



UNIVERSIDADE FEDERAL DE ALAGOAS  
CENTRO DE TECNOLOGIA  
CURSO DE ENGENHARIA QUÍMICA



VALDEIR ARAÚJO DE ABREU

**MODELAGEM, SIMULAÇÃO E AVALIAÇÃO TÉCNICO-ECONÔMICA DA ROTA  
ETÍLICA DE PRODUÇÃO DE BIODIESEL POR DESTILAÇÃO REATIVA A  
PARTIR DE ÓLEOS RESIDUAIS**

Maceió  
2021

VALDEIR ARAÚJO DE ABREU

**MODELAGEM, SIMULAÇÃO E AVALIAÇÃO TÉCNICO-ECONÔMICA DA ROTA  
ETÍLICA DE PRODUÇÃO DE BIODIESEL POR DESTILAÇÃO REATIVA A  
PARTIR DE ÓLEOS RESIDUAIS**

Trabalho de Conclusão de Curso  
apresentado ao Curso de Engenharia  
Química da Universidade Federal de  
Alagoas como requisito para a obtenção  
do título de Bacharel em Engenharia  
Química.

Orientador: Prof. Dr. João Inácio Soletti

Coorientador: Prof. Dr. Allan de Almeida  
Albuquerque

Maceió

2021

**Catálogo na fonte  
Universidade Federal de Alagoas  
Biblioteca Central  
Divisão de Tratamento Técnico**

Bibliotecário: Marcelino de Carvalho Freitas Neto – CRB-4 – 1767

A162m Abreu, Valdeir Araújo de.

Modelagem, simulação e avaliação técnico-econômica da rota etílica de produção de Biodiesel por destilação reativa a partir de óleos residuais / Valdeir Araújo de Abreu. – 2021.

34 f. il. : figs. ; tabs. color.

Orientador: João Inácio Soletti.

Co-orientador: Allan de Almeida Albuquerque.

Monografia (Trabalho de Conclusão de Curso em Engenharia Química).  
Universidade Federal de Alagoas. Centro de Tecnologia. Maceió, 2021.

Bibliografia: f. 32-34.

1. Biodiesel - Rota etílica. 2. Coluna de Destilação Reativa. 3. Óleos e gorduras - Resíduos. I. Título.

CDU: 662.756



**VALDEIR ARAÚJO DE ABREU**

***MODELAGEM, SIMULAÇÃO E AVALIAÇÃO TÉCNICO-ECONÔMICA DA ROTA ETÍLICA DE PRODUÇÃO DE BIODIESEL POR DESTILAÇÃO REATIVA A PARTIR DE ÓLEOS RESIDUAIS***

**BANCA EXAMINADORA**

---

Prof. Dr. João Inácio Soletti

---

Prof. Dr. Allan de Almeida Albuquerque

---

Prof.ª Dr.ª Lívia Maria de Oliveira Ribeiro

---

Prof. Dr. Hugo Valença de Araújo

À minha família, que sempre me apoiou e me proveu.  
Aos meus amigos, sem os quais este caminho teria sido  
muito mais árduo.

## **AGRADECIMENTOS**

À toda a minha família, em especial aos meus pais, José Paulino e Maria José, e a minha irmã Larisse Araújo, que sempre estiveram presentes e me apoiaram em cada decisão importante que tive que tomar. Agradeço a vocês, que nunca impuseram barreiras nos meus sonhos e sempre me incentivaram, inspiraram e, principalmente, me amaram por quem eu sou. Sou eternamente grato a cada um de vocês e espero que possa retribuir por todo o esforço que fizeram para que eu me tornasse quem sou hoje.

Aos meus professores da UFAL, que contribuíram imensamente para a minha formação pessoal e acadêmica.

Aos meus amigos da UFAL, pelos inesquecíveis momentos que compartilhamos uma infinidade de atividades. Em especial, ao meu grande amigo da graduação que levarei para toda a vida, Alef Tenório, pelo companheirismo e pela troca de experiências que me permitiram crescer.

Aos meus amigos da Residência Universitária Alagoana que sempre estiveram comigo quando precisei, em especial ao Júnior Santos, Edvaldo Rosendo e Wallison Freire.

Ao Movimento Empresa Júnior, em especial, à PROTEQ e a todos os seus membros, por terem me proporcionado uma vivência profissional diferenciada e única, ao longo da minha graduação.

Aos membros do LASSOP, em especial aos professores João Inácio e Allan Albuquerque, por terem me dado todo apoio técnico e científico no desenvolvimento deste trabalho.

## RESUMO

Processos de reação-separação têm sido amplamente estudados nos últimos anos em virtude da busca contínua por formas de reduzir investimentos, custos operacionais, impactos ambientais e desperdício de energia. Esta busca contínua reforça o dilema "produzir mais com menos, sendo sustentável", de modo que a intensificação de processos tem ganhado mais atenção. Neste cenário, a coluna de destilação reativa (CDR) tem sido aplicada para desenvolver processos com maior viabilidade técnica e econômica, aumentando o desempenho das reações de equilíbrio utilizadas na produção de biodiesel. A possibilidade de desenvolver tais processos tem incentivado estudos experimentais e de simulação de CDR aplicados às reações de equilíbrio de esterificação e transesterificação. Após pesquisa bibliográfica, foi constatado que poucos trabalhos avaliam a possibilidade de produzir biodiesel a partir de matérias-primas com alto teor de ácidos graxos livres (AGLs), tais como óleos e gorduras residuais (OGRs), em presença de etanol por CDR. Como resultado, esse trabalho tem por finalidade investigar a viabilidade técnico-econômica de um processo alternativo de produção do biodiesel com uso de uma CDR, em comparação ao processo convencional composto por um conjunto reator-separador. Para isso, foi desenvolvida a modelagem e a simulação dos processos convencional e alternativo de produção de biodiesel pela rota etílica no *software Aspen Plus* a fim de comparar a viabilidade técnica e econômica. Ambos os processos atenderam às especificações requeridas pela Agência Nacional de Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis (ANP), relativas ao mínimo de pureza em ésteres e máximo de impurezas. Além disso, o processo alternativo apresentou menores custos de investimento e de utilidades em relação ao processo convencional, com economia de US\$ 800.000,00 na implementação da unidade e US\$ 307.829,00 por ano em utilidades. O processo alternativo também apresentou maior retorno sobre investimento (ROI de 31,75%) e um menor período de retorno do investimento (2,15 anos), enquanto o processo convencional apresentou 27,21% e 2,42 anos, respectivamente.

**Palavras-Chave:** Biodiesel, Coluna de destilação reativa (CDR), Óleos e gorduras residuais (OGRs), Rota etílica, Avaliação técnico-econômica.

## ABSTRACT

Reactive separation processes have been extensively studied in recent years due continuous search for ways to reduce capital investments, operating costs, environmental impacts and energy waste. This continuous search reinforces the key phrase "produce more with less being sustainable", so that the intensification of processes has gained more attention in recent years. In this scenario, the reactive distillation column (RDC) has been applied to process development with greater technical and economic viability, increasing the performance of equilibrium reactions used in biodiesel production. The possibility of developing these processes has encouraged experimental studies and RDC simulation applied to esterification and transesterification equilibrium reactions. Bibliographic research showed that few studies have evaluated the possibility of producing biodiesel from raw materials with a high content of free fatty acids (FFAs), such as residual oils and fats (ROFs) in the presence of ethanol by RDC. As a result, this work aims to investigate the technical and economic feasibility of an alternative biodiesel production process using a RDC, in comparison to the conventional process composed of a reactor-separator unit. For this, the modeling and simulation of conventional and alternative processes of biodiesel production by the ethyl route in Aspen Plus software was developed to compare the technical and economic feasibility. Both processes met the specifications required by the National Agency of Petroleum, Natural Gas and Biofuels (ANP), regarding the minimum purity in esters and the maximum impurities. In addition, the alternative process has lower capital and utility costs compared to conventional process, with savings of US\$ 800,000.00 in the implementation of the plant and US\$ 307,829.00 per year in utilities. The alternative process also presented higher return on investment (ROI of 31.75%) and shorter period of return on investment (2.15 years), while the conventional process presented 27.21% and 2.42 years, respectively.

**Keywords:** Biodiesel, Reactive distillation column (RDC), Residual oils and fats (ROFs), Ethical route, Techno-economic assessment.

## LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 – Metodologia adotada no trabalho de modelagem e simulação dos processos. ....	21
Figura 2 – Estimativa das propriedades da trioleína: (a) entalpia de vaporização e (b) pressão de vapor. ....	25
Figura 3 – Sistemas de ELL: (a) pseudoternário e (b) pseudoquaternário. ....	26
Figura 4 – Fluxograma do processo convencional de produção do biodiesel a partir de OGRs pela rota etílica*.....	28
Figura 5 – Fluxograma do processo alternativo de produção do biodiesel a partir de OGRs pela rota etílica usando CDR*.....	29
Figura 6 – Consumo energético e economia dos processos convencional e alternativo. ....	30
Figura 7 – Custos de capital, operação e de utilidades dos processos convencional e alternativo. ....	31

## LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Especificações do biodiesel de acordo com o padrão ANP.....	23
Tabela 2 – Preços de matéria-prima, produto, catalisador e utilidades usadas em simulações de processo. ....	24
Tabela 3 – Temperatura das utilidades consideradas na simulação. ....	24
Tabela 4 – Resultados das correntes do processo convencional de produção de biodiesel a partir de OGRs pela rota etílica. ....	28
Tabela 5 – Resultados das correntes do processo alternativo de produção de biodiesel a partir de OGRs pela rota etílica com CDR.....	29
Tabela 6 – Custo Total Anual dos processos convencional e alternativo. ....	31

## LISTA DE ABREVIATURAS

AGLs	Ácidos graxos livres
ANP	Agência Nacional de Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis
AO	Ácido oleico
CDR	Coluna de destilação reativa
D	Vazão mássica de destilado
ELL	Equilíbrio líquido-líquido
ELV	Equilíbrio líquido-vapor
EMSO	Environment for Modeling, Simulation, and Optimization
F	Vazões mássicas de alimentação
FC	Fragmentos Constituintes
FS	Prato de alimentação ( <i>Feed Streams</i> )
GC	Contribuição de Grupos
N	Número de estágios
NRTL	Non-Random Two Liquid
OGRs	Óleo e gordura residuais
P	Pressão
PBP	<i>Payback Period</i>
RM	Razão molar
ROI	<i>Return Over Investment</i>
RR	Razão de refluxo
S	Vazão mássica de solvente
T	Temperatura
TAGs	Triacilgliceróis
UNIFAC	<i>Universal Functional-Group Activity Coefficient</i>
RMSD	Desvio médio quadrático

## LISTA DE SÍMBOLOS

$\dot{n}$	Vazão molar
$\dot{m}$	Vazão mássica
$w$	Fração mássica
$\Delta T_{ML}$	Diferença de temperatura média logarítmica

## SUMÁRIO

1	<b>INTRODUÇÃO</b> .....	13
2	<b>OBJETIVOS</b> .....	15
2.1	Objetivo Geral .....	15
2.2	Objetivos específicos .....	15
3	<b>REVISÃO BIBLIOGRÁFICA</b> .....	16
3.1	Matérias-primas para produção de biodiesel .....	16
3.2	Métodos de produção de biodiesel .....	16
3.3	Catálise homogênea .....	17
3.4	Separadores envolvidos na produção de biodiesel .....	18
3.5	Coluna de destilação reativa aplicada à produção de biodiesel .....	18
3.6	Simulador <i>Aspen Plus</i> .....	19
3.7	Avaliação econômica .....	20
4	<b>METODOLOGIA</b> .....	21
4.1	Definição dos componentes envolvidos nas reações de produção de biodiesel .....	21
4.2	Avaliação e estimativa das propriedades termofísicas .....	21
4.3	Definição dos modelos cinéticos e termodinâmicos .....	22
4.4	Modelagem e simulação dos processos convencional e alternativo de produção de biodiesel por catálise homogênea pela rota etílica .....	22
4.5	Comparar a viabilidade dos processos .....	22
5	<b>RESULTADOS E DISCUSSÃO</b> .....	25
5.1	Avaliação e estimativa das propriedades termofísicas .....	25
5.2	Definição dos modelos termodinâmicos .....	26
5.3	Modelagem, simulação e viabilidade dos processos .....	27
5.4	Avaliação econômica .....	30
6	<b>CONCLUSÕES</b> .....	32
	<b>REFERÊNCIAS</b> .....	33

## 1 INTRODUÇÃO

Atualmente, a busca por fontes alternativas de energia que contribuam para mitigar as emissões dos gases causadores do efeito estufa, oriundos principalmente do consumo de combustíveis fósseis, tem incentivado o desenvolvimento de novas técnicas e métodos para produção de energia (ALBUQUERQUE, 2015). Além disso, a incerteza sobre o esgotamento das reservas de petróleo e o crescimento de sua demanda, em todos os aspectos da vida dos seres humanos, tem contribuído para o aumento dessa procura (TALEBIAN-KIAKALAEH et al., 2013).

Nesse contexto, os biocombustíveis, quando derivados de matérias-primas renováveis e produzidos por processos de reconhecida sustentabilidade ambiental, surgem como alternativas de amplo interesse social e político, particularmente quando o seu uso não exige adequações significativas na tecnologia atualmente empregada nos motores de combustão (RAMOS et al., 2017).

Dentre as matérias-primas usadas na síntese do biodiesel, o óleo oriundo de oleaginosas apresenta grande destaque. Entretanto, matérias-primas alternativas, tais como óleos e gorduras residuais (OGRs) têm se tornado alvos de diferentes grupos de pesquisa e indústrias. Isso se deve ao uso de óleos comestíveis competir com o mercado de alimentos e ao apelo ambiental por se tratar de resíduos causadores de grandes impactos ambientais (BEJAN, 2013).

Com relação aos processos para obtenção de biodiesel, este pode ser obtido por meio de pirólise, microemulsões, diluição, esterificação de ácidos graxos livres (AGLs) ou transesterificação dos triacilgliceróis (TAGs) presentes nos OGRs e óleos vegetais. Esta última reação compõe a rota química mais comum, compondo a unidade de transesterificação em indústrias de biodiesel. Basicamente, essa unidade é composta de duas etapas: a primeira envolve a reação química dos TAGs dos óleos vegetais com o álcool, estimulada pela presença de um catalisador, para a produção do biodiesel bruto. A segunda etapa do processo refere-se à purificação para a obtenção do biodiesel de acordo com as especificações estabelecidas pelos órgãos regulamentadores. Em contrapartida, esse método de produção pode ocasionar altos custos e inconvenientes, que elevam significativamente o preço final do biodiesel, tais como: alto custo dos óleos comestíveis, restrições em relação ao teor de água e de AGLs, ocorrência de reações indesejadas e alta vazão de efluentes gerados (MACHADO, 2009).

Nesse cenário, a incorporação da coluna de destilação reativa (CDR) ao processo de produção de biodiesel pode torná-lo ainda mais rentável, uma vez que as etapas de reação e destilação ocorrem em um único equipamento. Além disso, pode gerar alguns benefícios, tais

como: redução do custo de capital e tempo de residência; otimização da separação; menor exigência de outros instrumentos; menor excesso de álcool, o que reduz o custo operacional; menor suscetibilidade a reações secundárias devido à contínua remoção dos produtos da zona reativa; possível aumento de seletividade e produtividade; e redução do custo de utilidades devido ao aproveitamento da energia liberada por reações exotérmicas para a vaporização de compostos mais voláteis (MACHADO, 2009; SILVA, 2019; SUNDMACHER et al., 2006; LUYBEN et al., 2009).

Para auxiliar no desenvolvimento desses novos processos e métodos, simuladores comerciais como Aspen Plus e similares tornam-se valiosas ferramentas para modelagem, simulação e otimização das condições operacionais. Estes permitem obter uma estimativa do dimensionamento de equipamentos de plantas químicas, visando a redução de custos de investimento e de operação (LOPES et al., 2016). Como resultado, podem ser utilizados no desenvolvimento de projetos de unidades industriais, em conjunto com estudos experimentais e de plantas piloto para verificação dos resultados (ALBUQUERQUE, 2015). Entretanto, simuladores de processos necessitam do apoio de profissionais especializados para estimativas confiáveis dos custos associados a uma planta química industrial.

Nesse contexto, o presente trabalho busca investigar a viabilidade técnico-econômica de um processo alternativo de produção de biodiesel pela rota etílica a partir de OGRs com uso de uma CDR, em comparação ao processo convencional composto por um conjunto reator-separador.

## 2 OBJETIVOS

### 2.1 Objetivo Geral

Investigar a viabilidade técnico-econômica de um processo alternativo de produção de biodiesel pela rota etílica a partir de OGRs com uso de uma CDR, em comparação ao processo convencional composto por um conjunto reator-separador utilizando o simulador comercial Aspen Plus®.

### 2.2 Objetivos específicos

- Avaliar e estimar as propriedades termofísicas dos componentes envolvidos na produção de biodiesel pela rota etílica;
- Definir os modelos cinéticos e termodinâmicos aplicados à produção de biodiesel pela rota etílica;
- Modelar e simular o processo convencional de produção de biodiesel por catálise homogênea pela rota etílica no *software Aspen Plus*;
- Modelar e simular o processo de produção de biodiesel por catálise homogênea pela rota etílica incluindo colunas de destilação reativa no *software Aspen Plus*;
- Comparar a viabilidade técnico-econômica dos processos.

### **3 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA**

#### **3.1 Matérias-primas para produção de biodiesel**

O óleo de soja é a principal matéria-prima para produção de biodiesel. No entanto, a sua utilização para esta finalidade gera uma competição direta com sua principal destinação: a alimentação humana. Em contrapartida, a segunda matéria-prima mais empregada provém da gordura animal, mais especificamente da gordura bovina. A grande utilização desse insumo é decorrente da expansão pecuária no território brasileiro (GARCILASSO, 2014).

Além do óleo de soja e da gordura animal, outras fontes de TAGs podem ser utilizadas para a produção de biodiesel, tais como: óleo de algodão, amendoim, palma, girassol, mamona, entre outros. Todavia, fontes alternativas como OGRs têm ganhado destaque devido, principalmente, a questões ambientais relacionadas ao seu descarte inadequado e por fatores econômicos, apresentando menor custo quando comparado às demais, em virtude da sua baixa qualidade e elevado grau de impurezas (GARCILASSO, 2014).

