 using "reactors/digester.mso";
28 using "pressure_changers/pump_w.mso";
29 using "reactors/boiler.mso";
30 using "pressure_changers/compressor_m";
31 using "pressure_changers/turbine_m";
32 using "heat_exchangers/heater_w";
33 using "heat_exchangers/heater_m";
34 using "reactors/gasifier";
35 using "reactors/stoic_reactor";
36 using "separators/dryer";
37 using "separators/flash_m";
38 using "separators/filter";
39
40
41 FlowSheet superBio_final
42 PARAMETERS
43 PP as Plugin(Brief="Physical Properties",
44   Type="PP"
45   ,Project = "../Flowsheets/v2_2/Fluid_v2_2.vrtherm"

```

```

46 );
47 NComp as Integer;
48 SET
49 NComp = PP.NumberOfComponents;
50
51 VARIABLES
52 fracH as fraction(Lower=0.15,Upper=0.99999);
53 SugarcaneFlow as Real(Unit = 'kg/h');
54 StrawFlow as Real(Unit = 'kg/h');
55 Biogas as Integer(Brief="0: no biogas; 1: biogas utilized", Lower=0, Upper = 1);
56
57 SPECIFY
58 fracH = .99999; # fracH vai de 0.15 ateh 0.99x. Mesmo com todo bagaco hidrolisado ,
59 #palha e lignina ainda geram energia e vapor (valor muito acima do VaporTotalConsumption
60 ).
61 #fracH = .15;
62
63 DUP001.key = 0; # bagaco para 0: cogeraçao; 1: gaseificaçao
64 DUP002.key = DUP001.key; # biogas para 0: cogeraçao; 1: gaseificaçao (se houver)
65 Biogas = 1;
66
67 DEVICES
68 DUP001 as duplicator; # duplica bagaco para cogeraçao e hidrolise
69 DUP002 as duplicator; # duplica biogas
70
71 MSS101 as main_sourceR;
72 MSS102 as main_sourceR;
73 PSS103 as power_sourceR;
74 WSS104 as water_sourceR;
75 PSS105 as power_sourceR;
76 DCL101 as dry_cleaning2;
77 MLL102 as mill2;
78 mPP103 as pump_mL;
79 PSS106 as power_sourceR;
80 SIE104 as sieve;
81 PHT105 as phosphTank;
82 MSS107 as main_sourceR;
83 mSP106 as splitter_mR; # split do bagaco
84 mMX107 as mixer_mR;
85 wTB404 as turbine_w2;
86 wSP405 as splitter_wD;
87 wTB406 as turbine_w2;
88 wSP407 as splitter_wD;
89 wTB408 as turbine_w2;
90 Xmw108 as heatex_mwUR;
91 MSS108 as main_sourceR;
92 LTS109 as liming_tank2;
93 Xmw110 as heatex_mwUR;
94 DEC111 as decanter2;
95 mMX501 as mixer_mR;
96 MSS501 as main_sourceR;
97 STX502 as steam_explosion;
98 mwM503 as mixer_w_m_R;
99 WSS502 as water_sourceR;
100 CFG504 as centrifuge2;
101 PSS503 as power_sourceR;
102 WSS504 as water_sourceR;
103 mwM601 as mixer_w_m_R;
104 WSS602 as water_sourceR;
105 MSS601 as main_sourceR;
106 HLE602 as enz_hydrolysis_emp;

```

```
106 PSS603 as power_sourceR;
107 CFG603 as centrifuge2;
108 PSS604 as power_sourceR;
109 mSP604 as splitter_mL;
110 mPP605 as pump_mR;
111 PSS605 as power_sourceR;
112 mSP606 as splitter_mL;
113 mMX607 as mixer_mL; ## mistura lignina e bagaco
114 mMX201 as mixer_mL;
115 mSP202 as splitter_mL;
116 EVP203 as evaporator2;
117 wSP204 as splitter_wL;
118 wSP205 as splitter_wU;
119 wSP206 as splitter_wL;
120 EVP207 as evaporator2;
121 EVP208 as evaporator2;
122 EVP209 as evaporator2;
123 mPP210 as pump_mR;
124 PSS201 as power_sourceL;
125 mMX211 as mixer_mL;
126 Xmw212 as heatex_mwUL;
127 WSS202 as water_sourceR;
128 Xmw213 as heatex_mwDL;
129 Xmw214 as heatex_mwDL;
130 wSP215 as splitter_wR;
131 MSS203 as main_sourceR; # Yeast cream
132 FMS216 as fermenter_glucose;
133 WSS204 as water_sourceR;
134 CFG217 as centrifuge2;
135 PSS205 as power_sourceR;
136 Xmw218 as heatex_mwUR;
137 COL301 as column3;
138 WSS301 as water_sourceR;
139 WSS302 as water_sourceR;
140 Xmw302 as heatex_mwUL;
141 WSS303 as water_sourceR;
142 MSS304 as main_sourceR; # MEG
143 DEH303 as dehydration3;
144 WSS305 as water_sourceR;
145 WSS306 as water_sourceR;
146 Xmw304 as heatex_mwDR;
147 WSS307 as water_sourceR;
148 mMX305 as mixer_mD;
149 Anhydrous_Ethanol as main_sinkR;
150 mMX306 as mixer_mR;
151 mwM801 as mixer_w_m_R;
152 WSS801 as water_sourceR;
153 ADG802 as anaerobic_digester;
154 mSP803 as splitter_mR;
155 mMX401 as mixer_mD;
156 MSS401 as main_sourceR; # Air
157 WSS402 as water_sourceR; # Condenses
158 wMX409 as mixer_wL;
159 WSS403 as water_sourceR;
160 wPP410 as pump_wL;
161 PSS404 as power_sourceR;
162 BLR411 as boiler2;
163 wSP412 as splitter_wL;
164 wSP413 as splitter_wL;
165 wSP414 as splitter_wL;
166 wSP415 as splitter_wL;
```

```

167 wMX307 as mixer_wL;
168 wMX308 as mixer_wL;
169 wMX309 as mixer_wL;
170 wMX310 as mixer_wL;
171 WSK401 as water_sinkR;
172 wMX219 as mixer_wL;
173 wMX220 as mixer_wL;
174 WSK201 as water_sinkR;
175 WSK301 as water_sinkR;
176 ###
177 # MSS901 as main_sourceR; # fonte provisoria de gases para DRB901
178 MSS902 as main_sourceR; # fonte de ar para gaseificacao GAS902
179 PSS903 as power_sourceR; # fonte de energia para compressor MCP903
180 PSS904 as power_sourceR;
181 PSS905 as power_sourceR;
182 MSS906 as main_sourceR; # fonte de ar para compressor MCP904
183 PSS907 as power_sourceR; # fonte de energia para compressor MCP904
184 WSS908 as water_sourceR; # fonte de agua para HRSG
185 QSS909 as heat_sourceR;
186 PSS910 as power_sourceR;
187 PSS911 as power_sourceR;
188 QSS912 as heat_sourceR;
189 QSS913 as heat_sourceR;
190 QSS914 as heat_sourceR;
191
192 DRB901 as air_dryer; # secador pneumatico
193 GAS902 as gasifier; # gaseificador de biomassa
194 Cmq903 as cooler_mLD;
195 FLT904 as filter; # filtro de gases (mesmo modelo do filtro comum)
196 mCP905 as compressor_m; # compressor de gas de sintese
197 Cmq906 as cooler_mLD;
198 mCP907 as compressor_m;
199 Cmq908 as cooler_mLD;
200 mCP909 as compressor_m;
201 mCP910 as compressor_m; # compressor de ar
202 Cmq911 as cooler_mLD;
203 mCP912 as compressor_m;
204 Cmq913 as cooler_mLD;
205 mCP914 as compressor_m;
206 mMX915 as mixer_mR; # misturador de ar e gas de sintese comprimidos
207 RTS916 as stoic_reactor; # reator estequiometrico
208 mTB917 as turbine_m; # turbina a gas
209 ## Xmw908 as heatex_mwUL; # recuperador de calor dos gases de combustao (HRSG)
210 Cmq918 as cooler_mLD; # recuperador de calor dos gases de combustao (gas)
211 Hwq919 as heater_wLD; # recuperador de calor dos gases de combustao (agua)
212 Hwq920 as heater_wLD;
213 Hwq921 as heater_wLD;
214 Hwq922 as heater_wLD;
215 # Cmq909 as cooler_mLD; # resfriador da corrente de gases de combustao
216 wSP923 as splitter_wU; # splitter de corrente
217 wTB924 as turbine_w2; # turbina a vapor
218 wTB925 as turbine_w2; # turbina a vapor
219 mMX926 as mixer_mR; # mistura gas de sintese a biogas
220
221 CONNECTIONS
222 MSS102.Outlet to DCL101.CrudeCane;
223 MSS101.Outlet to DCL101.InletStraw;
224 PSS103.Outlet_p to DCL101.Inlet_pw;
225 DCL101.SugarCane to MLL102.Cane;
226 WSS104.Outlet to MLL102.Water;
227 PSS105.Outlet_p to MLL102.Inlet_pw;

```

```
228 MLL102.MixedJuice to mPP103.Inlet;
229 PSS106.Outlet_p to mPP103.Inlet_p;
230 mPP103.Outlet to SIE104.Inlet;
231 SIE104.Filtrate to PHT105.Inlet;
232 MSS107.Outlet to PHT105.PhosphStream;
233 MLL102.Bagasse to mSP106.Inlet;
234 mSP106.Outlet2 to mMX107.Inlet1;
235 DCL101.OutletStraw to mMX107.Inlet2; # palha eh misturada com bagaco nao hidrolizado
    aqui.
236 wTB404.Outlet to wSP405.Inlet;
237 wSP405.Outlet2 to wTB406.Inlet;
238 wTB406.Outlet to wSP407.Inlet;
239 wSP407.Outlet2 to wTB408.Inlet;
240 PHT105.Outlet to Xmw108.Inlet_m;
241 Xmw108.Outlet_m to LTS109.Inlet;
242 MSS108.Outlet to LTS109.Lime;
243 LTS109.Outlet to Xmw110.Inlet_m;
244 Xmw110.Outlet_m to DEC111.Inlet;
245 MSS501.Outlet to mMX501.Inlet1;
246 mSP106.Outlet1 to mMX501.Inlet2;
247 mMX501.Outlet to STX502.Inlet;
248 WSS502.Outlet to mwM503.WaterInlet;
249 STX502.Outlet to mwM503.MassInlet;
250 mwM503.Outlet to CFG504.Inlet;
251 PSS503.Outlet_p to CFG504.Inlet_pw;
252 CFG504.FilterCake to mwM601.MassInlet;
253 WSS602.Outlet to mwM601.WaterInlet;
254 MSS601.Outlet to HLE602.Enzyme;
255 mwM601.Outlet to HLE602.Inlet;
256 PSS603.Outlet_p to HLE602.Inlet_pw;
257 PSS604.Outlet_p to CFG603.Inlet_pw;
258 HLE602.Outlet to CFG603.Inlet;
259 CFG603.Filtrate to mSP604.Inlet;
260 PSS605.Outlet_p to mPP605.Inlet_p;
261 mSP604.Outlet1 to mPP605.Inlet;
262 mPP605.Outlet to mMX201.Inlet2;
263 DEC111.Clarified to mMX201.Inlet1;
264 mMX201.Outlet to mSP202.Inlet;
265 mSP202.Outlet1 to EVP203.Inlet;
266 EVP203.OutletV to wSP204.Inlet;
267 wSP204.Outlet1 to wSP205.Inlet;
268 wSP205.Outlet1 to wSP206.Inlet;
269 wSP205.Outlet2 to Xmw110.Inlet_w;
270 wSP206.Outlet1 to Xmw108.Inlet_w;
271 EVP203.OutletL to EVP207.Inlet;
272 wSP204.Outlet2 to EVP207.InletS;
273 EVP207.OutletL to EVP208.Inlet;
274 EVP207.OutletV to EVP208.InletS;
275 EVP208.OutletL to EVP209.Inlet;
276 EVP208.OutletV to EVP209.InletS;
277 EVP209.OutletL to mPP210.Inlet;
278 PSS201.Outlet_p to mPP210.Inlet_p;
279 mPP210.Outlet to mMX211.Inlet1;
280 mSP202.Outlet2 to mMX211.Inlet2;
281 mMX211.Outlet to Xmw212.Inlet_m;
282 Xmw212.Outlet_m to Xmw213.Inlet_m;
283 Xmw213.Outlet_m to Xmw214.Inlet_m;
284 WSS202.Outlet to Xmw214.Inlet_w;
285 Xmw214.Outlet_w to wSP215.Inlet;
286 wSP215.Outlet1 to Xmw212.Inlet_w;
287 MSS203.Outlet to FMS216.YeastInlet;
```

288 WSS204.Outlet to FMS216.WaterInlet;
289 Xmw214.Outlet_m to FMS216.Inlet;
290 PSS205.Outlet_p to CFG217.Inlet_pw;
291 FMS216.Outlet to CFG217.Inlet;
292 CFG217.Filtrate to Xmw218.Inlet_m;
293 Xmw218.Outlet_m to COL301.Wine;
294 WSS301.Outlet to COL301.Waterin1;
295 WSS302.Outlet to COL301.Waterin2;
296 WSS303.Outlet to Xmw302.Inlet_w;
297 COL301.Vinasse to Xmw302.Inlet_m;
298 Xmw302.Outlet_w to Xmw218.Inlet_w;
299 COL301.HydrEth to DEH303.HydrEth;
300 WSS305.Outlet to DEH303.Waterin1;
301 WSS306.Outlet to DEH303.Waterin2;
302 DEH303.RecMEG to Xmw304.Inlet_m;
303 WSS307.Outlet to Xmw304.Inlet_w;
304 Xmw304.Outlet_m to mMX305.Inlet2;
305 MSS304.Outlet to mMX305.Inlet1;
306 mMX305.Outlet to DEH303.MEG;
307 DEH303.AnhyEth to Anhydrous_Ethanol.Inlet;
308
309 CFG504.Filtrate to mMX306.Inlet2;
310 Xmw302.Outlet_m to mMX306.Inlet1;
311 mMX306.Outlet to mwM801.MassInlet;
312 WSS801.Outlet to mwM801.WaterInlet;
313 mwM801.Outlet to ADG802.Inlet;
314 ADG802.Gas to mSP803.Inlet;
315 CFG603.FilterCake to mSP606.Inlet;
316 mMX607.Outlet to DUP001.Inlet;
317 DUP001.Outlet0 to mMX401.Inlet1; ##### duplicador de corrente
318 mMX107.Outlet to mMX607.Inlet1; ## bagaco para misturador
319 mSP606.Outlet1 to mMX607.Inlet2; # lignina para misturador
320 mSP803.Outlet1 to DUP002.Inlet;
321 DUP002.Outlet0 to mMX401.Inlet2; # biogas ou corrente nula para caldeira
322 WSS402.Outlet to wMX409.Inlet2;
323 WSS403.Outlet to wMX409.Inlet1;
324 PSS404.Outlet_p to wPP410.Inlet_p;
325 wMX409.Outlet to wPP410.Inlet;
326 wPP410.Outlet to BLR411.Water;
327 mMX401.Outlet to BLR411.Fuel;
328 MSS401.Outlet to BLR411.Air;
329 BLR411.Steam to wTB404.Inlet;
330 WSS504.Outlet to STX502.VaporInlet;
331 wSP405.Outlet1 to wSP412.Inlet;
332 wSP412.Outlet1 to DEH303.Vapin2;
333 wSP412.Outlet2 to DEH303.Vapin1;
334 wSP407.Outlet1 to wSP413.Inlet;
335 wSP413.Outlet2 to wSP414.Inlet;
336 wSP414.Outlet1 to COL301.Vapin2;
337 wSP414.Outlet2 to COL301.Vapin1;
338 wSP413.Outlet1 to wSP415.Inlet;
339 wSP415.Outlet1 to EVP203.InletS;
340 wSP415.Outlet2 to Xmw213.Inlet_w;
341 COL301.Vapout1 to wMX307.Inlet2;
342 COL301.Vapout2 to wMX307.Inlet1;
343 DEH303.Vapout1 to wMX308.Inlet1;
344 wMX307.Outlet to wMX308.Inlet2;
345 DEH303.Vapout2 to wMX309.Inlet1;
346 wMX308.Outlet to wMX309.Inlet2;
347 Xmw110.Outlet_w to wMX310.Inlet2;
348 Xmw108.Outlet_w to wMX310.Inlet1;

