

# CENTRO UNIVERSITÁRIO SENAI CIMATEC

Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional e Tecnologia Industrial

Gustavo de Souza dos Santos

# Modelo para tomada de decisão das rotas de produção do hidrogênio

Salvador 2024 Gustavo de Souza dos Santos

# Modelo para tomada de decisão das rotas de produção do hidrogênio

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional e Tecnologia Industrial do Centro Universitário SENAI CIMATEC como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre em Modelagem Computacional e Tecnologia Industrial.

Orientador: Prof. Dr. Fernando Luiz Pellegrini Pessoa.

Salvador 2024 Ficha catalográfica elaborada pela Biblioteca do Centro Universitário SENAI CIMATEC

S237m Santos, Gustavo de Souza dos

Modelo para tomada de decisão das rotas de produção do hidrogênio / Gustavo de Souza dos Santos. - Salvador, 2024.

158 f. : il. color.

Orientador: Prof. Dr. Fernando Luiz Pellegrini Pessoa.

Dissertação (Mestrado em Modelagem Computacional e Tecnologia Industrial) – Programa de Pós-Graduação, Centro Universitário SENAI CIMATEC, Salvador, 2024.

Inclui referências.

1. Hidrogênio. 2. Avaliação técnica-econômica-ambiental. 3. Modelagem de processos. 4. Cadeia do hidrogênio. 5. Ferramenta de suporte a tomada de decisão. I. Centro Universitário SENAI CIMATEC. II. Pessoa, Fernando Luiz Pellegrini. III. Título.

CDD 546.2



# CENTRO UNIVERSITÁRIO SENAI CIMATEC

### Mestrado Acadêmico em Modelagem Computacional e Tecnologia Industrial

A Banca Examinadora, constituída pelos professores abaixo listados, aprova a Defesa de Mestrado, intitulada "Modelo para tomada de decisão das rotas de produção e distribuição do hidrogênio" apresentada no dia 05 de abril de 2024, como parte dos requisitos necessários para a obtenção do Título de Mestre em Modelagem Computacional e Tecnologia Industrial.

	Assinado eletronicamente por: Fernando Luiz Pellegrini Pessoa CPF: ***.470.585-** Data: 10/04/2024 17:34:29 -03:00
Prof. Dr.	Fernando Luiz Pellegrini Pessoa
	SENAI CIMATEC

Orientador:

Assinado eletronicamente por: Alex Alisson Bandeira Santos CPF: \*\*\*.191.765-\*\* Data: 10/04/2024 14:42:52 -03:00

Membro Interno:

Prof. Dr. Alex Alisson Bandeira Santos SENAI CIMATEC

Electronically signed by: Daniela Hartmann CPF: \*\*\*.538.290\*\* Date: 4/11/2024 9:27:33 AM -03:00 --- ESCO

Membro Externo:

Prof.<sup>a</sup> Dr.<sup>a</sup> Daniela Hartmann CNODC

Dedico este trabalho à mamãe, família, amigos e minha gata.

### AGRADECIMENTOS

Gostaria de agradecer primeiramente a mim pela disciplina, esforço e dedicação ao longo do mestrado. Apesar das inúmeras atribulações na vida pessoal sempre mantive a postura e determinação para cumprir com o meu dever no mestrado e para com as pessoas que confiaram em mim. Deixo os agradecimentos do mais fundo do meu coração à minha mamãe que papai do céu levou antes de me ver Mestre e de outras tantas conquistas merecidas com muita garra, humildade e amor. Sempre foi um sonho de criança retribuir o carinho da minha criação e hoje comigo posso honrar e lembrar Elisabeth de Souza como minha mamãe.

Agradeço a minha família que sempre esteve comigo nos momentos que mais precisei e pelo conforto de poder ter sempre um lugar para chamar de lar independentemente da localização e circunstância. Agradeço a criação da minha família e sou privilegiado de ter pessoas tão boas na família e de pessoas que considero família mesmo não sendo de sangue. Tenho orgulho de ter duas irmãs fantásticas onde juntos estamos conquistando e encontrando nossas felicidades no mundo. Agradeço ao meu irmão de outra mãe, Lorran, por fazer parte da minha história e ser sempre um espelho do que quero ser como pessoa.

Agradeço a todas as pessoas (não foram poucas) que me ajudaram e habilitaram a conquistar meus objetivos, sabemos que a vida não é fácil. Em especial, no contexto do mestrado, agradeço a cada um que contribuiu para eu poder vir à Salvador para cursar a pós-graduação, Tia Linda e sua família (um abraço para Artur) por terem me recebido de coração aberto. Agradeço a cada um dos meus amigos e amigas por terem proporcionado o mais puro sentimento de comunhão nessa vida, apesar de me expressar com poucas palavras o sentimento mais honesto de felicidade eu encontro com vocês e todas as pessoas que fizeram e fazem parte da minha existência.

Um agradecimento especial ao meu orientador Professor Doutor Fernando Luiz Pellegrini Pessoa por ser o exemplo de profissional para mim e carinhosamente a figura mais próxima que tive de avô. Me ensinou todas as qualidades profissionais que devo buscar e o instinto de estar sempre procurando aprender mais criticamente. Sem me estender mais, agradeço por viver essa vida e minha gatinha Mingau (ou Marie se minhas irmãs estiverem perto) por ser minha gata.

#### RESUMO

A implementação eficaz da economia do hidrogênio enfrenta desafios consideráveis, principalmente relacionados à sua produção, armazenamento e distribuição. No contexto brasileiro, o hidrogênio possui grande potencial frente a maioria dos países do mundo, dada a riqueza de recursos naturais principalmente com energias de fontes renováveis, disponibilidade de terra e abundância em água. Dessa forma, podendo desempenhar um papel fundamental no mercado global de hidrogênio, exigindo uma exploração estratégica de suas capacidades de produção e consumo. Diante disso, foi desenvolvida uma abordagem integrada que considera aspectos econômicos e ambientais. O uso de modelagem matemática e análise técnico-econômico-ambiental é utilizada para avaliar as rotas de produção e distribuição do hidrogênio fazendo uso de um método eficiente e econômico capaz de identificar diferentes cenários e condições. Como resultado, foi desenvolvida uma ferramenta de suporte a tomada de decisão, chamada de Decision Making Model for Hydrogen (DMMH<sub>2</sub>), capaz de gerar informações up to date utilizando uma extensa base de dados da literatura, fornecedores e simuladores de processo. Os valores de resultado do custo mostraram-se condizentes com outras ferramentas de análise. Além disso, foi possível preencher lacunas no método de modelagem da cadeia do hidrogênio, considerando etapas e heurísticas necessárias aos sistemas de análise como o ajuste de escala para comparação de diferentes tecnologias, correção do ano de análise e sistematização do processo de modelagem da cadeia de suprimentos de forma integrada. Ao total, a ferramenta possui a capacidade de auxiliar e gerar insights em projetos de cadeia de suprimentos do H2 com a representação de 33 rotas de produção, 7 tecnologias de armazenamento e 26 configurações de transporte.

**Palavras-chave:** hidrogênio; avaliação técnica-econômica-ambiental; modelagem de processos; cadeia do hidrogênio; ferramenta de suporte a tomada de decisão.

### ABSTRACT

#### Model for decision-making on hydrogen production routes

The effective implementation of the hydrogen economy faces considerable challenges, primarily related to its production, storage, and distribution. In the Brazilian context, hydrogen has great potential compared to most countries in the world, given the wealth of natural resources, especially from renewable energy sources, land availability, and water abundance. Thus, it can play a key role in the global hydrogen market, requiring strategic exploration of its production and consumption capabilities. Considering this, an integrated approach that considers economic and environmental aspects has been developed. The use of mathematical modeling and technical-economic-environmental analysis is utilized to evaluate the production and distribution routes of hydrogen using an efficient and economical method capable of identifying different scenarios and conditions. As a result, a decision support tool called the Decision Making Model for Hydrogen (DMMH2) was developed, capable of generating up-to-date information using an extensive database from literature, suppliers, and process simulators. The result values of the cost were shown to be consistent with other analysis tools. Furthermore, it was possible to fill gaps in the modeling method of the hydrogen chain, considering stages and heuristics necessary for analysis systems such as scale adjustment for comparing different technologies, correction of the analysis year, and systematization of the supply chain modeling process in an integrated manner. Overall, the tool can assist and generate insights in H<sub>2</sub> supply chain projects with the representation of 33 production routes, 7 storage technologies, and 26 transport configurations.

**Keywords:** Hydrogen; techno-economic-environmental assessment; process modeling; hydrogen chain; decision support tool.

.

# LISTA DE FIGURAS

Figura 1. Organização do documento	.19
Figura 2. Fenômeno do efeito estufa	.22
Figura 3. Contribuição de emissões de GEE por setor	.25
Figura 4. Encontros das nações globais para discussão das mudanças climáticas	.27
Figura 5. Previsão e demanda mundial de H₂ por setor	.29
Figura 6. Produção de hidrogênio nacional	.29
Figura 7. Possíveis aplicações do hidrogênio Sustentável	.30
Figura 8. Conceito do Power-to-X	.31
Figura 9. Matriz energética brasileira	.32
Figura 10. Principais tecnologias e maturidade tecnológica das rotas de produção	do
hidrogênio	.33
Figura 11. Principais processos de produção do H <sub>2</sub>	.34
Figura 12. Sistema de eletrólise alcalina	.36
Figura 13. Sistema de eletrólise de óxido sólido	.37
Figura 14. Sistema de tipo PEM	.38
Figura 15. Mecanismo de um semicondutor fotocatalítico.	.40
Figura 16. Reator de plasma	.42
Figura 17. Ciclos termoquímicos	.43
Figura 18. Integração solar com ciclo termoquímico	.44
Figura 19. Ciclo termoquímico S-I	.44
Figura 20. Ciclo genérico de duas etapas Metal (M) e óxido de metal (MO)	.45
Figura 21. Esquema genérico de reator para gaseificação da biomassa	.46
Figura 22. Esquema de pirólise da biomassa	.48
Figura 23. Esquema da economia de $H_2$ usando processos fermentativos	.50
Figura 24. Reforma a vapor do gás natural	.51
Figura 25. Reforma auto termal do gás natural com captura de CO2	.53
Figura 26. Processo de oxidação parcial	.54
Figura 27. Ciclo de um estágio	.59
Figura 28. Ciclo Claude	.60
Figura 29. Ciclo Collins Helium	.61

Figura 30. Comparação de densidades do hidrogênio (Comprimido & Liquefeito x
Baseado em material)65
Figura 31. Tecnologias para armazenamento de H266
Figura 32. Configuração de cilindros no caminhão transportador
Figura 33. Modelo de carreta de cilindros comercial Bayotech
Figura 34. Perfil de publicações sobre cadeia de suprimentos/produção voltada para
H <sub>2</sub> 76
Figura 35. Análise técnico econômica de sistema off-grid
Figura 36. Produção de H $_2$ offshore com sistema híbrido77
Figura 37. Sistema de posto de abastecimento para H2
Figura 38. Fluxograma de metodologia multicritério79
Figura 39. Framework para tomada de decisão da cadeia de $H_2$ no Qatar80
Figura 40. Algoritmo para cálculo de custos84
Figura 41. Algoritmo para cálculo de emissões da cadeia de H2
Figura 42. Simulação em Aspen Plus da gaseificação com vapor da biomassa103
Figura 43. LCOH Solar PV and Offshore Wind Power 50 MW and 100 MW112
Figura 44. Distribuição do custo total de H2114
Figura 45. Perdas do transporte de H2 líquido por caminhão115
Figura 46. Pegada de carbono das tecnologias do estudo de caso 2116
Figura 47. Resultados do LCOH da ferramenta para vazão de 100 kg/h empregando
diferentes tecnologias de produção de H2118
Figura 48. Resultados do LCOS da ferramenta para vazão de 100 kg/h119
Figura 49. Resultados do LCOT da ferramenta para vazão de 100 kg/h120
Figura 50. Resultados do $CO_2$ da ferramenta para vazão de 100 kg/h nos sistemas
de produção121
Figura 51. Resultados do CO2 da ferramenta para vazão de 100 kg/h nos sistemas
de armazenamento
Figura 52. Resultados do $CO_2$ da ferramenta para vazão de 100 kg/h nos sistemas
de transporte123
Figura 53. Comparação do LCOH para as escalas de 1000 e 100 kg/h125
Figura 54. Comparação do LCOS para as escalas de 1000 e 100 kg/h126
Figura 55. Comparação do LCOT para as escalas de 1000 e 100 kg/h127

Figura 56. Comparação dos resultados emissões CO2 da ferramenta para o LCOH.
Figura 57. Comparação dos resultados emissões CO2 da ferramenta para o LCOS.
Figura 58. Comparação dos resultados emissões CO2 da ferramenta para o LCOT.
Figura 59. Ferramenta DMMH <sub>2</sub> 132
Figura 60. Pacotes DMMH <sub>2</sub> com convergência manual132
Figura 61. Abas de seleção de resultados da ferramenta DMMH2133
Figura 62. Configuração DMMH₂ para geração de energia133

# LISTA DE TABELAS

Tabela 1 Propriedades físico-químicas do H2.
Tabela 2. Gases do efeito estufa24
Tabela 3. Tipos de tanques pressurizados56
Tabela 4. Propriedades H <sub>2</sub> líquido58
Tabela 5. Compostos Químicos com potencial para serem carreadores de líquidos
orgânicos69
Tabela 6. Considerações econômicas relevantes.    81
Tabela 7. Emissões específicas por tecnologia de produção86
Tabela 8. Matriz Elétrica Brasileira87
Tabela 9. Emissões específicas por fonte de geração de eletricidade87
Tabela 10. Consumo de energia elétrica em função da pressão de armazenamento
Tabela 11. Consumo de eletricidade para liquefação e regaseificação do H <sub>2</sub> 89
Tabela 12. Consumo de energia térmica.    90
Tabela 13. Emissões específicas de veículos automotores de carga.    90
Tabela 14. Emissões de gases do efeito estufa por consumo de HFO91
Tabela 15. Dados base para o CT de zinco e óxido de zinco com fonte solar94
Tabela 16. Dados base para CT do CuCl94
Tabela 17. Dados base para CT híbrido de enxofre utilizando fonte solar95
Tabela 18. Dados base para CT de óxido de metais com fonte solar.    95
Tabela 19. Dados base para CT de enxofre e iodo com fonte nuclear.    96
Tabela 20. Dados base para CT com ciclo de ceria96
Tabela 21. Funções custo para processos bio fermentativos na produção de H297
Tabela 22. Parâmetros de cálculo para custo e geração de energia.    99
Tabela 23. Equações de custo e processo BoP PEM100
Tabela 24. Equações de geração de H $_2$ por tipo de biomassa101
Tabela 25. Composição proximate e ultimate102
Tabela 26. Equações de custo da planta de gaseificação.    104
Tabela 27. Dados base para planta de produção de $H_2$ por reforma a vapor105
Tabela 28. Dados base para plasmólise e fotocatálise
Tabela 29. Parâmetros de dimensionamento para transporte via Navio