Consequentemente, a utilização de OGRs para a produção de biodiesel traz vantagens associadas à destinação adequada desses resíduos, reduzindo os eventuais impactos ambientais negativos relacionados à contaminação da água. Além disso, reduzem ou eliminam a utilização de matérias-primas mais nobres, como o óleo de soja, de modo que promovem ganhos econômicos ao processo. Por outro lado, o uso de OGRs impacta na rota química de produção de biodiesel, pois há a necessidade de inclusão de um processo de pré-tratamento devido ao seu elevado teor de impurezas, principalmente, pela presença de AGLs e água (GARCILASSO, 2014).

#### **3.2 Métodos de produção de biodiesel**

A reação de transesterificação é a reação que ocorre entre os TAGs de um óleo vegetal, gordura animal ou OGRs com um álcool para formar ésteres e glicerol. A estequiometria da reação possui uma razão molar (RM) de 3:1 de mol de álcool para cada mol de TAG. Contudo, na prática, o máximo rendimento de éster é obtido para um RM acima da RM teórica identificada na estequiometria da reação. Essa medida visa deslocar o equilíbrio da reação no sentido de formação dos produtos. Além disso, a escolha da RM ótima vai depender de outros fatores, em especial, de condições operacionais como temperatura; pressão; tipo de álcool; teor de AGLs e de água; agitação; e do tipo e concentração do catalisador (SILVA et al., 2011).

Já na reação de esterificação para obtenção do biodiesel, os AGLs reagem com um álcool para formação de éster e água, em geral, na presença de um catalisador ácido homogêneo (SILVA et al., 2011). Nesse caso a reação de esterificação desempenha o papel de pré-tratamento ao reduzir os níveis de AGLs em matérias-primas graxas. Logo, essa etapa favorece a realização da reação de transesterificação, uma vez que a mesma deve ser conduzida com teores de AGLs e água abaixo de 0,5% e 0,02% em massa, respectivamente, a fim de reduzir a ocorrência significativa das reações paralelas de saponificação e hidrólise, as quais, podem reduzir o rendimento do processo e elevar os custos associados à purificação (ALBUQUERQUE, 2015).

Seja na reação de transesterificação ou de esterificação, os catalisadores são largamente utilizados para aumentar a velocidade das reações visando a produção de biodiesel. Entre esses, podem ser destacados os catalisadores de natureza ácida, básica ou enzimática. Por outro lado, quanto ao estado da matéria, os catalisadores podem ser divididos em homogêneos e heterogêneos. Os catalisadores homogêneos são aqueles que se encontram no mesmo estado físico dos reagentes, enquanto os heterogêneos estão em um estado físico diferente dos reagentes (SILVA et al., 2011).

### **3.3 Catálise homogênea**

A reação de transesterificação para produção de biodiesel é conduzida tradicionalmente na presença de um catalisador básico homogêneo. Isso se deve a algumas vantagens, tais como: aumento da conversão de TAGs, do rendimento em ésteres e das taxas de reação de produção de biodiesel, bem como redução do tempo de reação. Contudo, seu uso deve ser evitado quando em presença de matérias-primas com alto teor de AGLs e de água. Embora o meio reacional necessite de agitação, a sua aplicação intensa favorece a reação paralela de saponificação, gerando uma emulsificação de difícil purificação (SILVA et al., 2011).

Em contrapartida, catalisadores homogêneos ácidos são comumente utilizados para produção de biodiesel pela reação de esterificação de AGLs, pois permitem maior liberdade na utilização de matérias-primas com índices consideráveis de AGLs e de umidade, reduzindo a ocorrência da reação de saponificação (SILVA et al., 2011). Por fim também auxiliam no aumento da conversão de AGLs, do rendimento em ésteres e das taxas de reação de produção de biodiesel, bem como na redução do tempo de reação.

### **3.4 Separadores envolvidos na produção de biodiesel**

O processo de produção de biodiesel, em geral, é realizado com excesso de álcool para que seja atingido o máximo rendimento. Porém, por motivos econômicos, o álcool não reagido é separado dos produtos da reação e novamente injetado no processo através de uma coluna de destilação, por meio da diferença de volatilidade relativa entre os componentes da mistura. Nesse caso, as espécies químicas mais e menos voláteis são removidas nas correntes de topo e de fundo da coluna, respectivamente. Por exemplo, no processo de produção de biodiesel, o álcool é removido no topo da coluna e reciclado ao processo. Como resultado, essa operação impacta diretamente nos custos operacionais da planta, uma vez que reduz consideravelmente a quantidade de álcool alimentada ao sistema (LOPES et al., 2016).

Outra operação unitária muito utilizada em plantas de produção de biodiesel é a coluna de extração líquido-líquido. Nesse equipamento, o processo de separação é realizado pela introdução de um solvente, que interage com uma ou mais espécies químicas a fim de remover o soluto da corrente de alimentação, produzindo duas fases líquidas separadas como correntes de extrato e de refinado. Por envolver adição de um novo composto a mistura, pode implicar em aumento dos custos de investimento e operação baseados na recuperação do solvente, de modo que as especificações técnicas do biodiesel, tais como as estabelecidas pela Agência Nacional de Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis (ANP), não sejam atingidas (LOPES et al., 2016).

Finalmente, a produção de biodiesel através da reação de transesterificação pela rota básica necessita de posterior neutralização do catalisador com uso de um ácido fraco ou moderado. Como resultado, um sal é produzido e pode ser removido com uso de hidrociclones. Esses separam a fase sólida (sal) da fase líquida por meio do fluxo rotacional, que produz uma força centrífuga sobre o fluido e as partículas suspensas (MACHADO, 2009; SILVA et al., 2012).

### **3.5 Coluna de destilação reativa aplicada à produção de biodiesel**

A partir da segunda metade do século XX, a experiência acumulada por engenheiros da indústria no projeto e operação de reatores e separadores convencionais, bem como a necessidade de reduzir custos e aumentar a produtividade e a qualidade dos produtos, impulsionou o desenvolvimento do conceito de intensificação de processos, ou seja, combinar duas ou mais operações unitárias em único equipamento. Como resultado, colunas de destilação

reativa (CDRs) surgiram como uma grande inovação visando intensificar processos, de modo que muitas empresas mantiveram por muito tempo o conhecimento do processo “guardado a sete chaves” (ALBUQUERQUE, 2019).

Nesse contexto, a CDR realiza de forma simultânea as etapas de reação e separação, diferentemente das operações realizadas isoladamente em equipamentos tradicionais. A sua introdução na indústria favoreceu a redução de custos, uma vez que pode reduzir consideravelmente os custos associados à aquisição e operação de bombas, instrumentações e tubulações. Além disso, a CDR oferece maior flexibilidade operacional, pois pode ser constituída por pratos ou pacotes de recheio de diversos tipos de materiais. Outra vantagem é que o calor produzido por reações exotérmicas pode ser utilizado na etapa de destilação, reduzindo a quantidade de energia requerida no refeedor. Além disso, propõe a rápida remoção dos produtos da zona reacional, de modo que pode aumentar a produtividade e seletividade dos produtos, bem como reduzir a ocorrência de reações indesejadas (SILVA, 2019).

Para a produção de biodiesel por meio de transesterificação via rota etílica, por exemplo, o uso de CDR permite que o álcool não reagido seja separado durante a ocorrência da reação e reintroduzido à corrente de make-up de álcool. Além disso, a carga de álcool proveniente do refluxo provoca um elevado excesso de álcool no interior da coluna (hold-up), favorecendo o deslocamento do equilíbrio da reação de transesterificação para o sentido dos produtos (ALBUQUERQUE, 2019; SILVA, 2019).

Posto que há uma série de benefícios relacionados ao emprego de CDR na produção de biodiesel, torna-se necessário enfatizar as vantagens proporcionadas pelos ambientes de modelagem e simulação computacional de processos químicos, tais como Aspen Plus, Hysys, EMSO, entre outros. Esses reduzem os custos associados à construção de aparatos experimentais e usinas piloto, assim como possibilitam descartar processos “inviáveis” e sugerir processos alternativos com maior eficiência em termos técnicos, econômicos e ambientais.

### **3.6 Simulador *Aspen Plus***

O software Aspen Plus®, da ApenTech é um simulador de processos amplamente utilizado na indústria química por atuar com processos nos estados sólido, líquido e gasoso. Além disso, fornece estimativas confiáveis das propriedades físico-químicas de diversos componentes comumente encontrados na indústria. A ferramenta possibilita a modelagem,

simulação e otimização dos mais variados processos químicos, analisando o comportamento do sistema através de balanços de massa e energia. Esses por consequência possibilitam a avaliação energética, de pontos ótimos, de custo de capital, de custo de utilidades e diversos outros fatores (ASPENTECH, 2020).

O ambiente de simulação do Aspen Plus é utilizado para modelar unidades de processos, apresentando alta performance desde a etapa de reação às etapas de separação. A simulação do processo se inicia desde a matéria-prima até o produto final, sendo usados ícones e símbolos para representar as operações unitárias, os processos físico-químicos, entrada/saída de material nas correntes, fluxo de energia e sinal elétricos/pneumáticos. A ferramenta possibilita a predição do comportamento de processos baseados em conceitos básicos de engenharia.