```

349 wMX310.Outlet to WSK401.Inlet;
350 Xmw213.Outlet_w to wMX219.Inlet2;
351 EVP207.OutletS to wMX219.Inlet1;
352 wMX219.Outlet to wMX220.Inlet2;
353 EVP203.OutletS to wMX220.Inlet1;
354 wMX220.Outlet to WSK201.Inlet;
355 wMX309.Outlet to WSK301.Inlet;
356 ###
357 DUP001.Outlet1 to DRB901.inletBagasse; # bagaco (duplicado) para secador
358 # MSS901.Outlet to DRB901.inletGases; # gases de combustao para secador (provisorio)
359 Cmq918.Outlet to DRB901.inletGases;# # gases de combustao para secador
360 QSS909.Outlet_q to GAS902.Inlet_q; # calor para gaseificador
361 MSS902.Outlet to GAS902.Air; # ar para gaseificador
362 DRB901.outletBagasse to GAS902.Bagasse; # bagaco seco para gaseificador
363 GAS902.Syngas to Cmq903.Inlet; # mistura entre biogas e gas de sintese
364 Cmq903.Outlet to FLT904.Inlet; # gas de sintese com cinzas para filtro de gases
365
366 FLT904.Filtrate to mMX926.Inlet1; ##
367 DUP002.Outlet1 to mMX926.Inlet2; # biogas
368 mMX926.Outlet to mCP905.Inlet; # gas de sintese limpo para compressor
369
370 PSS903.Outlet_p to mCP905.Inlet_p; # fonte de energia para compressor
371 mCP905.Outlet to Cmq906.Inlet;
372 Cmq906.Outlet to mCP907.Inlet;
373 PSS904.Outlet_p to mCP907.Inlet_p;
374 mCP907.Outlet to Cmq908.Inlet;
375 Cmq908.Outlet to mCP909.Inlet;
376 PSS905.Outlet_p to mCP909.Inlet_p;
377 MSS906.Outlet to mCP910.Inlet; # ar para compressor
378 PSS907.Outlet_p to mCP910.Inlet_p; # fonte de energia para compressor
379 mCP910.Outlet to Cmq911.Inlet;
380 Cmq911.Outlet to mCP912.Inlet;
381 PSS910.Outlet_p to mCP912.Inlet_p;
382 mCP912.Outlet to Cmq913.Inlet;
383 Cmq913.Outlet to mCP914.Inlet;
384 PSS911.Outlet_p to mCP914.Inlet_p;
385 mCP909.Outlet to mMX915.Inlet1; # compressor de gas de sintese para misturador
386 mCP914.Outlet to mMX915.Inlet2; # compressor de ar para misturador
387 mMX915.Outlet to RTS916.Inlet;
388 RTS916.Outlet to mTB917.Inlet; # camara de combustao para turbina a gas
389 mTB917.Outlet to Cmq918.Inlet; # turbina para recuperador de calor
390 WSS908.Outlet to Hwq919.Inlet; # fonte de condensado para recuperador de calor
391 QSS912.Outlet_q to Hwq919.Inlet_q; # calor do gas no recuperador de calor para
condensado
392 Hwq919.Outlet to Hwq920.Inlet;
393 QSS913.Outlet_q to Hwq920.Inlet_q;
394 Hwq920.Outlet to Hwq921.Inlet;
395 QSS914.Outlet_q to Hwq921.Inlet_q;
396 Hwq921.Outlet to Hwq922.Inlet;
397 Cmq918.Outlet_q to Hwq922.Inlet_q;
398 Hwq922.Outlet to wSP923.Inlet; # vapor para splitter
399 wSP923.Outlet1 to wTB924.Inlet; # splitter para turbina a vapor
400 wSP923.Outlet2 to wTB925.Inlet; # splitter para turbina a vapor
401
402
403
404 SET
405 MSS101.CompositionBasis = "Mass" ;
406 MSS101.ValidPhases = "Liquid-Only" ;
407 MSS102.CompositionBasis = "Mass" ;
408 MSS102.ValidPhases = "Liquid-Only" ;

```

```
409 WSS104.ValidPhases = "Liquid-Only" ;
410 MSS107.CompositionBasis = "Mass" ;
411 MSS107.ValidPhases = "Liquid-Only" ;
412 Xmw108.Outlet_w.ValidPhases = "Liquid-Only" ;
413 MSS108.ValidPhases = "Liquid-Only" ;
414 MSS108.CompositionBasis = "Mass" ;
415 Xmw110.Outlet_w.ValidPhases = "Liquid-Only" ;
416 MSS501.CompositionBasis = "Mass" ;
417 MSS501.ValidPhases = "Liquid-Only" ;
418 WSS502.ValidPhases = "Liquid-Only" ;
419 WSS504.ValidPhases = "Vapour-Only" ;
420 WSS602.ValidPhases = "Liquid-Only" ;
421 MSS601.CompositionBasis = "Mass" ;
422 MSS601.ValidPhases = "Liquid-Only" ;
423 HLE602.Density = 1000 * 'kg/m^3' ;
424 HLE602.React_time = "72 hours" ;
425 HLE602.AI = "200 rpm" ;
426 Xmw212.Outlet_w.ValidPhases = "Liquid-Only" ;
427 WSS202.ValidPhases = "Liquid-Only" ;
428 Xmw213.Outlet_w.ValidPhases = "Liquid-Only" ;
429 Xmw214.Outlet_w.ValidPhases = "Liquid-Only" ;
430 Xmw214.ExchangerType = "Counter Flow" ;
431 Xmw214.HEType = "cooler" ;
432 MSS203.CompositionBasis = "Mass" ;
433 WSS204.ValidPhases = "Liquid-Only" ;
434 Xmw218.Outlet_w.ValidPhases = "Liquid-Only" ;
435 COL301.HydrOutletPhase = "Vapour" ;
436 COL301.Vapout1.ValidPhases = "Vapour-Liquid" ;
437 COL301.Waterout1.ValidPhases = "Liquid-Only" ;
438 COL301.Waterout2.ValidPhases = "Liquid-Only" ;
439 COL301.Vapout2.ValidPhases = "Vapour-Liquid" ;
440 WSS301.ValidPhases = "Liquid-Only" ;
441 WSS302.ValidPhases = "Liquid-Only" ;
442 Xmw302.HEType = "cooler" ;
443 Xmw302.Outlet_w.ValidPhases = "Liquid-Only" ;
444 WSS303.ValidPhases = "Liquid-Only" ;
445 MSS304.CompositionBasis = "Mass" ;
446 MSS304.ValidPhases = "Liquid-Only" ;
447 DEH303.Vapout1.ValidPhases = "Vapour-Liquid" ;
448 DEH303.Vapout2.ValidPhases = "Vapour-Liquid" ;
449 DEH303.Waterout2.ValidPhases = "Liquid-Only" ;
450 DEH303.Waterout1.ValidPhases = "Liquid-Only" ;
451 WSS305.ValidPhases = "Liquid-Only" ;
452 WSS306.ValidPhases = "Liquid-Only" ;
453 Xmw304.Outlet_w.ValidPhases = "Vapour-Only" ;
454 Xmw304.HEType = "cooler" ;
455 WSS307.ValidPhases = "Liquid-Only" ;
456 WSS801.ValidPhases = "Liquid-Only" ;
457 MSS401.CompositionBasis = "Molar" ;
458 MSS401.ValidPhases = "Vapour-Only" ;
459 WSS402.ValidPhases = "Liquid-Only" ;
460 wMX409.Outlet.ValidPhases = "Liquid-Only" ;
461 WSS403.ValidPhases = "Liquid-Only" ;
462 wMX307.Outlet.ValidPhases = "Vapour-Liquid" ;
463 wMX308.Outlet.ValidPhases = "Vapour-Liquid" ;
464 wMX309.Outlet.ValidPhases = "Vapour-Liquid" ;
465 wMX310.Outlet.ValidPhases = "Liquid-Only" ;
466 wMX219.Outlet.ValidPhases = "Liquid-Only" ;
467 wMX220.Outlet.ValidPhases = "Vapour-Liquid" ;
468 #MSS802.CompositionBasis = "Molar";
469 #MSS802.ValidPhases = "Vapour-Only";
```

```
470
471
472 SPECIFY
473 SugarcaneFlow = MSS102.Outlet.Total.Fw;
474 StrawFlow = MSS101.Outlet.Solid.Fw;
475 MSS101.T = 303 * 'K' ;
476 MSS101.P = 1 * 'atm' ;
477 MSS102.T = 303 * 'K' ;
478 MSS102.P = 1 * 'atm' ;
479 WSS104.P = 1 * 'atm' ;
480 WSS104.T = 303.15 * 'K' ;
481 DCL101.SFPTC = 0.14 ;
482 DCL101.Duty = 5 * 'Wh/kg' ;
483 DCL101.Cleaning_eff = 0.7 ;
484 DCL101.SugarLosses = 0.005 ;
485 DCL101.humidity_straw = 0.28 ;
486 DCL101.Fiber_cane = 0.13 ;
487 MLL102.humidity = 0.5 ;
488 MLL102.Duty = 16 * 'Wh/kg' ;
489 MLL102.WFPTC = 0.5 ;
490 MLL102.Extract = 0.96 ;
491 MLL102.frac_sol = 0.99 ;
492 mPP103.Pout = 3 * 'atm' ;
493 mPP103.n = 0.75 ;
494 SIE104.frac_sol = 0.82 ;
495 SIE104.frac_liq = 0.98 ;
496 PHT105.PAFPTJ = 0.1 * 'kg/ton' ;
497 PHT105.reac_time = 0.25 * 'h' ;
498 MSS107.T = 303.15 * 'K' ;
499 MSS107.P = 1 * 'atm' ;
500 MSS107.Solid.Fw = 1e-6 * 'kg/h' ;
501 mSP106.frac = fracH ;
502 wTB404.EF_ME = 0.98 ;
503 wTB404.EF_T = 0.85 ;
504 wTB404.Pout = 6 * 'bar' ;
505 wTB406.EF_ME = 0.98 ;
506 wTB406.EF_T = 0.85 ;
507 wTB406.Pout = 2.5 * 'bar' ;
508 wTB408.EF_ME = 0.98 ;
509 wTB408.EF_T = 0.85 ;
510 wTB408.Pout = 1 * 'bar' ;
511 Xmw108.PdropM = 0 * 'kPa' ;
512 Xmw108.PdropW = 0 * 'kPa' ;
513 Xmw108.Outlet_m.T = 347 * 'K' ;
514 Xmw108.U = 0.69445 * 'kW/m^2/K' ;
515 Xmw108.Outlet_w.T = 330 * 'K' ;
516 MSS108.T = 303.15 * 'K' ;
517 MSS108.P = 1 * 'atm' ;
518 LTS109.Conver = 1 ;
519 LTS109.LimeExcessPercent = 10 ;
520 LTS109.reac_time = 1 * 'h' ;
521 Xmw110.PdropM = 0 * 'kPa' ;
522 Xmw110.PdropW = 0 * 'kPa' ;
523 Xmw110.Outlet_m.T = 378 * 'K' ;
524 Xmw110.U = 0.69445 * 'kW/m^2/K' ;
525 Xmw110.Outlet_w.T = 350 * 'K' ;
526 DEC111.frac_sol = 0.95 ;
527 DEC111.frac_liq = 0.98 ;
528 DEC111.reac_time = 0.1 * 'h' ;
529 MSS501.T = 303.15 * 'K' ;
530 MSS501.P = 1 * 'atm' ;
```

```

531 MSS501.Solid.Fw = 1e-6 * 'kg/h' ;
532 STX502.P = 1 * 'atm' ;
533 STX502.Conver_React2 = 0.01 ;
534 STX502.Conver_React1 = 0.75 ;
535 STX502.VapourProportion = 0.5 ;
536 STX502.Humidity = 0.3 ;
537 STX502.reac_time = 0.10 * 'h' ;
538 mwM503.WaterProportion = 1 ;
539 WSS502.P = 1 * 'atm' ;
540 WSS502.T = 303 * 'K' ;
541 /*
542 MSS802.Outlet.Fluid.Fw=15000*'kg/h';
543 MSS802.Outlet.Solid.Fw=5e-5*'kg/h';
544 MSS802.Outlet.T=310*'K';
545 MSS802.Outlet.P=1*'atm';
546 MSS802.CompositionOfFluid = [0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, .21, .79, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0,
547 0, 0, 0, 0, 0,0,0,0];
548 #MSS802.CompositionOfFluid = [0, 0, 0, 0, 0, 0, .4, 0, 0, 0, 0, .6, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0,
549 0, 0, 0, 0, 0,0,0,0];
550 MSS802.CompositionOfSolid = [0.0374, 0.00624, 0.01695, 0.01022, 0.0002, 0.9272, 0,
551 0, 0.00169];
552 *#
553 CFG504.frac_sol = 0.995 ;
554 CFG504.frac_liq = 0.9 ;
555 CFG504.Duty = 1 * 'W*h/kg' ;
556 WSS602.P = 1 * 'atm' ;
557 WSS602.T = 303 * 'K' ;
558 MSS601.T = 303.15 * 'K' ;
559 MSS601.P = 1 * 'atm' ;
560 MSS601.Fluid.Fw = 10e-6 * 'kg/h' ;
561 HLE602.TS = 0.20 * 'kg/kg' ;
562 HLE602.EL = 0.085 * 'kg/kg' ;
563 HLE602.Duty = 10 * 'W*h/kg' ;
564 CFG603.frac_sol = 0.995 ;
565 CFG603.frac_liq = 0.9 ;
566 CFG603.Duty = 1 * 'W*h/kg' ;
567 mSP604.frac = 0.9999 ;
568 mPP605.n = 0.75 ;
569 mPP605.Pout = 3 * 'atm' ;
570 EVP203.P = 1.7 * 'atm' ;
571 EVP203.Outlet_Brix = 0.33 ;
572 EVP207.P = 1.2 * 'atm' ;
573 EVP207.Outlet_Brix = 0.38 ;
574 EVP208.P = 0.6 * 'atm' ;
575 EVP209.P = 0.2 * 'atm' ;
576 mPP210.n = 0.75 ;
577 mPP210.Pout = 3 * 'atm' ;
578 Xmw212.U = 0.69445 * 'kW/m^2/K' ;
579 Xmw212.PdropM = 0 * 'kPa' ;
580 Xmw212.PdropW = 0 * 'kPa' ;
581 Xmw212.Outlet_m.T = 375 * 'K' ;
582 Xmw212.Outlet_w.T = 370 * 'K' ;
583 WSS202.P = 1 * 'atm' ;
584 WSS202.T = 283 * 'K' ;
585 Xmw213.U = 0.69445 * 'kW/m^2/K' ;
586 Xmw213.PdropW = 0 * 'kPa' ;
587 Xmw213.PdropM = 0 * 'atm' ;
588 Xmw213.Outlet_m.T = 393 * 'K' ;
589 Xmw213.Outlet_w.T = 380 * 'K' ;
590 Xmw214.U = 0.69445 * 'kW/m^2/K' ;
591 Xmw214.PdropW = 0 * 'kPa' ;

```