Tabela 30. Parâmetros de dimensionamento para transporte via gasoduto onshore
(Utilidade e compressão)107
Tabela 31. Parâmetros de dimensionamento para transporte via gasoduto onshore
(gasodutos)
Tabela 32. Parâmetros de dimensionamento para transporte via gasoduto offshore.
Tabela 33. Parâmetros de dimensionamento para transporte via caminhão108
Tabela 34. Funções custo das unidades de conversão e reconversão109
Tabela 35. Utilidades das unidades de processamento
Tabela 36. Parâmetros de custo para o armazenamento de H2 utilizando tolueno. 110
Tabela 37. Parâmetros de custo para o armazenamento de H <sub>2</sub> líquido111
Tabela 38. Comparação de dados da literatura com dados do software para o custo
médio do hidrogênio em diferentes tecnologias111
Tabela 39. Parâmetros default da ferramenta. 117

# LISTA DE SIGLAS E ABREVIATURAS

- VPCA Velocidade de Propagação da Chama no Ar
- GEE Gases do Efeito Estufa
- AWE Alkaline Water Electrolysis
- SOES Solid Oxide Electrolysis
- PEM Proton Exchange Membrane
- LOHC Liquid Organic Hydrogen Carrier
- CAPEX Capital Expenditure
- **OPEX** Operational Expenditure
- CEPCI Chemical Engineering Plant Cost Index
- LCOH Levelised Cost of Hydrogen
- LCOP Levelised Cost of Production
- LCOS Levelised Cost of Storage
- LCOT Levelised Cost of Transport
- WACC Weighted Average Cost of Capital
- LCOX Levelised Cost of Hydrogen or Production or Storage or Transport
- ACV Análise de Ciclo de Vida
- GWP Global Warming Potential
- EECO2 Emissão Específica para uma Etapa do Processo
- HFO Heavy Fuel Oil
- CT Ciclo Termoquímico
- SSF + DF Solid State Fermentation + Dark Fermentation (resíduo de comida)
- DF + AD Dark Fermentation + Anaerobic Digestion (resíduo de comida)
- SF + PF Dark Fermentation + Photofermentation (biomassa rica em hemicellulose)
- DF FOOD Dark Fermentation (resíduo de comida Referência A)
- DF CORN Dark Fermentation (amido de milho)
- DF FOOD2 Dark Fermentation (resíduo de comida Referência B)
- DF MOLASSES Dark Fermentation (melaço)
- DF AGRICULTURAL Dark Fermentation (resíduo de agricultura)
- PF ALGAS Photo Fermentation (algas)
- BoP Balanço da Planta
- BgE Balanço de Geração de Energia
- FC Fator de Capacidade

TRL – Technology Readiness Level DMMH<sub>2</sub> – Decision Making Model for Hydrogen

# Sumário

1	INTR	ODUÇÃO	17
	1.1	OBJETIVOS	18
	1.1.1	Objetivo Geral	
	1.1.2	Objetivos Específicos	
	1.2	Organização do Documento	19
2	REVI	SÃO DA LITERATURA	20
	2.1	HIDROGÊNIO	20
	2.1.1	Características gerais	20
	2.1.2	Propriedades físico-químicas	20
	2.1.3	Importância como vetor de energia e descarbonização na transição energética	21
	2.1.4	Brasil e Hidrogênio: Aplicações, importância nacional e mundial	28
	2.2	TECNOLOGIAS DE PRODUÇÃO DO HIDROGÊNIO	32
	2.2.1	Fontes Renováveis	
	2.2.1	L.1 Processos de quebra da água	34
	2.2.1	L.2 Processos com biomassa	45
	2.2.2	Fontes Fósseis	51
	2.2.2	2.1 Reforma a vapor do metano	51
	2.2.2	2.2 Reforma auto termal	52
	2.2.2	2.3 Oxidação Parcial	53
	2.2.2	Pirólise de Hidrocarbonetos	54
	2.3	TECNOLOGIAS DE ARMAZENAMENTO DO HIDROGÊNIO	55
	2.3.1	Gás comprimido	55
	2.3.2	Liquefeito	57
	2.3.2	2.1 Linde Hampsom	59
	2.3.2	2.2 Ciclo Claude	59
	2.3.2	2.3 Collins Helium	60
	2.3.3	Estruturas geológicas	62
	2.3.3	3.1 Cavernas de Sal	62
	2.3.3	3.2 Campos de petróleo e gás esgotados	63
	2.3.3	3.3 Aquífero	64
	2.3.4	Compostos sólidos	64
	2.3.5	Amônia	67
	2.3.6	Carreadores de líquidos orgânicos para hidrogênio	68
	2.4	TECNOLOGIAS DE TRANSPORTE DO HIDROGÊNIO	69
	2.4.1	Caminhão	69
	2.4.2	Gasoduto	71

	2.4.3	Navio	72
	2.5	ESTADO DA ARTE	74
3	METO	DDOLOGIA	81
	3.1	Parâmetros Econômicos	81
	3.1.1	CAPEX & OPEX	82
	3.1.2	Estimativa de custo por escala	82
	3.1.3	Custo normalizado	83
	3.1.4	Algoritmo para os cálculos de custo	83
	3.2	Parâmetros Ambientais	84
	3.2.1	Armazenamento comprimido	
	3.2.2	Armazenamento de hidrogênio líquido	89
	3.2.3	Armazenamento de hidrogênio via amônia e tolueno	89
	3.2.4	Transporte via caminhão	90
	3.2.5	Transporte via gasoduto	91
	3.2.6	Transporte via navio	91
	3.2.7	Algoritmo para cálculo de emissões	92
	3.3	CÁLCULO DAS TECNOLOGIAS DE PRODUÇÃO, ARMAZENAMENTO E	
	TRANSPO	FRANSPORTE	
	3.3.1	Produção por Ciclo Termoquímico (CT)	
	3.3.2	Produção por Biohidrogênio	
	3.3.3	Produção por Eletrólise PEM	97
	3.3.4	Produção por Biomassa	100
	3.3.5	Produção por Reforma a Vapor do Metano	104
	3.3.6	Produção por Reforma a Vapor do Metano com Captura de CO2	105
	3.3.7	Produção por Plasmólise e Fotocatálise	105
	3.3.8	Transporte por Navio	106
	3.3.9	Transporte por Gasoduto	106
	3.3.10	Transporte por Caminhão	
	3.3.11	Armazenamento por Amônia	
	3.3.12	Armazenamento por Tolueno	
	3.3.13	Armazenamento por Hidrogênio Líquido	110
4	RESU	JLTADOS	111
	4.1	VALIDAÇÃO DO MODELO	111
	4.2	Estudo de caso 1	112
	4.3	ESTUDO DE CASO 2	114
	4.4	Estudo de caso 3	117

4.	I.5 FERRAMENTA DMMH2	131
5	CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS	134
6	REFERÊNCIAS	136
7	ANEXOS	154
7.1	ANEXO A – DADOS DE FATOR DE CAPACIDADE USINA EÓLIC.	A E SOLAR
FOT	TOVOLTAICA	154
7.2	ANEXO B – DETALHAMENTO DA INTERFACE DMMH2	156
7.3	ANEXO C – SUMÁRIO REDUZIDO DE OPÇÕES DE TEC	NOLOGIAS
DIS	SPONÍVEIS NO DMMH2	157
7.4	ANEXO D – PAINEL INICIAL DA FERRAMENTA DMMH2	157
8	PRODUÇÃO TÉCNICA E CIENTÍFICA	158

### 1 INTRODUÇÃO

Na era da transição energética, a emergência do hidrogênio como um vetor energético é essencial. Sendo um elemento abundante na natureza, representa uma alternativa promissora aos combustíveis fósseis, destacando-se no cenário de descarbonização global. Entretanto, a implementação eficaz da economia do hidrogênio enfrenta desafios consideráveis, principalmente relacionados à sua produção, armazenamento e distribuição. Métodos como a eletrólise da água e a gaseificação de biomassa, por exemplo, são alternativas para redução de emissões, mas requerem avanços tecnológicos significativos para se tornarem viáveis economicamente e eficientes energeticamente (Guarieiro, *et al.* 2022).

No contexto brasileiro, o hidrogênio possui grande potencial frente a maioria dos países do mundo, dada a riqueza de recursos naturais principalmente com energias de fontes renováveis, disponibilidade de terra e abundância em água. O Brasil pode desempenhar um papel fundamental no mercado global de hidrogênio, exigindo, para tanto, uma exploração estratégica de suas capacidades de produção e consumo (EPE, 2022).

Do ponto de vista da literatura, Younas *et al.* (2022) descreve as principais tecnologias de produção do hidrogênio, discutindo sobre seus pontos fortes e fracos. Riera *et al.* (2023), por sua vez, complementa com informações sobre como ocorre o processo de modelagem da cadeia de suprimentos do H<sub>2</sub>, reforçando pontos chave necessários ao modelo de sistemas produtivos voltados para este componente. Acar & Dincer (2014) avaliam o impacto ambiental causado pelas diferentes tecnologias de produção. Apesar da amplitude dos estudos, o tema de como representar a cadeia produtiva do hidrogênio ainda segue em crescimento exponencial como descrito por Khalilpour *et al.* (2020), o que reforça a atualidade do tema e como esse processo é aperfeiçoado conforme os países e instituições elaboram suas estratégias de transição energética.

Apesar da quantidade de trabalhos, existe um foco das pesquisas em avaliar estudos de caso regionalizados e cenários limitados em quantidade de tecnologias consideradas, com poucas ferramentas capazes de avaliar de maneira abrangente o tema de produção, armazenamento e transporte do hidrogênio. Além disso, lacunas nesse processo de representação matemática da cadeia produtiva do H<sub>2</sub> são identificadas, por exemplo, com a comparação de tecnologias em escalas não

equivalentes e correção do ano de análise.

Dessa maneira, uma abordagem integrada que considere os aspectos técnicos, econômicos e ambientais é crucial para o desenvolvimento sustentável do setor de hidrogênio. O uso de modelagem matemática e análise técnico-econômico-ambiental funciona como uma ferramenta eficiente e econômica para avaliar as rotas de produção e distribuição do hidrogênio. É necessário, portanto, compreender o comportamento da viabilidade técnica e econômica de todo o ciclo de produção e uso do hidrogênio como um vetor energético, identificando gargalos, otimizando processos e minimizando custos, além de avaliar os impactos ambientais. Análises dessa natureza permitem discutir previamente o desenvolvimento de novos projetos em diferentes cenários e condições a serem implementadas.

### 1.1 Objetivos

### 1.1.1 Objetivo Geral

Criar uma ferramenta computacional de suporte à tomada de decisão a partir da análise técnico-econômico-ambiental dos processos de produção e tecnologias de distribuição do hidrogênio.

### 1.1.2 Objetivos Específicos

Visando alcançar o objetivo do trabalho, foram propostos os seguintes objetivos específicos:

- Modelar matematicamente as fontes de geração de energia centralizadas e descentralizadas;
- Modelar matematicamente as tecnologias de produção do hidrogênio através de balanço de massa, energia e parâmetros econômicos;
- Modelar matematicamente as tecnologias de distribuição do hidrogênio através de balanço de massa, energia e parâmetros econômicos;
- Calcular e comparar o custo médio do hidrogênio para as tecnologias de produção, transporte e armazenamento;
- Avaliar os impactos ambientais das cadeias de produção, armazenamento e transporte.

### 1.2 Organização do Documento

Para melhor leitura do trabalho, sugere-se navegação pelo painel de navegação presente no Word, podendo ser ativado em Exibir>Painel de Navegação, presente na aba superior do Microsoft Word.



Figura 1. Organização do documento.



### 2 REVISÃO DA LITERATURA

### 2.1 Hidrogênio

#### 2.1.1 Características gerais

Hidrogênio molecular (H<sub>2</sub>) é o elemento químico mais abundante no universo além de ser encontrado em grande abundância na Terra, sendo normalmente ligado a outros elementos químicos desde moléculas simples a complexas. Sua característica que se destaca frente a outros compostos é sua densidade, sendo o hidrogênio molecular 14,4 vezes mais leve que o ar atmosférico. Em números, estima-se que o elemento hidrogênio representa 76% da massa do Universo e 70% da superfície terrestre. Sua presença na atmosfera em contrapartida se restringe na faixa de 1 ppm. Por mais que esteja tão presente dentre os recursos do planeta, a maior parte da sua produção mundial ainda é atrelada a tecnologias de fontes fósseis (Bessarabov, 2018).

Em relação as características moleculares, a molécula de hidrogênio é composta por dois prótons que compartilham seus dois elétrons numa ligação covalente. Existem 3 isótopos do átomo, sendo eles: Prótio, Deutério e Trítio. Prótio é a variação mais estável e presente na natureza, Deutério se diferencia por ser um pouco mais pesado por possuir 1 próton e 1 nêutron e parcela do total entre 0,0184 % e 0,0082% e, por fim, o Trítio, o isótopo radioativo composto por 1 próton e 2 nêutrons. Os isótopos mais raros estão comumente associados à temática de fusão nuclear (Bessarabov, 2018).

### 2.1.2 Propriedades físico-químicas

Em condições normais de temperatura e pressão (CNTP), 0 °C e 1 atm, o H<sub>2</sub> é gasoso, inodoro, insípido, incolor e altamente inflamável, sendo armazenado normalmente em cilindros de pressão. Sua forma líquida é atingida em sistemas com - 253 °C. Um dos pontos que mais chama a atenção do H<sub>2</sub> é a quantidade de energia liberada por unidade de massa, sendo muito superior aos combustíveis comuns, devido a isso sua aplicação é fundamental no setor aeroespacial. A gasolina possui uma densidade energética igual a 50 MJkg<sup>-1</sup>, enquanto o H<sub>2</sub> possui 140 MJkg<sup>-1</sup>. Outra característica que o distingue de outros combustíveis é a velocidade de propagação da chama no ar (VPCA). Em comparação com a gasolina, com VPCA de 0,4 ms<sup>-1</sup>, o hidrogênio possui 2,65 ms<sup>-1</sup>. A Tabela 1 sintetiza as principais propriedades físico-químicas deste elemento (Castro, *et al.* 2023).

Propriedade	Valor
Estado na CNTP (0 ºC e 1 atm)	Gasoso
Temperatura de ebulição (ºC)	- 253,00
Ponto de fusão (ºC)	- 259,10
Energia por unidade de massa (MJkg <sup>-1</sup> )	145,00
Densidade (g/L) na CNTP (0 °C e 1 atm)	0,08988
Limite de inflamabilidade inferior no ar (%)	4,00
Limite de inflamabilidade superior no ar (%)	75,00
Temperatura de ignição (ºC)	574,30
Pressão Crítica (atm)	1,80
Temperatura Crítica (°C)	- 240,00
Propagação da chama no ar (ms <sup>-1</sup> )	2,65
Coeficiente de difusão no ar (cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )	0,61

Tabela 1 Propriedades físico-químicas do H<sub>2</sub>.

Fonte: (Castro, et al. 2023).

