

AVALIAÇÃO DO DESEMPENHO TERMODINÂMICO DA PRODUÇÃO DE COMBUSTÍVEL DE AVIAÇÃO SUSTENTÁVEL A PARTIR DE ETANOL

Palavras-Chave: ANÁLISE PARAMÉTRICA, ATJ, EFICIÊNCIA ENERGÉTICA, ETANOL, HIDROGÊNIO, SAF, SIMULAÇÃO

Autores:

FERNANDO CHAER BORGES HAFEZ, FEQ - UNICAMP

Prof. Dr. JOAQUIM EUGÊNIO ABEL SEABRA, (ORIENTADOR), FEM - UNICAMP

INTRODUÇÃO

Diante das metas globais de descarbonização do setor aéreo, que emitiu cerca de 800 milhões de toneladas de CO₂ apenas em 2023, os Combustíveis de Aviação Sustentáveis (SAF) se consolidam como uma solução central para alcançar a neutralidade de carbono até 2050, conforme previsto no Acordo de Paris. Estudos indicam que a substituição do querosene fóssil por SAF pode reduzir em até 80% as emissões líquidas do setor (Brooks *et al.*, 2016), o que reforça sua importância estratégica no enfrentamento da crise climática.

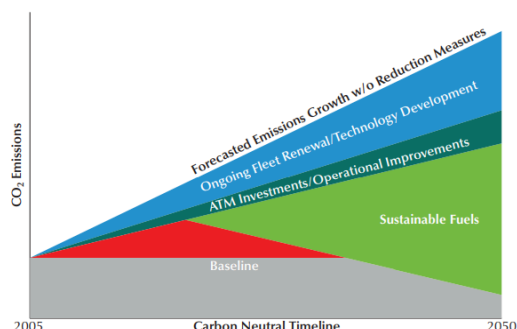


Figura 1 - Ações na aviação para a descarbonização (Cortez *et al.*, 2014)

Nesse contexto, torna-se claro que o Brasil se encontra em uma posição privilegiada para liderar a produção global de SAF, especialmente pela rota *Alcohol-to-Jet* (AtJ), graças à sua ampla expertise na produção de

etanol em escala industrial. Assim, o presente projeto tem como objetivo avaliar o desempenho termodinâmico da rota AtJ no contexto brasileiro, incluindo a produção de seus insumos - etanol, via fermentação, e hidrogênio, por meio da gaseificação da biomassa - com foco na avaliação paramétrica dos processos, a fim de apoiar o desenvolvimento e a futura implementação dessa tecnologia no país.

METODOLOGIA

Para atingir tal objetivo, realizou-se primeiro uma extensa revisão bibliográfica para compilar os parâmetros técnicos e o estado das tecnologias de cada uma das produções envolvidas. Em seguida, foram conduzidas simulações de processo no software AspenPlus, utilizando modelos disponibilizados pela própria empresa em seu site, a fim de analisar de forma paramétrica o impacto de diferentes variáveis nas principais etapas do processo. Os resultados obtidos foram comparados criticamente com os dados da literatura, permitindo a avaliação qualitativa e quantitativa dos modelos utilizados, estudando o seu rigor e sua fidelidade, contribuindo para uma compreensão mais detalhada e fundamentada da cadeia produtiva da rota AtJ.

As simulações foram realizadas a partir de três arquivos distintos da AspenTech, cada um representando uma etapa fundamental da cadeia analisada. O primeiro modelo simula a produção de etanol a partir da conversão bioquímica da biomassa lignocelulósica (palha de milho), envolvendo um pré-tratamento ácido para solubilização das pentoses, seguido de hidrólise enzimática da celulose em hexoses, fermentação alcoólica e posterior separação do etanol. O segundo modelo aborda a produção de hidrogênio via gaseificação termoquímica da madeira, na qual o gás de síntese gerado passa por etapas de reforma e reação de mudança do vapor (WGS), sendo então purificado por adsorção por oscilação de pressão (PSA).