```
592 Xmw214.PdropM = 0 * 'atm' ;
593 Xmw214.Outlet_m.T = 305 * 'K' ;
594 Xmw214.Outlet_w.T = 383 * 'K' ;
595 MSS203.T = 303 * 'K' ;
596 MSS203.P = 2 * 'atm' ;
597 FMS216.Conver_React1 = 1 ;
598 FMS216.Conver_React2 = 0.90 ;
599 FMS216.Conver_React3 = 0.0267 ;
600 FMS216.Conver_React4 = 0.0119 ;
601 FMS216.Conver_React5 = 0.0137 ;
602 FMS216.Ethanol_Loss = 0.01 ;
603 FMS216.WaterOutlet.T = 298 * 'K' ;
604 FMS216.Yeast_Proportion = 0.20 ;
605 FMS216.reac_time = 4 * 'h' ;
606 WSS204.P = 2 * 'atm' ;
607 WSS204.T = 283 * 'K' ;
608 CFG217.frac_sol = 0.995 ;
609 CFG217.frac_liq = 0.9 ;
610 CFG217.Duty = 1 * 'W*h/kg' ;
611 Xmw218.PdropM = 0 * 'kPa' ;
612 Xmw218.PdropW = 0 * 'kPa' ;
613 Xmw218.U = 0.69445 * 'kW/m^2/K' ;
614 Xmw218.Outlet_m.T = 350 * 'K' ;
615 COL301.Vapout1.v = 0.001 ;
616 COL301.Vapout2.v = 0.001 ;
617 WSS301.P = 1 * 'atm' ;
618 WSS301.T = 303 * 'K' ;
619 WSS302.P = 1 * 'atm' ;
620 WSS302.T = 303 * 'K' ;
621 Xmw302.PdropM = 0 * 'kPa' ;
622 Xmw302.PdropW = 0 * 'kPa' ;
623 Xmw302.U = 0.69445 * 'kW/m^2/K' ;
624 Xmw302.Outlet_w.T = 375 * 'K' ;
625 Xmw302.Outlet_m.T = 330 * 'K' ;
626 WSS303.P = 1 * 'atm' ;
627 WSS303.T = 303 * 'K' ;
628 MSS304.T = 350 * 'K' ;
629 MSS304.P = 1 * 'atm' ;
630 MSS304.Solid.F = 10e-6 * 'kmol/h' ;
631 DEH303.SolventRatio = 0.5 ;
632 DEH303.Vapout1.v = 0.001 ;
633 DEH303.Vapout2.v = 0.001 ;
634 WSS305.P = 1 * 'atm' ;
635 WSS305.T = 303 * 'K' ;
636 WSS306.P = 1 * 'atm' ;
637 WSS306.T = 303 * 'K' ;
638 Xmw304.U = 0.69445 * 'kW/m^2/K' ;
639 Xmw304.PdropM = 0 * 'kPa' ;
640 Xmw304.PdropW = 0 * 'kPa' ;
641 Xmw304.Outlet_m.T = 350 * 'K' ;
642 Xmw304.Outlet_w.T = 415 * 'K' ;
643 WSS307.P = 1 * 'atm' ;
644 WSS307.T = 303 * 'K' ;
645 WSS801.P = 1 * 'atm' ;
646 WSS801.T = 303 * 'K' ;
647 ADG802.HRT = 10.8 * 'h' ;
648 ADG802.sludgeHumidity = 0.97 ;
649 ADG802.Yps = 0.35 * 'l/g' ;
650 ADG802.loadRate = 45 * 'kg/m^3/d' ;
651 mSP803.frac = 0.9999 ;
652 mSP606.frac = 0.9999 ;
```

```

653 MSS401.T = 303.15 * 'K' ;
654 MSS401.P = 2 * 'atm' ;
655 MSS401.Solid.F = 10e-6 * 'kmol/h' ;
656 WSS402.P = 2.5 * 'atm' ;
657 WSS402.T = 395 * 'K' ;
658 WSS403.P = 2.5 * 'atm' ;
659 WSS403.T = 395 * 'K' ;
660 wPP410.n = 0.75 ;
661 wPP410.Pout = 6.15 * 'atm' ;
662 BLR411.Conver_Methane = 0.95 ;
663 BLR411.Conver_Cellulose = 0.85 ;
664 BLR411.Conver_Hemicellulose = 0.85 ;
665 BLR411.Conver_Lignin = 0.85 ;
666 BLR411.P = 64.15 * 'atm' ;
667 BLR411.T = 758 * 'K' ;
668 BLR411.f_lossess = 0.01 ;
669 BLR411.Ex_Air = 1.1 ;
670 BLR411.Efficiency_LHV = 0.872 ;
671 #WSS504.Fw = 17747.3 * 'kg/h' ;
672 WSS504.P = 12.83 * 'atm' ;
673 WSS504.T = 553.584 * 'K' ;
674
675
676
677 PARAMETERS
678 PPS as Plugin (Brief = "External Physical Properties",
679   Type="PP",
680   Project = "../Flowsheets/v2_2/Solid_v2_2.vrtherm"
681 );
682 NCompS as Integer (Brief = "Number of chemical components in the solid phase");
683 flu as ConstituentFluid (Symbol = " ", Protected = true);
684 sol as ConstituentSolid (Symbol = " ", Protected = true);
685
686 SET
687 NCompS = PPS.NumberOfComponents;
688
689 # "Parameter of Biodigester"
690 ADG802.COD = [0, 384, 192, 160, 96, 0, 0, 0, 0, 0, 64, 8, 366.4, 0, 64, 160, 192,
691 112, 16, 0, 0, 0, 192, 160, 366.4, 0, 39.824, 32, 0, 0, 0, 0,0,0,0] * 'g/mol';
692 ADG802.NReac = 5;
693 ADG802.limit = [2, 3, 4, 15, 18];
694
695 #Sucrose (2)
696 ADG802.stoic (:,1) = [0, -1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0,
697 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0,0,0,0];
698
699 #glucose (3)
700 ADG802.stoic (:,2) = [0, 0, -1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0,
701 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0,0,0,0];
702
703 #xylose (4)
704 ADG802.stoic (:,3) = [0, 0, 0, -1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0,
705 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0,0,0,0];
706
707 #acetic acid (15)
708 ADG802.stoic (:,4) = [0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, -1, 0, 0, 0, 0,
709 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0,0,0,0];
710
711 #glycerol (18)
712 ADG802.stoic (:,5) = [0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, -1, 0, 0,
713 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0,0,0,0];

```

```

714
715
716 #####

717
718 ##### GASEIFICACAO/BIGCC
719
720 ### secador - DRB901
721 SPECIFY
722 DRB901.outletBagasse.T = DRB901.outletGases.T-5*'K';
723 DRB901.outletBagasse.Fluid.Fw = 0.21*DRB901.outletBagasse.Solid.Fw;
724 #DRB901.outletGases.T = 460*'K';
725 #DRB901.Fevap = 0.70*DRB901.inletBagasse.Fluid.Fw;
726
727 ### gases de combustao (provisorio) - MSS901
728 #*
729 SET
730 MSS901.CompositionBasis = "Molar";
731 MSS901.ValidPhases = "Vapour-Only";
732 SPECIFY
733 MSS901.CompositionOfFluid(fluid.Water) = .163;
734 MSS901.CompositionOfFluid(fluid.CO2) = .123;
735 MSS901.CompositionOfFluid(fluid.O2) = .053;
736 MSS901.CompositionOfFluid(fluid.N2) = .662;
737 MSS901.CompositionOfFluid([2:fluid.CO2-1,fluid.CO2+1:fluid.O2-1,fluid.N2+1:NComp]) = 0;
738 MSS901.CompositionOfSolid = [1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0];
739 MSS901.Fluid.Fw = 348 * 't/h'; # chute!
740 MSS901.Solid.Fw = 1 * 'kg/h';
741 #MSS901.Solid.Fw = 0 * 'kg/h';
742 MSS901.T = 580 * 'K'; # a temperatura sugerida na literatura eh 480 K
743 MSS901.P = 1 * 'atm';
744 *#
745 ### fonte de ar para gaseificacao - MSS902
746
747 SET
748 MSS902.ValidPhases = "Vapour-Only";
749 SPECIFY
750 MSS902.Outlet.T = 300 * 'K';
751 MSS902.Outlet.P = 1 * 'atm';
752 MSS902.CompositionOfFluid([fluid.O2,fluid.N2]) = [.21,.79];
753 MSS902.CompositionOfFluid([1:fluid.O2-1,fluid.N2+1:NComp]) = 0;
754 MSS902.CompositionOfSolid = [1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0];
755
756 ### gaseificador - GAS902
757
758 # sem especificacoes
759
760 ### resfriador - Cmq903
761
762 Cmq903.Pdrop = 0.0 * 'bar';
763 Cmq903.Outlet.T = 550 * 'K';
764 Cmq903.U = 0.69445 * 'kW/m^2/K';
765 #Cmq903.U = 40 * 'kW/m^2/K';
766 #Cmq903.A = 4000 * 'm^2';
767 Cmq903.lmtd = 10 * 'K';
768
769 ### filtro - FLT904
770
771 FLT904.Filtrate.Solid.Fw = 1*'kg/h';
772 FLT904.frac_water = 0.99;
773 FLT904.frac_sol = 0.99;

```

```

774
775 ### compressor - mCP905
776
777 mCP905.Pratio = 2.621;
778 mCP905.EF_C = 0.85;
779
780 ### resfriador - Cmq906
781
782 Cmq906.Pdrop = 0.0 * 'bar';
783 Cmq906.Outlet.T = 550 * 'K';
784 Cmq906.U = 0.69445 * 'kW/m^2/K';
785 #Cmq906.U = 40 * 'kW/m^2/K';
786 #Cmq906.A = 4000 * 'm^2';
787 Cmq906.lmtd = 10 * 'K';
788
789
790 ### compressor - mCP907
791
792 mCP907.Pratio = 2.621;
793 mCP907.EF_C = 0.85;
794
795
796 ### resfriador - Cmq908
797
798 Cmq908.Pdrop = 0.0 * 'bar';
799 Cmq908.Outlet.T = 550 * 'K';
800 Cmq908.U = 0.69445 * 'kW/m^2/K';
801 #Cmq908.U = 40 * 'kW/m^2/K';
802 #Cmq908.A = 4000 * 'm^2';
803 Cmq908.lmtd = 10 * 'K';
804
805
806 ### compressor - mCP909
807
808 mCP909.Pratio = 2.621;
809 mCP909.EF_C = 0.85;
810
811 ### ar para compressor MCP904
812
813 SET
814 MSS906.CompositionBasis = "Molar";
815 MSS906.ValidPhases = "Vapour-Only";
816 SPECIFY
817 #MSS906.Fluid.F = 5335 * 'kmol/h';
818 MSS906.Fluid.F = (FLT904.Filtrate.Fluid.z(flu.CO)/2+
819     FLT904.Filtrate.Fluid.z(flu.H2)/2+
820     FLT904.Filtrate.Fluid.z(flu.CH4)*2)
821     *FLT904.Filtrate.Fluid.F/0.21*1.25;
822 # baseado no oxigenio necessario em excesso de 25%
823 MSS906.Solid.Fw = 1 * 'kg/h';
824 #MSS906.Solid.Fw = 0 * 'kg/h';
825 MSS906.T = 300 * 'K';
826 MSS906.P = 1.0 * 'atm';
827 MSS906.CompositionOfFluid ([flu.O2, flu.N2]) = [.21, .79];
828 MSS906.CompositionOfFluid ([1:flu.O2-1, flu.N2+1:NComp]) = 0;
829 MSS906.CompositionOfSolid = [1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0];
830
831 ### compressor - mCP910
832
833 mCP910.Pratio = 2.621;
834 mCP910.EF_C = 0.85;

```

```

835
836 ### resfriador - Cmq911
837
838 Cmq911.Pdrop = 0.0 * 'bar';
839 Cmq911.Outlet.T = 300 * 'K';
840 Cmq911.U = 0.69445 * 'kW/m^2/K';
841 Cmq911.lmtd = 10 * 'K';
842
843
844 ### compressor - mCP912
845
846 mCP912.Pratio = 2.621;
847 mCP912.EF_C = 0.85;
848
849 ### resfriador - Cmq913
850
851 Cmq913.Pdrop = 0.0 * 'bar';
852 Cmq913.Outlet.T = 300 * 'K';
853 Cmq913.U = 0.69445 * 'kW/m^2/K';
854 Cmq913.lmtd = 10 * 'K';
855
856 ### compressor - mCP914
857
858 mCP914.Pratio = 2.621;
859 mCP914.EF_C = 0.85;
860
861
862 ### camara de combustao (reator estequiometrico)
863
864 # reacoes
865 # CO (limit) + 0.5 O2 -> CO2
866 # CH4 (limit) + 2 O2 -> CO2 + 2 H2O
867 # H2 (limit) + 0.5 O2 -> H2O
868
869 SET
870 RTS916.NReac = 3;
871 # carbon monoxyde to carbon dioxyde
872 RTS916.stoic (:,1) = [0, 0, 0, 0, 0, 1, -1, -0.5, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0];
873 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0];
874 # methane to carbon dioxyde
875 RTS916.stoic (:,2) = [2, 0, 0, 0, 0, 1, 0, -2, 0, 0, -1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0];
876 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0];
877 # hydrogen to water
878 RTS916.stoic (:,3) = [1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, -0.5, 0, -1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0];
879 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0];
880
881 RTS916.h = [-283.0, -891.0, -285.8] * 'kJ/mol';
882 RTS916.density = PP.VapourDensity(RTS916.T, RTS916.Outlet.P, RTS916.Outlet.Fluid.z);
883 RTS916.limit = [flu.CO, flu.CH4, flu.H2];
884 SPECIFY
885 RTS916.conv = [1, 1, 1];
886 RTS916.V = 500 * 'm^3'; # Chute.
887 RTS916.Q = -5 * 'kW'; # Chute. Pesquisar valor realista.
888
889 ### turbina a gas - MTB907
890
891 mTB917.EF_T = .92;
892 mTB917.Outlet.P = 1 * 'atm';
893
894 ### fonte de condensado - WSS908
895

```

```
896 SET
897 WSS908.ValidPhases = "Liquid-Only";
898 SPECIFY
899 WSS908.Fw = 0.82*Cmq918.Outlet.Fluid.Fw; # Chutado
900 WSS908.T = 560 * 'K'; # Compressao isentalpiaca resultaria em 460 K
901 WSS908.P = 82 * 'bar'; # Precisa-se de uma bomba entre o condensado da coluna e o HRSG
902
903 ### HRSG (gas) - Cmq918
904
905 Cmq918.Pdrop = 0.0 * 'bar';
906 Cmq918.Outlet.T = 700*'K';
907 #Cmq918.Outlet_q.Q = 111*'MW';
908 Cmq918.U = 0.85*'kW/m^2/K';
909 Cmq918.lmtd = 10*'K';
910
911
912 ### HRSG (agua) - Hwq919
913
914 SET
915 Hwq919.Outlet.ValidPhases = "Vapour-Liquid";
916 SPECIFY
917 Hwq919.Pdrop = 0.0 * 'bar';
918 Hwq919.U = 0.85 * 'kW/m^2/K';
919 Hwq919.Outlet.v = 0.2;
920 Hwq919.lmtd = 10 * 'K';
921
922 SET
923 Hwq920.Outlet.ValidPhases = "Vapour-Liquid";
924 SPECIFY
925 Hwq920.Pdrop = 0.0 * 'bar';
926 Hwq920.U = 0.85 * 'kW/m^2/K';
927 Hwq920.Outlet.v = 0.5;
928 Hwq920.lmtd = 10 * 'K';
929
930 SET
931 Hwq921.Outlet.ValidPhases = "Vapour-Liquid";
932 SPECIFY
933 Hwq921.Pdrop = 0.0 * 'bar';
934 Hwq921.U = 0.85 * 'kW/m^2/K';
935 Hwq921.Outlet.v = 0.8;
936 Hwq921.lmtd = 10 * 'K';
937
938 SET
939 Hwq922.Outlet.ValidPhases = "Vapour-Only";
940 SPECIFY
941 Hwq922.Pdrop = 0.0 * 'bar';
942 Hwq922.U = 0.85 * 'kW/m^2/K';
943 Hwq922.lmtd = 10 * 'K';
944
945 ### splitter - wSP923
946
947 wSP923.frac = 0.5;
948
949
950 ### turbina - wTB924
951
952 wTB924.Outlet.P = 6 * 'bar';
953 wTB924.EF_T = 0.8;
954 wTB924.EF_ME = 0.958;
955
956
```