# 2.1.3 Importância como vetor de energia e descarbonização na transição energética

O hidrogênio não é um componente novo na indústria química, e em diversos setores da indústria, sendo utilizado como matéria-prima e produto final em vários processos, principalmente os petroquímicos. Sua utilização em escala industrial data desde 1950 de maneira mais intensa, porém seu uso já é conhecido desde os anos 1800. As aplicações contemporâneas se ampliam desde geração de energia, uso como combustível em transporte, armazenamento alternativo de energia e substituto como matéria prima renovável em processos com alta pegada de carbono, além do uso convencional em refinarias e processos químicos (GIZ, 2022; Bessarabov, 2018).

Atualmente, em contrapartida, cerca de 95% do H<sub>2</sub> produzido provém de tecnologias baseadas em fontes fósseis, sendo a reforma a vapor do metano e

gaseificação do carvão as principais rotas de obtenção. Ambas as tecnologias possuem um alto nível de maturidade tecnológica e são bem difundidas no mercado, em decorrência disso, a competitividade de tecnologias novas e sustentáveis é um desafio de engenharia que engloba toda uma cadeia de produção, infraestrutura e políticas públicas (GIZ, 2022).

Desse modo, com o intuito de entender o contexto de transição e o papel do H<sub>2</sub> é necessário entender o conceito de transição energética. O tópico é pautado nas mudanças climáticas associadas aos Gases do Efeito Estufa (GEE) e as consequências diretas e indiretas do fenômeno. Em síntese, a atmosfera da Terra naturalmente é composta por moléculas que refletem radiação solar proveniente do Sol num sistema que, em equilíbrio, mantêm a temperatura da Terra estável. Parte da radiação solar nesse sistema consegue passar pela atmosfera terrestre, sendo uma parcela absorvida pela superfície e a outra refletida novamente junto com radiação infravermelha emitida pela Terra. Todavia, com a emissão de gases por atividade humana, principalmente dióxido de carbono (CO<sub>2</sub>), em quantidade excessiva e ao longo das décadas, esse equilíbrio é deslocado para um ponto em que se acumula calor no planeta decorrente do aprisionamento dessa radiação, provocando o aquecimento global com o efeito estufa, como ilustrado na Figura 2 (GIZ, 2022).



Figura 2. Fenômeno do efeito estufa.

Fonte: Clima em Curso (2022).

A principal consequência direta desse fenômeno é o aumento da temperatura média do planeta. Entretanto, as consequências mais alarmantes são as indiretas. Ciclos de estações e catástrofes naturais em intensidade, derretimento de geleiras, correntes marítimas, e ciclos biológicos de fauna e flora que são sistemas muito sensíveis e impactam diretamente na logística humana para produção de alimentos, bem-estar, saúde e segurança (GIZ, 2022).

Além disso, é preciso compreender que não somente o CO<sub>2</sub> contribui para esse fenômeno como também outros gases em diferentes escalas. Metano (CH<sub>4</sub>), óxido nitroso (N<sub>2</sub>O), clorofluorcarbonetos (CFCs), hexafluoreto de enxofre (SF<sub>6</sub>) são exemplos. Esse conjunto de GEE está presente naturalmente na atmosfera, mas a intensificação causada por atividades como da indústria, agricultura, transporte e uso de fontes fósseis para geração de energia são a razão do aquecimento global (Atlas H<sub>2</sub> Bahia, 2023).

Em dados, cerca de 75% da contribuição para o fenômeno de aquecimento é causada pelo CO<sub>2</sub>. Sendo assim, a fim de padronizar e avaliar de maneira coerente os impactos desses gases na atmosfera foi criada uma relação baseada no potencial impacto de aquecimento global num período de 100 anos tendo como base o CO<sub>2</sub>. Os outros gases, dessa maneira, irão possuir um potencial de aquecimento global x vezes maior que o CO<sub>2</sub> por exemplo. A Tabela 2 apresenta alguns gases, características de tempo de vida na atmosfera e potencial de aquecimento global (Atlas H<sub>2</sub> Bahia, 2023).

Composto	Tempo de vida na atmosfera (anos)	Potencial de aquecimento global (PAG)
Dióxido de carbono (CO <sub>2</sub> )	Variável	1
Metano (CH4)	12	28
Óxido Nitroso (N2O)	121	265
HFC 23 (CHF <sub>3</sub> )	222	12400
HFC 123a (CF <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> F)	13	1300
HFC 152a (CH₃CHF₂)	1,5	138
Tetrafluorometano (CF <sub>4</sub> )	50000	6630
Hexafluoroetano (C₂F6)	10000	11100
Hexafluoreto de enxofre (SF <sub>6</sub> )	3200	23500

Tabela 2. Gases do efeito estufa

Se uma tonelada de óxido nitroso é emitida na atmosfera e ele tem um PAG de 265, seria como se fossem emitidas 265 toneladas de CO<sub>2</sub>. Essa dinâmica na literatura é chamada de CO<sub>2</sub> equivalente e pode ser aplicada em diversas situações para análise de ciclo de vida de processos, equipamentos, carros, dentre outros. O intuito principal é ter um padrão de análise do impacto ambiental e de aquecimento global que está associado (GIZ, 2022).

Finalmente, com o fenômeno e os agentes associados identificados, é necessário entender os setores e atividades humanas que atualmente contribuem para a emissão dos GEE. Os dados do *OurWorldInData* (2022) apresentados na Figura 3 ilustram esse cenário.

Fonte: (GIZ, 2022).



Figura 3. Contribuição de emissões de GEE por setor.

Fonte: Our World in data (2022).

É observada a presença de quatro macro setores que contribuem para o fenômeno do efeito estufa, como o setor de energia, 73%, e agricultura, 18%, os maiores contribuintes. Entretanto, é preciso compreender que alguns setores podem ganhar destaque pela emissão de compostos seguindo o parâmetro de CO<sub>2</sub> equivalente, tendo assim emissão de outros gases, com destaque para o metano na agricultura por exemplo.

No que tange às medidas globais para abordar esse fenômeno, tendo em vista que seus impactos afetam diretamente toda a economia mundial, existe um histórico de tomadas de ações conjuntas, começando no início dos anos 90 com a coordenação da chamada *United Nations Framework Convention on Climate Change* (UNFCCC), contudo, existindo uma primeira discussão oficial em 1988. Em seguida, a *Conference of Parties* (COP) passou a se tornar regular, reunindo

representantes de todo o mundo para discutir as ações necessárias sobre o tema da mudança climática (PNH2, 2023).

O destaque desses encontros recorrentes ocorreu em 1997 com o Protocolo de Kyoto, sendo possível um acordo com a grande maioria para a proteção climática. Foi estipulado um limite de aumento de temperatura de 2 °C antes de 2020. Além disso, foram reconhecidas inúmeras atividades que contribuíam para o fenômeno de aquecimento. Entre 2015 e 2021 a meta de 2 °C foi reduzida para 1,5 °C e, nesse período, estabelecido o Acordo de Paris. Nele, restrições mais incisivas foram estabelecidas e abrangem países emergentes nas ações (PNH2, 2023).

Em suma, questões de interesse de países sobrepõem a agilidade de ações conjuntas, conflito de ideias e tensões também são um fator que desaceleram as tomadas de decisões. Ao longo dessas décadas, contudo, algumas políticas se mostraram efetivas como por exemplo, o sistema de créditos de carbono na União Europeia. Nessa ferramenta de "comércio" de emissões, implementada em 2005, a emissão de CO<sub>2</sub> passa a ser associada a uma taxa que exige certificado de CO<sub>2</sub>. Existe um limite de emissões associadas com reduções recorrentes, essa política consegue abranger 55% dos principais emissores de carbono na União Europeia, com a outra parcela sendo regulada por outras taxas e políticas (Atlas H<sub>2</sub> Bahia, 2023).

Outra tática fruto desses debates é a importação desses certificados vindos de outras regiões do globo, entretanto, o processo burocrático associado é significativo, principalmente pela dificuldade de se certificar a cadeia produtiva envolvida no processo. A Figura 4 sintetiza os principais eventos que ocorreram nas últimas décadas e representam os principais marcos de reuniões internacionais (GIZ, 2022).




Fonte: (GIZ, 2022).

Diante desse contexto, o hidrogênio se torna uma versátil estratégia para a descarbonização mundial e para realizar a transição de um sistema energético baseado em combustíveis fósseis para um sistema neutro de emissões ou de baixas emissões comparadas ao sistema atual. Além das aplicações e características, o principal destaque vem do resíduo da sua utilização ser livre de CO<sub>2</sub>, emitindo vapor de água como subproduto. O H<sub>2</sub>, no entanto, não é uma solução universal e por isso é considerado como um vetor energético nesse processo de transição, habilitando o sistema produtivo dos países a reduzirem suas emissões (Atlas H<sub>2</sub> Bahia, 2023).

Atualmente é discutido extensamente a melhor maneira de implementar essa substituição, uma vez que a infraestrutura existente, legislação e tecnologias não são capazes de alimentar a demanda energética atual da humanidade. Além disso, por ser um tema que necessariamente envolve parcerias entre países, a abordagem é ainda mais cautelosa. Disponibilidade de energias renováveis, área disponível e custos de infraestrutura associados são os pontos estratégicos a serem estudados. Como consequência, empresas, políticos, órgãos governamentais e sociedade permanecem com o H<sub>2</sub> no holofote a fim de entender como a sociedade irá lidar com

o tema do aquecimento global sendo o H2 uma das principais ferramentas da humanidade (Atlas H2 Bahia, 2023).

Outro ponto que deve ser levado em consideração são os impactos do aumento da concentração de H<sub>2</sub> na atmosfera. Apesar do H<sub>2</sub> não ser um gás do efeito estufa, sua presença na atmosfera pode impactar indiretamente no aumento de duração de outros gases. Por exemplo, o hidrogênio emitido é consumido pelo radical OH<sup>-</sup>, entretanto, a redução de OH<sup>-</sup> na atmosfera implica num maior tempo de vida de metano, um gás do efeito estufa 28 vezes mais impactante que o dióxido de carbono. Apesar dessa consequência, é avaliado que esta alteração de composição na atmosfera não chegue a 10% dos benefícios alcançados com a mudança para uma economia de baixo carbono, dentro de um horizonte de 100 anos (Shaddix, 2022; Sand *et al.* 2023)

2.1.4 Brasil e Hidrogênio: Aplicações, importância nacional e mundial.

Visando atingir as metas do Acordo de Paris, já é compreendido o papel do H<sub>2</sub> como estratégia para a descarbonização. Diante disso, é esperado que a demanda por H<sub>2</sub> no mundo cresça durante os próximos anos tendo em vista as metas para 2050. A demanda mundial de H<sub>2</sub> em 2018 foi de 115 milhões de toneladas com o principal uso, 63% para hidrogênio puro, sendo direcionado para refino e produção de amônia representando 96% dessa parcela. As demais aplicações, 37% dos 115 milhões de toneladas, com utilização na indústria de aço, produção de metanol e outras misturas de gases. Entretanto, o crescimento no período de 2019-2022 foi impactado diretamente pelo período da pandemia do COVID-19 (EPE, 2022).

De acordo com dados da IEA (2022), houve a retomada do aumento de demanda de 5% em 2021 comparado ao ano anterior. Além disso, políticas previstas e anunciadas até 2030 já preveem um aumento que irá movimentar ainda mais o mercado mundial de H<sub>2</sub>. A Figura 5 ilustra o cenário mundial.



# Figura 5. Previsão e demanda mundial de H<sub>2</sub> por setor.

Fonte: IEA (2022).

O Brasil ainda se limita ao consumo e produção de hidrogênio no refino e produção de amônia, além disso, a Petrobras é responsável por grande parcela da produção brasileira, sendo ela também um consumidor próprio. O fato de o Brasil estar entre os potenciais produtores de hidrogênio sustentável no mundo e atuar como possível exportador, em contrapartida, induz a uma perspectiva de aumento nas próximas décadas desse mercado interno e futuro mercado externo. A Figura 6 ilustra o cenário da produção nacional (EPE, 2021).



Figura 6. Produção de hidrogênio nacional.

Dentre as aplicações que poderão se intensificar e aumentar a distribuição da figura acima estão as soluções de descarbonização utilizando hidrogênio.

Certamente a localização, país e políticas adotadas nos próximos anos irão impactar na escolha dessas estratégias. Os países no mundo estão num consenso de que a estratégia de diminuição da pegada do carbono segue esse caminho. Por outro lado, a posição do Brasil para estratégia interna pode se beneficiar de outros recursos já existentes, em especial biocombustíveis com origem de biomassa. A Figura 7 abaixo sintetiza as possíveis aplicações do hidrogênio, em específico advindo da eletrólise, contudo, a tecnologia de produção pode ser alterada desde que a energia e tecnologia de produção utilizada seja considerada renovável (Guarieiro, *et al.* 2022).



Figura 7. Possíveis aplicações do hidrogênio Sustentável.

Fonte: (Guarieiro, et al. 2022).

Reiterando o fato do hidrogênio ser um vetor energético tanto quanto fonte de energia direta, é preciso lembrar dos e-combustíveis produzidos a partir do H<sub>2</sub> como metanol, diesel, metano, querosene, entre outros, utilizando a rota por Fischer-Tropsch. Dessa maneira, a logística que se altera para os produtos é menos impactada em termos de adequação de infraestrutura, sendo apenas a matéria prima principal associada diferente. Os conceitos de *Power-to-X* e *Sector Coupling* funcionam nesse sentido e permitem a integração de diversos setores visando sempre o uso de energias renováveis para chegar às diversas possibilidades de aplicações (Guarieiro, *et al.* 2022). A Figura 8 exemplifica o princípio do *Power-to-X*.



Figura 8. Conceito do Power-to-X.

Fonte: AS, Schneider (2022).

Diante desse cenário de estratégias e utilizações do H<sub>2</sub>, o Brasil, em contraste aos demais países, possui uma matriz energética com grande participação de fontes renováveis, representando 46% do seu total. Além disso, 83% da matriz elétrica do país é renovável, com grande participação de hidrelétricas, eólica e de biomassa. Devido a isso, é reforçada a adoção de estratégias que façam proveito dos recursos disponíveis e infraestrutura existente, visando a melhor adequação do país frente às metas mundiais (EPE, 2022). A Figura 9 representa a matriz brasileira frente aos demais países.



Figura 9. Matriz energética brasileira.

Fonte: (GIZ, 2022).

Diante do contexto que envolve a temática do hidrogênio, sua importância e necessidade de tomada de decisões para estratégias públicas e privadas, se torna de extrema relevância avaliar os custos associados à cadeia de produção, distribuição, geração de energia e armazenamento. Diante disso, propor modelos para estimar preliminarmente um mercado em ascensão e estudar os possíveis cenários é de grande utilidade. Para tanto, é preciso entender as principais etapas que o hidrogênio exige na sua cadeia de valor e que serão discutidas nos próximos tópicos.

