

SIMULAÇÃO MODULAR SEQUENCIAL E ANÁLISE ECONÔMICA PRELIMINAR DO PROCESSO DE PRODUÇÃO DE METANOL VIA HIDROGENAÇÃO CATALÍTICA DE CO

G. Y. Ottaiano¹, M. A. Bannoud¹, T. D. Martins²

¹Universidade Estadual de Campinas, Campinas, Brasil (ottaiano@unifesp.br)

²Universidade Federal de São Paulo, Diadema, Brasil

O presente trabalho descreve a implementação de modelo de simulação modular sequencial para síntese de metanol ($\text{CO} + 2\text{H}_2 \rightarrow \text{CH}_3\text{OH}$), integrando reator isotérmico, separador flash bifásico e laço de reciclo com purga. No caso base, obteve-se produção estimada de 20.800 t/ano com pureza de 99,6% em massa e CAPEX preliminar de USD 43,5 MM. A análise econômica indica inviabilidade ao preço convencional (USD 600/t), com break-even estimado em USD 945/t, compatível com o segmento de metanol verde.

Palavras-chave: simulação modular sequencial; metanol; laço de reciclo; análise econômica preliminar.

INTRODUÇÃO

O metanol (CH_3OH) é um dos produtos químicos de maior volume de produção mundial, com aplicações que vão de intermediário para síntese de formaldeído e ácido acético até vetor energético em trajetórias de descarbonização. Neste último contexto, o chamado metanol verde, produzido a partir de H_2 renovável e CO_2 capturado, tem sido amplamente investigado como uma alternativa potencial de baixo carbono (Olah et al., 2018). A rota convencional de síntese opera sobre catalisador $\text{Cu/ZnO/Al}_2\text{O}_3$, tipicamente a 200–280 °C e 50–100 bar, com entalpia de reação $\Delta H^\circ_{298} = -90,2 \text{ kJ/mol}$ (Graaf et al., 1988).

A modelagem computacional de processos químicos constitui uma importante ferramenta de apoio ao projeto de processos industriais, permitindo avaliar condições operacionais, consumo de utilidades e viabilidade econômica antes da construção da planta. A simulação modular sequencial (SMS) é uma abordagem em que cada unidade de operação é representada por um módulo independente e o cálculo percorre o fluxograma de forma sequencial (Westerberg et al., 1979). Em processos com reciclo, essa abordagem requer estratégias iterativas para identificar o estado estacionário do laço fechado (Biegler et al., 1997).

A análise econômica integrada à simulação, ainda que em nível preliminar, orienta decisões sobre escala, condições de operação e mercados-alvo. O método de fator de Lang (Lang, 1948), amplamente utilizado em etapas conceituais de projeto, fornece estimativas de

ordem de grandeza do custo de capital a partir de correlações de equipamentos (Turton et al., 2018), embora com incertezas que podem atingir $\pm 50\%$.

O objetivo deste trabalho é apresentar uma implementação computacional estruturada da SMS do processo de produção de metanol, discutindo as hipóteses simplificadoras adotadas, os principais resultados técnicos e uma estimativa econômica exploratória, com ênfase nas condições de viabilidade do processo em diferentes cenários de preço do metanol.

MATERIAL E MÉTODOS

Descrição do Processo e Hipóteses Gerais

O processo simulado compreende quatro módulos interligados por um laço de reciclo: misturador, reator de tanque agitado contínuo (CSTR, *Continuous Stirred Tank Reactor*) isotérmico, separador flash bifásico e divisor de reciclo com purga. A alimentação fresca é composta por CO (100 kmol/h), H_2 (200 kmol/h) e N_2 como inerte (5 kmol/h), com razão $\text{H}_2/\text{CO} = 2:1$ conforme a estequiometria da reação principal. As condições de projeto foram fixadas em $T_R = 250 \text{ °C}$ e $P_R = 50 \text{ bar}$ no reator, e $T_F = 40 \text{ °C}$ e $P_F = 10 \text{ bar}$ no flash, com base em valores tipicamente reportados para processos industriais de síntese de metanol (Graaf et al., 1988; Turton et al., 2018). O modelo assume operação em estado estacionário e 8.000 horas operacionais por ano. A Figura 1 apresenta uma representação esquemática do processo.