```

957   ### turbina - wTB925
958
959   wTB925.Outlet.P = 2.5 * 'bar';
960   wTB925.EF_T = 0.8;
961   wTB925.EF_ME = 0.958;
962
963   #####
964
965   ### ANALISE ECONOMICA
966
967   PARAMETERS
968   Taxes as fraction (Brief = "Taxes",Default=0.34);
969   #n as Integer(Brief = "Number of years",Default=25);
970
971   VARIABLES
972
973   # Capital costs
974   # Capital costs of Rankine
975   CBM_CHP as Real (Brief = "Capital Costs of Rankine power cycle", Unit = 'US$');
976   CBM_HX_CHP as Real(Brief = "Bare Module Cost of Heat Exchangers", Unit = 'US$');
977   # Capital costs of BIGCC
978   CBM_BIGCC as Real (Brief = "Capital Costs of BIGCC", Unit = 'US$');
979   CBM_HX_BIGCC as Real(Brief = "Bare Module Cost of Heat Exchangers", Unit = 'US$');
980   # Capital costs of PTH (Pretreatment and Hydrolysis)
981   CBM_PTH as Real (Brief = "Capital Costs of pre-treatment and hydrolysis", Unit = 'US$');
982   CBM_HX_PTH as Real(Brief = "Bare Module Cost of Heat Exchangers", Unit = 'US$');
983   # Capital costs of AD (Anaerobic Digestion)
984   CBM_AD as Real (Brief = "Capital Costs of anaerobic digestion", Unit = 'US$');
985   CIM as Real (Brief = "Total Modular Costs", Unit = 'US$');
986   # Operating Costs
987   # Operating costs of Rankine
988   Labour_CHP as Real (Brief = "Labour Costs of Rankine power cycle", Unit = 'US$/h');
989   Util_CHP as Real (Brief = "Utility Costs of Rankine power cycle", Unit = 'US$/h');
990   OpC_CHP as Real (Brief = "Operating Costs of Rankine power cycle", Unit = 'US$/h');
991   # Operating costs of BIGCC
992   Labour_BIGCC as Real (Brief = "Labour Costs of BIGCC", Unit = 'US$/h');
993   Util_BIGCC as Real (Brief = "Utility Costs of BIGCC", Unit = 'US$/h');
994   OpC_BIGCC as Real (Brief = "Operating Costs of BIGCC", Unit = 'US$/h');
995   # Operating costs of Pretreatment and Hydrolysis
996   Labour_PTH as Real (Brief = "Labour Costs of Pretreatment and hydrolysis", Unit = 'US$/h
997   ');
997   Util_PTH as Real (Brief = "Utility Costs of Pretreatment and hydrolysis", Unit = 'US$/h
998   ');
998   RawMat_PTH as Real (Brief = "Raw material costs of Pretreatment and hydrolysis", Unit =
999   'US$/h');
999   OpC_PTH as Real (Brief = "Operating Costs of Pretreatment and hydrolysis", Unit = 'US$/h
1000   ');
1000   # Operating costs of Anaerobic Digestion
1001   Labour_AD as Real (Brief = "Labour Costs of Anaerobic Digestion", Unit = 'US$/h');
1002   Util_AD as Real (Brief = "Utility Costs of Anaerobic Digestion", Unit = 'US$/h');
1003   OpC_AD as Real (Brief = "Operating Costs of Anaerobic Digestion", Unit = 'US$/h');
1004   # Total operating costs
1005   OpC_total as Real (Brief = "Total operating costs", Unit = 'US$/h');
1006   Deprec as Real (Brief = "Linear Depreciation", Unit = 'US$/yr');
1007
1008
1009   # Vapor management
1010   Vapor2barConsumption as flow_mass (Brief = "2.5 bar vapor consumption totalization");
1011   Vapor6barConsumption as flow_mass (Brief = "6 bar vapor consumption totalization");
1012   Vapor13barConsumption as flow_mass (Brief = "13 bar vapor consumption totalization");
1013   VaporTotalConsumption as flow_mass (Brief = "Total vapor consumption totalization");

```

```

1014
1015 # WSS402 management
1016   WSS402Recuperation as flow_mass (Brief = "WSS402 recuperation");
1017
1018 # "Cold Water management"
1019   ColdWaterConsumption as flow_mass (Brief = "Cool water consumption totalization");
1020
1021 # "Ethanol management"
1022   EthanolYield as flow_vol (Brief = "Anhydrous ethanol yield");
1023   EthanolPrice as Real (Brief = "Ethanol sale price", Unit = 'US$/l');
1024   fracE2G as fraction (Brief = "Fraction of E2G produced");
1025
1026 # "Electricity management"
1027   MaxElectricityFromBiogas as power(Brief="Maximum additional electricity due to biogas");
1028   ElectricityConsumption as power (Brief = "Total electricity consumption");
1029   ElectricityGeneration as power (Brief = "Total electricity generation");
1030   ElectricitySurplus as power (Brief = "Electricity Surplus");
1031   ElectricityPrice as Real (Brief = "Electricity sale price", Unit = 'US$/(kW*h)');
1032
1033 # "Enzyme management"
1034   EnzymePrice as Real (Brief = "Enzyme purchase price", Unit = 'US$/l');
1035
1036 # "Income management"
1037   EthanolIncomes as Real (Brief = "Ethanol Incomes", Unit = 'US$/h');
1038   ElectricityIncomes as Real (Brief = "Electricity Incomes", Unit = 'US$/h');
1039   TotalIncomes as Real (Brief = "Total Incomes", Unit = 'US$/h');
1040
1041 # "Outcome management"
1042   #EnzymeOutcomes as Real (Brief = "Enzyme Outcomes", Unit = 'US$/h');
1043
1044 # "Profit management"
1045   Profit as Real (Brief = "Profit", Unit = 'US$/h');
1046   CashFlow as Real (Brief = "Cash Flow", Unit = 'US$');
1047
1048 # "Internal Rate of Return Analysis"
1049   #NPV as Real (Brief = "Net Present Value", Unit = 'US$');
1050   BCR as Real (Brief = "Benefit/Cost Ratio");
1051   IRR as fraction (Brief = "Internal Rate of Return", Lower = 0.01, Upper = 1.0, Default =
1052     0.1);
1052   IRR10 as Real;
1053   IRR25 as Real;
1054
1055 SPECIFY
1056
1057   IRR = 0.12;
1058   #NPV = 0;
1059
1060 # "Sugarcane specifications"
1061   MSS102.CompositionOfFluid = [0.8278, 0.1648, 0.0071, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0,
1062     0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0.0003,0,0,0];
1063   MSS102.CompositionOfSolid = [0.4491, 0.2407, 0.2406, 0.0449, 0, 0, 0, 0, 0.0247];
1064   MSS102.Outlet.Total.Fw = 800000 * 'kg/h';
1065
1066 # "Straw specifications"
1067   MSS101.CompositionOfFluid = [1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0,
1068     0, 0, 0, 0,0,0,0];
1069   MSS101.CompositionOfSolid = [0.3926, 0.3203, 0.2135, 0.0735, 0, 0, 0, 0, 0];
1070   MSS101.Outlet.Total.zw (1) = 0.5;
1071   #MSS101.Outlet.Total.Fw = 112000*'kg/h';
1072
1073 # "Phosphoric Acid specifications"

```

```

1074 MSS107.CompositionOfFluid = [0.15, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0,
1075 0, 0, 0, 0, 0.85,0,0,0];
1076 MSS107.CompositionOfSolid = [0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1];
1077
1078 # "Lime specifications"
1079 MSS108.CompositionOfFluid = [1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0,
1080 0, 0, 0, 0,0,0,0];
1081 MSS108.CompositionOfSolid = [0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0];
1082
1083 # "Phosphoric Acid specifications"
1084 MSS501.CompositionOfFluid = [0.9, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0,
1085 0, 0, 0, 0,0,0,0];
1086 MSS501.CompositionOfSolid = [0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1];
1087
1088 # "Water specifications"
1089 MSS601.CompositionOfFluid = [1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0,
1090 0, 0, 0, 0,0,0,0];
1091 MSS601.CompositionOfSolid = [0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0];
1092
1093 # "Yeast Cream specifications"
1094 MSS203.CompositionOfFluid = [1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0,
1095 0, 0, 0, 0,0,0,0];
1096 MSS203.CompositionOfSolid = [0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0];
1097
1098 # "Yeast Cream dilution in Water"
1099 MSS203.Outlet.Total.zw(1)=0.70;
1100
1101 # "MEG specifications"
1102 MSS304.CompositionOfFluid = [0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0,
1103 1, 0, 0, 0,0,0,0];
1104 MSS304.CompositionOfSolid = [0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0];
1105
1106 # "Biodigestor conversion"
1107 ADG802.conv = [0.72, 0.72, 0.72, 0.72, 0.72];
1108
1109 # "Air specifications"
1110 MSS401.CompositionOfFluid = [0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0.21, 0.79, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0,
1111 0, 0, 0, 0, 0,0,0,0];
1112 MSS401.CompositionOfSolid = [0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1];
1113
1114 EQUATIONS
1115
1116 #####
1117
1118 ##### INVESTMENT COSTS
1119
1120 # Rankine Cogeneration Cost Analysis
1121
1122 # "Bare module cost of heat exchangers in BIGCC"
1123 CBM_HX_CHP = 8.77e6*'US$'; # checar
1124
1125 # "Bare module cost of BIGCC"
1126 CBM_CHP = (CBM_HX_CHP
1127 +10^6*(
1128 2.97*37.77*(BLR411.Steam.Fw/(238.686*'t/h'))^0.6
1129 + 2.97*12.6*(
1130 (wTB404.Outlet_p.W/(42.2*'MW'))^0.6 # ha tres turbinas em uso
1131 + (wTB406.Outlet_p.W/(42.2*'MW'))^0.6
1132 + (wTB408.Outlet_p.W/(42.2*'MW'))^0.6
1133 )
1134 )*'US$'); # * 0.7; # estudo de caso 3

```

```

1135
1136 ##### Gasification Cost Analysis #####
1137
1138 # "Bare module cost of heat exchangers in BIGCC"
1139 CBM_HX_BIGCC = 3.88e7*'US$';
1140 # 1.76*(4*3.29*10^(2.7652+0.7282*log(Cmq913.A/'m^2')+0.0783*log(Cmq913.A/'m^2')^2))*'US$
    '+
1141 # 3*3.60*10^(2.7652+0.7282*log(Hwq920.A/'m^2')+0.0783*log(Hwq920.A/'m^2')^2))*'US$'/2;
1142
1143 # "Bare module cost of BIGCC
1144 CBM_BIGCC = ( CBM_HX_BIGCC
1145 +10^6*(
1146 3.07*13.4*(DRB901.inletBagasse.Total.Fw/(33.5*'t/h'))^0.65
1147 + 2.79*28.7*(GAS902.Bagasse.Solid.Fw/(68.8*'t/h'))^0.65
1148 + 3.07*10.1*(GAS902.Syngas.Fluid.F/(1.40*'kmol/s'))^0.7
1149 #+ 3.03*12.0*(GAS902.Syngas.Fluid.Fw/(39.2*'kg/s'))^0.6
1150 + 3.07*7.4*(GAS902.Syngas.Fluid.F/(0.50*'kmol/s'))^0.65
1151 + 2.84*19.3*(mCP910.Inlet_p.W/(13.2*'MW'))^0.85
1152 + 3.07*33.3*(mTB917.Outlet_p.W/(26.3*'MW'))^0.7
1153 + 3.07*9.0*(wTB924.Outlet_p.W/(10.3*'MW'))^0.7
1154 )*'US$'); # * 0.7; # estudo de caso 4
1155
1156 ##### Pre-treatment/Hydrolysis Cost Analysis #####
1157 CBM_HX_PTH = 1.70e7*'US$'; # areas dos trocadores de calor sao calculadas apenas em
    simulacao da etapa
1158 CBM_PTH= CBM_HX_PTH
1159 +10^6*(
1160 2.99*6.58*(STX502.Inlet.Solid.Fw/(110*'t/h'))^0.6
1161 + 3.89*1.72*(STX502.Inlet.Solid.Fw/(83*'t/h'))^0.78
1162 + 3.12*0.81*(DEH303.AnhyEth.Total.Fw*fracE2G/(1.04*'t/h'))^0.8
1163 #+ 4.54*3.58*(DEH303.AnhyEth.Total.Fw*fracE2G/(18.5*'t/h'))^0.7
1164 + 2.49*36.11*(DEH303.AnhyEth.Total.Fw*fracE2G/(34.7*'t/h'))^0.68
1165 + 3.63*1.32*(STX502.Inlet.Solid.Fw/(10.1*'t/h'))^0.65
1166 )*'US$';
1167
1168 ##### Anaerobic digestion cost analysis #####
1169 # CBM_AD = 4.27e6*(COL301.Vinasse.Fluid.Fw/(400*'t/h'))^0.51 *'US$'; # * 1.5; # estudo de
    caso 5
1170 CBM_AD=10^6*(
1171 3.22*2.13*((ADG802.Inlet.Fluid.Fw-ADG802.Outlet.Fluid.Fw)/(43*'t/h'))^0.6
1172 )*'US$';
1173
1174 #####
1175
1176 ##### OPERATING COSTS
1177
1178 # Rankine cycle
1179 Labour_CHP = 36*'US$/h';
1180 Util_CHP = (-124.9*fracH+680)*0.000499*'US$/s'; # relacao entre fracH e calor trocado
    por agua de resfriamento
1181 OpC_CHP * 365/200 = 1.23*Util_CHP+2.73*Labour_CHP+0.11*CBM_CHP/'yr';
1182 # BIGCC cycle
1183 Labour_BIGCC = 41*'US$/h';
1184 Util_BIGCC = -(Cmq911.Q+Cmq913.Q+Cmq903.Q+Cmq906.Q+Cmq908.Q)*0.499*'US$/GJ'
1185 +MSS906.Fluid.F*24.62*'m^3/kmol'*0.00477*'US$/m^3';
1186 OpC_BIGCC * 365/200 = (1.23*Util_BIGCC+2.73*Labour_BIGCC+0.11*CBM_BIGCC/'yr');# * .7;
1187 # PreTreatment and Hydrolysis
1188 Labour_PTH = 36*'US$/h';
1189 Util_PTH = (-66.2*fracH+241.5)*0.000499*'US$/s';
1190 RawMat_PTH = EnzymePrice * EthanolYield * fracE2G;
1191 OpC_PTH * 365/200 = (1.23*(Util_PTH + RawMat_PTH) + 2.73*Labour_PTH+0.11*CBM_PTH/'yr');

```