### **3.7 Avaliação econômica**

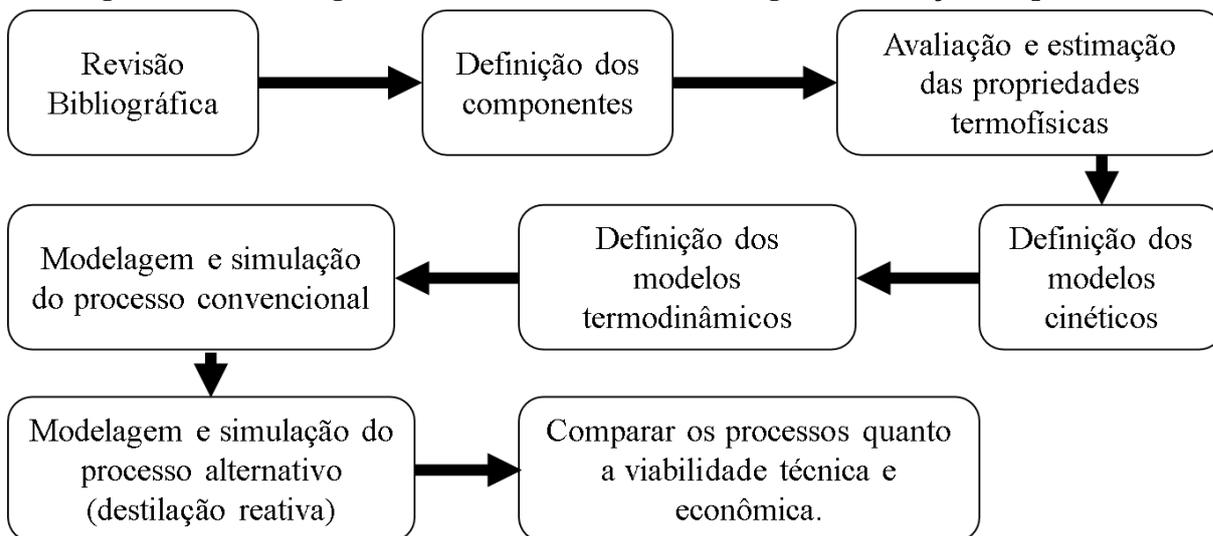
O engenheiro químico deve compreender todos os fatores que interferem direta e indiretamente nos custos inerentes ao processo. Deste modo, é essencial que as operações agreguem valor ao produto de forma a viabilizar os custos associados ao investimento inicial e de operação. O capital inicial, por sua vez, deve ser capaz de suprir as demandas para implementação do projeto, visto que os maiores custos relacionados a uma planta industrial estão na fase de implementação dos equipamentos.

A avaliação econômica está baseada nas dimensões dos principais equipamentos e no consumo das matérias-primas e utilidades. O amplo conhecimento dos engenheiros de projeto somado a ferramentas computacionais, como o *software Aspen Plus*, possibilita gerar uma avaliação econômica da viabilidade do projeto, com elevada precisão, sem a necessidade da construção de plantas piloto.

## 4 METODOLOGIA

A fim de atingir os objetivos deste trabalho, a seguinte metodologia foi adotada – Figura 1.

**Figura 1 – Metodologia adotada no trabalho de modelagem e simulação dos processos.**



Fonte: Autor (2021).

### 4.1 Definição dos componentes envolvidos nas reações de produção de biodiesel

Ambos os processos convencional e alternativo de produção de biodiesel a partir de OGRs possuem unidades de esterificação dos AGLs e de transesterificação dos triacilgliceróis (TAGs). Devido à dificuldade de obtenção das propriedades dos componentes (causada pela decomposição térmica), os componentes representativos escolhidos para a produção de biodiesel (etil oleato) pela rota etílica foram trioleína, ácido oleico, etanol, etil oleato, glicerol e água (ALBUQUERQUE, 2019).

### 4.2 Avaliação e estimativa das propriedades termofísicas

Foi realizada uma avaliação das propriedades termofísicas dos componentes envolvidos na produção de biodiesel, de modo que foram validadas as suas propriedades presentes no software Aspen Plus. Em contrapartida, a trioleína apresentou divergência em algumas propriedades em comparação a dados experimentais. Por esse motivo foram utilizados os modelos de Contribuição de Grupos (CG), que são aplicados a uma grande variedade de gorduras, e de Fragmentos Constituintes (FC), comumente usados para estimar as propriedades de acilgliceróis. A primeira abordagem foi aplicada ao cálculo de pressão de vapor e entalpia

de vaporização, enquanto a segunda visou estimar o volume molar, a massa específica e a viscosidade desses compostos (CERIANI; GANI; LIU, 2013; ZONG; RAMANATHAN; CHEN, 2010).

#### **4.3 Definição dos modelos cinéticos e termodinâmicos**

Nesta etapa ocorreu a definição dos modelos cinéticos e termodinâmicos para os processos convencional e alternativo de produção de biodiesel. O modelo cinético de transesterificação escolhido desconsiderou a formação dos intermediários devido à alta razão molar (RM) etanol para óleo aplicada aos processos convencional (RM = 14,0) e alternativo (RM = 12,6) (SILVA et al., 2019, SOUZA et al., 2019). Por outro lado, a reação de esterificação foi modelada usando um reator de conversão, com base nos resultados de Marchetti et al. (2010), pois essa unidade apresentou projetos iguais nos processos convencional e alternativo. Nesse caso uma conversão de AGLs de 99,5 % foi adotada.

Além disso, o equilíbrio líquido-vapor (ELV) e o equilíbrio líquido-líquido (ELL) dos dois processos foram modelados, respectivamente, com os modelos termodinâmicos *Non-Random Two Liquid* (NRTL) e *Universal Functional-Group Activity Coefficient* (UNIFAC), utilizando parâmetros modificados propostos por Bessa et al. (2015) para esse último (ALBUQUERQUE, 2015).

#### **4.4 Modelagem e simulação dos processos convencional e alternativo de produção de biodiesel por catálise homogênea pela rota etílica**

Nesta etapa foi realizada a modelagem e a simulação dos fluxogramas dos processos convencional e alternativo de produção do biodiesel no *software* Aspen Plus, utilizando um conjunto reator-separador e uma coluna de destilação reativa (CDR), respectivamente, na unidade de transesterificação. Uma corrente de alimentação com 34,875 ton/ano de OGRs foi adotada com porcentagem em massa de 89,32 % e de 10,68 % para a trioleína e o ácido oleico, respectivamente, sendo alimentada na unidade de esterificação (ALBUQUERQUE, 2019; MARCHETTI et al. 2010).

#### **4.5 Comparar a viabilidade dos processos**

Nesta etapa foram realizados estudos visando atender às especificações da Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis (ANP) em relação ao biodiesel produzido

e a obtenção glicerol com pureza de 99,5 % em massa (ANP, 2014). Por esse motivo, processos que atendem os requisitos dessa norma, conforme apresentado na Tabela 1, podem ser considerados viáveis tecnicamente.

**Tabela 1 – Especificações do biodiesel de acordo com o padrão ANP.**

Mínimo (% massa)	Máximo (mg·kg <sup>-1</sup> )	Máximo (% massa)		
Ester	Água	Glicerol total/livre	Etanol	AGLs/TAGs
96,5	200	0,25/0,02	0,2	0,25/0,2

Fonte: Adaptado de ANP (2014).

Na análise de viabilidade econômica, os processos convencional e alternativo, foram avaliados utilizando a ferramenta de Avaliação Econômica do *software* Aspen Plus. Sendo considerados os indicadores do custo total de capital, custo de operação e custo total anual (TAC), considerando que o custo de capital será diluído em 3 anos – Equação 1. O retorno sobre investimento (do inglês *Return Over Investment* – ROI) representa a taxa de lucro em relação ao montante investido, enquanto o período de retorno sobre o investimento (do inglês *Payback Period* – PBP) refere-se ao espaço de tempo necessário para que o custo de capital seja restituído – Equações 2 e 3. O preço de equilíbrio (do inglês *Break-even point* – BEP) representa o ponto onde o custo total de produção se equivale ao das receitas – Equações 4.

$$TAC = \frac{C_{capital}}{3} + C_{operação} \quad (1)$$

$$ROI = \frac{Receita - Investimento}{Investimento} \times 100 \quad (2)$$

$$PBP = \frac{Investimento}{Receita líquida anual} \quad (3)$$

$$BEP = \frac{Custo Fixo Anual}{Produção Anual} + Custo de Produção por Tonelada \quad (4)$$

Para a etapa de avaliação econômica dos processos, alguns parâmetros foram mantidos constantes, tais como: um ano de operação de 8.766 h, uma vida operacional da planta de 30 anos, um tempo de partida da planta de 4 meses e início da engenharia básica em 27 de janeiro de 2021 (Albuquerque, 2019). Além disso, foram adotados os preços médios dos reagentes e produtos, assim como, os preços das utilidades aplicadas aos processos – Tabela 2.