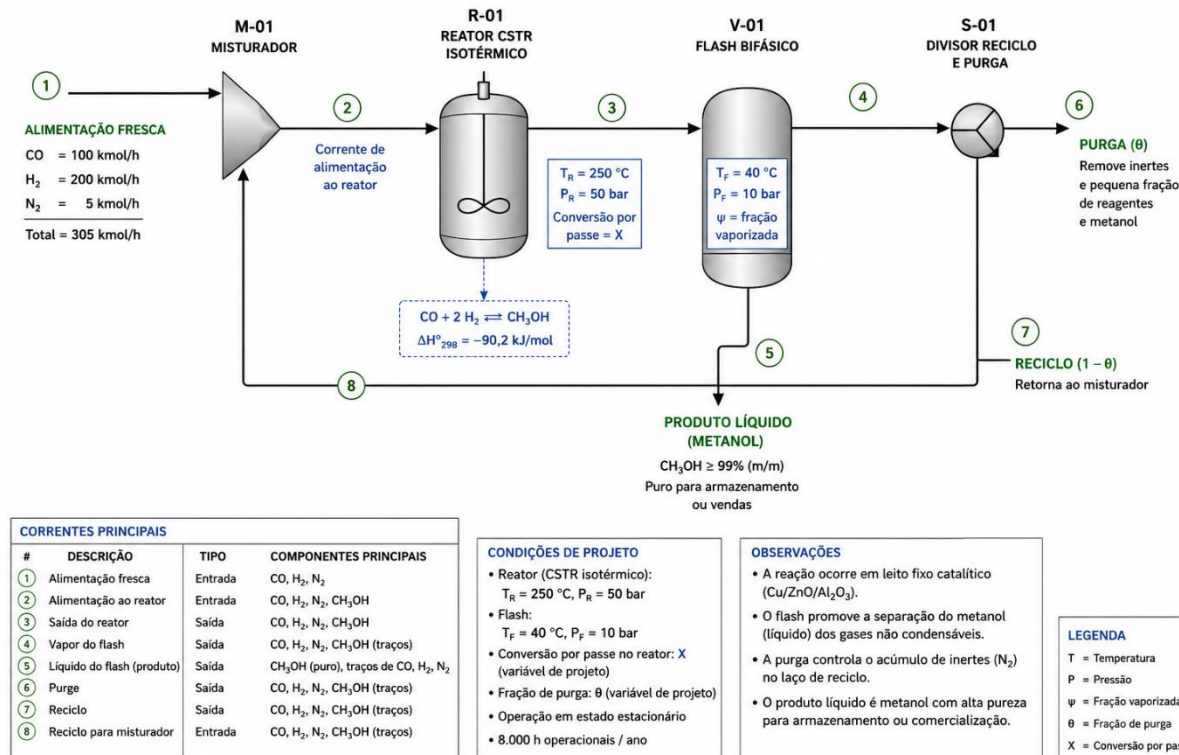


Figura 1. Fluxograma do processo considerado.

Módulo Reator: CSTR Isotérmico e Hipóteses Cinéticas

O reator é representado como um CSTR isotérmico de leito catalítico fixo. Essa escolha corresponde a uma simplificação relevante: reatores industriais de síntese de metanol são tipicamente tubulares (mais próximos de um reator de fluxo pistonado (PFR, *Plug Flow Reactor*)) ou de leito catalítico com múltiplos passes. O CSTR tende a representar uma condição mais conservadora que um PFR sob condições equivalentes, uma vez que ele opera inteiramente nas condições de saída (de menor taxa de reação), o que tende a superestimar o volume do reator em relação a um PFR equivalente. Essa abordagem foi adotada com o objetivo de fornecer estimativas conservadoras no dimensionamento.

A conversão por passe X é adotada como variável de projeto especificada, ou seja, imposta externamente ao invés de calculada a partir da integração do perfil cinético ao longo do reator. Essa simplificação, comum em estudos de síntese de processos (Biegler et al., 1997), permite explorar o espaço paramétrico de forma sistemática, mas implica que o volume do reator calculado representa apenas uma estimativa compatível com aquela conversão sob as hipóteses do

modelo. Resultados de volume devem ser interpretados como estimativas de ordens de grandeza.

A taxa de reação líquida adota uma expressão de lei de potência simplificada a partir da cinética de Graaf et al. (1990):

$$r_{\text{liq}} = k(T) \cdot P_{\text{CO}} \cdot P_{\text{H}_2}^2 - [k(T)/K_{\text{eq}}(T)] \cdot P_{\text{MeOH}} \quad (1)$$

O fator pré-exponencial ($A = 2,135 \times 10^{-2} \text{ mol}/(\text{kg} \cdot \text{s} \cdot \text{bar}^3)$) e a energia de ativação ($E_a = 65 \text{ kJ/mol}$) foram ajustados para reproduzir volumes de leito da ordem de centenas de m^3 para a escala considerada, não representam uma parametrização cinética rigorosamente ajustada, sendo empregados apenas para reproduzir a escala esperada do problema. A constante de equilíbrio $K_{\text{eq}}(T)$ é calculada via equação de van't Hoff a partir de dados termodinâmicos do NIST ($\Delta G^\circ_{298} = -24,8 \text{ kJ/mol}$; $\Delta H^\circ_{298} = -90,2 \text{ kJ/mol}$), o que constitui uma estimativa aceitável para fins de projeto conceitual, embora correlações específicas para a reação de síntese de metanol (Graaf e Winkelman, 2016) ofereçam maior acurácia.

O dimensionamento do leito catalítico segue a equação do CSTR: massa de catalisador $W_{\text{cat}} = \xi / r_{\text{liq}}$, com densidade do leito $\rho_{\text{cat}} = 1.190 \text{ kg/m}^3$ (típico para $\text{Cu/ZnO/Al}_2\text{O}_3$). O calor removido no reator é

estimado como $Q = \xi \cdot |\Delta H^{\circ}_{298}|$, assumindo temperatura uniforme.

Módulo Flash: Hipóteses de Equilíbrio

O separador flash isotérmico é modelado pelo equilíbrio líquido-vapor (ELV) via equação de Rachford-Rice (1952). A fração de vapor ψ é obtida resolvendo:

$$g(\psi) = \sum_i [z_i(K_i - 1) / (1 + \psi(K_i - 1))] = 0 \quad (2)$$

As constantes de equilíbrio $K_i = y_i/x_i$ merecem discussão explícita. Para o metanol, adota-se a lei de Raoult simplificada ($K_{MeOH} = P_{sat}(T)/P$), calculada pela equação de Antoine (Reid et al., 1988). A 40 °C e 10 bar, $P_{sat} \approx 0,35$ bar, de modo que $K_{MeOH} \approx 0,035 \ll 1$, o que indica condensação preferencial do metanol. Esse resultado é consistente com o comportamento físico esperado e que justifica a alta pureza do produto líquido.