```

1192 # Anaerobic Digestion
1193 Labour_AD = 33*'US$/h';
1194 Util_AD = (81.2*fracH+24.7)*0.000499*'US$/s';
1195 OpC_AD * 365/200 = 1.23*Util_AD+2.73*Labour_AD+0.11*CBM_AD/'yr';
1196
1197 #####
1198
1199 # "Lime dilution in Water"
1200 MSS108.Outlet.Total.zw(1)=0.50;
1201
1202 # "Phosphoric acid proportion in pretreatment"
1203 mMX501.Outlet.Fluid.Fw * mMX501.Outlet.Fluid.zw(22) = 9.5/1000 * mMX501.Outlet.Solid.Fw
1204 * (mMX501.Outlet.Solid.zw(1) + mMX501.Outlet.Solid.zw(2) + mMX501.Outlet.Solid.zw(3));
1205
1206 # "Inlet Brix to fermenter"
1207 sum(mMX211.Outlet.Total.zw(2:4))=0.22;
1208
1209 # "Vapor 2.5 bar consumption totalization"
1210 Vapor2barConsumption = wSP407.Outlet1.Fw;
1211
1212 # "Vapor 6 bar consumption totalization"
1213 Vapor6barConsumption = wSP405.Outlet1.Fw;
1214
1215 # "Vapor 13 bar consumption totalization"
1216 #Vapor13barConsumption = wSP402.Outlet1.Fw;
1217 Vapor13barConsumption = WSS504.Outlet.Fw;
1218
1219 # "Total Vapor consumption totalization"
1220 VaporTotalConsumption = Vapor2barConsumption + Vapor6barConsumption
1221 + Vapor13barConsumption;
1222
1223 MaxElectricityFromBiogas = mSP803.Outlet1.Fluid.Fw*mSP803.Outlet1.Fluid.zw(flu.CH4)
1224 *50*'MJ/kg'; # LHV
1225
1226 if DUP001.key equal 0 then # ciclo Rankine
1227
1228   if Biogas equal 0 then
1229     # "Total electricity consumption"
1230     ElectricityConsumption * 365/200 = 30*'kW*h/t' * MSS102.Outlet.Total.Fw
1231     + 24*'kW*h/t' * mSP106.Outlet1.Total.Fw; # MOS Dias et al 2012: Integrated versus
1232     stand-alone second generation ethanol production from sugarcane bagasse and trash
1233     # "Total electricity generation"
1234     ElectricityGeneration * 365/200 = wTB404.Outlet_p.W + wTB406.Outlet_p.W
1235     + wTB408.Outlet_p.W - wTB404.EF_T*MaxElectricityFromBiogas*0.35; #35% efficiency of
1236     conversion to electricity
1237     # "Total operating costs"
1238     OpC_total = OpC_CHP+OpC_PTH+20*'US$/t'*StrawFlow * 200/365;
1239     # "Total costs"
1240     CIM=1.18*(CBM_CHP+CBM_PTH);
1241   else
1242     # "Total electricity consumption"
1243     ElectricityConsumption * 365/200 = 30*'kW*h/t' * MSS102.Outlet.Total.Fw
1244     + 24*'kW*h/t' * mSP106.Outlet1.Total.Fw;
1245     # "Total electricity generation"
1246     ElectricityGeneration * 365/200 = wTB404.Outlet_p.W + wTB406.Outlet_p.W + wTB408.
1247     Outlet_p.W;
1248     # "Total operating costs"
1249     OpC_total = OpC_CHP + OpC_PTH + OpC_AD+20*'US$/t'*StrawFlow * 200/365;
1250     # "Total costs"
1251     CIM=1.18*(CBM_CHP+CBM_PTH+CBM_AD);
1252   end

```

```

1250
1251 else # BIGCC
1252
1253 if Biogas equal 0 then
1254   # "Total electricity consumption"
1255   ElectricityConsumption * 365/200 = 30*'kW*h/t' * MSS102.Outlet.Total.Fw
1256   + 24*'kW*h/t' * mSP106.Outlet1.Total.Fw
1257   + mCP905.Inlet_p.W + mCP907.Inlet_p.W + mCP909.Inlet_p.W + mCP910.Inlet_p.W
1258   + mCP912.Inlet_p.W + mCP914.Inlet_p.W;
1259   # "Total electricity generation"
1260   ElectricityGeneration * 365/200 = mTB917.Outlet_p.W + wTB924.Outlet_p.W
1261   + wTB925.Outlet_p.W - wTB404.EF_T*MaxElectricityFromBiogas*0.35; #35% efficiency of
      conversion to electricity
1262   # "Total operating costs"
1263   OpC_total = OpC_BIGCC + OpC_PTH+20*'US$/t'*StrawFlow * 200/365;
1264   # "Total costs"
1265   CIM=1.18*(CBM_BIGCC+CBM_PTH);
1266 else
1267   # "Total electricity consumption"
1268   ElectricityConsumption * 365/200 = 30*'kW*h/t' * MSS102.Outlet.Total.Fw
1269   + 24*'kW*h/t' * mSP106.Outlet1.Total.Fw
1270   + mCP905.Inlet_p.W + mCP907.Inlet_p.W + mCP909.Inlet_p.W + mCP910.Inlet_p.W
1271   + mCP912.Inlet_p.W + mCP914.Inlet_p.W;
1272   # "Total electricity generation"
1273   ElectricityGeneration * 365/200 = mTB917.Outlet_p.W + wTB924.Outlet_p.W + wTB925.
      Outlet_p.W;
1274   # "Total operating costs"
1275   OpC_total = OpC_BIGCC + OpC_PTH + OpC_AD+20*'US$/t'*StrawFlow * 200/365;
1276   # "Total costs"
1277   CIM=1.18*(CBM_BIGCC+CBM_PTH+CBM_AD);
1278 end
1279
1280 end
1281
1282 # "Depreciation"
1283 Deprec = 0.9/10/'yr'*CIM;
1284
1285 # "Electricity Surplus"
1286 ElectricitySurplus = ElectricityGeneration - ElectricityConsumption;
1287
1288 # "EthanolYield"
1289 EthanolYield = DEH303.AnhyEth.Total.Fw / (790 * 'kg/m^3');
1290
1291 # "Fraction of E2G"
1292 fracE2G = mMX201.Inlet2.Fluid.F*(2*mMX201.Inlet2.Fluid.z(2)+mMX201.Inlet2.Fluid.z(3))/
1293   ( mMX201.Inlet2.Fluid.F*(2*mMX201.Inlet2.Fluid.z(2)+mMX201.Inlet2.Fluid.z(3)) +
1294     mMX201.Inlet1.Fluid.F*(2*mMX201.Inlet1.Fluid.z(2)+mMX201.Inlet1.Fluid.z(3)) );
1295
1296 # "WSS402Recuperation"
1297 WSS402Recuperation = 0.95 * (WSK401.Inlet.Fw + WSK201.Inlet.Fw + WSK301.Inlet.Fw);
1298 WSS402.Fw = WSS402Recuperation;
1299
1300 # "CoolWaterConsumption"
1301 ColdWaterConsumption = WSS202.Fw + WSS204.Fw;
1302
1303 # "Price management"
1304 #EthanolPrice = 0.5916 * 'US$/l'; # MOS Dias et al 2012 Integrated versus stand-alone
      second generation ethanol production from sugarcane bagasse and trash
1305 EthanolPrice = 0.4940 * 'US$/l'; # CEPEA 2018, media abr 2016 a abr 2018
1306 #ElectricityPrice = 85.73 * 'US$/(MW*h)'; # MOS Dias et al 2012
1307 ElectricityPrice = 78.47 * 'US$/(MW*h)'; # ANEEL 2018 Resultados de Leiloes 2016 a 2018

```

```

1308  EnzimePrice = 0.11 * 'US$/l'; # (por litro de etanol) # Idem
1309
1310 # "Income management"
1311  EthanolIncomes = EthanolPrice * EthanolYield * fracE2G * 200/365;
1312  ElectricityIncomes = ElectricityPrice * ElectricitySurplus * 200/365;
1313  TotalIncomes = EthanolIncomes + ElectricityIncomes;
1314
1315 # "Outcome management"
1316  #EnzimeOutcomes = EnzimePrice * MSS601.Solid.Fw;
1317
1318 # "Profit management"
1319  Profit = TotalIncomes - OpC_total;
1320
1321 # "Cash Flow"
1322  CashFlow = ((Profit - Deprec)*(1-Taxes)+Deprec)*'yr';
1323
1324 # "Net Present Value"
1325  IRR10=(1+IRR)^10;
1326  IRR25=(1+IRR)^25;
1327  #NPV = CashFlow*(IRRn-1)/IRR/IRRn-CIM;
1328  BCR = (CashFlow*(IRR10-1)/IRR10 + Profit*'yr'*(1-Taxes) *
1329  ( (IRR25-1)/IRR25 - (IRR10-1)/IRR10 ))/IRR/CIM;
1330
1331  OPTIONS
1332  Dynamic = false;
1333  Integration = "original";
1334  #GuessFile = "../Flowsheets/superBio_1G_2G_f28.rlt ";
1335  GuessFile = "../Flowsheets/superBio_final-15.rlt ";
1336  SecondGuessFile = "../Flowsheets/superBio_final-85.rlt ";
1337  #SecondGuessFile = "../Flowsheets/etapas/gasification.rlt ";
1338  NLSolver(
1339    File = "nlsolver",
1340    RelativeAccuracy = 1e-3,
1341    AbsoluteAccuracy = 1e-6,
1342    MaxIterations = 200
1343  );
1344  DAEsSolver(
1345    File = "dassl",
1346    RelativeAccuracy = 1e-3,
1347    AbsoluteAccuracy = 1e-6,
1348    EventAccuracy = 1e-2
1349  );
1350
1351  end
1352
1353  Optimization optim as superBio_final # PSO
1354
1355  MAXIMIZE
1356  BCR;
1357
1358  FREE
1359  fracH;
1360  DUP001.key;
1361  Biogas;
1362
1363  #INITIAL
1364  #mSP106.frac = 0.35;
1365  #HLE602.EL = 0.08;
1366
1367  GUESS
1368  fracH=0.9999;

```

```
1369 DUP001.key = 0;
1370 Biogas = 1;
1371
1372 EQUATIONS
1373 fracH >= 0.15;
1374
1375 OPTIONS
1376   Dynamic = false;
1377   NLPsolveNLA = false;
1378   FeasiblePath = true;
1379   NLPsolver(
1380     File = "PSO", number_of_particles = 8, MaxIterations = 8,
1381     AbsoluteAccuracy = 1e-3,
1382     RelativeAccuracy = 1e-6
1383   );
1384
1385   GuessFile = "../Flowsheets/superBio_final-15.rlt ";
1386   SecondGuessFile = "../Flowsheets/superBio_final-85.rlt ";
1387
1388   /*Notas #####
1389
1390   Converge em 1291 segundos resultando em:
1391   fracH=0.9999;
1392   DUP001.key = 0;
1393   Biogas = 1
1394
1395   Fim das notas
1396   #####*/
1397
1398 end
```

APÊNDICE B – MÉTODO DE MONTE CARLO

B.1 Código EMSO

O código para a aplicação do método de Monte Carlo à superestrutura é uma variação do original. A fim de poupar espaço, ele está mostrado a partir do que seria a linha 971 no programa `superBio.mso`.

`superBio_MC.mso`

```

1 VARIABLES
2
3 # Capital costs
4 # Capital costs of Rankine
5 CBM_CHP(1000) as Real (Brief = "Capital Costs of Rankine power cycle", Unit = 'US$');
6 # Capital costs of BIGCC
7 CBM_BIGCC(1000) as Real (Brief = "Capital Costs of BIGCC", Unit = 'US$');
8 # Capital costs of PTH (Pretreatment and Hydrolysis)
9 CBM_PTH(1000) as Real (Brief = "Capital Costs of pre-treatment and hydrolysis", Unit = '
    US$');
10 # Capital costs of AD (Anaerobic Digestion)
11 CBM_AD(1000) as Real (Brief = "Capital Costs of anaerobic digestion", Unit = 'US$');
12 CIM(1000) as Real (Brief = "Total Modular Costs", Unit = 'US$');
13 # Operating Costs
14 # Operating costs of Rankine
15 OpC_CHP(1000) as Real (Brief = "Operating Costs of Rankine power cycle", Unit = 'US$/h')
    ;
16 # Operating costs of BIGCC
17 OpC_BIGCC(1000) as Real (Brief = "Operating Costs of BIGCC", Unit = 'US$/h');
18 # Operating costs of Pretreatment and Hydrolysis
19 OpC_PTH(1000) as Real (Brief = "Operating Costs of Pretreatment and hydrolysis", Unit =
    'US$/h');
20 # Operating costs of Anaerobic Digestion
21 OpC_AD(1000) as Real (Brief = "Operating Costs of Anaerobic Digestion", Unit = 'US$/h');
22 # Total operating costs
23 OpC_total(1000) as Real (Brief = "Total operating costs", Unit = 'US$/h');
24
25 Deprec(1000) as Real (Brief = "Linear Depreciation", Unit = 'US$/yr');
26 # "Ethanol management"
27
28 EthanolYield as flow_vol (Brief = "Anhydrous ethanol yield");
29 EthanolPrice(1000) as Real (Brief = "Ethanol sale price", Unit = 'US$/l');
30 fracE2G as fraction (Brief = "Fraction of E2G produced");
31
32 # "Electricity management"
33 MaxElectricityFromBiogas as power (Brief="Maximum additional electricity due to biogas");
34 ElectricityConsumption as power (Brief = "Total electricity consumption");
35 ElectricityGeneration as power (Brief = "Total electricity generation");
36 ElectricitySurplus as power (Brief = "Electricity Surplus");
37 ElectricityPrice(1000) as Real (Brief = "Electricity sale price", Unit = 'US$/(kW*h)');
38

```

```

39 # "Enzime management"
40   EnzimePrice as Real (Brief = "Enzime purchase price", Unit = 'US$/l');
41
42 # "Income management"
43   EthanolIncomes(1000) as Real (Brief = "Ethanol Incomes", Unit = 'US$/h');
44   ElectricityIncomes(1000) as Real (Brief = "Electricity Incomes", Unit = 'US$/h');
45   TotalIncomes(1000) as Real (Brief = "Total Incomes", Unit = 'US$/h');
46
47 # "Outcome management"
48   #EnzimeOutcomes as Real (Brief = "Enzime Outcomes", Unit = 'US$/h');
49
50 # "Profit management"
51   Profit(1000) as Real (Brief = "Profit", Unit = 'US$/h');
52   CashFlow(1000) as Real (Brief = "Cash Flow", Unit = 'US$');
53
54 # "Internal Rate of Return Analysis"
55 # NPV(10) as Real (Brief = "Net Present Value", Unit = 'US$');
56   BCR(1000) as Real (Brief = "Benefit/Cost Ratio");
57   IRR as fraction (Brief = "Internal Rate of Return", Lower = 0.01, Upper = 1.0, Default =
58     0.1);
59   IRR10 as Real;
60   IRR25 as Real;
61 SPECIFY
62
63   IRR = 0.12;
64   #NPV = 0;
65
66 #####
67
68 ##### COSTS
69
70 #
71 # Colar conteudo de arquivo aleatorios.txt gerado pelo script aleatorios.py aqui!
72 #
73
74
75 #####
76
77 EQUATIONS
78
79 ##### Costs #####
80
81 if DUP001.key equal 0 then # ciclo Rankine
82
83 if Biogas equal 0 then
84   # "Total electricity consumption"
85   ElectricityConsumption * 365/200 = 30*'kW*h/t' * MSS102.Outlet.Total.Fw + 24*'kW*h/t'
86     * mSP106.Outlet1.Total.Fw; # MOS Dias et al 2012: Integrated versus stand-alone
87     second generation ethanol production from sugarcane bagasse and trash
88   # "Total electricity generation"
89   #ElectricityGeneration = wTB403.Outlet_p.W + wTB404.Outlet_p.W + wTB406.Outlet_p.W +
90     wTB408.Outlet_p.W;
91   ElectricityGeneration * 365/200 = wTB404.Outlet_p.W + wTB406.Outlet_p.W + wTB408.
92     Outlet_p.W - wTB404.EF_T*MaxElectricityFromBiogas*0.35; #35% efficiency of
93     conversion to electricity
94   # "Total operating costs"
95   OpC_total = OpC_CHP+OpC_PTH+20*'US$/t'*StrawFlow * 200/365;
96   # "Total costs"
97   CTM=1.18*(CBM_CHP+CBM_PTH);
98 else

```