# 2.2 Tecnologias de produção do hidrogênio

As tecnologias de produção do H<sub>2</sub> podem ser divididas em duas macros categorias: tecnologias baseadas em fontes renováveis e tecnologias baseadas em fontes fósseis. Como já foi discutido nos tópicos anteriores, a produção em larga escala e mais barata atualmente advém da reforma a vapor do metano. Entretanto, tecnologias alternativas vêm ganhando destaque para medidas estratégicas de descarbonização. O H<sub>2</sub> além das rotas convencionais também pode ser obtido a partir de outros processos como um subproduto do processo principal na produção *cloro-alkali*. A Figura 10 sintetiza as principais tecnologias existentes bem como o nível de maturidade tecnológica das rotas de produção do hidrogênio.



Figura 10. Principais tecnologias e maturidade tecnológica das rotas de produção do hidrogênio.

Fonte: Energy Central (2021).

Apesar de existirem inúmeros processos para obtenção do produto em pauta, a literatura e especialistas na área enfatizam em algumas tecnologias mais promissoras a curto, médio e longo prazo, ilustradas na Figura 11.



### Figura 11. Principais processos de produção do H<sub>2</sub>



# 2.2.1 Fontes Renováveis

# 2.2.1.1 Processos de quebra da água

Utilizar água como matéria prima na Terra é uma estratégia muito útil dependendo do seu tipo e disponibilidade, tanto pela sua abundância quanto pelas propriedades intrínsecas da água. Na produção de H<sub>2</sub> especificamente sua quebra dá origem a moléculas de H<sub>2</sub> e O<sub>2</sub>, conforme apresentado na Equação 1. A energia requerida é de 237,2 kJ/mol, liberando após a reação 48,6 kJ/mol de calor (Kumar & Himabindu, 2019).

$$H_2 O \rightarrow H_2 + \frac{1}{2} O_2$$

### Equação 1

A eletrólise é uma técnica de decomposição química não espontânea realizada quando uma corrente elétrica é aplicada em um eletrólito, possuindo eletrodos ânodo-cátodo. Existem alguns métodos para produção de hidrogênio utilizando esse princípio como a eletrólise alcalina (AWE – *Alkaline Water* 

*Electrolysis*), a eletrólise em óxido sólido (SOES – Solid Oxide Electrolysis), a eletrólise em membrana de troca de prótons (PEM – Proton Exchange Membrane) e a eletrólise de troca de ânions (AEM – Anion Exchange Membrane). A eletrólise AWE e a PEM, mais populares, ocorrem em temperaturas moderadas (373 K), enquanto que a eletrólise em óxido sólido opera em altas temperaturas (800–1273 K) (Kumar & Himabindu, 2019).

O processo de eletrólise atende a 4% da demanda mundial de hidrogênio. Atualmente um eletrolisador comercial comum tem um consumo de energia de cerca de 4,5 a 5 kWh/Nm<sup>3</sup>, sendo muito maior do que outras tecnologias. A AWE é considerada mais vantajosa em comparação com outros métodos de eletrólise sendo atualmente a forma mais barata de produzir hidrogênio eletrolítico (~700 –  $800 \notin / kW$ ). Enquanto o tipo PEM e SOES ainda são caros (~1000–1500  $\notin / kW$  e ~2800–5600  $\notin / kW$ , respectivamente). Entretanto, diversos projetos na última década vêm sendo planejados com o intuito de aperfeiçoar o desempenho econômico das tecnologias, principalmente do tipo PEM (Grigoriev, *et al.* 2020).

Em suma, a principal desvantagem da geração de hidrogênio por eletrólise é o alto custo em comparação com a reforma a vapor do metano. O custo da eletricidade é maior que o da energia térmica e, como o processo é intensivo em demanda de energia, principalmente elétrica, consequentemente se torna caro. Em contrapartida, a viabilização do seu uso pode permitir um meio de se obter H<sub>2</sub> altamente puro com um processo simples e com perspectivas de atender a demanda mundial, se beneficiando também do uso de energias limpas para sua operação e produção (Grigoriev, *et al.* 2020).

# 2.2.1.1.1 Eletrólise alcalina

A configuração do sistema de eletrólise alcalina é baseada em uma célula eletrolítica com dois eletrodos (ânodo e cátodo, geralmente de níquel), imersos em uma solução alcalina (hidróxido de potássio/sódio – KOH/NaOH), além de uma membrana de troca aniônica como ilustrado na Figura 12 (Spek, *et al.* 2022).



Figura 12. Sistema de eletrólise alcalina.

Anode:  $2OH^- \rightarrow H_2O + \frac{1}{2}O_2 + 2e^-$ Cathode:  $2H_2O + 2e^- \rightarrow H_2 + 2OH^-$ Overall cell:  $H_2O \rightarrow H_2 + \frac{1}{2}O_2$ Fonte: (Kumar & Himabindu, 2019).

A produção de H<sub>2</sub> ocorre tipicamente em pressões de 1 a 25 bar e temperaturas entre 20 e 200 °C. O processo começa com a alimentação de água no cátodo e aplicação de uma corrente contínua, facilitando a reação de redução da água que gera gás hidrogênio, sendo ele liberado e coletado como produto, além da formação de íons hidroxila (OH<sup>-</sup>).

A hidroxila formada é transportada do cátodo para o ânodo através de um diafragma, devido ao circuito elétrico aplicado entre os eletrodos. No ânodo, ocorre a oxidação da hidroxila, resultando em água e oxigênio como produtos, além da liberação de dois elétrons. A água produzida pode ser retornada ao cátodo para aumentar o rendimento da produção de hidrogênio (Spek, *et al.* 2022).

As principais vantagens dessa tecnologia são o alto nível de maturidade tecnológica e o fato de os materiais utilizados não serem nobres como no caso da eletrólise tipo PEM que utiliza catalisadores a base de platina. A eficiência energética da AWE também é um ponto positivo, com desempenhos variando entre 60% e 80% (Spek, *et al.* 2022).

Em contrapartida, sistemas alcalinos têm algumas desvantagens, como baixas densidades de corrente, formação de carbonatos nos eletrodos e níveis significativos de impurezas nos gases produzidos (H<sub>2</sub> e O<sub>2</sub>), o que implica na necessidade de um sistema de purificação e manutenção que aumentam o custo do processo (Spek, et al. 2022).

### 2.2.1.1.2 Eletrólise de óxido sólido

A eletrólise de óxido sólido (SOES) é composta por três partes cerâmicas: os eletrodos (ânodo e cátodo) e o eletrólito, que é uma cerâmica mais densa. O cátodo é geralmente um cermet de níquel e zircônia estabilizado com ítria (YSZ - Yttria-Stabilized Zirconia), o eletrólito é feito apenas de YSZ, e o ânodo é composto por óxidos do tipo perovskita, frequentemente manganito de lantânio dopado com estrôncio. A Figura 13 a seguir ilustra o sistema da SOES (Younas, *et al.* 2022).



Figura 13. Sistema de eletrólise de óxido sólido.

Anode:  $O^{2-} \rightarrow \frac{1}{2} O_2 + 2e^-$ Cathode:  $H_2O + 2e^- \rightarrow H_2 + O^{2-}$ Overall cell:  $H_2O \rightarrow H_2 + \frac{1}{2} O_2$ 

Fonte: (Kumar & Himabindu, 2019).

O processo de produção de H<sub>2</sub> na SOES começa com a alimentação de água no cátodo, onde ocorre a reação de eletrólise. Diferentemente da AWE, a água é fornecida como vapor devido às altas temperaturas, e o íon gerado durante a eletrólise é o  $O_2^-$  (Younas, *et al.* 2022).

Os ânions são transportados através do eletrólito de YSZ e, ao chegar ao ânodo, são oxidados para formar moléculas de oxigênio, liberando elétrons. Os eletrolisadores da SOES operam em temperaturas altas entre 500 °C - 1000 °C, o que favorece a reação de eletrólise e reduz a necessidade de energia elétrica para a

produção de H<sub>2</sub>, como explicado no início desse capítulo. Isso resulta em uma alta eficiência energética (90% - 100%) e permite a operação em altas pressões, com a utilização de catalisadores de materiais mais baratos, diminuindo os custos do equipamento (Younas, *et al.* 2022).

Apesar da alta eficiência e dos baixos custos em alguns aspectos, a tecnologia SOES ainda possui um baixo nível de maturidade tecnológica para produção em grande escala. Portanto, enfrenta desafios relacionados à durabilidade limitada e ao tamanho considerável da instalação (Younas, *et al.* 2022).

# 2.2.1.1.3 Eletrólise tipo PEM (Proton Exchange Membrane)

A eletrólise do tipo PEM é similar a uma célula combustível PEM, onde o eletrólito presente é composto de membranas sólidas polissulfonadas, comumente Nafion<sup>®</sup> ou Fumapem<sup>®</sup>. Diferente da eletrólise alcalina, não exige meio aquoso para funcionamento, a água é inserida no ânodo onde ocorre a quebra da molécula de água e o próton H<sup>+</sup> é transportado através da membrana como ilustra a Figura 14. A temperatura de operação é baixa, de 20 a 80 °C, entretanto existem estratégias de otimização do sistema operando em temperaturas e pressões maiores, bem como aplicações de campos magnéticos para polarização da água. Essas estratégias, em contrapartida, se encontram ainda em projetos de P&D e não são amplamente disponíveis comercialmente (Kumar & Himabindu, 2019).





Fonte: (Kumar & Himabindu, 2019).

A principal vantagem desse tipo de sistema é a produção de um gás hidrogênio altamente puro, facilitando o processo de purificação e reduzindo custo de *downstream*. Além disso, o tamanho reduzido do equipamento devido a espessura da membrana (20-300  $\mu$ m) e alta condutividade do próton na membrana (0,1 ± 0,02 S cm<sup>-1</sup>) são aspectos que aumentam a eficiência do equipamento (Kumar & Himabindu, 2019).

Em termos de sustentabilidade a eletrólise tipo PEM dentre as técnicas de eletrólise é a mais adequada para acoplamento direto a fontes de energia renováveis. O rápido tempo de resposta frente ao *input* de energia e produção de H<sub>2</sub> é uma característica versátil para enfrentar as intermitências de produção de energia eólica e solar (Kumar & Himabindu, 2019).

Os desafios desta tecnologia giram em torno da redução dos custos da produção. Os catalisadores utilizados são a base de irídio e platina e inúmeras pesquisas são direcionadas a manutenção da alta eficiência utilizando materiais mais baratos para o ânodo, cátodo e a base do catalisador (Kumar & Himabindu, 2019).

# 2.2.1.1.4 Fotocatálise

A fotocatálise, ou "fotossíntese sintética" como tem sido associada, é uma reação química induzida pela foto-irradiação, seja ela solar ou artificial, na presença de um fotocatalisador. O processo de quebra da água nesse sistema ocorre da seguinte maneira: a irradiação incide sobre a estrutura do semicondutor com o catalisador, onde, a energia absorvida deve ser maior que o *band gap* do semicondutor, promovendo um fluxo de elétrons na estrutura onde ocorrem as reações de oxidação e redução com a quebra da água. A Figura 15 exemplifica esse processo (Tong, *et al.* 2012).



Figura 15. Mecanismo de um semicondutor fotocatalítico.

Fonte: Tong, et al (2012).

Na figura acima, VB representa a camada de valência do material que com a excitação eletrônica se torna deficiente em elétrons, causando a oxidação da água. CB é a zona de condução do material onde há um excesso de elétrons, promovendo a redução dos íons H<sup>+</sup> para hidrogênio molecular. A reação geral é descrita pela Equação 2 (Oliveira, 2015).

$$H_2 O + 2\gamma \rightarrow H_2 + \frac{1}{2}O_2$$

#### Equação 2

Nessa equação,  $\gamma$ , representa a formação dos sítios positivos e negativos da série de semirreações que ocorrem para atingir a energia livre de Gibbs necessária (237,18 kJ/mol) com o potencial reversível (1,23 V). A luz nesse caso pode ser fornecida através de inúmeros comprimentos de onda visando atingir esses valores. A utilização de técnicas para aumentar a eficiência da absorção da irradiação e eficiência da reação são os principais focos de estudo nessa tecnologia (Acar, *et al.* 2014).

Os principais desafios para amadurecimento dessa técnica se encontram na limitação de *band gap* para os foto catalisadores, o que causa uma baixa taxa de produção de H<sub>2</sub>. Aplicação de agentes de sacrifício, catálise heterogênea e co-catalisadores são as estratégias mais promissoras estudadas para contornar a

desativação dos sítios de reação e aumentar a eficiência das reações parciais (Molinari, *et al.* 2014).

#### 2.2.1.1.5 Termólise

A termólise da água é a dissociação da água com aplicação de calor. Diferente das estratégias discutidas até agora que visam minimizar ou otimizar o processo de quebra, a termólise é um processo mais intensivo em energia, aplicando calor em temperaturas entre 2200 e 2700 °C (Younas, *et al.* 2022). A equação a seguir representa esse processo:

 $2H_2O$  calor  $\rightarrow 2H_2 + O_2$ 

#### Equação 3

Em pressões de 1 bar o processo consegue atingir 64% de taxa de dissociação. Nas condições de operação, o processo tem desafios na purificação, exigindo materiais de separação não convencionais ou resfriamento para que então ocorra a separação do oxigênio e hidrogênio, além de equipamentos que resistam as altas temperaturas (Younas, *et al.* 2022).

Experimentos utilizando irradiação solar provaram uma taxa de dissociação de 90% evitando também a recombinação das moléculas. Entretanto, embora seja um processo sem muitas etapas, a termólise e plasmólise, que será discutida em seguida, são tecnologias que podem se beneficiar das metas mundiais para uso de energia renovável. A utilização em sistemas de geração local, podem ser um ramo de mercado a ser explorado por essas tecnologias ainda não maduras. O principal entrave, cujo é justamente a parte energética, que pode ser superado caso o preço da energia renovável favoreça sua utilização ou esteja disponível em abundância. Atualmente são tecnologias pouco comentadas para produção em larga escala, mas que estão no radar de possibilidades a serem desenvolvidas para produção de hidrogênio renovável (Younas, *et al.* 2022).

# 2.2.1.1.6 Plasmólise

Plasmólise é uma tecnologia onde a matéria prima em estado líquido ou vapor passa por um reator onde há a formação de um plasma que quebra o composto em substâncias menores. Esse tipo de reator é composto por um tubo com a presença de eletrodos de alumínio em volta e um catalisador de Ru, Au, Pd,

Ni, ou Rh dentro do sistema. Diversos tipos de matéria prima podem ser utilizados, juntamente com um gás inerte, como: água, metanol, etanol e outros hidrocarbonetos leves (Younas, *et al.* 2022). A Figura 16 ilustra o equipamento base dessa técnica.





#### Fonte: Autor.

Estima-se que os reatores dielétricos com barreira de descarga sejam os mais adequados para produções em larga escala pois se adaptam melhor para maiores *input*s de energia. Reatores de micro plasma também tem sido estudado recentemente para sistemas de produção local podendo ser utilizados com baterias (Yao, *et al* 2020).