Para CO, H₂ e N₂, são atribuídos valores $K = 100$ (gases permanentes não condensáveis). Essa é uma simplificação: a 40 °C, as temperaturas críticas desses componentes são -140 °C (CO), -240 °C (H₂) e -147 °C (N₂), sendo muito abaixo da temperatura do flash, de modo que todos se encontram em estado supercrítico e têm solubilidade líquida negligível. O valor $K = 100$, embora arbitrário em sua magnitude exata, fornece uma aproximação consistente para os objetivos deste estudo: a diferença entre $K = 100$ e $K \rightarrow \infty$ é inferior a 0,1% na composição do produto líquido ($x_{N_2} < 0,001$), o que sugere que a simplificação seja aceitável para o escopo deste trabalho. Modelos mais rigorosos poderiam empregar equações de estado cúbicas (Peng-Robinson, por exemplo) para descrever o ELV a alta pressão, especialmente para a fase vapor rica em CO e H₂.

Convergência do Laço de Reciclo

O estado estacionário do laço é a solução de $f(R) = (1 - \theta) \cdot V_{flash}[Reator(Feed+R)] - R = 0$. A convergência é obtida em dois estágios: (i) substituição direta amortecida com fator $\omega = 0,7$ por 50 iterações, fornecendo estimativa inicial estável; (ii) refinamento pelo método de Newton-Krylov via *scipy.fsolve* (tolerância $\|f\| < 10^{-10}$ kmol/h; Virtanen et al., 2020).

Estimativa Econômica Preliminar

A estimativa de custo de capital (CAPEX) segue o método de Lang (Lang, 1948), reconhecidamente adequado para avaliações conceituais (Classe 5, segundo AACE International), com incertezas típicas de $\pm 30\%$ a $\pm 50\%$:

$$CAPEX = f_{Lang} \cdot \sum C_{bare,i} \cdot (1 + f_{cont}) \quad (3)$$

onde $f_{Lang} = 4,74$ para plantas de fluidos (Turton et al., 2018), $f_{cont} = 0,25$ (+25% para contingência e engenharia), e $C_{bare,i} = a \cdot S^b$ são os custos individuais

por correlações de potência (base índice de custo de plantas químicas (CEPCI) 596, ano 2020). Cabe ressaltar que a potência do compressor de reciclo foi estimada heurísticamente como fração do calor de reação, uma simplificação que pode subestimar significativamente esse equipamento e, conseqüentemente, o CAPEX total. A avaliação mais precisa requereria o balanço energético do compressor, o que está fora do escopo deste modelo conceitual. Essa simplificação constitui uma ressalva limitante do presente projeto conceitual: como o compressor de reciclo é o equipamento de maior peso no CAPEX (ver Resultados), os valores de capital aqui reportados devem ser interpretados como um limite inferior, e não como uma estimativa definitiva do investimento requerido.

Os custos operacionais (OPEX) incluem matérias-primas (CO: USD 5/kmol $\approx$ USD 179/t; H₂: USD 2/kmol $\approx$ USD 992/t, valores de referência para gás de síntese via reforma a vapor), utilidades elétricas, mão de obra, manutenção (3% do CAPEX) e seguros (1% do CAPEX). O fluxo de caixa livre (FCL) considera depreciação linear ao longo de 15 anos, alíquota de imposto de 25% e taxa mínima de atratividade (TMA) de 12% a.a. Os preços adotados são estimativas de referência e podem variar substancialmente com a localização da planta, fonte das matérias-primas e conjuntura de mercado. A análise de break-even explora a sensibilidade ao preço do metanol no intervalo de USD 300 a USD 1.500/t.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Balanço de Massa e Produto

A Figura 2 e a Tabela 1 apresentam o balanço de massa do processo no caso base ($X = 20\%$, $\theta = 5\%$). O laço de reciclo amplifica a vazão molar circulante de forma considerável: a corrente de mistura totaliza cerca de 1.384 kmol/h contra 305 kmol/h de feed fresco, resultando em um fator de reciclo de aproximadamente 3,5. Esse valor elevado é consequência direta da baixa conversão por passe (20%). A cada ciclo, apenas 20% do CO presente no reator é convertido, de modo que a maior parte do reagente retorna ao laço. Em estado estacionário, o balanço de CO exige que a quantidade purgada mais a quantidade consumida na reação iguale o feed fresco; com $\theta = 5\%$ e a razão de reciclo calculada, a conversão global estimada de CO atinge aproximadamente 83%.

O produto líquido de fundo do flash apresenta composição de 99,6% mássico de CH₃OH. Esse resultado é consequência das constantes de equilíbrio adotadas no flash: $K_{MeOH} = P_{sat}/P \approx 0,035$ implica que apenas $\sim 3,5\%$ do metanol presente permanece na fase vapor, enquanto $K = 100$ para os gases permanentes implica que praticamente toda a fração de CO, H₂ e N₂ permanece em fase gasosa. Nas

condições de flash adotadas (40 °C, 10 bar), a separação é termodinamicamente favorável pela grande diferença de volatilidade entre o metanol e os demais componentes, o que torna o uso de um único estágio de separação uma hipótese razoável para fins de projeto conceitual.