Por fim, o terceiro modelo representa a conversão do bioetanol em combustível de aviação por meio da rota Alcohol-to-Jet (AtJ), que utiliza o hidrogênio como insumo adicional. Esse processo compreende as etapas de desidratação do etanol para etileno, oligomerização para formação de alfa-olefinas, hidrogenação e fracionamento em correntes de querosene, diesel e nafta. Destaca-se que o uso de hidrogênio proveniente de fontes renováveis foi considerado estratégico, visando a redução das emissões de CO₂ associadas à produção do combustível final.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

● PRODUÇÃO DE ETANOL

A avaliação do processo de produção de etanol revelou que o modelo representa com boa acurácia várias das etapas, mas restringe as condições de outras. Nesse contexto, o impacto da temperatura na fermentação - um dos parâmetros mais críticos - foi adequadamente capturado. A partir de simulações entre 301 K e 315 K, com incrementos de aproximadamente 1,5 K, estimou-se, por regressão linear, uma produção ótima de etanol em 301 K (28°C), com um rendimento de 21.949 kg/h, equivalente a 76% do rendimento teórico. A elevação da temperatura no intervalo resultou em uma queda de aproximadamente 30 kg/h na

produção de etanol. Tal resultado está em conformidade com a literatura, conforme ilustra a Tabela 1, que aponta a faixa ótima para esses microrganismos como sendo entre 30-34°C (Dias *et al.*, 2015).

Microrganismo	Biomassa	Rendimento	Fonte
<i>Z. mobilis</i>	Palha de milho	76,0%	AspenTech, 2025
<i>S. cerevisiae</i>	Caldo de cana	89,3%	Dias, 2015
<i>S. cerevisiae</i> *	Bagaço e suco de agave	68,7%	Rijal <i>et al.</i> , 2016
<i>S. cerevisiae</i>	Sacarose de cana	92,0%	Efe <i>et al.</i> , 2005
<i>S. cerevisiae</i> *	Bagaço de cana	99,0%	Bušić <i>et al.</i> , 2016
<i>Z. mobilis</i> *	Bagaço de cana	79,1%	Bušić <i>et al.</i> , 2016
<i>S. cerevisiae</i> *	Restolho de milho	81,1%	Bušić <i>et al.</i> , 2016
<i>S. cerevisiae</i>	Suco de agave	97,6%	Díaz-Montañó, 2013

Tabela 1 - Comparação de Resultados da Fermentação de Biomassa para a Produção de Etanol entre 28-34°C

Em contrapartida, outras análises revelaram limitações importantes no modelo adotado. Devido ao uso de calculadoras e *inputs* automáticos, a simulação indicou variações insignificantes na produção de etanol ao alterar o tipo de biomassa (cana, milho ou agave); a umidade inicial; a pressão e a temperatura (Díaz-Blanco *et al.*, 2018); e a concentração de ácido no pré-tratamento (Bušić *et al.*, 2016). Tais resultados, porém, devem ser ponderados pelas diferenças estruturais e composicionais entre os diferentes processos presentes na literatura, que reconhecem esses fatores como determinantes para a eficiência da produção (Rijal *et al.*, 2016).

● PRODUÇÃO DE HIDROGÊNIO

Nesta etapa, a análise da composição elementar das diferentes biomassas foi o ponto de maior destaque. A Figura 2 demonstra que a simulação resultou em uma produção de 1.402 kg/h de H₂ para a madeira de choupo, 1.404 kg/h para o bagaço de cana e 1.260 kg/h para agave. A menor produtividade do agave está diretamente relacionada à sua composição elementar, que possui maior teor de cinzas,

reduzindo a fração de matéria conversível em gás (Gai, 2012; Basu, 2013).

Vale ressaltar também que teores de outros elementos, como cloro e enxofre, foram obtidos da base de dados ‘Phyllis2’, por meio da aproximação das porcentagens para diferentes espécies de cana e agave.