**Tabela 2 – Preços de matéria-prima, produto, catalisador e utilidades usadas em simulações de processo.**

Composto/Utilidade	Preço médio
Etanol	0,7784 \$/kg
Óleo residual	0,4750 \$/kg
Biodiesel	0,9250 \$/kg
Água	$8,70 \times 10^{-4}$ \$/kg
Glicerol	0,8050 \$/kg
Hidróxido de sódio (NaOH)	0,51 \$/kg
Ácido sulfúrico (H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> )	0,2 \$/kg
LP <i>steam</i>	7,78 \$/GJ
MP <i>steam</i>	8,22 \$/GJ
HP <i>steam</i>	9,88 \$/GJ
Freon	7,89 \$/GJ
Água de resfriamento (5°C)	4,43 \$/GJ
Eletricidade	0,12 \$/kWh
Tratamento de efluente	0,33 \$/kg

Fonte: Adaptado de ALBUQUERQUE (2016) , ALBUQUERQUE (2019) e POTRICH et al. (2020).

O LP *steam* refere-se a vapor de água a baixa pressão (*low-pressure*), MP *steam* se refere a vapor de água a pressão moderada (*moderate-pressure*) e HP *steam* se refere a vapor de água a alta pressão (*high-pressure*).

**Tabela 3 – Temperatura das utilidades consideradas na simulação.**

Utilidade	Temperatura	
	Entrada (°C)	Saída (°C)
LP <i>steam</i>	160	159
MP <i>steam</i>	184	183
HP <i>steam</i>	254	253

Fonte: Autor (2021).

Para a escolha das utilidades aplicada em cada um dos equipamentos nas etapas de aquecimento/resfriamento, foi considerada a regra empírica apresentada por PERLINGEIRO (2018), em que um  $\Delta T_{ML}$  mínimo de 10°C reduz a utilização de grandes áreas de troca térmica dos equipamentos destinados ao aquecimento/resfriamento das correntes.

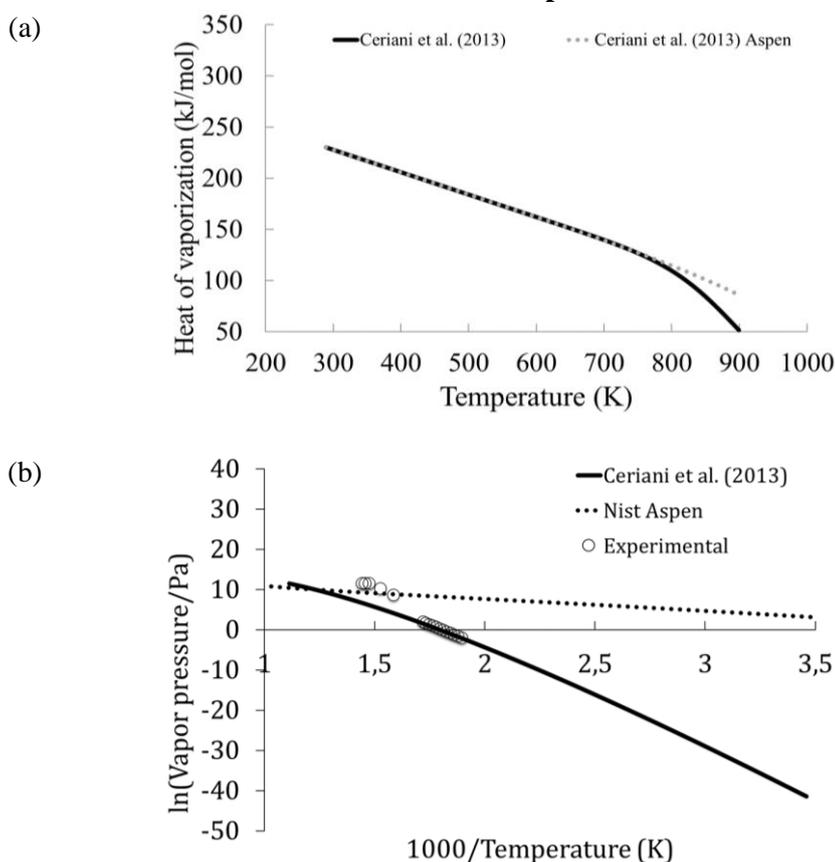
## 5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

São apresentados a seguir os resultados obtidos com base na metodologia adotada no trabalho.

### 5.1 Avaliação e estimativa das propriedades termofísicas

As Figura 2a e Figura 2b apresentam resultados para a entalpia de vaporização e pressão de vapor estimadas para a trioleína comparado a dados experimentais de óleos vegetais reportados na literatura. Os modelos visaram estimar as propriedades termofísicas da trioleína importantes no processo de produção de biodiesel. Levando em consideração a dificuldade de obtenção das propriedades da trioleína, causada pela sua decomposição a altas temperaturas, são verificadas divergências entre dados experimentais encontrados na literatura para o calor de vaporização – Figura 2a. De acordo com a Figura 2b, houve diferença significativa na pressão de vapor experimental e calculada com o modelo do Aspen Plus, de modo que o modelo de Ceriani, Gani e Liu (2013) obteve melhor concordância, justificando o uso dos métodos de CG e FC (ZONG; RAMANATHAN; CHEN, 2010).

**Figura 2 – Estimativa das propriedades da trioleína: (a) entalpia de vaporização e (b) pressão de vapor.**

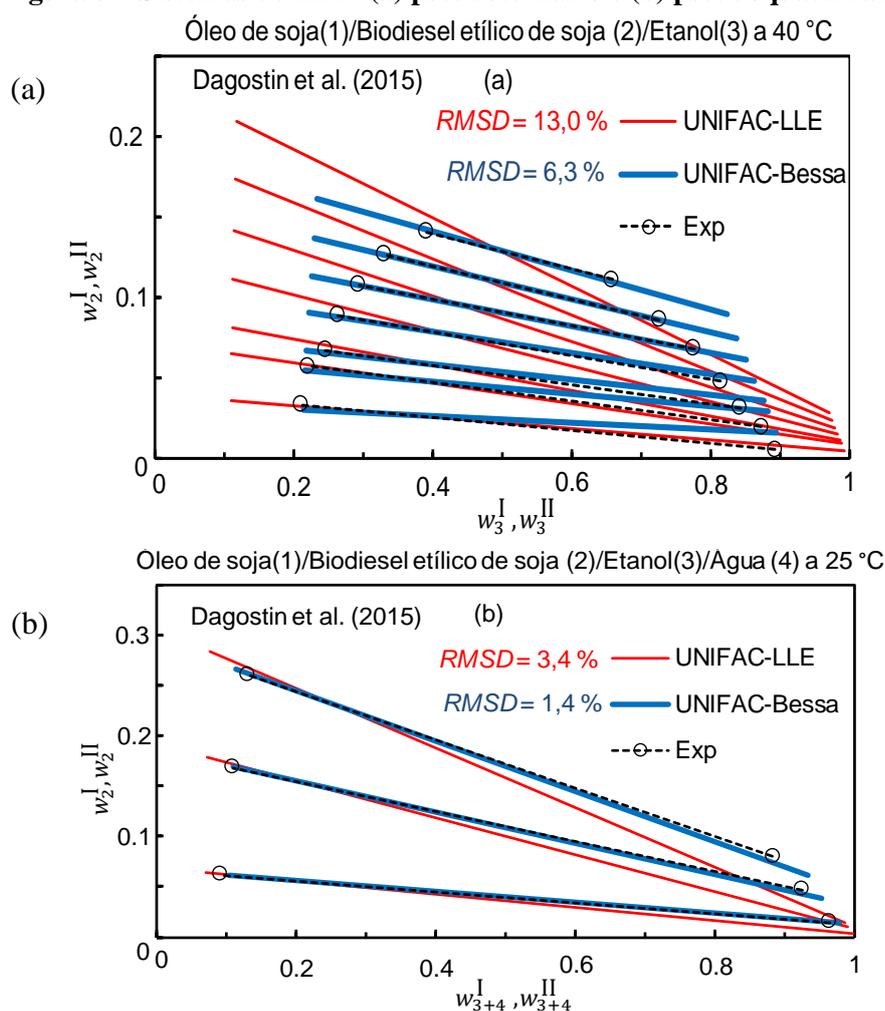


Fonte: Adaptado de Albuquerque et al. (2020) e Ceriani, Gani e Liu (2013).

## 5.2 Definição dos modelos termodinâmicos

Os ELV e ELL foram modelados com os modelos NTRL e UNIFAC, respectivamente. Devido à maior complexidade envolvida no ELL de sistemas etílicos de biodiesel, o modelo UNIFAC foi testado com os parâmetros de ELL propostos por Magnussen, Rasmussen e Fredenslund (1981) e Bessa et al. (2015), respectivamente, que foram denominados UNIFAC-LLE e UNIFAC-Bessa.

**Figura 3 – Sistemas de ELL: (a) pseudoternário e (b) pseudoquaternário.**



Fonte: Magnussen, Rasmussen e Fredenslund (1981), Bessa et al. (2015) e Dagostin et al. (2015).

O UNIFAC-Bessa representou satisfatoriamente os sistemas de ELL investigados e alguns deles foram comparados aos dados experimentais obtidos por Dagostin et al. (2015), conforme mostra a Figura 3. Isso é demonstrado pelas inclinações próximas entre as linhas de amarração experimental e preditas, assim como devido a menor região bifásica e aos mais baixos desvios médios quadráticos (*RMSD*).