A validação do balanço por átomos de carbono indica erro inferior a 0,01 kmol C/h (< 0,01%), confirmando a convergência numérica do algoritmo.

Tabela 1. Balanço de massa por corrente (caso base: $X = 20\%$, $\theta = 5\%$).

Corrente	CO (kmol/h)	H ₂ (kmol/h)	CH ₃ OH (kmol/h)	N ₂ (kmol/h)	Total (kmol/h)
Feed	100,000	200,000	0,000	5,000	305,000
Mistura	415,717	831,435	37,848	98,648	1,383,648
Reator (saída)	332,574	665,148	120,991	98,648	1,217,361
Flash Líq.	0,240	0,480	81,152	0,071	81,942
Flash Vap.	332,334	664,668	39,840	98,577	1,135,419
Reciclo	315,717	631,435	37,848	93,648	1,078,648
Purga	16,617	33,233	1,992	4,929	56,771

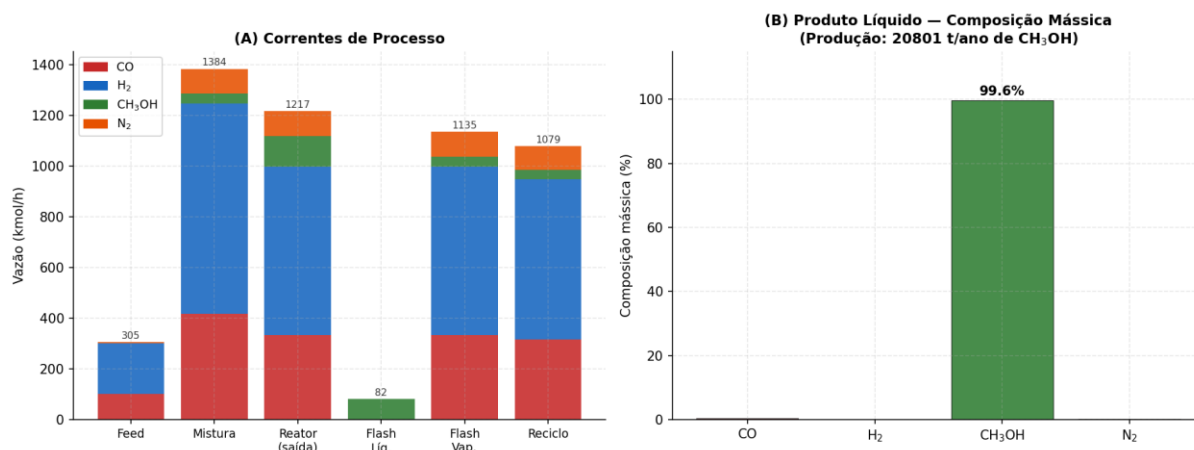


Figura 2. Balanço de massa do processo: (A) Correntes do processo (B) e composição mássica do produto líquido. Caso base: $X = 20\%$, $\theta = 5\%$.

Algoritmo de Convergência e Graus de Liberdade

A Figura 3 ilustra o algoritmo SMS de dois estágios implementado, e a Tabela 2 apresenta os graus de liberdade. O estágio de substituição direta amortecida ($\omega = 0,7$) tem papel essencial de regularização: sem amortecimento, o laço de reciclo deste processo diverge na maioria das condições iniciais testadas, pois o alto fator de reciclo torna o sistema sensível à estimativa inicial. O fator $\omega = 0,7$ representa um compromisso entre velocidade de convergência (ω tendendo a 1) e estabilidade (ω tendendo a 0). O estágio 2 (Newton-Krylov) converge o resíduo a $1,14 \times 10^{-13}$ kmol/h, bem abaixo da tolerância definida, confirmando a robustez do algoritmo.

A análise de graus de liberdade totaliza 20 GDL para o processo completo, sendo exatamente compensados pelas 20 especificações de projeto (T_R , P_R , X , T_F , P_F , θ , e as condições de cada alimentação). Um GDL residual nulo é condição necessária (embora não suficiente) para a existência de solução única, fornecendo a base formal para a execução da SMS.

Análise Econômica do Caso Base

Os indicadores econômicos do caso base são reunidos na Tabela 3 e detalhados na Figura 4. Ressalta-se que esses valores têm caráter de estimativa preliminar de projeto conceitual e devem ser interpretados como ordens de grandeza, não como projeções financeiras definitivas. Incertezas de ± 30 –50% no CAPEX e ± 20 –

30% no OPEX são inerentes ao método de Lang na fase conceitual (AACE International, Classe 5).

Tabela 2. Análise de graus de liberdade do processo de síntese de metanol simulado.