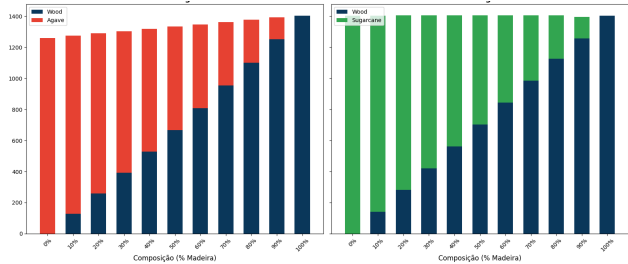


Figura 2 - Vazões de H₂ para o agave (vermelho), o bagaço de cana (verde), e a madeira de choupo (azul escuro)

Além da análise elementar, outros parâmetros também apresentaram resultados consistentes com a literatura consultada. A simulação confirmou que melhorar a eficiência de secagem da biomassa aumenta a produção de H₂ (de 7.000 para 8.950 kg/h), pois menos energia é gasta na vaporização da água (Basu, 2013). Da mesma forma, a adição de vapor como meio gaseificador em etapas posteriores elevou a produção de H₂ e reduziu a de CO, devido ao favorecimento da reação de mudança do vapor (WGS) (Mahishi *et al.*, 2007).

Contudo, devido a algumas restrições do arquivo, o efeito catalítico das cinzas; o envenenamento de catalisadores (Basu, 2013; Makwana *et al.*, 2023); o perfil de temperatura do gaseificador (Brunetti, 2009; Acharya *et al.*, 2010); e as particularidades de diferentes catalisadores (Boymans *et al.*, 2024), fenômenos que impactam a conversão geral e eficiência do processo - segundo a literatura - não puderam ser simulados adequadamente.

● **PRODUÇÃO DE SAF**

Inicialmente, percebeu-se que o teor de água na corrente de entrada de etanol não afetava a qualidade do processo, conforme indica o relatório da RSB de 2021. Por último, a simulação do processo AtJ demonstrou que a

temperatura é um parâmetro de grande influência neste processo em várias etapas. Conforme os dados da Tabela 2, a conversão de etanol se mantém estável em torno de 94,97% até 633,15 K (360 °C), começando a decair em temperaturas superiores, atingindo 81,79% a 733,15 K (460 °C). Tal comportamento sugere a existência de uma faixa ótima de operação, após a qual reações secundárias ou a desativação do catalisador, fenômenos descritos na literatura (Eagan *et al.*, 2019; Liu *et al.*, 2024), podem estar ocorrendo.

Temperatura (K)	Etileno (kg/h)	Conversão (%)
533,15	19081,71	94,97%
583,15	19081,71	94,97%
633,15	19077,53	94,95%
683,15	18870,53	93,92%
733,15	16433,70	81,79%
783,15	16433,70	81,79%

Tabela 2 - Análise da produção de etileno a 1 bar pela temperatura

A etapa de oligomerização também apresentou resultados coerentes com a literatura. Devido a limitações do arquivo AspenPlus, foi feita uma modelagem adicional utilizando Python, com base em Pandey *et al.* (2021), que descreve a distribuição de Anderson-Schulz-Flory (ASF) parametrizada em função da temperatura e pressão. Por ser uma reação exotérmica, o aumento da temperatura reduz a seletividade para olefinas maiores (Kaltschmitt, 2017), enquanto que o aumento da pressão favorece compostos de maior massa molecular, elevando o rendimento de querosene (Teixeira *et al.*, 2024), conforme ilustram as Figuras 3 e 4.