```

94 # "Total electricity consumption"
95 ElectricityConsumption * 365/200 = 30*'kW*h/t' * MSS102.Outlet.Total.Fw + 24*'kW*h/t'
    * mSP106.Outlet1.Total.Fw;
96 # "Total electricity generation"
97 #ElectricityGeneration = wTB403.Outlet_p.W + wTB404.Outlet_p.W + wTB406.Outlet_p.W +
    wTB408.Outlet_p.W;
98 ElectricityGeneration * 365/200 = wTB404.Outlet_p.W + wTB406.Outlet_p.W + wTB408.
    Outlet_p.W;
99 # "Total operating costs"
100 OpC_total = OpC_CHP + OpC_PTH + OpC_AD+20*'US$/t'*StrawFlow * 200/365;
101 # "Total costs"
102 CIM=1.18*(CBM_CHP+CBM_PTH+CBM_AD);
103 end
104
105 else # BIGCC
106
107 if Biogas equal 0 then
108 # "Total electricity consumption"
109 ElectricityConsumption * 365/200 = 30*'kW*h/t' * MSS102.Outlet.Total.Fw + 24*'kW*h/t'
    * mSP106.Outlet1.Total.Fw
110 + mCP905.Inlet_p.W + mCP907.Inlet_p.W + mCP909.Inlet_p.W + mCP910.Inlet_p.W + mCP912.
    Inlet_p.W + mCP914.Inlet_p.W;
111 # "Total electricity generation"
112 ElectricityGeneration * 365/200 = mTB917.Outlet_p.W + wTB924.Outlet_p.W + wTB925.
    Outlet_p.W - wTB404.EF_T*MaxElectricityFromBiogas*0.35; #35% efficiency of
    conversion to electricity
113 # "Total operating costs"
114 OpC_total = OpC_BIGCC + OpC_PTH+20*'US$/t'*StrawFlow * 200/365;
115 # "Total costs"
116 CIM=1.18*(CBM_BIGCC+CBM_PTH);
117 else
118 # "Total electricity consumption"
119 ElectricityConsumption * 365/200 = 30*'kW*h/t' * MSS102.Outlet.Total.Fw + 24*'kW*h/t'
    * mSP106.Outlet1.Total.Fw
120 + mCP905.Inlet_p.W + mCP907.Inlet_p.W + mCP909.Inlet_p.W + mCP910.Inlet_p.W + mCP912.
    Inlet_p.W + mCP914.Inlet_p.W;
121 # "Total electricity generation"
122 ElectricityGeneration * 365/200 = mTB917.Outlet_p.W + wTB924.Outlet_p.W + wTB925.
    Outlet_p.W;
123 # "Total operating costs"
124 OpC_total = OpC_BIGCC + OpC_PTH + OpC_AD+20*'US$/t'*StrawFlow * 200/365;
125 # "Total costs"
126 CIM=1.18*(CBM_BIGCC+CBM_PTH+CBM_AD);
127 end
128
129 end
130
131 #####
132
133 # "Depreciation"
134 Deprec = 0.9/10/'yr'*CIM;
135
136 # "Electricity Surplus"
137 ElectricitySurplus = ElectricityGeneration - ElectricityConsumption;
138
139 # "EthanolYield"
140 EthanolYield = DEH303.AnhyEth.Total.Fw / (790 * 'kg/m^3');
141
142 # "Fraction of E2G"
143 fracE2G = mMX201.Inlet2.Fluid.F*(2*mMX201.Inlet2.Fluid.z(2)+mMX201.Inlet2.Fluid.z(3))/
144 ( mMX201.Inlet2.Fluid.F*(2*mMX201.Inlet2.Fluid.z(2)+mMX201.Inlet2.Fluid.z(3)) +

```

```

145     mMX201.Inlet1.Fluid.F*(2*mMX201.Inlet1.Fluid.z(2)+mMX201.Inlet1.Fluid.z(3)) );
146
147 # "WSS402Recuperation"
148 WSS402Recuperation = 0.95 * (WSK401.Inlet.Fw + WSK201.Inlet.Fw + WSK301.Inlet.Fw);
149 WSS402.Fw = WSS402Recuperation;
150
151 # "CoolWaterConsumption"
152 ColdWaterConsumption = WSS202.Fw + WSS204.Fw;
153
154 # "Price management"
155 #EthanolPrice = 0.6058 * 'US$/l'; # MOS Dias et al 2012 Integrated versus stand-alone
      second generation ethanol production from sugarcane bagasse and trash
156 #EthanolPrice = 0.4927 * 'US$/l'; # CEPEA 2018, media abr 2016 a abr 2018
157 #ElectricityPrice = 85.70 * 'US$/(MW*h)'; # MOS Dias et al 2012
158 #ElectricityPrice = 78.46 * 'US$/(MW*h)'; # ANEEL 2018 Resultados de Leiloes 2016 a
      2018
159 EnzimePrice = 0.11 * 'US$/l'; # (por litro de etanol) # Idem
160 #EnzimePrice = 0.06 * 'US$/l'; # (por litro de etanol) # Idem

```

B.2 Código Python auxiliar

O código em Python para gerar os valores aleatórios usados no Método de Monte Carlo está transcrito a seguir. Além de gerar os valores aleatórios, o mesmo código faz também a análise de Monte Carlo. Para isso é preciso rodar a simulação `superBio_MC.mso` no EMSO, salvar seus resultados com formato `rlt`, localizar as razões benefício/custo (sob a variável BCR, do inglês *benefit/cost ratio*) e copiar esse resultado para o arquivo `aleatoriosBCR.txt`.

aleatorios.py

```

1 # -*- coding: utf-8 -*-
2 """
3 Created on Wed Apr 11 18:31:26 2018
4
5 @author: gabriel
6
7 Instrucoes:
8 Rodar programa, abrir arquivo aleatorios.txt,
9 copiar para o EMSO, salvar resultado em rlt,
10 buscar variavel BCR, copiar dados para o arquivo
11 aleatoriosBCR.txt
12
13 """
14
15 import random
16 import numpy as np
17 import pandas as pd
18 from scipy.integrate import simpas as integrate
19 from scipy import stats
20 import matplotlib.pyplot as plt
21 import seaborn as sns
22 import statsmodels
23 from pylab import figure, show, legend, ylabel
24 sns.set(color_codes=True)
25
26 def call_rand(n=100,stdev=0.35):
27     x = zeros(n)
28     a1 = ones(n)

```

```

29     for i in arange(len(x)):
30         x[i]=random.gauss(1.0, stdev)
31     lower = 0.3
32     upper = 1.7
33     y=sum((x<lower)*a1)+sum((x>=upper)*a1)
34     p = (n-y)/n
35     s = "[" + ", ".join(map(str, x)) + "]"
36     #s=s.replace("\n", "").replace("  ", ", ").replace(" -", ", ").replace(", ]", " ]").
37         replace("[", ", "[ ").replace(", ", ", ").replace(", ,", ", ")
38     return s, x, p
39
40 datapts = 1000
41
42 f = open('aleatorios.txt', 'w')
43 var = ['EthanolPrice = ', '\nElectricityPrice = ', '\nCBM_CHP = ', '\nCBM_BIGCC = ', '\n
44     nCBM_PTH = ', '\nOpC_CHP = ', '\nOpC_BIGCC = ', '\nOpC_PTH = ', '\nCBM_AD = ', '\n
45     nOpC_AD = ']
46 val = ["*0.4940*'US$/l';", "*78.47*'US$/(MW*h)';", "*2.67212e8*'US$';", "*1.28237e9*'US$
47     '";", "*1.32493e8*'US$';", "*2563.2*'US$/h';", "*11096.8*'US$/h';", "*2398.53*'US$/h
48     '";", "*1.94734e7*'US$';", "*311.479*'US$/h';\n\n"]
49 stdev = [.13, .18, .35, .35, .35, .35, .35, .35, .35, .35, .35, .35]
50 "*1.32493e8*'US$';", "*2563.2*'US$/h';", "*11096.8*'US$/h';", "*2398.53*'US$/h
51     '";", "*1.94734e7*'US$';", "*311.479*'US$/h';\n\n"]
52
53 for i in range(10):
54     z,y,p = call_rand(datapts, stdev[i])
55     s = var[i]+z+val[i]
56     while s.count(',') < datapts-1:
57         i-=1
58         z,y,p = call_rand(datapts)
59         s = var[i]+z+val[i]
60     f.write(s)
61
62 f.close()
63
64 f = open('aleatoriosBCR.txt', 'r')
65
66 i = 0
67 for content in f:
68     res = content
69
70 f.close()
71
72 res=res.replace(" l ", "\n")
73
74 f = open('aleatoriosBCR_mod.txt', 'w')
75 f.write(res)
76 f.close()
77
78 with open("aleatoriosBCR_mod.txt") as f:
79     bcr = array(map(float, f))
80
81 plt.figure(figsize=(12,7.2))
82 sns.color_palette("hls", 8)
83 sns.set_context("poster")
84 sns.set_palette('dark')
85 fig1 = sns.distplot(bcr,
86                     bins=25,
87                     axlabel="Razao beneficio custo",
88                     label='Histograma normalizado',
89                     kde = True,

```

```
84         norm_hist = True,
85         color = 'b'
86     ).set_xlim([0., 1.4])
87
88 sns.kdeplot(bcr, label='Estimativa de densidade de kernel', gridsize=400)
89 sns.kdeplot(bcr, cumulative=True, label=u"Distribuicao de probabilidade acumulada", gridsize
90             =200)
91 data = stats.describe(bcr)
92 mean = data[2]
93 variance = data[3]
94 stddev = sqrt(data[3])
95 skewness = data[4]
96 kurtosis = data[5]
97
98 prob = len(bcr[bcr >= 1.0]) / float(datapts)
99 print("A probabilidade de o projeto ser atraente eh de %4.1f.%%"%(prob*100))
100 print("A media da distribuicao eh %6.4f e o desvio padrao eh %6.4f."%(mean, stddev))
```

APÊNDICE C – MODELOS UTILIZADOS

Os modelos da maioria dos equipamentos utilizados na simulação biorrefinaria encontram-se descritos em riqueza de detalhes na tese de Furlan (85). Esta seção mostra os códigos para modelos desenvolvidos posteriormente à tese citada.

C.1 Duplicador e seletor de corrente

O duplicador e seletor não representam equipamentos que existem fisicamente no processo, apenas têm a função de permitir a construção da superestrutura. São usados respectivamente para duplicar correntes materiais para serem direcionadas a diferentes ramos da superestrutura; ou para selecionar uma entre duas correntes na confluência entre dois ramos da superestrutura.

duplicator_and_selector.mso

```

1  using "main_stream";
2
3  Model duplicator
4
5  ATTRIBUTES
6  Pallette = false;
7  Brief = "Stream duplicator";
8  Info =
9  "==" INFO ==
10 This model makes two copies of the inlet stream. The two outlets are similar to the inlet
    stream (mass balance is deliberately violated).
11 This model should be used for MINLP in conjunction with the 'selector' model, which
    selects a stream and discards the other.
12 "
13 ;
14
15 #*-----*#
16 * Declaracao de variaveis
17 *-----*#
18
19 VARIABLES
20 in Inlet as main_stream (Brief = "Inlet stream", PosX=0.5, PosY=1.0, Symbol = "_{in
    }", Protected = false);
21 out Outlet0 as main_stream (Brief = "Outlet stream 0", PosX=0.5, PosY=0.0, Symbol = "_
    {out0}", Protected = false);
22 out Outlet1 as main_stream (Brief = "Outlet stream 1", PosX=0.0, PosY=0.5, Symbol = "_
    {out1}", Protected = false);
23 key as Integer (Brief = "Decision variable related to outlets 0 and 1", Lower = 0,
    Upper = 1);
24
25 #*-----*#
26 Parametros
27 *-----*#
28
29 PARAMETERS
30 outer PP as Plugin (Brief = "External Physical Properties (Fluid Phase)", Type="PP");
31 outer PPS as Plugin (Brief = "External Physical Properties (Solid Phase)", Type="PP");

```

```

32  outer NComp as Integer (Brief = "Number of Chemical Components for the Fluid Phase",
    Lower = 1);
33  outer NCompS as Integer (Brief = "Number of Chemical Components for the Solid Phase",
    Lower = 1);
34  M(NComp) as molweight (Brief = "Component Mol Weight (Fluid Phase), Vector Size =
    NComp", Protected=true);
35  MS(NCompS) as molweight (Brief = "Component Mol Weight (Solid Phase), Vector Size =
    NCompS", Protected=true);
36
37  ##-----
38  * Equacoes do modelo
39  *-----##
40
41  EQUATIONS
42
43  "Duplication of Inlet flow of fluid in Outlet0"
44  Outlet0.Fluid.Fw = Inlet.Fluid.Fw;
45
46  "Duplication of Inlet flow of solid in Outlet0"
47  Outlet0.Solid.Fw = Inlet.Solid.Fw;
48
49  "Duplication of Inlet flow of fluid in Outlet1"
50  Outlet1.Fluid.Fw = Inlet.Fluid.Fw;
51
52  "Duplication of Inlet flow of Solid in Outlet1"
53  Outlet1.Solid.Fw = Inlet.Solid.Fw;
54
55  "Duplication of mass fractions in fluid phase in Outlet0"
56  Outlet0.Fluid.zw = Inlet.Fluid.zw;
57
58  "Duplication of mass fractions in solid phase in Outlet0"
59  Outlet0.Solid.zw = Inlet.Solid.zw;
60
61  "Duplication of mass fractions in fluid phase in Outlet1"
62  Outlet1.Fluid.zw = Inlet.Fluid.zw;
63
64  "Duplication of mass fractions in solid phase in Outlet1"
65  Outlet1.Solid.zw = Inlet.Solid.zw;
66
67  "Pressure in Outlet0"
68  Outlet0.P = Inlet.P;
69
70  "Pressure in Outlet1"
71  Outlet1.P = Inlet.P;
72
73  "Temperature in Outlet0"
74  Outlet0.T = Inlet.T;
75
76  "Temperature in Outlet1"
77  Outlet1.T = Inlet.T;
78
79  "Vapor fraction in Outlet0"
80  Outlet0.v = Inlet.v;
81
82  "Vapor fraction in Outlet1"
83  Outlet1.v = Inlet.v;
84
85  "Enthalpy of fluid in Outlet0"
86  Outlet0.Fluid.h = Inlet.Fluid.h;
87
88  "Enthalpy of fluid in Outlet1"

```