Unidade de Operação	Variáveis	Equações	GDL	Especificações
Misturador (2 entradas → 1 saída)	14	6	8	Composição, T, P das alimentações
Reator CSTR isotérmico	11	6	5	T_R , P_R , conversão X especificada
Separador Flash (ELV)	15	9	6	T_F , P_F
Divisor reciclo / purga	9	8	1	Razão de purga θ
TOTAL	49	29	20	20 especificações. GDL = 0

ALGORITMO DE CONVERGÊNCIA DO LAÇO DE RECICLO Simulação Modular Sequencial (SMS)

ESTÁGIO 1 – Substituição Direta Amortecida

$R^0 = 0$ (estimativa inicial)

Para $k = 1, 2, \dots, 50$:

$$M = \text{Feed} + R^{k-1}$$

$$R^k_{\text{cand}} = (1 - \theta) \cdot \text{Flash}(\text{Reator}(M))$$

$$R^k = 0.3 \cdot R^{k-1} + 0.7 \cdot R^k_{\text{cand}}$$

$\omega = 0.7$ (fator de amortecimento)

Garante estabilidade sem divergência

ESTÁGIO 2 – Refinamento Newton-Krylov

Resolver:

$$f(R) = (1 - \theta) \cdot \text{Flash}(\text{Reator}(M)) - R = 0$$

via `scipy.fsolve` ($\text{xtol} = 10^{-10}$)

Resíduo convergido = $1.14\text{e-}13$ kmol/h ✓

Referência:

Westerberg et al. (1979)
Process Flowsheeting

Figura 3. Algoritmo de convergência SMS em dois estágios.

O CAPEX estimado de USD 43,5 MM é dominado pelo custo do compressor de reciclo (aproximadamente 58% do bare), o que reflete a alta vazão circulante (~ 1.135 kmol/h de vapor) associada à baixa conversão por passe. Convém notar que a estimativa do compressor se baseou em uma heurística simplificada (fração do calor de reação), e a potência real de compressão (calculada pelo balanço termodinâmico para uma razão de pressões de $10 \rightarrow 50$ bar) seria da ordem de 1.800 kW, em contraste com os ~ 312 kW usados no cálculo. Essa discrepância sugere que o CAPEX real pode ser substancialmente maior do que o valor estimado, tornando a análise econômica ainda mais conservadora.

O OPEX anual de USD 12,1 MM é liderado pelo custo de matérias-primas ($\text{CO} + \text{H}_2$: $\sim$ USD 7,2 MM/ano, 59% do OPEX). A receita bruta estimada de USD 12,5 MM/ano ao preço de USD 600/t resulta em um FCL de apenas USD 0,37 MM/ano, sendo insuficiente para amortizar o CAPEX de USD 43,5 MM dentro da vida útil considerada sob a TMA de 12%. Isso se traduz em Valor Presente Líquido (VPL) preliminar de aproximadamente $-\text{USD } 40,9$ MM, indicando, nessa estimativa exploratória, a inviabilidade econômica ao preço convencional de mercado para a escala simulada.

Análise de Sensibilidade

A Figura 5 apresenta 48 cenários combinando $X = 10\text{--}40\%$ e $\theta = 2\%, 5\%$ e 10% . Três aspectos merecem discussão do ponto de vista físico-químico.

(i) Influência da conversão por passe no volume do reator: O volume cresce de forma acentuada com X, passando de ~ 200 m³ ($X=10\%$) para mais de 1.000 m³ ($X=40\%$) para purga de 5%. Esse comportamento decorre da diminuição da taxa de reação líquida à medida que a conversão se aproxima do equilíbrio: na condição de saída do CSTR, a concentração de CH_3OH aumenta com X enquanto as concentrações de CO e H_2 diminuem, reduzindo o termo progressivo e aumentando o termo regressivo na Equação (1). Em outras palavras, quanto maior a conversão imposta, mais o sistema se aproxima do equilíbrio termodinâmico, e a equação do CSTR ($V = \xi/r$) implica V tendendo a ∞ . O valor de $K_{eq}(250^\circ\text{C}) \approx 3,5 \times 10^{-3} \text{ bar}^{-2}$ é relativamente pequeno, o que significa que o equilíbrio é atingido rapidamente nas condições de alta pressão parcial de reagentes, impondo um limite prático de conversão por passe em torno de 30–35% para esta modelagem.

(ii) Influência da razão de purga no desempenho do sistema: Uma purga menor ($\theta = 2\%$) reduz a perda de reagentes não convertidos e de metanol presente no vapor, aumentando a produção anual. Contudo, para

manter o balanço de estado estacionário dos inertes (N_2), uma purga menor exige um reciclo proporcionalmente maior, o que eleva a vazão circulante e, consequentemente, o custo e tamanho do compressor e dos demais equipamentos, refletindo-se em CAPEX maior e VPL mais negativo para $X > 25\%$.

Para $\theta = 10\%$, o efeito oposto é observado: a purga maior reduz o reciclo e o CAPEX, mas diminui a produção por descarte de mais reagentes não reagidos. O mínimo de perda econômica (VPL menos negativo) situa-se em torno de $X = 18\text{--}22\%$ e $\theta = 5\text{--}10\%$, para o cenário de preços considerado.

Tabela 3. Indicadores técnicos e econômicos do caso base ($X = 20\%$, $\theta = 5\%$, $P_{MeOH} = \text{USD } 600/\text{t}$). Valores econômicos são estimativas de Classe 5 ($\pm 30\text{--}50\%$).