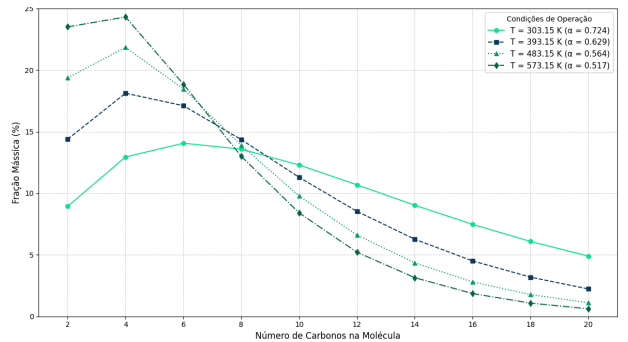


Figura 3 - Distribuições de alfa olefinas lineares em diferentes temperaturas

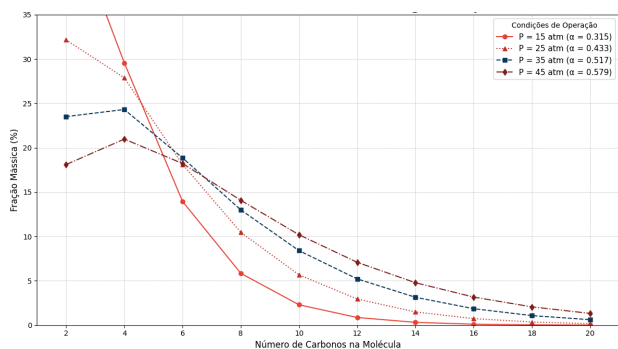


Figura 4 - Distribuições de alfa olefinas lineares em diferentes pressões

Ademais, na etapa de hidrogenação, notou-se que a pressão exerceu uma influência sutil no sistema, já que um aumento de 15 para 65 bar resultou em uma variação mínima na vazão mássica de querosene, mas elevou sua fração na corrente de produto de 18,22% para 22,52%. Similarmente aos outros arquivos, não foi possível simular as particularidades dos catalisadores utilizados no processo, como (Park *et al.*, 2022)

Por fim, apesar do trabalho tratar apenas da viabilidade técnica e termodinâmica por meio das simulações, é crucial reconhecer que barreiras econômicas ainda são um grande entrave (Cortez *et al.*, 2014; Kaltschmitt, 2017). Os altos custos de capital associados aos equipamentos, catalisadores, somados aos custos operacionais - especialmente o fornecimento de hidrogênio - continuam sendo entraves significativos para a implementação comercial da tecnologia AtJ em larga escala no país (Teixeira *et al.*, 2024).

CONCLUSÕES

A avaliação paramétrica e termodinâmica da rota Alcohol-to-Jet (AtJ) capturou adequadamente, por meio das simulações, o efeito de parâmetros críticos sobre o desempenho da cadeia produtiva - desde a geração dos insumos até a produção de SAF - como também um forte alinhamento com a literatura consultada. Além disso, a modelagem complementar da oligomerização feita em Python também representou adequadamente o comportamento da reação em função da temperatura e pressão. Entretanto, algumas das análises foram

restringidas por limitações nos arquivos de simulação, que, por suas configurações padrão, não permitiram um estudo aprofundado maior em alguns aspectos cruciais, que influenciam significativamente a eficiência e o controle do processo.

O processo de conversão AtJ em si também apresenta uma baixa emissão de carbono, haja vista que a maior parte da pegada de CO₂ da cadeia produtiva estudada advém da fabricação dos insumos, etanol e hidrogênio - reforçando a importância de integrar fontes renováveis na etapa de suprimento de insumos.

Futuros aprimoramentos nas simulações podem permitir uma avaliação mais abrangente dos processos, contribuindo para um entendimento mais completo das produções, de maneira mais sustentável e alinhada com os compromissos de descarbonização do setor aeronáutico.

BIBLIOGRAFIA

ACHARYA, B.; DUTTA, A.; BASU, P. **An investigation into steam gasification of biomass for hydrogen enriched gas production in presence of CaO**. International Journal of Hydrogen Energy, v. 35, n. 4, p. 1582-1589, fev. 2010.

BASU, P. **Biomass gasification, pyrolysis, and torrefaction: practical design and theory**. London: Academic Press, 2013.

BOYMANS, E. et al. **Recent developments in the catalytic conversion of syngas to SAF**. Disponível em: <<https://www.icarus-biojet.eu/project-outputs/public-deliverables/ICARUSD14-2-.pdf>>. Acesso em: 4 ago. 2025.

BROOKS, K. P. et al. **Chapter 6 - Low-Carbon Aviation Fuel Through the Alcohol to Jet Pathway**. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/B9780128045688000068>>.