```

89  Outlet1.Fluid.h = Inlet.Fluid.h;
90
91  "Enthalpy of solid in Outlet0"
92  Outlet0.Solid.h = Inlet.Solid.h;
93
94  "Enthalpy of solid in Outlet1"
95  Outlet1.Solid.h = Inlet.Solid.h;
96
97  end
98
99  Model selector
100
101  ATTRIBUTES
102  Pallette = false;
103  Brief = "Stream selector";
104  Info =
105  "==" INFO ==
106  This model selects one of two inlet streams and copies it to the outlet stream (mass
107  balance is deliberately violated).
108  This model should be used for MINLP in conjunction with the 'duplicator' model, which
109  makes two copies of one stream.
110
111  "
112  ;
113  #*-----*#
114  * Declaracao de variaveis
115  *-----*#
116  VARIABLES
117  in Inlet0 as main_stream (Brief = "Inlet stream 0", PosX=0.5, PosY=1.0, Symbol = "_{in
118  }", Protected = false);
119  in Inlet1 as main_stream (Brief = "Inlet stream 1", PosX=0.5, PosY=1.0, Symbol = "_{in
120  }", Protected = false);
121  out Outlet as main_stream;
122  key as Boolean;
123
124  #*-----*#
125  Parametros
126  *-----*#
127  PARAMETERS
128  outer PP as Plugin (Brief = "External Physical Properties (Fluid Phase)", Type="PP");
129  outer PPS as Plugin (Brief = "External Physical Properties (Solid Phase)", Type="PP");
130  outer NComp as Integer (Brief = "Number of Chemical Components for the Fluid Phase",
131  Lower = 1);
132  outer NCompS as Integer (Brief = "Number of Chemical Components for the Solid Phase",
133  Lower = 1);
134  M(NComp) as molweight (Brief = "Component Mol Weight (Fluid Phase), Vector Size =
135  NComp", Protected=true);
136  MS(NCompS) as molweight (Brief = "Component Mol Weight (Solid Phase), Vector Size =
137  NCompS", Protected=true);
138
139  EQUATIONS
140  #*
141  "Selection of inlet flow rate (fluid)"
142  Outlet.Fluid.Fw = Inlet0.Fluid.Fw*(1-key) + Inlet1.Fluid.Fw*key;
143
144  "Selection of inlet flow rate (solid)"
145  Outlet.Solid.Fw = Inlet0.Solid.Fw*(1-key) + Inlet1.Solid.Fw*key;
146
147

```

```

142 "Selection of inlet mass fraction (fluid)"
143 Outlet.Fluid.zw = Inlet0.Fluid.zw*(1-key) + Inlet1.Fluid.zw*key;
144
145 "Selection of inlet mass fraction (solid)"
146 Outlet.Solid.zw = Inlet0.Solid.zw*(1-key) + Inlet1.Solid.zw*key;
147
148 "Selection of pressure"
149 Outlet.P = Inlet0.P*(1-key) + Inlet1.P*key;
150
151 "Selection of temperature"
152 Outlet.T = Inlet0.T*(1-key) + Inlet1.T*key;
153
154 "Selection of vapor pressure"
155 Outlet.v = Inlet0.v*(1-key) + Inlet1.v*key;
156
157 "Selection of enthalpy of fluid"
158 Outlet.Fluid.h = Inlet0.Fluid.h*(1-key) + Inlet1.Fluid.h*key;
159
160 "Selection of enthalpy of solid"
161 Outlet.Solid.h = Inlet0.Solid.h*(1-key) + Inlet1.Solid.h*key;
162 *#
163 if key equal 0 then
164   Outlet.Fluid.Fw = Inlet0.Fluid.Fw;
165   Outlet.Solid.Fw = Inlet0.Solid.Fw;
166   Outlet.Fluid.zw = Inlet0.Fluid.zw;
167   Outlet.Solid.zw = Inlet0.Solid.zw;
168   Outlet.P = Inlet0.P;
169   Outlet.T = Inlet0.T;
170   Outlet.v = Inlet0.v;
171   Outlet.Fluid.h = Inlet0.Fluid.h;
172   Outlet.Solid.h = Inlet0.Solid.h;
173 else
174   Outlet.Fluid.Fw = Inlet1.Fluid.Fw;
175   Outlet.Solid.Fw = Inlet1.Solid.Fw;
176   Outlet.Fluid.zw = Inlet1.Fluid.zw;
177   Outlet.Solid.zw = Inlet1.Solid.zw;
178   Outlet.P = Inlet1.P;
179   Outlet.T = Inlet1.T;
180   Outlet.v = Inlet1.v;
181   Outlet.Fluid.h = Inlet1.Fluid.h;
182   Outlet.Solid.h = Inlet1.Solid.h;
183 end
184
185 end
186
187 FlowSheet teste_duplicator_and_selector
188
189 #*-----
190 * Declaracao de dispositivos (ou blocos contendo o modelo)
191 *-----*#
192
193 DEVICES
194 src1 as main_sourceR;
195 dupl as duplicator;
196 slct as selector;
197
198 #*-----
199 * Especifica as conexoes entre os modelos
200 *-----*#
201
202 CONNECTIONS

```

```

203  src1.Outlet to dupl.Inlet;
204  dupl.Outlet0 to slct.Inlet0;
205  dupl.Outlet1 to slct.Inlet1;
206
207  #*-----
208  #Parametros
209  *-----*#
210
211
212  PARAMETERS
213  PP as Plugin (Brief = "External Physical Properties",
214    Type="PP",
215    Project = "../Flowsheets/v2_2/Fluid_v2_2.vrtherm"
216  );
217  PPS as Plugin (Brief = "External Physical Properties",
218    Type="PP",
219    Project = "../Flowsheets/v2_2/Solid_v2_2.vrtherm"
220  );
221
222  NComp as Integer (Brief = "Number of chemical components in the fluid phase");
223  NCompS as Integer (Brief = "Number of chemical components in the solid phase");
224
225  SET
226  src1.CompositionBasis = "Mass";
227  src1.ValidPhases = "Liquid-Only";
228
229  #*-----
230  * Opcoes de Solver
231  *-----*#
232
233  OPTIONS
234  Dynamic = false;
235
236  #*-----
237  * Especifica variaveis definidas no modelo
238  *-----*#
239
240  SPECIFY
241  src1.CompositionOfFluid(1:2) = [0.5,0.5];
242  src1.CompositionOfFluid(3:NComp) = 0;
243  src1.CompositionOfSolid = [0.5, 0.5, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0];
244  src1.Fluid.Fw = 70 * 't/h';
245  src1.Solid.Fw = 50 * 't/h';
246  src1.T = 300 * 'K';
247  src1.P = 1 * 'atm';
248
249  dupl.key = 1;
250  slct.key = 1;
251
252  #*-----
253  * Define o valor dos parametros declarados no modelo
254  *-----*#
255
256  SET
257  NComp = PP.NumberOfComponents();
258  NCompS = PPS.NumberOfComponents();
259
260  end

```

C.2 Secador de bagaço

dryer.mso

```

1  using "main_stream";
2  using "../assumptions";
3
4
5  Model air_dryer
6
7  /*-----
8  Parametros
9  *-----*/
10
11  PARAMETERS
12  propterm as Plugin(Brief="Steam tables", Type="water");
13  outer PP  as Plugin (Brief = "External Physical Properties (Fluid Phase)", Type="PP");
14  outer PPS as Plugin (Brief = "External Physical Properties (Solid Phase)", Type="PP");
15  outer NComp as Integer (Brief = "Number of Chemical Components for the Fluid Phase",
16    Lower = 1);
17  outer NCompS as Integer (Brief = "Number of Chemical Components for the Solid Phase",
18    Lower = 1);
19  M(NComp)  as molweight (Brief = "Component Mol Weight (Fluid Phase), Vector Size =
20    NComp", Protected=true);
21  MS(NCompS) as molweight (Brief = "Component Mol Weight (Solid Phase), Vector Size =
22    NCompS", Protected=true);
23  Comp      as ConstituentFluid;
24
25  /*-----
26  * Declaracao de variaveis
27  *-----*/
28
29  VARIABLES
30  in  inletBagasse as main_stream (Brief = "Humid bagasse", PosX=0.5, PosY=1.0, Symbol =
31    "_{inB}", Protected = false);
32  in  inletGases   as main_stream (Brief = "Hot flue gases", PosX = 1.0, PosY = 0.5,
33    Symbol = "_{outG}", Protected = false);
34  out outletBagasse as main_stream (Brief = "Dry bagasse", PosX=0.5, PosY=0.0, Symbol =
35    "_{outB}", Protected = false);
36  out outletGases  as main_stream (Brief = "Cold flue gases", PosX=0.0, PosY=0.5, Symbol
37    = "_{outG}", Protected = false);
38  Fevap           as flow_mass (Brief = "Flow of evaporated water");
39  Q               as power (Brief = "Heat transferred from the gases to the bagasse");
40  A               as area (Brief = "Heat transfer area");
41
42  EQUATIONS
43  "Mass balance of bagasse stream (solid phase)"
44  inletBagasse.Solid.Fw = outletBagasse.Solid.Fw;
45
46  "Mass balance of bagasse stream (fluid phase)"
47  inletBagasse.Fluid.Fw = outletBagasse.Fluid.Fw + Fevap;
48
49  "Mass balance of gas stream (solid phase)"
50  #outletGases.Solid.Fw = max([inletGases.Solid.Fw,1*'kg/h']);
51  outletGases.Solid.Fw = inletGases.Solid.Fw;
52
53  "Mass balance of gas stream (fluid phase)"
54  inletGases.Fluid.Fw + Fevap = outletGases.Fluid.Fw;
55
56  "Mass balance of water (bagasse stream)"

```

```

49  Fevap = inletBagasse.Fluid.Fw*inletBagasse.Fluid.zw(1) - outletBagasse.Fluid.Fw*
      outletBagasse.Fluid.zw(1);
50
51  "Mass balance of water (gas stream)"
52  Fevap = outletGases.Fluid.Fw*outletGases.Fluid.zw(1) - inletGases.Fluid.Fw*inletGases.
      Fluid.zw(1);
53
54  for i in [2:NComp+NCompS] do
55    "Mass balance for remaining components in the bagasse 2"
56    outletBagasse.Total.Fw * outletBagasse.Total.zw(i) = inletBagasse.Total.Fw*
      inletBagasse.Total.zw(i);
57  end
58
59  for i in [2:NComp] do
60    "Mass balance for remaining components in the gases 2"
61    outletGases.Fluid.Fw * outletGases.Fluid.zw(i) = inletGases.Fluid.Fw*inletGases.Fluid.
      zw(i);
62  end
63
64  outletGases.Total.zw([NComp+1:NComp+NCompS]) = 0;
65
66
67  "Energy Balance 1"
68  outletBagasse.Fluid.F*outletBagasse.Fluid.h + outletBagasse.Solid.F*outletBagasse.Solid.
      h =
69  inletBagasse.Fluid.F*inletBagasse.Fluid.h + inletBagasse.Solid.F*inletBagasse.Solid.h +
      Q;
70
71  "Energy Balance 2"
72  outletGases.Fluid.F*outletGases.Fluid.h = inletGases.Fluid.F*inletGases.Fluid.h - Q;
73
74  "Pressure of dried bagasse"
75  outletBagasse.P = min([inletBagasse.P, inletGases.P]);
76
77  "Pressure of cold gases"
78  outletGases.P = outletBagasse.P;
79
80  "Vapour fraction in outletBagasse"
81  outletBagasse.v = 0;
82
83  "Vapour fraction in outletGases"
84  outletGases.v = 1;
85
86  "Enthalpy of outletBagasse (fluid)"
87  outletBagasse.Fluid.h = PP.LiquidEnthalpy(outletBagasse.T, outletBagasse.P,
      outletBagasse.Fluid.z);
88
89  "Enthalpy of outletBagasse (solid)"
90  outletBagasse.Solid.h = PPS.VapourEnthalpy(outletBagasse.T, outletBagasse.P,
      outletBagasse.Solid.z);
91
92  "Enthalpy of outletGases (fluid)"
93  outletGases.Fluid.h = PP.VapourEnthalpy(outletGases.T, outletGases.P, outletGases.Fluid.
      z);
94
95  "Enthalpy of outletGases (solid)"
96  outletGases.Solid.h = PPS.VapourEnthalpy(outletGases.T, outletGases.P, outletGases.Solid
      .z);
97
98  "Heat transfer area"
99  A = Q/(inletGases.T-inletBagasse.T)/(50*'W/m^2/K');

```

100
101 end

C.3 Gaseificador

gasifier.mso

```

1  Model gasifier
2
3  #*-----
4  * Descricao:
5  Modelo linear e semi-empirico de gaseificaco bagaco de cana-de-acucar.
6  Aproximacao valida para teores de umidade no bagaco de ate 40%
7  *
8  * Hipoteses assumidas:
9  Estado estacionario;
10 Umidade do bagaco inferior a 40%.
11 *
12 * Restricoes:
13 *
14 * Bibliografia:
15 * 1) Pellegrini, Oliveira Jr. Exergy analysis of sugarcane bagasse gasification
16 Energy 32 (2007) 314-324
17 * 2) Dias et al. Improving bioethanol production from sugarcane.
18 Energy 36 (2011) 3691-3703
19 *
20 *-----*#
21
22 ATTRIBUTES
23 Pallette = false;
24 #Icon = "icon/dryer";
25 Brief = "Model of a linear, semi-empirical bagasse gasifier";
26 Info =
27 "== GENERAL ==
28 Model of a linear, semi-empirical bagasse gasifier.
29 The linear approximation is suitable to the production of dry bagasse with up to 40% (
    mass/mass) moisture.
30 The gasifier model calculates the composition of the biomass gas based exclusively on
    the moisture of the bagasse, so the water is the only component of the fluid phase
    that matters.
31
32 == ASSUMPTIONS ==
33 * Steady-state;
34 * Bagasse moisture < 40%.
35
36 == SPECIFY ==
37 * The bagasse stream;
38 * The temperature and pressure of the air stream.
39
40 == REFERENCES ==
41 * DIAS et al, Improving bioethanol production from sugarcane: evaluation of distillation,
42 thermal integration and cogeneration systems, Energy 36 (2011) 3691-3703.
43 ";
44
45 #*-----
46 #Parametros
47 *-----*#
48
49 PARAMETERS
50
```

```

51 outer PP      as Plugin (Brief = "External Physical Properties (Fluid Phase)", Type="PP
      ");
52 outer PPS     as Plugin (Brief = "External Physical Properties (Solid Phase)", Type="PP")
      ;
53 outer NComp   as Integer (Brief = "Number of Chemical Components for the Fluid Phase
      ", Lower = 1);
54 outer NCompS  as Integer (Brief = "Number of Chemical Components for the Solid Phase
      ", Lower = 1);
55 M(NComp)     as molweight (Brief = "Component Mol Weight (Fluid Phase), Vector Size =
      NComp", Protected=true);
56 MS(NCompS)   as molweight (Brief = "Component Mol Weight (Solid Phase), Vector Size =
      NCompS", Protected=true);
57 Comp         as ConstituentFluid;
58 CompS        as ConstituentSolid;
59 theRest(NComp - Comp.CH4 + Comp.CO2 - 2) as Integer (Brief = "List of components
      except water and volatiles", Hidden = true); # com Fluid_v2_1.vrtherm e Solid_v2_1.
      vrtherm
60
61
62 #*-----
63 * Define o valor dos parametros declarados no modelo
64 *-----*#
65
66 SET
67
68 M = PP.MolecularWeight();
69 MS = PPS.MolecularWeight();
70 theRest = [Comp.Water+1:Comp.CO2-1,Comp.CH4+1:NComp]; # com Fluid_v2_1.vrtherm e
      Solid_v2_1.vrtherm
71
72 #*-----
73 * Declaracao de variaveis
74 *-----*#
75
76 VARIABLES # 13 + 2*NComp + NCompS variaveis
77 in Bagasse as main_stream (Brief = "Bagasse", PosX=0.5, PosY=1.0, Symbol = "_{in1}",
      Protected = false);
78 in Air      as main_stream (Brief = "Air stream", PosX = 0, Symbol = "_{in2}", Protected
      = false);
79 in Inlet_q  as heat_stream (Brief = "Heat stream");
80 out Syngas as main_stream (Brief = "Synthesis gas", PosY = 0, Symbol = "_{out1}");
81 out FixedCarbon as main_stream (Brief = "FixedCarbon and fixed carbon", PosX = 1, PosY =
      1, Symbol = "_{out2}");
82 humidity as positive (Brief = "Percentage of water in the dry bagasse", Lower = 12,
      Upper = 40);
83 LHV as Real (Brief = "Lower Heating Value - Wet Basis", Default=500, Lower=-1e8, Upper
      =1e8, final Unit = 'kJ/kg');
84 EQR as fraction (Brief = "Equivalence ratio (air/fuel)/(air_stoic/fuel). Fixed in
      0.25.", Protected = true);
85
86 #*-----
87 * Equacoes do modelo
88 *-----*#
89
90 EQUATIONS
91
92 "Humidity in the bagasse (definition)"
93 humidity = Bagasse.Total.zw(Comp.Water)*100; # fracao massica de agua
94
95 "Total mass balance"
96 Bagasse.Total.Fw + Air.Total.Fw = Syngas.Total.Fw + FixedCarbon.Total.Fw;

```