Em síntese, dependendo da matéria prima utilizada existem diversas configurações de plasma que amplificam a eficiência de produção. Assim como nas tecnologias anteriormente discutidas, a etapa de purificação e pureza do produto do reator são um desafio de engenharia dessa tecnologia, existindo estudos que focam na cinética dessas reações para melhor controle de qualidade. PSA (*Pressure Swing Adsorption*) e armadilha de gelo são citadas como tecnologias para purificação do gás de produto. Todavia, o número de autores que trabalha nessa linha ainda é limitado e a tecnologia ainda se encontra em nível de bancada (Yao, *et al* 2020).

#### 2.2.1.1.7 Ciclos termoquímicos

Ciclos termoquímicos para quebra da água são baseados em uma série de reações intermediárias onde os compostos usados nas reações são todos reciclados, deixando na reação geral apenas a entrada de água e saída de oxigênio e hidrogênio. Eles são divididos em duas categorias, presentes na Figura 17: ciclos termoquímicos puros que utilizam apenas calor para as reações e os ciclos termoquímicos híbridos, quando há o uso de eletricidade nas reações intermediárias (Spek, *et al.* 2022).





Fonte: Spek, et al. (2022).

Essa técnica é vista como uma tecnologia de longo prazo para uso sustentável na produção de H<sub>2</sub>. Os processos além das macros categorias de híbrido ou puro são divididos em ciclos de duas etapas, multe etapas e mecanismos híbridos. À medida que o número de etapas aumenta a temperatura requerida de operação é diminuída. Desde a década de 70, onde ocorreu o primeiro congresso relacionado ao tema, inúmeros ciclos de reações foram identificados. Entretanto, os mais avançados são: o ciclo híbrido de enxofre, ciclo de cobre-cloro, ciclo de enxofre-iodo, e o ciclo de óxido de zinco e zinco, este último acoplado a reatores de concentração solar (Spek, *et al.* 2022).

Em termos técnicos, a tecnologia possui as vantagens de reuso dos materiais e possibilidade de produzir um hidrogênio de baixo custo em larga escala usando integração com energia solar ou nuclear, com fatores de capacidade de 20-28%). Em contrapartida, as altas temperaturas de operação, entre 500 e 2000°C, atualmente causam dificuldades para duração dos equipamentos, causando a degradação da planta e por se tratar de um processo essencialmente térmico, onde há presença de uma série de reações de troca de calor, a eficiência do sistema é considerada baixa. Os ciclos com enxofre em específico possuem o desafio de lidar com corrosão (Komatsu, 2018).



Figura 18. Integração solar com ciclo termoquímico.

Fonte: Budama et al. (2020).

A Figura 18 ilustra o funcionamento de uso de espelhos com o intuito de concentrar energia solar para funcionamento do ciclo. A possibilidade também do uso do calor da energia nuclear torna esse processo com grande potencial de sustentabilidade na produção. As Figuras 19 e 20 ilustram o funcionamento de algumas reações de ciclos (Komatsu, 2018).





Fonte: Komatsu (2018).





Fonte: Autor.

# 2.2.1.2 Processos com biomassa

# 2.2.1.2.1 Gaseificação

Gaseificação é um processo antigo para produção de H<sub>2</sub>, entretanto a matéria prima utilizada principalmente na Europa é o carvão. A utilização de biomassa nesse processo implica em mudanças que impactam na qualidade e na eficiência de produção do gás de produto do reator. Dessa maneira, deve ser avaliado tanto o potencial da biomassa e a quantidade necessária de processamento para se atingir um custo competitivo do H<sub>2</sub> produzido. Em larga escala essa tecnologia possui boa performance econômica, entretanto, deve ser analisada as melhores condições de operação do sistema e confiabilidade da biomassa (Castro *et al.* 2022).

Existem 3 reatores para essa tecnologia: *entrained flow, fluidized bed, e fixed bed.* A diferença entre esses equipamentos está no processo de queima da biomassa (700 – 1200 °C) além de alguns fatores de *design* que facilitam a decomposição dos compostos carbonáceos, dependendo da composição e tamanho das partículas. A Figura 21 ilustra as etapas presentes no processo de gaseificação da biomassa (Castro *et al.* 2022).



Figura 21. Esquema genérico de reator para gaseificação da biomassa.

Fonte: Younas, et al. 2022.

Uma série de reações ocorre nesse processo partindo desde a secagem da biomassa, retirando umidade, até a sua decomposição com o processo de pirólise e em sequência as reações de oxidação e redução. Ao longo dessas etapas *tar* e *char*, resíduos, são formados, representando frações pequenas de compostos pesados da biomassa. O *tar* é um componente viscoso enquanto o *char* é um resíduo sólido. A variabilidade da formação desses compostos depende das temperaturas de operação, tipo do reator e biomassa. No geral, o gás de produto gerado do reator é composto por monóxido de carbono e H<sub>2</sub>, com a presença de dióxido de carbono, metano e traços de outros hidrocarbonetos além enxofre. Este último exige uma atenção no processo de purificação visto que causa envenenamento de catalisadores e corrosão nas etapas que sucedem o reator (Lora *et al.* 2009).

Em termos de sustentabilidade a tecnologia se beneficia do uso do CO formado nas etapas de *downstream* do processo, em que o gás de produto passa por um processo de reforma para aumentar a produção de H<sub>2</sub>. Além disso, o fato de a biomassa capturar CO<sub>2</sub> durante seu crescimento favorece a um balanço mínimo de emissão de acordo com análises de ciclo de vida (Lora *et al.* 2009; Santana *et al.* 2021).

Em suma, o processo de gaseificação apresenta um TRL, em outras palavras um nível de maturidade tecnológica, mediano visto que existem inúmeros potenciais de melhorias, como: avaliação de uso de catalisadores para diferentes tipos de biomassa; condições de operação; *design* de reatores; processos de purificação do gás; degradação dos equipamentos. O custo médio do hidrogênio é atrelado diretamente a capacidade de produção da planta, existindo viabilidade com vazões consideráveis biomassa no sistema, o que exige uma disponibilidade da biomassa (Mutlu *et al.* 2020).

# 2.2.1.2.2 Pirólise

A pirólise da biomassa possui, em termos de interesse, diversas similaridades com a gaseificação. Devido ao fato de a matéria prima ser renovável gerando um H<sub>2</sub> de custo efetivo num sistema ideal. A operação da pirólise se caracteriza pelo aquecimento da biomassa na ausência de oxigênio em temperaturas que variam entre 400 e 600 °C. Diferente da gaseificação existem três produtos principais, sendo eles: um gás de produto com composição similar ao da gaseificação; um bio-óleo; e um resíduo sólido (*char*) (Hu *et al.* 2019).

A divisão de formação dos produtos da pirólise é definida pelas estratégias de operação, existindo a pirólise lenta, pirólise intermediária e pirólise rápida. O tempo de residência e qualidade dos produtos é o que difere as técnicas. Na pirólise lenta, produtos sólidos e o gás de produto são os principais produtos extraídos. A pirólise intermediária, operada em 10 segundos em média, gera rendimentos maiores para os líquidos de produto. Por último, a pirólise rápida, ocorrendo em poucos segundos permite o cenário de maior rendimento possível para produtos líquidos (Hu *et al.* 2019). A Figura 22 ilustra o sistema.



#### Figura 22. Esquema de pirólise da biomassa

Fonte: (Hu et al. 2019).

Em decorrência da presença de produto líquido no processo, através da técnica de queima da biomassa, a gaseificação se mostra mais eficiente para produção direta do H<sub>2</sub>. Todavia, em termos do conceito de *Power-to-X* é válido o estudo dos compostos que podem ser extraídos do bio-óleo e que possam atuar tanto para produção de H<sub>2</sub> concomitantemente com a geração de outros produtos. A biorrefinaria multiproduto nesse cenário é o mais ideal e deve ser avaliado a partir das métricas de escolha que irão depender do tipo da biomassa e os produtos possíveis de extrair (Nasir *et al.* 2013).

Assim como na gaseificação, existem diversos desafios de engenharia para que haja maturidade tecnológica na produção de H<sub>2</sub> utilizando a pirólise. Ainda em pesquisa, a estratégia de co-pirólise indica um aumento de eficiência na produção de hidrogênio do gás de produto. Por se tratar de uma matéria com inúmeros componentes, a pirólise também exige uma purificação do gás para atingir a qualidade alta do H<sub>2</sub> produzido. Degradação dos equipamentos devido as altas temperaturas de operação, desativação de catalisadores, variabilidade da biomassa e os resíduos sólidos e líquidos gerados são alguns dos principais desafios (Shahabuddin *et al.* 2020).

#### 2.2.1.2.3 Biohidrogênio

O processo de produção de biohidrogênio abrange algumas tecnologias que se enquadram bem com a dinâmica de economia circular. A razão dessa característica é a interligação entre os diferentes subprodutos e produtos gerados ao longo de uma cadeia de produção, e que funcionam como matéria prima de outro processo. Em contrapartida, para que seja atingida essa interligação é necessária uma cadeia logística interligada e eficiente que promova esse processo (Dahiya *et al.* 2021).

Existe uma gama de matérias primas que podem ser utilizadas para produção do biohidrogênio, partindo de biomassa de primeira geração (plantas oleosas e colheitas agrícolas ricas em açúcar), segunda geração (resíduos de florestas, indústrias, residências e resíduos ricos em matéria orgânica) e terceira geração (algas e culturas modificadas). Além de ser considerada uma estratégia sustentável potencialmente neutra em carbono, as condições de operação são simples com temperatura ambiente e pressão atmosférica (Dahiya *et al.* 2021).

Os métodos mais estudados são a fermentação escura, foto fermentação, e eletro-biohidrogenação. Cada uma dessas tecnologias possui suas vantagens e desvantagens em termos de eficiência de produção e capacidade de lidar com diferentes materiais orgânicos. Elas diferem entre si pelos mecanismos fermentativos e condições de meio de cultura, com a fermentação escura de maior destaque para performance econômica. A literatura apresenta um consenso de que a estratégia adequada para uma economia baseada em H<sub>2</sub> seria mais bem aproveitada com a ligação da fermentação escura seguido de outra técnica de processo fermentativo. A Figura 23 esquematiza esse processo (Saratale *et al.* 2019).



# Figura 23. Esquema da economia de H<sub>2</sub> usando processos fermentativos

Fonte: Dahiya et al. (2021).

As técnicas promissoras comentadas, embora com diversos estudos na área, ainda são consideradas tecnologias de longo prazo. Alguns desafios comuns aos métodos giram em torno da sensitividade dos sistemas e baixa eficiência de produção, grandes requisitos de área, limitações dos reatores, a pureza dos produtos gerados e tempo de fermentação. O foco dos estudos gira em torno do tratamento adequado do material orgânico a ser fermentado e padronização dos parâmetros de operação. Por se tratar de processos biológicos que envolvem uma série de reações com compostos complexos é necessário o entendimento profundo desses mecanismos e a engenharia genética é a área mais envolvida nesse ramo. O *scale-up* da produção superando esses desafios abre caminho para a viabilidade das biorrefinarias num modelo circular com geração competitiva de H<sub>2</sub> (Saratale *et al.* 2019).

# 2.2.2 Fontes Fósseis

A utilização de combustíveis fósseis, consolidada atualmente, permite o uso de diferentes hidrocarbonetos como: gás natural (principal), hidrocarbonetos líquidos e carvão. Essa variação de matéria prima e os objetivos de uso se divide ao longo de três tecnologias: a reforma a vapor do metano, reforma auto termal e oxidação parcial. As estratégias discutidas possuem suas vantagens e desvantagens entre si e serão discutidas a seguir.

# 2.2.2.1 Reforma a vapor do metano

Com participação de 80% na produção mundial de hidrogênio, a reforma a vapor do metano se inicia com a limpeza do gás ou líquido de hidrocarboneto a ser utilizado para retirada de partes de enxofre, que contaminam catalisadores e afetam a eficiência das reações. As temperaturas no reformador chegam em torno dos 650 e 900 °C e, em seguida, os produtos são encaminhados ao processo de *shift reaction* para posterior purificação. O combustível utilizado para queima (no fornecimento de calor da reação) costuma ser em torno de 30-40% do gás natural total usado na planta (Castro, *et al.* 2023). O fluxograma genérico desse processo é ilustrado na Figura 24.







As reações que ocorrem no reator de reforma e na etapa de *shift reaction* são, respectivamente, descritas nas Equações 4 e 5.

 $\begin{array}{l} CH_4 + H_2 0 \ \leftrightarrow C 0 + \ H_2 \\ C 0 + H_2 0 \ \leftrightarrow C 0_2 + \ H_2 \end{array}$ 

Equações 4 e 5

A reação de quebra do metano possui uma entalpia de 206 kJ/mol enquanto a conversão do CO -41 kJ/mol (Younas, *et al.* 2022).

Em contrapartida ao processo convencional e para atender as políticas de baixo carbono, a reforma com captura de CO<sub>2</sub> veio ganhando destaque nos últimos anos, em especial na União Europeia, principal continente afetado pelas mudanças de estrutura energética no contexto da descarbonização. A compatibilidade das tecnologias de captura, todavia, se adequam tecnicamente melhor a reforma auto termal, uma vez que todo o CO<sub>2</sub> gerado é produzido no mesmo reator, com a junção das reações do processo. Enquanto no processo tradicional em torno de 60% do CO<sub>2</sub> é produzido no reator e o restante na geração de energia para o processo. Essa diferença implica numa captura mais complexa e cara (Castro, *et al.* 2023).

#### 2.2.2.2 Reforma auto termal

A reforma auto termal, assim como a oxidação parcial são processos muito parecidos com a reforma padrão. A diferença nessa tecnologia é a utilização do mesmo reator para as reações de oxidação parcial do hidrocarboneto (exotérmica) e a reação de reforma (endotérmica). Dessa maneira, o processo é intensificado e facilita o sistema de captura de carbono, uma vez que, sem a necessidade de queima do gás natural para suprir o calor da reação endotérmica, a captura pode ser focada após a reação de *shift*. Além disso, as correntes de saída da reforma do gás natural atreladas as eficiências não ideais (não atingem 100%), implicam em correntes com composição variada, o que também implica em maior dificuldade e custo de separação (EPE, 2022). A Figura 24 apresenta o fluxograma genérico da reforma auto termal.



Figura 25. Reforma auto termal do gás natural com captura de CO<sub>2</sub>.



A reação global do processo é descrita na Equação 6.

$$C_n H_m + \frac{1}{2}nH_2O + \frac{1}{4}nO_2 \to nCO + \left(\frac{1}{2}n + \frac{1}{2}m\right)H_2$$

Equação 6

Esse processo exige a utilização do oxigênio puro que, por sua vez, é extraído do ar e exige um processo de purificação que encarece o processo. Estimase que essa técnica para reforma permita uma taxa de captura do dióxido de carbono de 90% ao final de todas as etapas, frente aos 70% estimados para a reforma convencional (EPE, 2022).