BRUNETTI, A.; BARBIERI, G.; DRIOLI, E. **Upgrading of a syngas mixture for pure**

hydrogen production in a Pd-Ag membrane reactor. Chemical Engineering Science, v. 64, n. 15, p. 3448-3454, ago. 2009.

BUŠIĆ, A. et al. **Bioethanol Production from Renewable Raw Materials and its Separation and Purification: a Review.** Food Technology and Biotechnology, v. 56, n. 3, 2018.

CORTEZ, L. A. B. et al. **Roadmap for sustainable aviation biofuels for Brazil - A Flightpath to Aviation Biofuels in Brazil.** [s.l.] Editora Edgard Blücher, 2014.

DIAS, M. O. DE S. et al. **Sugarcane processing for ethanol and sugar in Brazil.** Environmental Development, v. 15, p. 35-51, jul. 2015.

DÍAZ-BLANCO, D. I. et al. **Optimization of dilute acid pretreatment of Agave lechuguilla and ethanol production by co-fermentation with Escherichia coli MM160.** v. 114, p. 154-163, 1 abr. 2018.

DÍAZ-MONTAÑO, D. M. **Continuous Agave Juice Fermentation for Producing Bioethanol.** Biomass Now - Sustainable Growth and Use, 30 abr. 2013.

EAGAN, N. M. et al. **Chemistries and processes for the conversion of ethanol into middle-distillate fuels.** Nature Reviews Chemistry, v. 3, n. 4, p. 223-249, 20 mar. 2019.

EFE, C.; STRAATHOF, A. J. J.; VAN DER WIELEN, L. A. M. **Technical and economical feasibility of production of ethanol from sugar cane and sugar cane bagasse.** B-Basic Internal Report. Delft University of Technology, Department of Biotechnology, 2005. Acesso em: 4 ago. 2025.

GAI, C.; DONG, Y. **Experimental study on non-woody biomass gasification in a downdraft gasifier.** International Journal of Hydrogen Energy, v. 37, n. 6, p. 4935-4944, mar. 2012.

GRASSI, Carolina; SOUZA, Simone P.; **Disponibilidade de matéria-prima para**

combustível de aviação no Brasil: desafios e oportunidades. [S.l.]: RSB em colaboração com Agroicone e Universidade Estadual de Campinas, 2021.

KALTSCHMITT, M.; NEULING, U. (EDS.). **Biokerosene.** Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2018.

LIU, Z. et al. **Modulating structural and acidic properties of ZSM-5 to boost dehydration-oligomerization of higher alcohols derived from fermentation ethanol upgrading to bio-jet fuel precursors.** Fuel, v. 371, p. 131852, 18 maio 2024.

MAHISHI, M.; GOSWAMI, D. **Thermodynamic optimization of biomass gasifier for hydrogen production.** International Journal of Hydrogen Energy, v. 32, n. 16, p. 3831-3840, nov. 2007.

MAKWANA, J. et al. **An analysis of waste/biomass gasification producing hydrogen-rich syngas: A review.** International Journal of Thermofluids, v. 20, n. 100492, p. 100492, 2023.

PANDEY, U. et al. **Modeling Fischer–Tropsch kinetics and product distribution over a cobalt catalyst.** AIChE Journal, v. 67, n. 7, 23 fev. 2021.

PARK, H. et al. **Techno-Economic Analysis and CO₂ Emissions of the Bioethanol-to-Jet Fuel Process.** ACS Sustainable Chemistry & Engineering, v. 10, n. 36, p. 12016–12022, 31 ago. 2022.

RIJAL, D. et al. **Process options for conversion of Agave tequilana leaves into bioethanol.** Industrial Crops and Products, v. 84, p. 263–272, jun. 2016.

TEIXEIRA, A. T. et al. **Process simulation and economic evaluation of the Alcohol-to-Jet production of sustainable aviation fuel in the Brazilian context.** Energy Conversion and Management, v. 319, p. 118947–118947, 1 nov. 2024.