Gestão:

Reunião de Acompanhamento e Avaliação - RAA 2026

MODELAGEM DE INCERTEZAS FINANCEIRAS NA PRODUÇÃO DE COMBUSTÍVEL SUSTENTÁVEL DE AVIAÇÃO (SAF) A PARTIR DO HIDROPROCESSAMENTO DE ÉSTERES E ÁCIDOS GRAXOS (HEFA): UMA ABORDAGEM COM APRENDIZADO DE MÁQUINA

Souza, N. A.[1]; Alijó, P. H. R.[2]; Luna, A. S.[2]

[1]Bolsista de mestrado do PRH-ANP 24/UERJ, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química (PPGEQ), Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro – RJ. E-mail: natalvimdesouza@hotmail.com

[2]Docentes do PPGEQ/UERJ, Rio de Janeiro – RJ. E-mails: pedro.alijo@uerj.br; adsluna@gmail.com

MOTIVAÇÃO E OBJETIVOS

Investir na transição energética é decidir sob incerteza. A forma rigorosa de medir o risco de um projeto, como uma planta de combustível sustentável de aviação (SAF), é o Monte Carlo acoplado ao simulador de processo — mas cada cenário exige reconvergir o simulador (70,0 s por execução no Aspen Plus). Com milhares de cenários, a análise se torna inviável, e a prática recorre a estimativas determinísticas, que não dizem a probabilidade de sucesso.

53,1 dias

para UMA análise de risco com 65.536 cenários no simulador

Objetivo: substituir o simulador por metamodelos de aprendizado de máquina e levar a análise de risco de semanas para horas — uma transformação digital da avaliação de projetos de energia.

Estudo de caso: SAF pela rota HEFA a partir de sebo bovino, em dois fluxogramas do Aspen Plus — um cinético e um estequiométrico.

APLICAÇÃO NO SETOR DE PETRÓLEO E ENERGIA

- Vale para qualquer processo modelado em simulador comercial: refino, biocombustíveis, hidrogênio, captura de carbono.
- O simulador passa a ser pago uma única vez: cada nova análise leva menos de um minuto, e as licenças ficam livres.
- O investimento passa a ser decidido pela probabilidade de sucesso e pelas variáveis que governam o risco, e não por um valor único.

Aplicativo proposto (trabalho futuro)

Entra: modelo de processo e faixas de incerteza

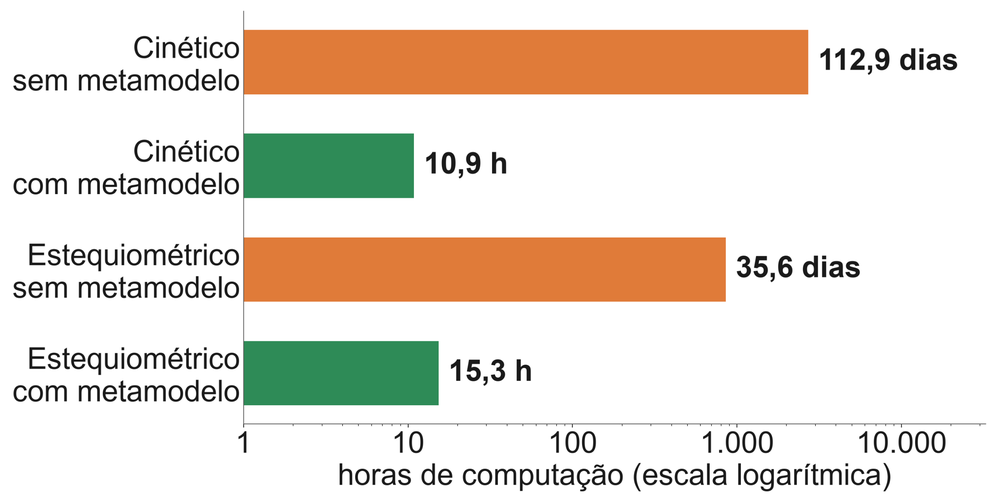
Plataforma: metamodelos treinados e validados

Sai: MSP, risco e variáveis-chave

METODOLOGIA: O FLUXO DIGITALIZADO

Simulador Aspen Plus, por automação → **Amostragem** sequência de Sobol → **Metamodelos** testa algoritmos, seleção por nRMSE → **Validação** execuções independentes → **Análise de risco** Monte Carlo e índices de Sobol

RESULTADOS



249× mais rápido

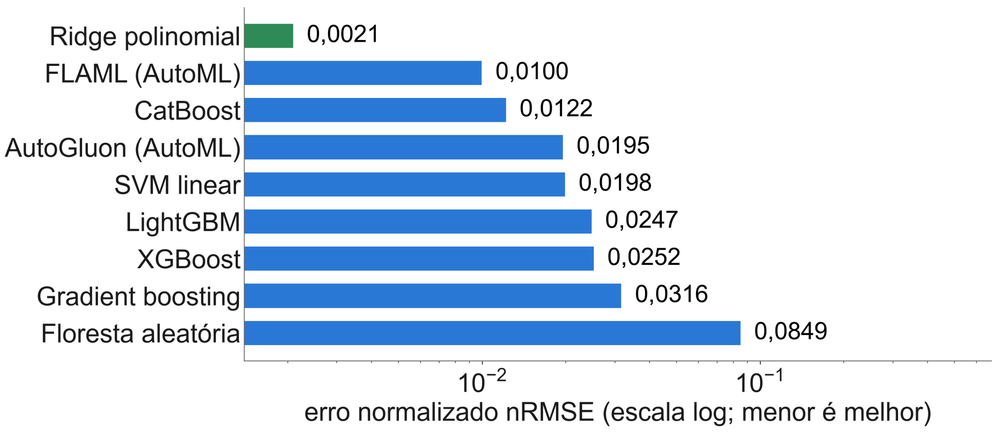
cinético: 112,9 dias → 10,9 h

56× mais rápido

estequiométrico: 35,6 dias → 15,3 h

< 1 min

por nova análise, depois do treino



Fidelidade: o melhor modelo erra o MSP em US$ 0,42/t; o do simulador, US$ 0,74/t em 32 execuções novas do Aspen.

FLUXOGRAMA CINÉTICO

MSP: US$ 1.982/t (−40,5% sobre o caso-base)
competitivo em 99,6% dos cenários
variância: sebo 95,0%; processo 0,6%

FLUXOGRAMA ESTEQUIOMÉTRICO

MSP: US$ 1.451/t (conversões fixas)
competitivo em 100%, mas **na especificação em só 49,4%**
variância: processo 2,7% + interação 11,8%

MSP com coprodutos; competitividade frente a US$ 2.651/t (Argus, nov/2025). O risco não é só de preço: no estequiométrico, a parte que vem do processo só aparece com o simulador na análise.

CONSIDERAÇÕES FINAIS

O metamodelo transforma o simulador de gargalo em recurso: a análise de risco com as variáveis de processo, que levaria semanas, passa a caber no ciclo de decisão. Próximo passo: um aplicativo aberto.

AGRADECIMENTOS

A bolsista o apoio financeiro do Programa de Formação de Recursos Humanos da Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis – PRH-ANP, gerido pela Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP), Brasil. Processo nº 2025/03791-6

REFERÊNCIAS

MARTÍNEZ-HERNÁNDEZ, E. et al. Chemical Engineering Research and Design, v. 146, p. 60-70, 2019.

WU, C.; WANG, Y.; TAO, L. Chemical Engineering Journal Advances, v. 20, 100650, 2024.