# 2.2.2.3 Oxidação Parcial

A oxidação parcial tem a particularidade de ser uma tecnologia que visa a utilização de hidrocarbonetos mais pesados como matéria prima para produção do H<sub>2</sub>. O processo pode ser operado em condições catalíticas ou não, a diferença está nas temperaturas de operação. Quando não há meio catalítico as temperaturas de reação ocorrem em temperaturas de 1300-1500 °C. A Equação 7 e Figura 26 ilustram a reação global na presença de catalisador e o processo, respectivamente, sem catalisador a reação segue a reforma padrão (Holladay *et al.* 2009).

$$C_n H_m + \frac{1}{2}O_2 \rightarrow nCO + \frac{1}{2}mH_2$$

Equação 7







Hidrocarbonetos do metano à nafta são apropriados ao processo com catalisadores de Ni ou Rh. Para os óleos pesados por outro lado não são recomendados a utilização do catalisador devido a formação de coque com consequente desativação do meio catalítico. Os gastos energéticos nessa planta costumam ser maiores do que das outras técnicas devido a maior dificuldade de quebra das cadeias carbônicas, que nesse caso são maiores. As altas temperaturas de operação e formação de coque são as principais dificuldades de engenharia nesse processo, além da formação de compostos com enxofre após a etapa do reformador (Holladay *et al.* 2009).

# 2.2.2.4 Pirólise de Hidrocarbonetos

Pirólise de hidrocarbonetos é uma técnica que produz hidrogênio através da decomposição da sua matéria prima. Esse processo ocorre sem a presença de água ou oxigênio. Diferentemente das técnicas abordadas anteriormente, a pirólise não envolve água ou oxigênio na reação, consequentemente, não produzindo CO ou CO<sub>2</sub>. Dessa maneira, retirando a necessidade da *shift reaction* e reduzindo significativamente emissões (Holladay *et al.* 2009).

No entanto, caso os materiais usados não forem adequadamente secos, podem ocorrer quantidades significativas de emissões de CO<sub>2</sub> e CO. O processo oferece benefícios como flexibilidade no tipo de combustível usado, sendo relativamente simples e compacto, gerando carbono sólido como subproduto. A equação 8 ilustra a reação do processo (Holladay *et al.* 2009).

$$C_n H_m \to nC + \frac{1}{2}mH_2$$

Equação 8

Um desafio dessa técnica é o potencial acúmulo de carbono, que pode afetar a eficiência do processo, o que exige um *design* apropriado dos reatores. Diante disso, essa técnica ainda é considerada de longo prazo. Entretanto, as vantagens de produção de carbono sólido e baixa emissões de gases associada são vantagens a serem exploradas pela tecnologia no futuro (Holladay *et al.* 2009).

# 2.3 Tecnologias de armazenamento do hidrogênio

2.3.1 Gás comprimido

O método de armazenamento do H<sub>2</sub> através de vasos pressurizados é a tecnologia mais difundida para armazenamentos estacionários e transporte em curtas distâncias, além de ser o método mais simples. O uso dessa tecnologia em ambiente industrial gira em torno de pressões de armazenamento de 200 bar. Entretanto, dependendo dos requisitos e tipo de aplicação, as condições podem ser modificadas (Andersson *et al.* 2019).

Por se tratar de um gás com densidade de 0,083 kg/m<sup>3</sup> em CNTP, a grande quantidade de energia necessária na compressão é o ponto de desvantagem da técnica. No uso padrão, a densidade gravimétrica dos tanques chega a 1% do total para o H<sub>2</sub> armazenado. Diante disso, existem classificações para os diferentes tipos de tanque (I, II, III, IV e V) e seus usos, conforme a Tabela 3 (Muthukumar *et al.* 2023).

Тіро	P (bar)	Descrição	Material	Densidade Gravimétrica (%wt)
I	Até 300	Estocagem de gás industrial e uso estacionário	Aço Inox (316, 304, 304, 316L e 304L); Alumínio (6061 ou 700)	1,7
II	Até 300	Estocagem de gás industrial e uso estacionário, mais leve que o Tipo I	Aço inox ou alumínio revestido com fibra de carbono ou aramida	2,1
Ш	350-700	Aplicação automobilística	Vaso metálico com reforço de resina de fibra	5,0-5,5
IV	700-800	Aplicação automobilística	Vaso polimérico reforçado com fibra de carbono ou aramida	5,0-5,7
V	Até 15	Mais leve que os tipos III e IV	Vaso de material compósito reforçado com fibra	-

Tabela 3. Tipos de tanques pressurizados.

Fonte: (Muthukumar et al. 2023).

Os tanques focados nesse estudo serão de uso I e II, o parâmetro de escolha varia em aspectos de projeto como viabilidade de implementação em relação ao custo e peso. A principal diferença do tanque tipo II é seu custo que pode ser até 1,5 vezes maior que o tipo I e uma redução de peso de 40% (Amaral, 2021).

Em termos de segurança, alguns pontos são chave para esse tipo de armazenamento: válvula *shut-off* para interromper a linha em ocasiões de risco; limitador de vazão para não danificar o sistema com variações abruptas de pressão; válvula de alívio em acidentes com fogo para evitar explosões. Os materiais aplicados conseguem lidar com o fenômeno de *embrittlement* durante seu tempo de vida útil, existindo a possibilidade de falhas em situações de fadiga térmica ou

efeitos mecânicos abruptos, que são fenômenos complexos de ocorrerem em situações normais de uso, o que reforça a utilização do tanque para as condições que foi projetado de carga e descarga (Amaral, 2021).

A etapa de compressão, assim como os materiais dos tanques, varia de acordo com uso e requisitos do sistema. Dessa maneira, três tipos de compressores são aplicados: centrífugo, alternativo e diafragma. O compressor centrífugo é recomendado em para usos de pressões de descarga moderadas e altas vazões. Compressor do tipo pistão (alternativo), é utilizado em vazões relativamente altas e vazões moderadas. Compressores de diafragma possuem características especiais, além de ser recomendado para aplicações de gases inflamáveis devido ao seu sistema que impede vazamentos, exigem menos estágios necessários para atingir as mesmas pressões dos demais tipos de compressores (Andersson *et al.* 2019).

### 2.3.2 Liquefeito

O hidrogênio, no seu estado gasoso, é conhecido por ser inodoro, insípido e incolor. No entanto, dado o seu status como um gás permanente — o que significa que ele não pode ser liquefeito apenas por compressão à pressão atmosférica (1 atm) — condições especiais são necessárias para transformá-lo em hidrogênio líquido. Para alcançar a liquefação, o gás hidrogênio deve ser resfriado até a sua temperatura crítica, que está em aproximadamente -240°C. Uma vez liquefeito, é essencial armazenar o hidrogênio líquido em recipientes a vácuo mantidos abaixo do seu ponto de ebulição, que está por volta de -253°C (Ahluwalia *et al.* 2023).

A transição para a fase líquida acarreta mudanças notáveis nas propriedades do hidrogênio, particularmente o aumento de sua densidade. Na tabela 4, é apresentada uma visão geral das principais propriedades do hidrogênio líquido (Aziz, 2022), esclarecendo as características e comportamentos que o tornam um componente essencial em várias aplicações tecnológicas (Ahluwalia *et al.* 2023).

Propriedade	Unidade SI	Valor
Densidade	kg/m³	70,85
Densidade volumétrica de energia	kWh/L	2,36
Densidade gravimétrica de energia	kWh/kg	33,30
Calor de evaporação	kJ/kg	446,00
Calor de orto- para para- hidrogênio (-253 °C)	kJ/kg	703,00

#### Tabela 4. Propriedades H<sub>2</sub> líquido

Fonte: (Aziz, 2021).

Um aspecto essencial a considerar no contexto do armazenamento do hidrogênio líquido é a presença de isômeros. O hidrogênio exibe dois isômeros de spin distintos, nomeadamente orto-hidrogênio e para-hidrogênio. No orto-hidrogênio, ambos os prótons dentro dos núcleos dos átomos de hidrogênio giram na mesma direção, enquanto no para-hidrogênio, inversamente, envolve prótons com orientações de spin opostas. Essa diferença nas configurações de spin leva a variações sutis nas propriedades físicas, térmicas, magnéticas e ópticas, que, por sua vez, impactam o processo de resfriamento necessário para a liquefação (Ahluwalia *et al.* 2023).

Esses isômeros coexistem em equilíbrio, com sua distribuição de concentração sendo dependente da temperatura. Em temperaturas extremamente baixas, o orto-hidrogênio em forma líquida torna-se instável e se transforma prontamente em para-hidrogênio, resultando na vaporização do hidrogênio líquido devido ao calor gerado por essa conversão de isômero. No estado gasoso, sob condições atmosféricas padrão (20°C e 1 atm), a razão de concentração é tipicamente de 75% de orto-hidrogênio para 25% de para-hidrogênio. No entanto, à medida que as temperaturas diminuem, a concentração de para-hidrogênio se aproxima de quase 100% devido ao seu estado de energia mais baixo (Ahluwalia *et al.* 2023).

O processo de liquefação do hidrogênio envolve três etapas principais: compressão, expansão e estrangulamento, que são combinadas dentro de um ciclo. Nas seções subsequentes, são descritas três tecnologias chave utilizadas para a liquefação do hidrogênio (Ahluwalia *et al.* 2023).

### 2.3.2.1 Linde Hampsom

O ciclo de Linde-Hampson (L-H), conhecido por sua simplicidade, foi inicialmente desenvolvido e amplamente utilizado para a liquefação do ar. Nesse processo, o gás à temperatura ambiente é primeiro comprimido e depois resfriado através de troca de calor. Subsequentemente, o gás comprimido e resfriado passa por uma expansão Joule-Thomson isentálpica por meio de uma válvula de estrangulamento.

Neste ciclo, a expansão Joule-Thomson (J-T) é empregada para baixar a temperatura do hidrogênio. No entanto, é importante notar que a eficiência da expansão J-T diminui quando se lida com gases que têm temperaturas de inversão mais baixas que a temperatura ambiente. O hidrogênio, em particular, tem uma temperatura de inversão de -73,15°C. Para resolver isso, o hidrogênio é comprimido a pressões mais altas e resfriado abaixo de sua temperatura de inversão antes da etapa de expansão. A Figura 27 ilustra um diagrama de fluxo de um único estágio.

Figura 27. Ciclo de um estágio.



Fonte: (Aziz, 2021).

# 2.3.2.2 Ciclo Claude

No ciclo de liquefação Claude, um expansor adicional é introduzido ao ciclo básico de Linde Hampson (L-H) para melhorar a eficiência da redução da temperatura por meio de uma etapa de expansão isentrópica em vez de expansão Joule-Thomson. O processo envolve o resfriamento de hidrogênio gasoso comprimido usando múltiplos trocadores de calor, com um motor de expansão colocado entre eles. Parte do gás comprimido é direcionada ao motor de expansão para auxiliar no resfriamento do restante do gás (Aziz, 2021).

Em teoria, o processo de compressão mantém uma temperatura constante, enquanto o processo de expansão mantém a entalpia constante. No entanto, o uso prático do motor de expansão para condensação é desaconselhado devido ao potencial dano causado pela substância liquefeita. Em vez disso, o motor de expansão é empregado para expandir uma parte do hidrogênio de alta pressão, levando a uma temperatura mais baixa do hidrogênio. Este hidrogênio resfriado é então misturado com outro fluxo de hidrogênio frio a uma temperatura mais baixa, e a mistura passa por uma troca de calor adicional com o hidrogênio de alta pressão dentro do trocador de calor. A Figura 28 fornece uma ilustração do fluxo geral do processo (Yang & Ogden, 2008).





Fonte: (Aziz, 2021).

# 2.3.2.3 Collins Helium

No ciclo Collins-Helium, o gás hélio desempenha um papel crucial como agente de resfriamento para o hidrogênio. O processo principal assemelha-se ao ciclo de Linde-Hampson, apresentando etapas de troca de calor após a fase de compressão e uma válvula de expansão para produzir hidrogênio liquefeito. A representação geral desse processo é ilustrada na Figura 29 (Aziz, 2021).



Figura 29. Ciclo Collins Helium

O ciclo começa com a compressão do gás hidrogênio, tipicamente empregando um compressor de múltiplos estágios. Posteriormente, o hidrogênio comprimido flui através de uma série de trocadores de calor. Nestes trocadores de calor, o hidrogênio é gradualmente resfriado pela troca de calor com o gás hélio, que atua como um refrigerante. O processo de troca de calor leva a uma redução significativa na temperatura, aproximando o hidrogênio do seu ponto de liquefação (Aziz, 2021).

Após as etapas de troca de calor, o hidrogênio resfriado é direcionado para uma válvula de expansão. Aqui, a pressão é substancialmente reduzida, causando uma expansão adiabática. Esta expansão resulta em uma queda adicional de temperatura, levando finalmente à liquefação do hidrogênio. O hidrogênio líquido condensado pode então ser armazenado ou utilizado para várias aplicações (U.S. Department of Energy, 2004).

A utilização de hélio neste ciclo como um meio de resfriamento permite um resfriamento eficiente do hidrogênio, tornando-o uma escolha prática para a liquefação do hidrogênio, especialmente quando temperaturas extremamente baixas

Fonte: (Aziz, 2021).

são necessárias para aplicações em diversos campos científicos e industriais (Aziz, 2021).

#### 2.3.3 Estruturas geológicas

O armazenamento subterrâneo apresenta uma alternativa convincente, especialmente quando se lida com quantidades significativas de hidrogênio. Embora essa abordagem de armazenamento tenha se mostrado eficaz para gases como CO<sub>2</sub> e metano, a viabilidade de utilizá-la para o hidrogênio permanece como um tema de pesquisa em andamento entre especialistas. A literatura existente frequentemente destaca três métodos convencionais de armazenamento geológico: cavernas de sal, reservatórios de petróleo e gás esgotados e aquíferos salinos. As seções subsequentes irão explorar as características e os aspectos técnicos de cada tipo de armazenamento individualmente (Fangxuan *et al.* 2023).

# 2.3.3.1 Cavernas de Sal

As cavernas de sal são altamente versáteis, capazes de armazenar várias substâncias, particularmente gases específicos sob altas pressões. Essas escavações cilíndricas, feitas pelo homem, estão situadas dentro de espessos depósitos de sal subterrâneos e são construídas por um processo controlado conhecido como mineração por solução. As cavernas de sal podem atingir dimensões impressionantes, com profundidades de até 2000 metros, volumes excedendo 1.000.000 de metros cúbicos, alturas variando de 300 a 500 metros e diâmetros que vão de 50 a 100 metros, permitindo que acomodem quantidades substanciais de gás. Tipicamente, para Armazenamento Subterrâneo de Hidrogênio (ASH) em cavernas de sal, as pressões operacionais ficam dentro da faixa de 30% a 80% da pressão litostática, que é a pressão acumulada do peso do sobrecarregamento ou da rocha sobrejacente sobre a formação rochosa (Zivar *et al.* 2021).