Indicador	Valor
Produção de CH_3OH	$\sim 20.800 \text{ t/ano } (\pm 10\%)$
Volume do reator (leito cat.)	$\sim 320 \text{ m}^3$ (estimativa CSTR)
Calor removido no CSTR	$\sim 2.080 \text{ kW}$
Fração vaporizada (flash)	0,933
CAPEX total (método de Lang)	USD 43,5 MM ($\pm 50\%$)
OPEX anual	USD 12,1 MM/ano ($\pm 30\%$)
Receita bruta anual	USD 12,5 MM/ano ($P = \text{USD } 600/\text{t}$)
Fluxo de Caixa Livre (FCL)	USD 0,37 MM/ano
VPL (MARR = 12%, $n = 15$ anos)	USD $-40,9$ MM
Taxa Interna de Retorno (TIR)	Não determinada (FCL insuficiente)
Payback simples	> 100 anos ao preço de USD 600/t
Preço de break-even estimado	$\sim \text{USD } 945/\text{t}$ (incerteza $\pm \text{USD } 200/\text{t}$)

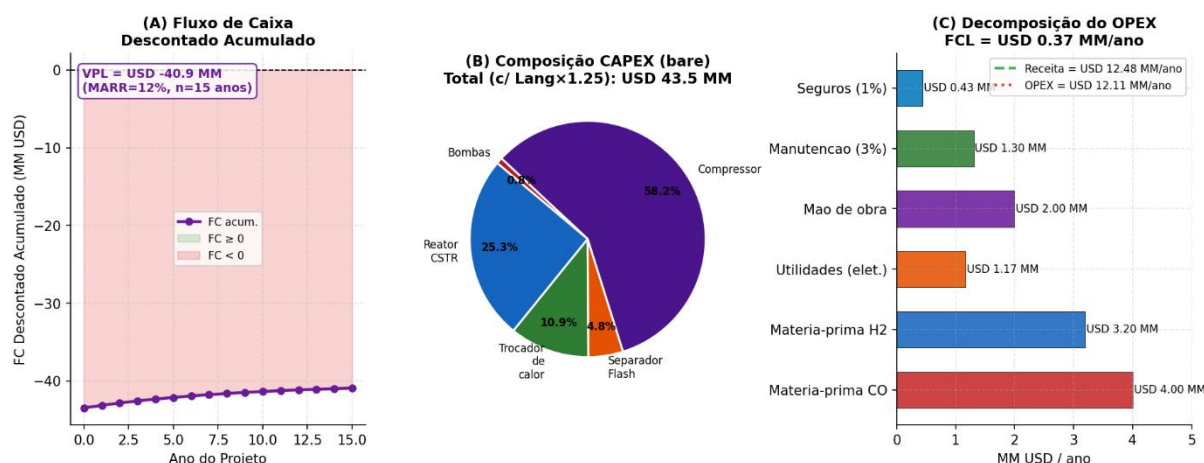


Figura 4. Análise econômica do caso base: (A) fluxo de caixa descontado acumulado, (B) composição do CAPEX e (C) decomposição do OPEX.

(iii) Mapa de calor VPL (Fig. 5F). Todos os cenários apresentam VPL negativo ao preço de USD 600/t, indicando que a inviabilidade econômica preliminar não resulta de uma escolha subótima de parâmetros operacionais, mas reflete a estrutura de custos do processo na escala considerada. O gradiente de cores

(mais verde = menos negativo) sugere que a região $X = 15\text{--}25\%$ com $\theta = 8\text{--}10\%$ seria a mais favorável economicamente, dentro das premissas adotadas.

Análise de Break-Even de Preço

A Figura 6 apresenta como o VPL e o FCL variam com o preço do metanol, mantendo $X = 20\%$ e $\theta = 5\%$. O break-even preliminar estimado situa-se em torno de USD 945/t — valor que, considerando a incerteza inerente ao método de estimativa ($\pm 50\%$ no CAPEX), poderia variar entre aproximadamente USD 600/t e USD 1.400/t. Portanto, a conclusão mais robusta é que os resultados sugerem baixa atratividade econômica

ao preço convencional (USD 300–450/t em 2023) e possivelmente viável no segmento de metanol verde, cujos preços reportados para o metanol verde situam-se tipicamente entre USD 800 e USD 1.500 t⁻¹, dependendo da rota tecnológica, do custo do hidrogênio renovável e da origem do CO₂ (IRENA, 2021; Lux Research, 2024).