### 5.3 Modelagem, simulação e viabilidade dos processos

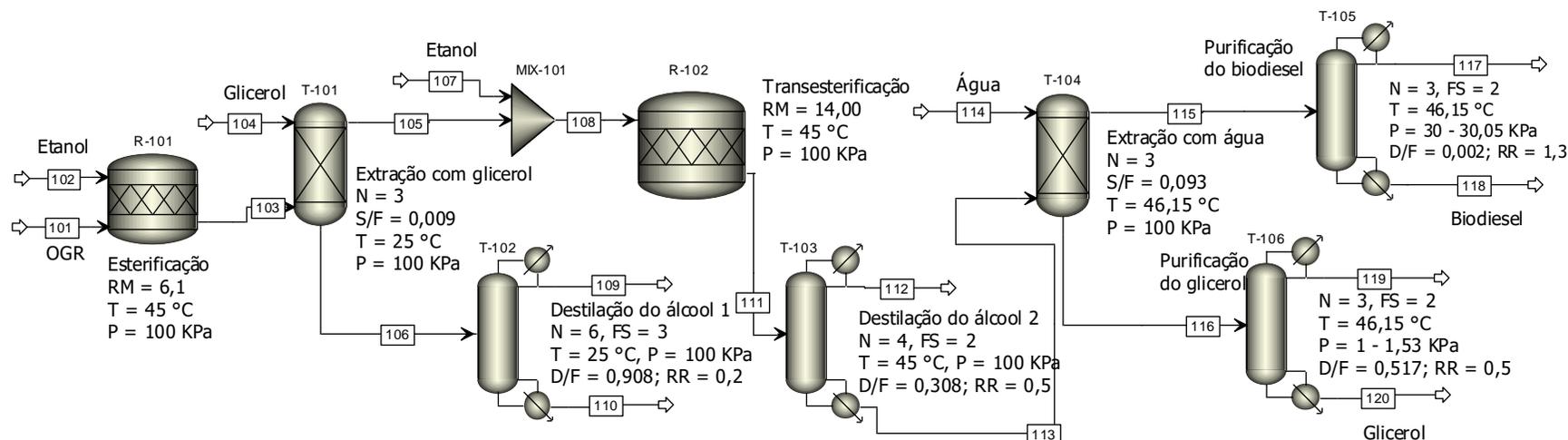
Os fluxogramas desenvolvidos para a modelagem e a simulação dos processos convencional e alternativo de produção de biodiesel pela rota etílica são mostrados nas Figura 4 e Figura 5, respectivamente. Os resultados das correntes dos processos são apresentados nas Tabela 4 e Tabela 5.

A produção de biodiesel por meio do processo convencional foi iniciada com a alimentação de OGRs e álcool em uma RM = 6,1:1 (MARCHETTI et al, 2010). Em seguida, a corrente de produto foi encaminhada ao extrator, onde ocorreu a lavagem com glicerol para remover a maior parte do etanol não reagido. A corrente de fundo do extrator (T-101), rica em glicerol e etanol, foi direcionada para uma coluna de destilação (T-102) para recuperar o etanol. Enquanto isso, a corrente de topo do extrator (T-101) foi misturada a uma corrente de etanol e enviada ao reator de transesterificação (R-102). O produto da reação foi alimentado a uma coluna de destilação (T-103) para recuperar o etanol em excesso. Posteriormente, uma etapa de lavagem com água (T-104) foi aplicada com o objetivo de separar o biodiesel do glicerol. Por fim, as correntes ricas em biodiesel e glicerol foram purificadas por destilação à vácuo.

No processo alternativo as etapas de esterificação, lavagem com glicerol, destilação (T-202) do etanol, lavagem com água e purificação dos produtos foram análogas às apresentadas no processo convencional, apresentando diferenças nas especificações de projeto das duas últimas. Isso ocorreu devido ao uso da CDR para reação e separação simultâneas.

Ambos os processos atenderam às especificações requeridas pela ANP, relativas ao mínimo de pureza em ésteres e máximo de impurezas (AGLs, TAGs, álcool, água, glicerol livre e total), conforme a Tabela 1, de modo que foram considerados viáveis tecnicamente. Todavia, o processo alternativo apresentou produtividade em biodiesel e glicerol farmacêutico (99,5% em massa) ligeiramente superior ao processo convencional. Além disso, apresentou menor consumo de utilidades (3330 kW) quando comparado ao processo convencional (3916 kW).

Figura 4 – Fluxograma do processo convencional de produção do biodiesel a partir de OGRs pela rota etílica\*.



Fonte: Adaptado de Albuquerque, Danielski e Stragevitch (2016).

\***Notações:** F, S e D são vazões mássicas de alimentação, de solvente e de destilado, logo, S/F é a razão mássica de solvente por alimentação; N, FS, RR, T e P representam número de estágios, prato de alimentação, razão de refluxo, temperatura e pressão; RM é a razão molar etanol:OGRs.

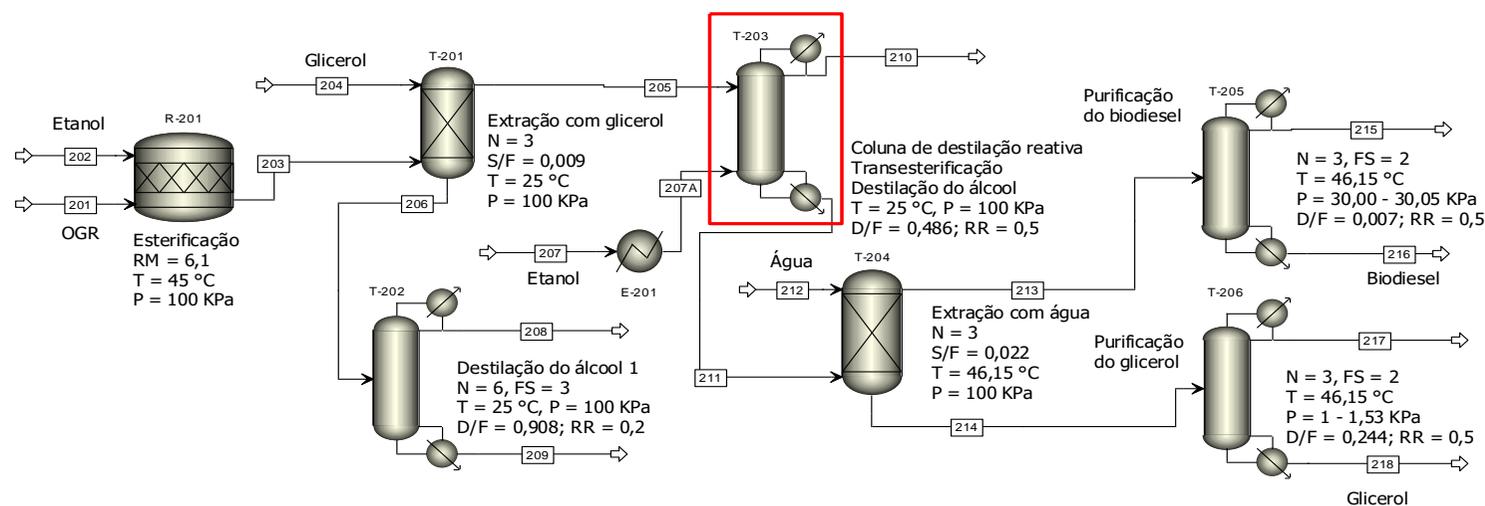
Tabela 4 – Resultados das correntes do processo convencional de produção de biodiesel a partir de OGRs pela rota etílica.

Correntes	101	102	103	105	106	108	110	111	113	115	116	118	120
$T/^{\circ}\text{C}^{\text{a}}$	45,00	45,00	45,00	25,00	25,00	89,29	137,60	45,00	236,31	46,15	46,15	186,37	124,63
$P/\text{bar}^{\text{b}}$	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	0,30	0,02
$\dot{n}/\text{kmol}\cdot\text{h}^{-1\text{c}}$	5,52	33,66	39,17	15,61	24,10	61,39	0,53	61,39	17,70	13,61	27,40	13,30	4,32
$\dot{m}/\text{Kg}\cdot\text{h}^{-1\text{d}}$	3978,42	1550,53	5528,95	4426,24	1152,71	6534,90	105,72	6534,90	4524,90	4132,51	812,39	4126,01	392,39
$w/\%^{\text{e}}$													
Trioleína	89,32	0,00	64,27	79,42	3,30	53,80	35,97	0,12	0,18	0,20	0,00	0,20	0,00
AO <sup>f</sup>	10,68	0,00	0,04	0,03	0,05	0,02	0,55	0,02	0,03	0,04	0,00	0,04	0,00
Água	0,00	0,00	0,49	0,04	2,19	0,03	0,24	0,03	0,00	0,13	51,03	0,01	0,34
Glicerol	0,00	0,00	0,00	0,59	2,06	0,40	22,43	5,98	8,64	0,00	48,14	0,00	99,66
Etanol	0,00	100,00	26,80	10,29	89,01	39,24	3,82	30,86	0,19	0,04	0,84	0,01	0,00
Etil Oleato	0,00	0,00	8,41	9,62	3,39	6,51	36,98	62,98	90,96	99,59	0,00	99,75	0,00

Fonte: Autor (2021).