Os atributos geológicos únicos das cavernas de sal, caracterizados por sua impermeabilidade, propriedades mecânicas favoráveis do sal e resistência a reações químicas, as posicionam como uma escolha prática e confiável para armazenamento de hidrogênio. Além disso, as propriedades viscoplásticas das rochas evaporíticas realçam suas capacidades de vedação, enquanto a estabilidade mecânica inerente
das cavernas de sal as torna adaptáveis e adequadas para armazenamento tanto de médio quanto de curto prazo, apoiando processos flexíveis de injeção e retirada de hidrogênio. Adicionalmente, as condições de alta salinidade dentro dessas cavernas atuam como um impedimento natural ao consumo microbiano de hidrogênio. Consequentemente, as cavernas de sal se destacam como uma solução robusta para enfrentar os desafios do armazenamento de hidrogênio em larga escala, alinhando-se aos objetivos de desenvolvimento de infraestrutura de energia limpa e sustentável (Zivar *et al.* 2021).

## 2.3.3.2 Campos de petróleo e gás esgotados

A utilização de campos de petróleo e gás esgotados para armazenamento de hidrogênio implica na reutilização de reservatórios de hidrocarbonetos, que são armadilhas geológicas contendo hidrocarbonetos, tipicamente cobertas por uma capa impermeável e suportadas por um aquífero na parte inferior ou nas bordas. Reservatórios de hidrocarbonetos esgotados destacam-se como opções altamente adequadas para armazenamento subterrâneo de gás devido às suas estruturas geológicas bem definidas, estanqueidade da capa de rocha e a presença de infraestrutura de superfície e subsuperfície já existente. Reservatórios de gás esgotados, em particular, oferecem uma riqueza de informações geológicas e integridade comprovada da capa de rocha, tornando-os uma opção bem caracterizada para armazenamento de hidrogênio. O gás remanescente dentro de um reservatório de gás esgotado pode servir como um gás almofada, embora apresente desafios relacionados à pureza do hidrogênio se não for gerenciado com cuidado. Planejamento estratégico e a cessação da extração de gás em um momento ótimo são considerações críticas durante o projeto da instalação, acelerando a configuração do armazenamento enquanto minimiza custos (Zivar et al. 2021).

Ao converter um reservatório de petróleo esgotado em um local de armazenamento de hidrogênio, um estudo abrangente se torna essencial, especialmente quando óleo residual permanece no reservatório. Esse óleo residual pode aumentar o potencial para reações químicas, incluindo a conversão de hidrogênio em metano, e introduzir interações multicontato entre o hidrogênio e o óleo na sua interface, potencialmente comprometendo a pureza do hidrogênio. Além

63

disso, a dissolução de hidrogênio no óleo remanescente pode resultar em perda de hidrogênio. Como resultado, um planejamento meticuloso e avaliação são de suma importância para garantir a transição bem-sucedida de um reservatório de petróleo esgotado em uma instalação eficaz de armazenamento de hidrogênio (Zivar *et al.* 2021).

# 2.3.3.3 Aquífero

O armazenamento de hidrogênio em aquíferos salinos representa outro caminho promissor dentro do âmbito das soluções de armazenamento subterrâneo de hidrogênio. Aquíferos salinos são vastas formações geológicas subterrâneas caracterizadas por alta porosidade e permeabilidade, idealmente adequados para armazenar gás hidrogênio. Neste método, o hidrogênio é injetado nesses aquíferos, deslocando a salmoura ou água salina já presente. Aquíferos salinos oferecem uma solução de armazenamento custo-efetiva e segura, já que suas camadas de capa rochosa impermeáveis atuam como selos naturais para prevenir a fuga de gás. A utilização de aquíferos salinos para o armazenamento de hidrogênio contribui significativamente para a capacidade total de armazenamento de energia de hidrogênio em grande escala, facilitando a estabilidade da rede e apoiando a transição para a energia limpa (Zivar *et al.* 2021).

É necessário compreender as avaliações geológicas para identificar formações de aquíferos adequadas e garantir sua integridade. Isso inclui a caracterização das propriedades do reservatório, perfuração de poços de injeção e extração, e o desenvolvimento de protocolos de monitoramento e segurança. Adicionalmente, sistemas de compressão e descompressão de gás são essenciais para facilitar os processos eficientes de injeção e recuperação (Zivar *et al.* 2021).

## 2.3.4 Compostos sólidos

O armazenamento com base em materiais (compostos sólidos) para hidrogênio é considerado como uma solução de armazenamento para longo prazo, visto que o nível de TRL das tecnologias associadas ainda se encontra entre 4/5. Além disso, o foco das pesquisas ainda se encontra em prova de conceito e melhorias que potencializem as vantagens, consequentemente, a viabilidade da estratégia empregada. Empresas que fornecem equipamentos desse tipo fornecem em escala de bancada que, apesar de apresentarem altas densidades gravimétricas e volumétricas (comparadas ao H<sub>2</sub> liquefeito e comprimido), ilustrados na Figura 30, inúmeros problemas de irreversibilidade, cinéticas lentas são presentes nas tecnologias a base de material (Ren *et al.* 2017).





Fonte: Ren et al. (2017).

No geral, dois grandes blocos dividem o armazenamento baseado em material, ilustrados na Figura 31, o armazenamento por fissorção (adsorção), utilizando interações fracas de Van der Waals, e o armazenamento por quimissorção (absorção), com ligações químicas dos diferentes compostos com o H<sub>2</sub> (Ren *et al.* 2017).



Figura 31. Tecnologias para armazenamento de H<sub>2</sub>.

Fonte: Hassan et al. (2021).

A principal diferença entre a adsorção e absorção está na fenomenologia associada; em processos adsortivos a substância (nesse caso o H<sub>2</sub>) interage com a superfície do material/estrutura do adsorvedor. Na absorção, o H<sub>2</sub> é incorporado quimicamente ao volume do material absorvedor – funcionando como uma espécie de esponja química – na adsorção o exemplo seria um aprisionamento físico para o gás. Consequentemente, a energia associada para liberação/armazenamento chega a ser 10 vezes maior para a absorção em comparação com a adsorção (50-100 kJ/mol e 4-10 kJ/mol, respectivamente). Para fins práticos, em caso de estações de abastecimento, isso acarreta mudanças de temperaturas do gás que devem ser levadas em consideração para operação, especialmente em decorrência das propriedades químicas e físicas do H<sub>2</sub>, que o tornam um gás perigoso que exige um padrão de segurança (Hassan *et al.* 2021).

#### 2.3.5 Amônia

Amônia é um dos carreadores líquidos de destaque para a categoria de converter H<sub>2</sub> seja considerado para transporte e reconversão ou como uso final, sendo avaliado para fins automobilísticos também. A síntese convencional utiliza o processo Haber-Bosch, que opera em pressões de 15 a 25 MPa e temperaturas de 300 a 550 °C, com algumas variações de configurações existentes para operação da planta. O processo, que envolve utilização de hidrogênio e nitrogênio como principais reagentes, utiliza o gás natural como fonte do H2 numa razão de 0,6 (ton Gás natural/ton NH<sub>3</sub>). Como esperado, outras fontes de hidrogênio (biomassa, biocombustíveis) ser eletrólise е podem acopladas а visando planta sustentabilidade, entretanto, é difícil de atingir competitividade em virtude dos custos associados a matéria prima para que o H2 seja fornecido ao processo de síntese (Jackson, et al. 2020).

Do total da amônia produzida mundialmente, 85% é direcionado ao mercado de fertilizantes (em torno de 200 milhões de ton/ano). Apesar de ser um processo consolidado no mercado, o processo de síntese e decomposição (no cenário de transportador de H<sub>2</sub>) é energeticamente intensivo. Além disso, o processo de decomposição da amônia não existe em larga escala, sendo presente no mercado de fornos elétricos em menor escala que geram H<sub>2</sub> e N<sub>2</sub>. Diversos estudos por outro lado avaliam o cenário de larga escala e opções de separação com membrana, simulações computacionais e escala de bancada, sendo ainda necessário maior investigação para viabilidade prática desses processos (Jackson, *et al.* 2020).

Em termos técnicos, a densidade gravimétrica de H<sub>2</sub> na amônia é de 17,7 wt%, sendo superior a outros métodos de conversão química/física. A densidade volumétrica segue o mesmo padrão com 120,3 kg H<sub>2</sub>/m<sup>3</sup> de amônia. Sendo a temperatura de ebulição e fusão -33,35 ° C e -77,7 ° C, respectivamente, o armazenamento líquido é mais fácil de se obter (10 bar e temperatura ambiente) do que o H<sub>2</sub> liquefeito, sendo mais barato nessa comparação. Entretanto, a toxicidade associada deve ser levada em consideração no manuseio, sendo o contato com o ser humano danoso e em casos extremos fatal além das emissões de NO<sub>x</sub> em contato com chama (Cui & Aziz, 2023).

Sua decomposição exige 2,79 kJ/mol de H<sub>2</sub> no cenário ideal. Catalisadores novos são avaliados para otimização desse processo, sendo atualmente o foco de

pesquisas relacionados ao tema. Outra forma de decomposição é através da eletrólise com uma voltagem teórica de 0,06 V, bem menor que os 1,23 V para a água, entretanto esse modelo está sendo pouco discutido na literatura. Modelagens voltadas para o transporte do H<sub>2</sub> através de amônia estimam uma taxa de recuperação de 69,5 % a partir da mistura H<sub>2</sub>-N<sub>2</sub> da decomposição, com parte do H<sub>2</sub> sendo utilizado como combustível para a reação. Do balanço energético, considerando a etapa de síntese, 13% da energia total do H<sub>2</sub> produzido é utilizado, sendo necessário avaliar o impacto dos outros processos na cadeia produtiva até a entrega do produto para ter entendimento da viabilidade ou não em termos energéticos (Cui & Aziz, 2023).

## 2.3.6 Carreadores de líquidos orgânicos para hidrogênio

Os transportadores ou Carreadores de Líquidos Orgânicos para Hidrogênio (LOHCs) emergiram como uma solução de vanguarda na busca por tecnologias sustentáveis de armazenamento de energia. Esses compostos, seja em estado líquido ou sólidos de baixo ponto de fusão, exibem a capacidade de sofrer processos reversíveis de hidrogenação e desidrogenação sob temperaturas elevadas impulsionados pela presença de um catalisador. Os LOHCs, em contraste com os combustíveis fósseis convencionais e os combustíveis circulares baseados em CO<sub>2</sub>, mantêm sua estrutura molecular inicial mesmo após a liberação de hidrogênio recarregável. Essa estabilidade inerente é uma característica crucial que diferencia os LOHCs no âmbito do armazenamento de energia. Diferentemente dos combustíveis tradicionais, que são completamente convertidos, o que possibilita sua reutilização em múltiplos ciclos (Byun *et al.*, 2022).

A preservação da estrutura central dos LOHCs apresenta vantagens significativas. Primeiramente, ela elimina a necessidade de produção contínua de novos transportadores após cada ciclo. Isso não apenas reduz os custos operacionais, mas também minimiza o impacto ambiental associado aos processos de produção. Além disso, a integridade estrutural garante desempenho ao longo do uso prolongado, contribuindo para a longevidade e eficiência dos sistemas de armazenamento de energia que utilizam LOHCs (Byun *et al.*, 2022).

Vários tipos de LOHCs têm sido estudados, incluindo dibenziltolueno, 1,2dimetilindol, 7-etilindol, N-etilcarbazol, peridro-NEC, peridro-dibenziltolueno, tolueno, metilciclohexano, CO<sub>2</sub>-metanol e amônia. Esses sistemas de LOHC passam por processos catalíticos de hidrogenação e desidrogenação, e a escolha depende de fatores como capacidade de armazenamento de hidrogênio, ponto de ebulição, ponto de fusão e aspectos de custo. As claras vantagens destes carreadores incluem sua compatibilidade com a infraestrutura de combustível existente e sua capacidade de armazenar hidrogênio com poucas perdas, mesmo a longo prazo ou durante transporte ultramarino em condições padrão. A Tabela 5 fornece as substâncias que são possíveis LOHCs.

Tabela 5. Compostos químicos com potencial para serem carreadores de líquidos

OI	g	ar	110	CC	5.	

LOHC	Razão para considerer uso		
N-etilcarbazol	Compostos nitrogenados bem avaliados		
Dibenziltolueno	Casos existentes de aplicação como LOHC; Seguro		
	e bom manuseio		
12-di-hidro-12-azaborina	Características únicas através da interação Boro-		
	Nitrogênio		
Ácido fórmico	Seguro e bom manuseio		
Metanol	Alta densidade gravimétrica		
Naftaleno	Ciclo alcanos bem estudados; alta densidade		
	gravimétrica		
Tolueno	Ciclo alcanos bem estudados; planejado para uso		
	em longo prazo de LOHC e aplicado em diversos		
	estudos de caso.		
Fenazina	Estabilidade promissora e uso de matérias-primas		
	sustentáveis		
	Fonte: Byun <i>et al.</i> (2022).		

2.4 Tecnologias de transporte do hidrogênio

2.4.1 Caminhão

Uma carreta de cilindros de hidrogênio consiste em uma série de vasos pressurizados compactados num contêiner para transporte do gás. As características variáveis desse transportador podem ser as pressões de armazenamento (100-500 bar, dependendo da legislação local), o material do vaso e a organização dos cilindros (Reddi *et al.* 2018).

Dependendo da pressão e tipo do tanque, o espaçamento e capacidade máxima de transporte de hidrogênio irá variar. A melhor configuração é função

dependente da carga a ser transportada, com tanques tipo I e II sendo mais baratos e capacidade máxima de carga menor, em comparação com os tipos III e IV mais caros. A Figura 32 ilustra algumas configurações dos cilindros reconhecida por norma internacional (Reddi *et al.* 2018).



Figura 32. Configuração de cilindros no caminhão transportador.

Fonte: Reddi et al. (2018).

O limite de carga para automóveis pesados em estradas e meios urbanos é variável para cada país, sendo recomendada a consulta em cada cenário. Com o advento das pautas para economia do hidrogênio no Brasil, espera-se o reforço ou atualização dos padrões existentes nos próximos anos conforme novos padrões surgem. Atualmente a NBR 12176 (Cilindros para gases) e a resolução ANTT nº 5.849 (transporte terrestre de produtos perigosos), juntamente com suas complementações, podem servir de auxílio.

Um exemplo de caminhão comercial é ilustrado na Figura 33. Constituído por: 1 – Contêineres de cilindros; 2 – Cilindros tipo III; 3 – Válvulas para altas pressões; 4 – Dispositivo de alívio de pressão; 5 – Painel de controle; 6 – Recursos de segurança; 7 – Sistema de carga e descarga. Em média a quantidade de hidrogênio é de 300 kg, com modelos variando entre 200 e 500 kg (Bayotech, 2022).



Figura 33. Modelo de carreta de cilindros comercial Bayotech.

Fonte: Bayotech (2022).