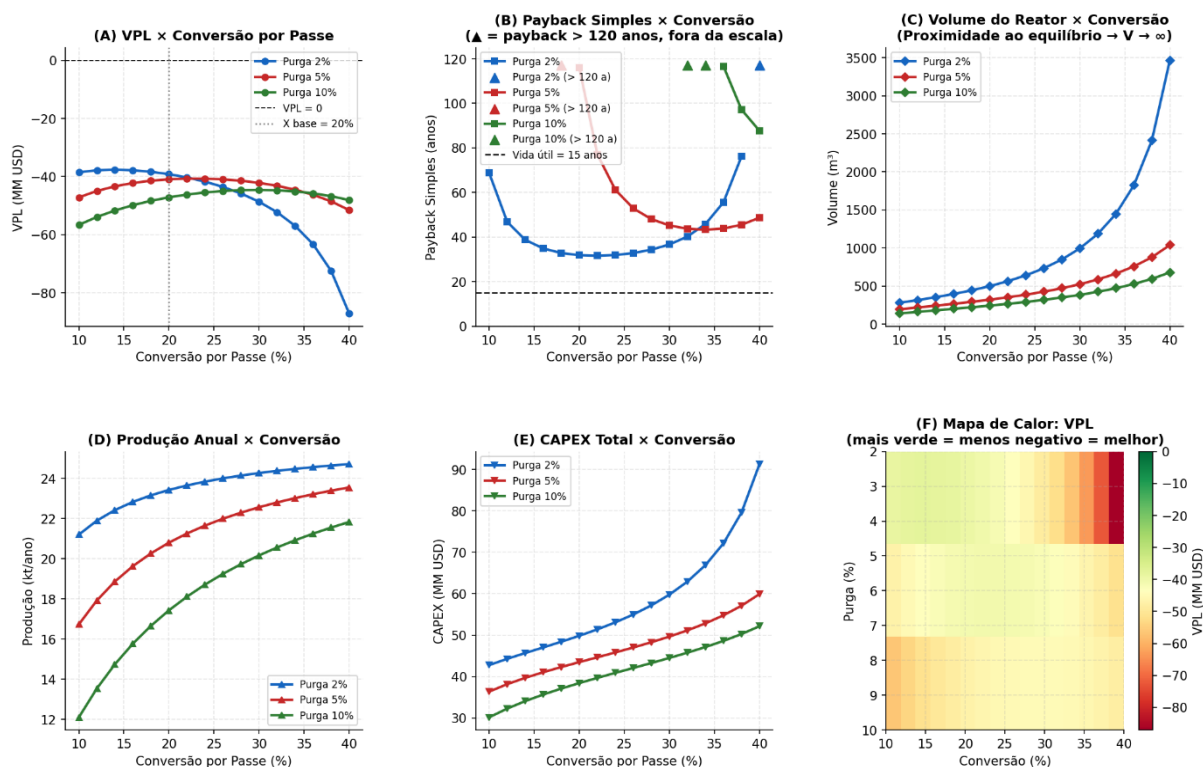


Figura 5. Análise de sensibilidade: (A) VPL, (B) payback, (C) volume do reator, (D) produção, (E) CAPEX e (F) mapa de calor VPL × (X , θ).

Análise de Break-Even do Preço do Metanol ($X = 20\%$, Purga = 5%)

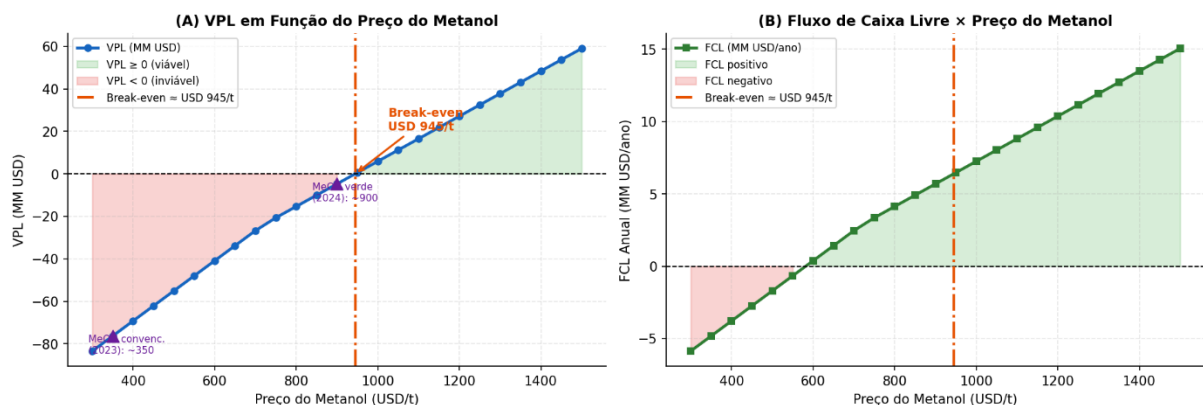


Figura 6. Análise de break-even do preço do metanol: VPL (A) e FCL (B) em função do preço de venda ($X = 20\%$, $\theta = 5\%$).

É importante destacar que o break-even calculado assume a estrutura de custos do caso base, o que pode tornar o valor real de break-even mais alto. Além disso, plantas de maior escala se beneficiariam de economias de escala (expoente de 0,63 nas correlações de custo do reator) que poderiam reduzir o CAPEX específico e, consequentemente, o preço de break-even. Uma análise mais completa demandaria a integração de modelos cinéticos detalhados, otimização do ponto de operação e estimativa de custos de Classe 3 ou 4.

CONCLUSÃO

O trabalho apresentou uma implementação computacional em Python da simulação modular sequencial do processo de síntese de metanol, com ênfase na transparência das hipóteses adotadas e no caráter exploratório da análise econômica. Os principais achados podem ser assim resumidos.

No caso base ($X = 20\%$, $\theta = 5\%$), o modelo SMS, com convergência do laço de reciclo a resíduo de $1,14 \times 10^{-13}$ kmol/h, indica uma produção estimada de ~20.800 t/ano de CH_3OH com pureza de ~99,6% em massa e volume de leito catalítico da ordem de 320 m³. Esses valores têm caráter indicativo e são sensíveis às hipóteses cinéticas e ao modelo CSTR adotados; estimativas mais acuradas requerem modelos cinéticos detalhados e projeto hidráulico do reator.