<sup>a</sup>Temperatura; <sup>b</sup>Pressão; <sup>c</sup>Vazão molar; <sup>d</sup>Vazão mássica; <sup>e</sup>Porcentagem em massa; <sup>f</sup>Ácido oleico.

Figura 5 – Fluxograma do processo alternativo de produção do biodiesel a partir de OGRs pela rota etílica usando CDR\*.



Fonte: Adaptado de Albuquerque (2019).

\***Notações:** F, S e D são vazões mássicas de alimentação, de solvente e de destilado, logo, S/F é a razão mássica de solvente por alimentação; N, FS, RR, T e P representam número de estágios, prato de alimentação, razão de refluxo, temperatura e pressão; RM é a razão molar etanol:OGRs.

Tabela 5 – Resultados das correntes do processo alternativo de produção de biodiesel a partir de OGRs pela rota etílica com CDR.

Correntes	201	202	203	205	206	207A	209	211	213	214	216	218
T/°C <sup>a</sup>	45,00	45,00	45,00	25,00	25,00	78,00	137,60	147,60	46,15	46,15	147,75	141,40
P/bar <sup>b</sup>	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	0,30	0,02
$\dot{n}/\text{kmol}\cdot\text{h}^{-1\text{c}}$	5,52	33,66	39,17	15,61	24,10	50,00	0,53	18,89	14,26	10,19	13,43	4,30
$\dot{m}/\text{Kg}\cdot\text{h}^{-1\text{d}}$	3978,42	1550,53	5528,95	4426,24	1152,71	2303,45	105,72	4579,69	4160,17	519,52	4131,38	392,52
w/% <sup>e</sup>												
Trioleína	89,32	0,00	64,27	79,42	3,30	0,00	35,97	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
AO <sup>f</sup>	10,68	0,00	0,04	0,03	0,05	0,00	0,55	0,03	0,04	0,00	0,04	0,00
Água	0,00	0,00	0,49	0,04	2,19	0,00	0,24	0,00	0,16	18,00	0,01	0,19
Glicerol	0,00	0,00	0,00	0,59	2,06	0,00	22,43	8,56	0,00	75,41	0,00	99,81
Etanol	0,00	100,00	26,80	10,29	89,01	100,00	3,82	1,36	0,67	6,58	0,13	0,00
Etil Oleato	0,00	0,00	8,41	9,62	3,39	0,00	36,98	90,05	99,13	0,01	99,82	0,00

Fonte: Autor (2021).

<sup>a</sup>Temperatura; <sup>b</sup>Pressão; <sup>c</sup>Vazão molar; <sup>d</sup>Vazão mássica; <sup>e</sup>Porcentagem em massa; <sup>f</sup>Ácido oleico.

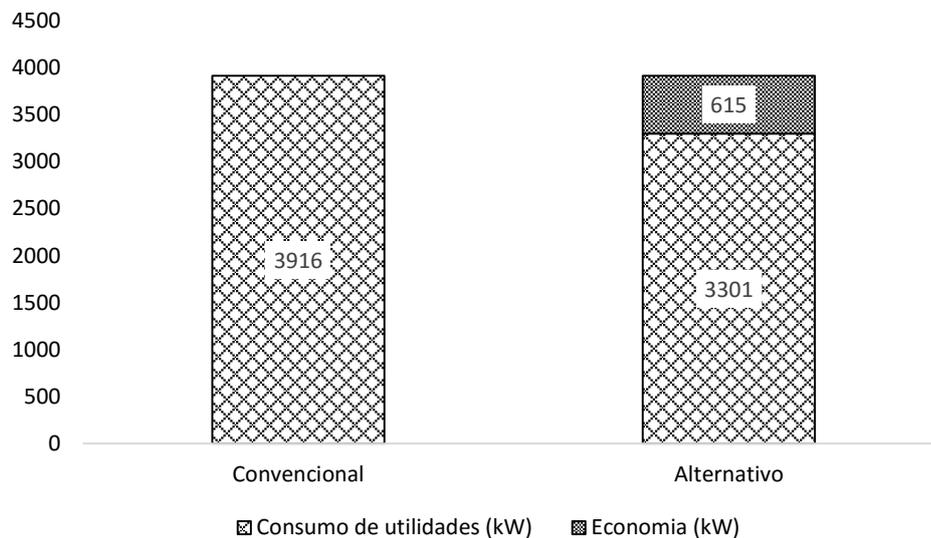
## 5.4 Avaliação econômica

Na avaliação econômica, as estimativas de custo são obtidas através de correlações empíricas que quando combinadas à experiência acumulada de engenheiros, favorece a precisão nas projeções de custo nas etapas preliminares do projeto (PETERS et al., 1968).

Apesar dos fatores empíricos não compuserem métodos de alta exatidão, são maneiras rápidas de discriminar entre as diferentes alternativas, favorecendo direções de investimento nas etapas de implementação e de custo inicial.

Quando avaliado o consumo energético entre os processos convencional e alternativo (descrito anteriormente), pôde-se observar uma tendência à economia de energia quando aplicado o processo alternativo – Figura 6.

**Figura 6 – Consumo energético e economia dos processos convencional e alternativo.**



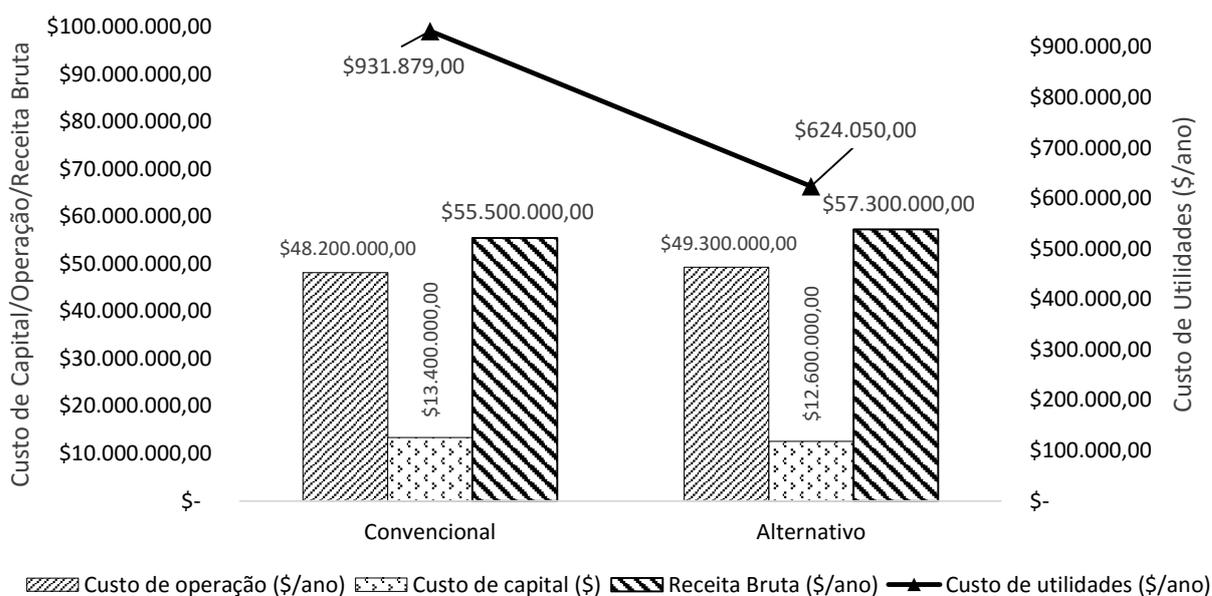
Fonte: Autor (2021).

A economia energética desencadeada pelo processo alternativo refletiu diretamente na redução de custo associado às utilidades, considerando que nos processos estudados não há pontos de aproveitamento energético (através da reutilização de vapor e água fria nos equipamentos). A redução de 615 kW no consumo energético impactou na economia de US\$ 307.829,00 por ano de operação da unidade, favorecendo uma maior competitividade do processo alternativo.

Apesar da economia em utilidades, o processo alternativo apresentou um acréscimo de 2,28% no custo de operação (um total de US\$ 1.100.000,00 por ano) em relação ao método convencional. Enquanto isso, a receita bruta do processo alternativo é 3,24% superior ao processo convencional.

O custo de capital associado ao processo convencional é superior ao alternativo devido à presença de dois equipamentos (reator + coluna de destilação) na etapa de transesterificação, enquanto o processo alternativo dispõe de apenas um equipamento (Coluna de Destilação Reativa – CDR) para realização das operações simultâneas de reação e separação – Figura 7.

**Figura 7 – Custos de capital, operação e de utilidades dos processos convencional e alternativo.**



Fonte: Autor (2021).