```

97
98 "Fraction of ashes and fixed carbon"
99 FixedCarbon.Solid.Fw = 0.158 * Bagasse.Total.Fw; # Kirubakaran et al (2009) A review on
    gasification of biomass
100
101 "Composition of the stream of ashes and fixed carbon 1"
102 FixedCarbon.Solid.z(CompS.Ash) = 1;
103
104 "Composition of the stream of ashes and fixed carbon 2"
105 FixedCarbon.Solid.z([1:CompS.Ash-1,CompS.Ash+1:NCompS]) = 0;
106
107 "Composition of the stream of ashes and fixed carbon 3"
108 FixedCarbon.Fluid.z(1) = 1;
109
110 "Composition of the stream of ashes and fixed carbon 3"
111 FixedCarbon.Fluid.z(2:NComp) = 0;
112
113 "No fluid phase in ashes"
114 FixedCarbon.Fluid.Fw = 1*'kg/h';
115
116 "Solid residue in syngas"
117 Syngas.Solid.Fw = 0.029*Bagasse.Total.Fw; # Kirubakaran et al. 2007
118
119 "Solid residue in phase in air"
120 Air.Solid.Fw = 0*'kg/h';
121
122 "Component molar balance (H2O)"
123 Syngas.Fluid.z(Comp.Water) = 7.8166e-02 + 3.2451e-03*humidity;
124
125 "Component molar balance (CO2)"
126 Syngas.Fluid.z(Comp.CO2) = 6.7142e-02 + 3.2771e-03*humidity;
127
128 "Component molar balance (CO)"
129 Syngas.Fluid.z(Comp.CO) = 2.9507e-01 + -5.9007e-03*humidity;
130
131 "Component molar balance (CH4)"
132 Syngas.Fluid.z(Comp.CH4) = 0.05;
133
134 "Component molar balance (N2)"
135 Syngas.Fluid.z(Comp.N2) = 3.9066e-01 + -2.5331e-03*humidity;
136
137 "Component molar balance (H2)"
138 Syngas.Fluid.z(Comp.H2) = 1.1873e-01 + 1.9982e-03*humidity;
139
140 "Component molar balance (O2)"
141 Syngas.Fluid.z(Comp.O2) = 0; #max([1 - sum(Syngas.Fluid.z),0]);
142
143 "Component molar balance (Non Volatile components)"
144 Syngas.Fluid.z(theRest) = 0;
145
146 "Component molar balance (solid phase) 1"
147 Syngas.Solid.z(1:CompS.Ash-1) = 0;
148
149 "Component molar balance (solid phase) 2" # cinzas
150 Syngas.Solid.z(CompS.Ash) = 1;
151
152 "Component molar balance (solid phase) 3"
153 Syngas.Solid.z(CompS.Ash+1:NCompS) = 0;
154
155 "Equivalence ratio"
156 EQR = 0.25;

```

```

157
158 " Air Flow "
159 Air.Fluid.F = 30.94*Bagasse.Solid.F*EQR;
160
161 "Syngas vapour fraction "
162 Syngas.v = 1;
163
164 "Temperature of the syngas "
165 Syngas.T/'K'-273.15 = 1241.0-17.2*humidity;
166
167 "Pressure of the syngas "
168 Syngas.P = min([Air.P, Bagasse.P]);
169
170 "Lower heating value "
171 LHV/'kJ'*'kg' = 6253.77-46.52*humidity;
172
173 "Enthalpy of the syngas "
174 Syngas.Fluid.h = PP.VapourEnthalpy(Syngas.T, Syngas.P, Syngas.Fluid.z);
175
176 "Enthalpy of solid phase of syngas" # (irrelevant , since Syngas.Solid.F = 0)
177 Syngas.Solid.h = 0*'kJ/kmol';
178
179 "Enthalpy of the ashes" # (irrelevant , since FixedCarbon.Fluid.F = 0)
180 FixedCarbon.Fluid.h = 0*'kJ/kmol';
181
182 "Enthalpy of solid phase of ashes "
183 FixedCarbon.Solid.h = PPS.VapourEnthalpy(FixedCarbon.T, FixedCarbon.P, FixedCarbon.Solid.z
    );
184
185 "Energy balance" # desconsiderando o calor de reacao (o que superestima Inlet_q.Q) e as
    perdas (o que o subestima)
186 Inlet_q.Q + Bagasse.Solid.h*Bagasse.Solid.F + Bagasse.Fluid.h*Bagasse.Fluid.F + Air.
    Fluid.h*Air.Fluid.F
187 = FixedCarbon.Solid.h*FixedCarbon.Solid.F + Syngas.Fluid.h*Syngas.Fluid.F;
188
189 "Temperature of ashes "
190 FixedCarbon.T = Syngas.T;
191
192 "Pressure of ashes "
193 FixedCarbon.P = Syngas.P;
194
195 "Vapour Fraction of ashes "
196 FixedCarbon.v = 0;
197
198 end

```

C.4 Compressor de gás

compressor_m.mso

```

1 using "main_stream";
2 using "../energy_stream";
3
4 Model compressor_m
5   ATTRIBUTES
6   Pallette = true;
7   Icon = "icon/compressor";
8   Brief = "Simplified Gas Compressor Model";
9   Info =
10  "==" GENERAL ==

```

```

11  Model of a gas compressor based on the isentropic efficiency.
12
13  == ASSUMPTIONS ==
14  * Steady-state;
15  * Adiabatic;
16  * No phase-changes.
17
18  == SPECIFY ==
19  * Inlet stream;
20  * Pressure drop or outlet stream pressure;
21  * Compressor isentropic efficiency;
22  ";
23
24  /*-----
25  # Parametros
26  *-----*#
27
28  PARAMETERS
29  outer PP as Plugin (Brief = "VRTherm Physical Properties", Type = "PP");
30
31  /*-----
32  * Declaracao de variaveis
33  *-----*#
34
35  VARIABLES
36  H_IS as enth_mol (Brief = "Outlet Isoentropic Mass Enthalpy", Symbol = "H_{isoentr}");
37  T_IS as temperature (Brief = "Temperature of gas at state of Outlet isoentropic
    enthalpy", Symbol = "T_{isoentr}", Hidden = true);
38  EF_C as efficiency (Brief = "Compressor Isoentropic Efficiency", Symbol = "\eta",
    Default = 0.5);
39
40  in Inlet as main_stream (Brief = "Inlet Stream", PosX=0.34, PosY=0.0, Symbol="_{in}",
    Protected = true);
41  out Outlet as main_stream (Brief = "Outlet Stream", PosX=0.91, PosY=1.0, Symbol="_{out}
    ", Protected = false);
42  in Inlet_p as power_stream (Brief = "Electric Power Demanded", PosX=0.0, PosY=0.5,
    Symbol="_{in}");
43
44  S_in as entr_mol (Brief = "Entropy of the inlet stream", Symbol = "S_{in}");
45  Pratio as Real (Brief = "Pressure Drop", Symbol = "\Delta P");
46  Pincrease as press_delta (Brief = "Pressure Drop", Symbol = "\Delta P");
47
48  /*-----
49  * Equacoes do modelo
50  *-----*#
51
52  EQUATIONS
53  "Total molar balance (fluid phase)"
54  Outlet.Fluid.F = Inlet.Fluid.F;
55
56  "Total molar balance (solid phase)"
57  Outlet.Solid.Fw = Inlet.Solid.Fw;
58
59  "Component molar balance (fluid phase)"
60  Outlet.Fluid.z = Inlet.Fluid.z;
61
62  "Component molar balance (solid phase)"
63  Outlet.Solid.z = Inlet.Solid.z;
64
65  "Pressure increase"
66  Outlet.P = Inlet.P + Pincrease;

```

```

67
68 "Pressure ratio"
69 Outlet.P = Inlet.P * Pratio;
70
71 "Entropy at the gas at the inlet of the compressor"
72 S_in = PP.VapourEntropy(Inlet.T, Inlet.P, Inlet.Fluid.z);
73
74 "Entropy of gas at same state of outlet isoentropic enthalpy"
75 # Encontra T_IS a partir da entropia, da pressao e da composicao na entrada
76 S_in = PP.VapourEntropy(T_IS, Outlet.P, Outlet.Fluid.z);
77
78 "Outlet isoentropic molar enthalpy"
79 # Calcula entalpia isentropica na saida
80 H_IS = PP.VapourEnthalpy(T_IS, Outlet.P, Outlet.Fluid.z);
81
82 "Enthalpy of solid phase" # (irrelevant, since Outlet.Solid.F = 0)
83 Outlet.Solid.h = 0*'kJ/kmol';
84
85 "Outlet real molar enthalpy"
86 EF_C = (Inlet.Fluid.h - H_IS)/(Inlet.Fluid.h - Outlet.Fluid.h);
87
88 "Outlet molar enthalpy as a function of T, P and z"
89 # Calcula Outlet.T a partir de Outlet.h, Outlet.P e Outlet.z conhecidos
90 Outlet.Fluid.h = PP.VapourEnthalpy(Outlet.T, Outlet.P, Outlet.Fluid.z);
91
92 "Outlet vapour fraction as a function of T, P and z"
93 Outlet.v = PP.VapourFraction(Outlet.T, Outlet.P, Outlet.Fluid.z);
94
95 "Eletric power demanded"
96 Inlet.Fluid.F * (Inlet.Fluid.h - Outlet.Fluid.h) + Inlet_p.W = 0 * 'kW';
97
98 end

```

C.5 Turbina a gás

turbine_m.mso

```

1 using "main_stream";
2 using "energy_stream";
3
4 Model turbine_m
5 ATTRIBUTES
6 Pallette = true;
7 Icon = "icon/turbine";
8 Brief = "Simplified Gas Turbine Model";
9 Info =
10 "=== GENERAL ===
11 Model of a gas turbine based on the isoentropic efficiency.
12
13 === ASSUMPTIONS ===
14 * Steady-state;
15 * Adiabatic;
16 * No phase-changes.
17
18 === SPECIFY ===
19 * Inlet stream;
20 * Pressure drop or outlet stream pressure;
21 * Turbine isoentropic efficiency.
22 ";
23

```

```

24 ##
25 # Parametros
26 *##
27
28 PARAMETERS
29 outer PP as Plugin (Brief = "VRTherm Physical Properties", Type = "PP");
30
31 ##
32 * Declaracao de variaveis
33 *##
34
35 VARIABLES
36 H_IS as enth_mol (Brief = "Outlet Isoentropic Mass Enthalpy", Symbol = "H_{isoentr}");
37 T_IS as temperature (Brief = "Temperature of gas at state of Outlet isoentropic
    enthalpy", Symbol = "T_{isoentr}", Hidden = true);
38 EF_T as efficiency (Brief = "Turbine Efficiency", Symbol = "\eta", Default = 0.5);
39
40 in Inlet as main_stream (Brief = "Inlet Stream", PosX=0.08, PosY=0.0, Symbol="_{in}",
    Protected = true);
41 out Outlet as main_stream (Brief = "Outlet Stream", PosX=0.665, PosY=1.0, Symbol="_{
    out}", Protected = false);
42 out Outlet_p as power_stream (Brief = "Eletric Power Generated", PosX=0.94, PosY=0.5,
    Symbol="_{out}");
43
44 S_in as entr_mol (Brief = "Entropy of the inlet stream", Symbol = "S_{in}");
45 Pdrop as press_delta (Brief = "Pressure Drop", Symbol = "\Delta P");
46
47 ##
48 * Equacoes do modelo
49 *##
50
51 EQUATIONS
52 "Total molar balance (fluid phase)"
53 Outlet.Fluid.F = Inlet.Fluid.F;
54
55 "Total molar balance (solid phase)"
56 Outlet.Solid.F = Inlet.Solid.F;
57
58 "Component molar balance"
59 Outlet.Fluid.z = Inlet.Fluid.z;
60
61 "Component molar balance (solid phase)"
62 Outlet.Solid.z = Inlet.Solid.z;
63
64 "Pressure drop"
65 Outlet.P = Inlet.P - Pdrop;
66
67 "Entropy at the gas at the inlet of the turbine"
68 S_in = PP.VapourEntropy(Inlet.T, Inlet.P, Inlet.Fluid.z);
69
70 "Entropy of gas at same state of outlet isoentropic enthalpy"
71 # Encontra T_IS a partir da entropia, da pressao e da composicao na entrada
72 S_in = PP.VapourEntropy(T_IS, Outlet.P, Outlet.Fluid.z);
73
74 "Outlet isoentropic molar enthalpy"
75 # Calcula entalpia isentropica na saida
76 H_IS = PP.VapourEnthalpy(T_IS, Outlet.P, Outlet.Fluid.z);
77
78 "Outlet real molar enthalpy"
79 EF_T = (Outlet.Fluid.h - Inlet.Fluid.h)/(H_IS - Inlet.Fluid.h);
80

```

```

81  "Outlet molar enthalpy as a function of T, P and z"
82  # Calcula Outlet.T a partir de Outlet.h, Outlet.P e Outlet.z conhecidos
83  Outlet.Fluid.h = PP.VapourEnthalpy(Outlet.T, Outlet.P, Outlet.Fluid.z);
84
85  "Enthalpy of solid phase" # (irrelevant, since Outlet.Solid.F = 0)
86  Outlet.Solid.h = 0*'kJ/kmol';
87
88  "Outlet vapour fraction as a function of T, P and z"
89  Outlet.v = PP.VapourFraction(Outlet.T, Outlet.P, Outlet.Fluid.z);
90
91  "Electric power generated"
92  Inlet.Fluid.F * (Inlet.Fluid.h - Outlet.Fluid.h) = Outlet_p.W;
93
94  end
95
96  FlowSheet teste_properties
97
98  #*-----
99  #Parametros
100 *-----*#
101
102  PARAMETERS
103  NComp as Integer (Brief = "Number of chemical components", Lower = 1);
104  PP as Plugin (Type = "PP",
105    Components = ["water"],
106    LiquidModel = "SRK",
107    VapourModel = "Ideal");
108  M(NComp) as molweight (Brief = "Molar Weight");
109
110  SET
111  M = PP.MolecularWeight();
112
113  #*-----
114  * Declaracao de variaveis
115  *-----*#
116
117  VARIABLES
118  h2 as enth_mol;
119  h1 as enth_mol;
120  h12 as enth_mol;
121  h12_mass as enth_mass;
122
123
124  #*-----
125  * Equacoes do modelo
126  *-----*#
127
128  EQUATIONS
129  h2 = PP.LiquidEnthalpy( 350 * 'K', 1 * 'bar', [1] );
130  h1 = PP.LiquidEnthalpy( 300 * 'K', 1 * 'bar', [1] );
131  h12 = h2-h1;
132  h12_mass = h12/M;
133
134  end

```