A análise econômica preliminar pelo método de Lang (incerteza $\pm 30\text{--}50\%$) sugere CAPEX da ordem de USD 43,5 MM e VPL de aproximadamente –USD 40,9 MM ao preço de USD 600/t, com break-even estimado em torno de USD 945/t. Esse resultado indica que a escala e os preços de matérias-primas considerados tornariam o processo economicamente desafiador nas condições convencionais de mercado, mas potencialmente competitivo em nichos de mercado associados ao metanol verde. A subestimação do compressor de reciclo, identificada na análise, sugere que o CAPEX real pode ser maior, reforçando o caráter conservador desta estimativa. Cabe destacar, como ressalva limitante deste projeto conceitual, que a potência do compressor de reciclo foi estimada por uma heurística simplificada (fração do calor de reação), a qual subestima significativamente o consumo real do equipamento — cerca de 312 kW no modelo heurístico, frente a aproximadamente 1.800 kW obtidos por balanço termodinâmico rigoroso para a razão de compressão de 10 para 50 bar. Consequentemente, tanto o CAPEX quanto o OPEX (custo energético de compressão) reportados neste trabalho devem ser interpretados como estimativas de limite inferior, podendo a viabilidade econômica real do processo ser ainda mais desfavorável do que a indicada pela análise preliminar aqui apresentada.

A análise de sensibilidade revelou que o volume estimado do reator aumenta acentuadamente para conversões por passe superiores a aproximadamente 30%, refletindo a redução da taxa líquida de reação à medida que o sistema se aproxima do equilíbrio cinético-termodinâmico. Embora um reator tubular (PFR) apresente maior eficiência volumétrica que o CSTR adotado neste trabalho, ambos os modelos tendem a prever aumento expressivo do volume requerido em condições próximas ao equilíbrio. Observou-se ainda que a razão de purga (θ) estabelece um compromisso entre produção e custo de capital: valores menores de θ favorecem a recuperação de reagentes e aumentam a produção de metanol, enquanto valores mais elevados reduzem a vazão de reciclo e, consequentemente, a demanda por equipamentos associados ao laço de reciclo. Dentro das premissas adotadas, os resultados sugerem que a região de operação correspondente a $X \approx 18\text{--}22\%$ e $\theta \approx 5\text{--}10\%$ apresenta o melhor desempenho econômico entre os cenários avaliados.

Futuros estudos podem explorar técnicas alternativas, como por exemplo o uso de algoritmos metaheurísticos (Bannoud et al., 2024), além de novas configurações e condições operacionais do processo.

REFERÊNCIAS

- AACE INTERNATIONAL. Cost Estimate Classification System – As Applied in Engineering, Procurement and Construction for the Process Industries. **Recommended Practice No. 18R-97**. Morgantown: AACE International, 2020.
- BANNOUD, M. A.; SILVA, C. A. M.; MARTINS, T. D. Applications of metaheuristic optimization algorithms in model predictive control for chemical engineering processes: a systematic review. **Annual Reviews in Control**, 2024.
- BIEGLER, L. T.; GROSSMANN, I. E.; WESTERBERG, A. W. **Systematic Methods of Chemical Process Design**. Upper Saddle River: Prentice Hall, 1997.
- GRAAF, G. H.; STAMHUIS, E. J.; BEENACKERS, A. A. C. M. Kinetics of low-pressure methanol synthesis. **Chemical Engineering Science**, v. 43, n. 12, p. 3185–3195, 1988.
- GRAAF, G. H.; SCHOLTENS, H.; STAMHUIS, E. J.; BEENACKERS, A. A. C. M. Intra-particle diffusion limitations in low-pressure methanol synthesis. **Chemical Engineering Science**, 45(4), p. 773–783, 1990.
- GRAAF, G. H.; WINKELMAN, J. G. M. Chemical equilibria in methanol synthesis including the water-gas shift reaction: a critical reassessment. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 55, n. 20, p. 5854–5861, 2016.
- INTERNATIONAL RENEWABLE ENERGY AGENCY (IRENA). **Innovation Outlook: Renewable Methanol**. Abu Dhabi: IRENA, 2021.

LANG, H. J. Simplified approach to preliminary cost estimates. **Chemical Engineering**, v. 55, p. 112–113, 1948.

LUX RESEARCH. **Future of methanol: The cost of moving away from natural gas**. 2024.

NATIONAL INSTITUTE OF STANDARDS AND TECHNOLOGY. **NIST Chemistry WebBook**, SRD 69. Gaithersburg, 2023. Disponível em: <https://webbook.nist.gov/>. Acesso em: jun. 2026.

OLAH, G. A.; GOEPPERT, A.; PRAKASH, G. K. S. **Beyond Oil and Gas: The Methanol Economy**. 3. ed. Weinheim: Wiley-VCH, 2018.

RACHFORD, H. H.; RICE, J. D. Procedure for use of electronic digital computers in calculating flash vaporization hydrocarbon equilibrium. **Journal of Petroleum Technology**, v. 4, n. 10, p. 19–23, 1952.

REID, R. C.; PRAUSNITZ, J. M.; POLING, B. E. **The Properties of Gases and Liquids**. 5. ed. New York: McGraw-Hill, 1988.

TURTON, R.; BAILIE, R. C.; WHITING, W. B.; SHAEIWITZ, J. A.; BHATT, D. **Analysis, Synthesis and Design of Chemical Processes**. 5. ed. Upper Saddle River: Prentice Hall, 2018.

VIRTANEN, P. et al. SciPy 1.0: Fundamental algorithms for scientific computing in Python. **Nature Methods**, v. 17, p. 261–272, 2020.

WESTERBERG, A. W.; HUTCHISON, H. P.; MOTARD, R. L.; WINTER, P. **Process Flowsheeting**. Cambridge: Cambridge University Press, 1979.