A partir do cálculo do Custo Total Anual (TAC) – Equação 1, pode-se verificar na Tabela 6 o menor custo associado ao processo convencional, uma diferença de US\$ 792.633,33 por ano. Apesar do TAC ser maior para o processo alternativo, é observado nas Tabela 4 e Tabela 5 que a vazão de biodiesel e glicerol produzidos por hora é superior no processo alternativo. A maior produtividade impacta diretamente no *Return Over Investment* (ROI), que representa a taxa de retorno em relação ao valor investido para construção da unidade, e no *Payback Period* (PBP) – tempo de retorno do investimento

**Tabela 6 – Custo Total Anual dos processos convencional e alternativo.**

Processo	Convencional	Alternativo
ROI (%)	27,21	31,75
PBP (anos)	2,42	2,15
BEP (\$/ton)	723,36	704,10
TAC (\$/ano)	\$52.707.366,67	\$53.500.000,00

Fonte: Autor (2021).

## 6 CONCLUSÕES

Estimar as propriedades da trioleína foi essencial para promover uma modelagem assertiva do processo de produção de biodiesel pela rota etílica, visto que as propriedades disponíveis no simulador *Aspen Plus* apresentam divergências em relação aos dados experimentais.

Como o sistema abordado é multicomponente, encontrar um modelo termodinâmico que apresente boa representatividade das características do processo tornou-se uma tarefa difícil, uma vez que envolve o ELV e o ELL. Desta forma, foram utilizados os modelos NRTL e UNIFAC para representar os cálculos de ELV e ELL, respectivamente. No método UNIFAC foram ainda utilizados parâmetros específicos, reportados na literatura, para processos de produção de biodiesel pela rota etílica, de modo que apresentou menores desvios nas inclinações das linhas de amarração do ELL e tornou mais rigorosa a simulação de colunas de extração.

A etapa de modelagem e simulação dos processos convencional e alternativo de produção de biodiesel pela rota etílica apresentaram fluxogramas análogos, com exceção do uso de um conjunto reator-separador e uma CDR na unidade de transesterificação, respectivamente. Ao avaliar o processo convencional e alternativo, foi verificado que ambos atenderam às especificações requeridas pela ANP. Porém, o processo alternativo mostrou-se promissor devido ao menor consumo energético (3330 kW) quando comparado ao processo convencional (3916 kW).

O menor consumo energético do processo alternativo provocou uma economia no consumo de utilidades de US\$ \$307.829,00 por ano e apresentou menor custo de capital (redução de US\$ \$800.000,00), visto que o reator e coluna de destilação estão presentes em um único equipamento (CDR).

Apesar do TAC do processo alternativo ser 1,50% maior que o do processo convencional, o mesmo apresentou retorno sobre investimento (ROI) de 31,75%, frente a 27,21% do processo convencional. O processo alternativo também apresentou menor período para retorno do investimento (2,15 anos) em relação ao convencional (2,42 anos) devido ao maior ROI do processo alternativo.

Como melhoria em futuros trabalhos abordando a produção de biodiesel pela rota etílica é sugerido substituir o reator de conversão por um reator de mistura perfeita ou de fluxo pistão, de modo que seja possível aplicar uma cinética rigorosa para a etapa de esterificação.

## REFERÊNCIAS

AGÊNCIA NACIONAL DO PETRÓLEO, GÁS NATURAL E BIOCMBUSTÍVEIS (ANP). **ANP Resolução No. 45, de 25.8.2014 - DOU 26.8.2014**. 2014.

ALBUQUERQUE, A. A.; DANIELSKI, L.; STRAGEVITCH, L. Techno-Economic Assessment of an Alternative Process for Biodiesel Production from Feedstock Containing High Levels of Free Fatty Acids. **Energy & Fuels**, v. 30, n. 11, p. 9409-9418, 2016.

ALBUQUERQUE, Allan de Almeida. **Processo alternativo de produção de biodiesel a partir de matérias-primas com alto teor de ácidos graxos livres**. 2015. Dissertação de Mestrado. Universidade Federal de Pernambuco.

ALBUQUERQUE, Allan de Almeida. **Reactive separation processes applied to biodiesel production: phase equilibrium, design, optimization and techno-economic assessment**. 2019. Tese de Doutorado. Universidade Federal de Pernambuco.

ALBUQUERQUE, Allan de Almeida; DANIELSKI, Leandro; STRAGEVITCH, Luiz. Techno-economic assessment of an alternative process for biodiesel production from feedstock containing high levels of free fatty acids. **Energy & Fuels**, v. 30, n. 11, p. 9409-9418, 2016.

AspenTech, Disponível em < <https://www.aspentech.com/products/engineering/aspens-plus> >, acesso em 17 de janeiro de 2021.

BEJAN, Claudia Cristina Cardoso; DA SILVA, Andreia Maria. Proposta de produção de biodiesel em Pernambuco a partir de óleo de fritura. **Anais da Academia Pernambucana de Ciência Agrônoma**, v. 7, p. 272-285, 2013.

BESSA, L. C. B. A.; FERREIRA, M. C.; SHIOZAWA, S.; BATISTA, E. A. C.; MEIRELLES, A. J. A. (Liquid+liquid) equilibrium of systems involved in the stepwise ethanolysis of vegetable oils. **The Journal of Chemical Thermodynamics**, v. 89, p. 148-158, 2015.

CERIANI, R.; GANI, R.; LIU, Y. A. Prediction of vapor pressure and heats of vaporization of edible oil/fat compounds by group contribution. **Fluid Phase Equilibria**, v. 337, p. 53-59, 2013.

DAGOSTIN, J. L. A.; MAFRA, M. R.; RAMOS, L. P.; CORAZZA, M. L. Liquid-liquid phase equilibrium measurements and modeling for systems involving {soybean oil+ethyl esters+(ethanol+water)}. **Fuel**, v. 141, p. 164-172, 2015.

GARCILASSO, Vanessa Pecora. **Análise entre processos e matérias-primas para a produção de biodiesel**. 2014. Tese de Doutorado. Universidade de São Paulo.

LOPES, JVM et al. Simulação da produção de biodiesel de óleo de palma: projeto, análise exérgica e da separação. In: **XXI Congresso Brasileiro de Engenharia Química**. 2016. p. 1-8.

LUYBEN, William L.; YU, Cheng-Ching. **Reactive distillation design and control**. John Wiley & Sons, 2009.

MACHADO, Guilherme Duenhas. **Produção de biodiesel por esterificação em coluna de destilação reativa: modelagem matemática**. 2009. Dissertação de Mestrado. Universidade Estadual de Maringá.

MAGNUSSEN, T.; RASMUSSEN, P.; FREDENSLUND, A. UNIFAC parameter table for prediction of liquid-liquid equilibriums. **Industrial & Engineering Chemistry Process Design and Development**, v. 20, n. 2, p. 331–339, 1981.

MARCHETTI, J. M.; PEDERNERA, M. N.; SCHBIB, N. S. Production of biodiesel from acid oil using sulfuric acid as catalyst: kinetics study. **International Journal of Low-Carbon Technologies**, v. 6, n. 1, p. 38-43, 2010.

MAX, S. Peters; KLAUS, D. Timmerhaus; RONALD, E. West. **Plant design and economics for chemical engineers**. McGraw-Hill Companies, 2003.

PERLINGEIRO, Carlos Augusto G. **Engenharia de processos: análise, simulação, otimização e síntese de processos químicos**. 2. ed. São Paulo Editora Blucher, 2018. 208 p.

PETERS, Max Stone et al. **Plant design and economics for chemical engineers**. New York: McGraw-Hill, 1968.

POTRICH, Erich et al. Replacing hexane by ethanol for soybean oil extraction: Modeling, simulation, and techno-economic-environmental analysis. **Journal of Cleaner Production**, v. 244, p. 118660, 2020.

RAMOS, Luiz P. et al. Biodiesel: matérias-primas, tecnologias de produção e propriedades combustíveis. **Rev. Virtual Quim**, v. 9, n. 1, p. 317-369, 2017.

SILVA, Danylo de Oliveira et al. Otimização da separação sólido-líquido em hidrociclones mediante modificações geométricas. 2012.

SILVA, J. M. F. Simulation and preliminary economic assessment of a biodiesel plant and comparison with reactive distillation. **Fuel Processing Technology**, v. 123, p. 75–81, 2014.

SILVA, Ronaldy José Miller Cavalcanti Lima da. **Simulação e otimização da purificação do etanol via absorção e da produção de biodiesel via destilação reativa: uma abordagem multivariada**. 2019. Dissertação de Mestrado. Universidade Federal de Pernambuco.

SILVA, Tatiana Aparecida Rosa da et al. **Biodiesel de óleo residual: produção através da transesterificação por metanólise e etanólise básica, caracterização físico-química e otimização das condições reacionais**. 2011. Tese de Doutorado. Universidade Federal de Uberlândia.

SOUZA, T. P. C.; STRAGEVITCH, L.; KNOECHELMANN, A.; PACHECO, J. G. A.; SUNDMACHER, Kai; KIENLE, Achim (Ed.). **Reactive distillation: status and future directions**. John Wiley & Sons, 2006.

TALEBIAN-KIAKALAIIEH, A. et al. Biodiesel production from high free fatty acid waste cooking oil by solid acid catalyst. In: **6th International Conference on Process Systems Engineering**. 2013. p. 572-576.

ZONG, L.; RAMANATHAN, S.; CHEN, C. Fragment-Based Approach for Estimating Thermophysical Properties of Fats and Vegetable Oils for Modeling Biodiesel Production Process. **Ind. Eng. Chem. Res.**, v. 49, n. 2, p. 876-886, 2010.