# 2.4.2 Gasoduto

O transporte de hidrogênio através de gasodutos é a estratégia melhor custoefetiva para grandes distâncias e altas vazões. No mundo existem diversos gasodutos voltados para o uso de H<sub>2</sub> no refino e indústria química, com pressões de operação entre 10-30 bar e vazões que variam entre 310-8900 kg/h. Entretanto, a extensão é ínfima quando comparada a rede de gás natural existente que totaliza mais de 2.000.000 km. A rede para H<sub>2</sub> é concentrada nos USA, Canada e Europa totalizando algo em torno de 16.000 km. Devido a isso, diversos projetos vêm discutindo e avaliando o reaproveitamento da rede existente ou realizando *blending* de H<sub>2</sub> com GN (gás natural) para reduzir os custos de implementação. Desafios de engenharia existem, em contrapartida, devido as propriedades únicas do H<sub>2</sub> como tamanho molecular e chance de causar vazamento e cisalhamento em sistemas de tubulação comuns (Nazir, *et al.* 2020).

O hidrogênio, em relação ao coeficiente de difusão, quando comparado ao GN chega a ser quatro vezes maior. Por isso, válvulas, juntas, e selos devem ser projetados de uma forma que minimizem os vazamentos em virtude da propriedade de difusão desse componente. Todavia, a baixa densidade do H<sub>2</sub> comparado a maioria dos compostos, neste caso, é um benefício uma vez que a perda energética na corrente não é tão impactante. Estima-se que entre 0,0005-0,001% seja a porcentagem de vazamento de H<sub>2</sub> em tubulações no período de um ano. Os

materiais do gasoduto são extremamente determinantes nesse processo e os que são compostos de ferro fundido e cimento fibroso estão muito mais propensos a esse fenômeno (Nazir, *et al.* 2020).

Outro processo que ocorre devido a circulação do H<sub>2</sub> na tubulação é o processo de fragilização, causado pela degradação mecânica das paredes de escoamento e que se não previsto em projeto pode levar a formação e propagação de rachaduras. Entretanto, composição do material, temperaturas de operação e pressão são fatores determinantes que impactam na frequência desse fenômeno. Não há um range consolidado para se prever a incidência da fragilização, sendo assim, a análise de todos os fatores supracitados deve ser levada em consideração de acordo com indicações de normas, como a ASME B31.12-2014 (Nazir, *et al.* 2020).

No que tange ao *blending* de H<sub>2</sub> em redes de gás natural é preciso entender a existência de duas macros formas de distribuição: redes de transmissão, voltados para usos domésticos e de menores vazões; redes de distribuição voltadas para vazões maiores e grandes consumidores. A qualidade do gás natural transportado nessas redes varia, dessa maneira, tanto infraestrutura quanto propriedade de escoamento são impactadas. Consequentemente, não existe um único limite de mistura do hidrogênio nas redes existentes. Do ponto de vista técnico, as condições aceitas por cada usuário final e a rede utilizada criam limites específicos para cada situação. Segundo a norma EN 16726, cada região e cenário devem ser estudadas de maneira particular. De um modo geral, alguns índices como densidade, poder calorífico e índice Wobbe são parâmetros que permitem a análise do impacto do H<sub>2</sub> nas propriedades do gás transportado com gás natural (Parker, 2003).

No geral, os ganhos de utilização de gasodutos são a longevidade da infraestrutura comparado a outras técnicas, riscos reduzidos de acidentes, impactos em mobilidade e o custo a longo prazo reduzido. Em contrapartida, como discutido anteriormente, inúmeros desafios de engenharia ainda persistem para que haja possibilidade de ampla utilização dessa tecnologia de transporte (Parker, 2003).

## 2.4.3 Navio

Atualmente, não existe um direcionamento claro para a melhor maneira de se transportar H<sub>2</sub> através de navios, mesmo assim, três técnicas são promissoras:

transporte de hidrogênio líquido, carreadores líquidos orgânicos e amônia. O custo de conversão é destaque nas três tecnologias e representam entre 60 e 80 % da parcela total do custo do transporte em viagens de 10.000 km. Além disso, estas técnicas são utilizadas para aumentar a densidade energética do H<sub>2</sub> armazenado de tal maneira que seja economicamente viável os altos custos do modal marítimo. Inúmeros conceitos de navios para transporte de H<sub>2</sub> também sendo propostos frente a tecnologia atual disponível (Ishimoto *et al.* 2020).

O transporte de H<sub>2</sub> líquido, apesar de aumentar 10 vezes a densidade energética do componente comparado ao H2 gasoso em 80 bar, possui desvantagens como: o boil-off, ainda sem técnicas que minimizem essa ocorrência de maneira efetiva; 1/3 de energia do conteúdo de H<sub>2</sub> requerida para liquefação no local de exportação. Os carreadores líquido orgânicos (LOHCs), referem-se a químicos orgânicos que reagem reversivelmente com H<sub>2</sub>, formando um composto que pode ser facilmente transportado por navio. As condições de temperatura de operação para conversão e reconversão são baixas e os ciclos podem ser repetidos inúmeras vezes. O tolueno é o composto mais relevante para o fim de transporte do H<sub>2</sub> formando ciclohexano, entretanto, parte da carga do navio deve ser reservada para o transporte do composto na ida e do tolueno na volta, o que implica em menor capacidade de transporte de H<sub>2</sub> por viagem e maior consumo de combustível. Além disso, para fazer sentido o transporte através dessa técnica o combustível do navio deve ser renovável, como o metanol, o que implica na baixa maturidade dessa tecnologia que possui uma taxa de perda de 0,1% de tolueno por ciclo de conversão e reconversão (Ishimoto et al. 2020).

Por último, a utilização da amônia como carreador é uma estratégia que chama grande atenção tanto pelo fato do processo de síntese Haber-Bosch ser amplamente conhecido quanto pelo uso da amônia com combustível no navio. O fenômeno de *boil-off* também é desprezível no transporte líquido da amônia, o que gera vantagem frente ao transporte do líquido puro de H<sub>2</sub>. Infraestrutura para transporte de amônia também é algo existente por ser um importante composto para fertilizantes e de uso em processos químicos, facilitando a logística de demanda em diversos setores tanto para amônia quanto para hidrogênio. Entretanto, dentro desse cenário, o processo de reconversão da amônia a H<sub>2</sub> e N<sub>2</sub> permanece ineficiente em escala (Nazir *et al.* 2020).

No que tange ao custo desses processos as seguintes etapas são necessárias para se levar em consideração:

- 1. Transporte do H<sub>2</sub> do site de produção ao porto de exportação;
- Conversão do H<sub>2</sub> gasoso na tecnologia escolhida (liquefeito, LOHC ou amônia);
- 3. Armazenamento no terminal de importação;
- 4. Armazenamento no terminal de exportação;
- 5. Trajeto marítimo;
- 6. Reconversão do H<sub>2</sub>;
- 7. Transporte ao local de demanda.

Estimativas otimistas dos próximos anos sugerem que, considerando o desenvolvimento de aporte de infraestrutura, o custo de transporte marítimo seja entre 0,78-1,31 EUR/kg/10000 km. Distâncias menores que 10000 km estão sujeitas a serem menos atrativas comparadas ao transporte através de gasodutos. Em relação as técnicas utilizadas, a liquefação é considerada a mais cara, com amônia e LOHC apresentando custos similares entre si. Diante disso, o preço da energia elétrica possui relevância no parâmetro de escolha das tecnologias. Um preço baixo de eletricidade implica numa menor diferença entre a tecnologia de liquefação e as demais, o que permite a utilização de uma técnica com menos exigências de conversão e  $H_2$  altamente puro (Nazir *et al.* 2020).

# 2.5 Estado da arte

Este capítulo visa identificar trabalhos e modelagens correlatas ao objetivo geral deste estudo, além de justificar a construção da metodologia com base nas lacunas e gargalos observados em trabalhos de outros autores.

Younas *et al.* (2022) apresenta um overview das principais tecnologias de produção do H<sub>2</sub>, além de abordar brevemente o funcionamento de cada tecnologia fornece custos de produção em dólar por quilo. Similarmente, Riera *et al.* (2023) aborda o *review* da modelagem e otimização da cadeia de produção do H<sub>2</sub>, trazendo a comparação de custos de diferentes tecnologias. Acar & Dincer (2014) comparam, do ponto de vista de emissões e custos de produção, tecnologias de fontes renováveis e não renováveis. Entretanto, a comparação de custo entre as

tecnologias, em muitos exemplos, não é ponderada corretamente devido os seguintes fatores:

- Escala: a escala de viabilidade para diferentes processos é função dependente do modelo de negócio proposto, custos de operação, custos de implementação e tempo de vida útil, portanto, negligenciar o uso das mesmas escalas para comparar diferentes tecnologias pode acarretar incertezas que, indiretamente, inviabilizam uma tecnologia do ponto de vista do empreendedor;
- Comparação de tecnologias com base em anos diferentes e dados de custo de componentes não anualizados: dentre as tecnologias apresentadas nos artigos, as referências de ano em alguns casos (principalmente processos bioquímicos e ciclos termoquímicos) são de antes de 2015, ano em que houve um aumento de pesquisa nos respectivos temas, entretanto, é necessário trazer a análise de custo para, no mínimo, o ano de análise do artigo que o cita.

Em termos do número de contribuições científicas, Khalilpour *et al.* (2020) identifica crescimento exponencial do período de 2005 a 2020 como observado na Figura 34. O motivo se deve tanto pela necessidade de tecnologias alternativas e sustentáveis as fontes fósseis convencionais, quanto pelas diferentes estratégias regionais avaliadas pelas instituições governamentais. Diante disso, o desenvolvimento de metodologias durante esse período vem se adaptando as ambições e condições dos países constantemente, uma vez que o tema se encontra em pauta ativamente.

Figura 34. Perfil de publicações sobre cadeia de suprimentos/produção voltada para



Fonte: Khalilpour et al. (2020).

Dentre os trabalhos de modelagens para diferentes sistemas de fornecimento, existem diversas estratégias que se restringem a estudos de caso em diferentes países, aplicando estratégias de sistemas complexos para realizar a otimização do cenário de análise, avaliar custos e a integração com diferentes infraestruturas, como observado nas Figuras 35, 36 e 37. São avaliadas análises técnicoeconômicas considerando sistemas *off-grid*, geração de energia eólica *offshore* e sistemas híbridos com diferentes configurações de eletrólise e tecnologias de armazenamento.



Figura 35. Análise técnico econômica de sistema off-grid.

Fonte: Yates et al. (2020).

Figura 36. Produção de H<sub>2</sub> offshore com sistema híbrido.



Fonte: Mcdonagh et al. (2020).



Figura 37. Sistema de posto de abastecimento para H<sub>2</sub>.

Fonte: Viktosson et al. (2017).

Do ponto de vista de resposta a cada cenário, o objetivo dos trabalhos é atendido, entretanto, existe uma limitação da quantidade de opções de tecnologias de produção, armazenamento e transporte consideradas em cada sistema. Dessa forma, diferentes opções de infraestrutura que seriam viáveis não são identificadas.

A modelagem do sistema de produção, armazenamento e transporte voltados ao H<sub>2</sub> é, portanto, um sistema que deve seguir uma estratégia de simulação adequada capaz de considerar todos os aspectos necessários para avaliar o custo ou impacto dentro da perspectiva de sustentabilidade. Raab *et al.* (2022), Janosovský *et al.* (2022) e Okonkwo *et al.* (2021) sugerem algoritmos similares para a construção da modelagem, como observado nas Figuras 38 e 39.



# Figura 38. Fluxograma de metodologia multicritério

Fonte: Janosovský et al. (2022).



Figura 39. Framework para tomada de decisão da cadeia de H<sub>2</sub> no Qatar.

Fonte: Okonkwo et al. (2021).

Como observado, diferentes esferas de sistemas, cálculos e heurísticas são abrangidos aplicando as metodologias citadas na modelagem da cadeia de produção, fornecendo uma resposta mais representativa da realidade.

Ferramentas que aplicam metodologias correlatas às apresentadas são o Hyjack e o H2A. O primeiro é uma plataforma aberta para engenheiros, projetistas e consultores que fornece calculadoras de custo e parâmetros de diversos equipamentos relacionados aos processos de H<sub>2</sub>, tendo como base fornecedores e consultoria com profissionais da área de hidrogênio. O H2A, por sua vez, desenvolvido pela NREL (*National Renewable Energy Laboratory*) ligado ao departamento de energia dos Estados Unidos, fornece planilhas de análise de custo para algumas tecnologias de produção de hidrogênio. Apesar das funções disponíveis, planilhas do H2A não apresentam funções capazes de comparar as diferentes tecnologias devida à divisão em arquivos separados na base de dados.

Visando alcançar os objetivos propostos neste trabalho, portanto, de maneira a aperfeiçoar a modelagem da cadeia de suprimentos de hidrogênio, é introduzida uma abordagem que preenche uma lacuna crítica na literatura existente. Enquanto estudos anteriores carecem de uma sistematização completa, é estabelecida uma metodologia única, desenvolvida com uma extensa base de modelagens similares, parametrizando os processos envolvidos. São consideradas uma série de tecnologias de produção, armazenamento e transporte de H<sub>2</sub>, fornecendo uma ferramenta atualizada que não só atende aos pré-requisitos de modelagem, mas também o faz através de uma lente sustentável. Dessa forma, são permitidos *insights* práticos para a indústria e base para outros estudos, atuando no auxílio do desenvolvimento sustentável na cadeia de suprimentos do hidrogênio.

# 3 METODOLOGIA

# 3.1 Parâmetros Econômicos

Os parâmetros e considerações econômicas que foram utilizados neste trabalho serão discutidos nesta seção. As principais considerações são descritas na Tabela 6.

Parâmetro	Valor	Unidade	
Tempo de construção	1	Ano	
Tempo de operação	8000	Horas/ano	
Ano de referência	2022	Ano	
Tempo de vida	20	Anos	

Tabela 6. Considerações econômicas relevantes.

Fonte: Autor.

O ano base foi atualizado através do CEPCI (*Chemical Engineering Plant Cost Index*) para o ano de 2022. Dessa maneira, o cálculo de desconto do fluxo de caixa toma como base o início de 2022 considerando 1 ano para construção da planta, facilidades e toda infraestrutura necessária. O tempo de operação base foi escolhido como 8000 horas anuais que representam 334 dias, podendo este parâmetro ser modificado na interface do *software*. O período de 20 anos foi estabelecido com base numa série de trabalhos relacionados a cadeia de suprimentos voltado para hidrogênio apresentados em Riera *et al.* (2023). O autor apresenta diferentes abordagens da literatura para o tema de modelagem e otimização, com um período de tempo de vida considerado nos trabalhos entre 15-30 anos dependendo da(s) tecnologia(s) envolvida(s).

#### 3.1.1 CAPEX & OPEX

O CAPEX (*Capital Expenditure*) refere-se aos custos de aquisição e todas as facilidades necessárias para implementação do processo (equipamentos, construções, taxa de contratação, etc.). Já o OPEX (*Operational Expenditure*) trata dos custos de operação necessários ao funcionamento da planta (utilidades, salários, matéria prima etc.).

A estimativa dos dados de CAPEX e OPEX utiliza como base 3 opções neste trabalho: dados da literatura; fornecedores; simuladores de processo. Os dados da literatura utilizados são estudos de caso que descriminam os custos associados a cada processo, a partir disso, foram elaboradas base dados para utilização e/ou regressão para a capacidade desejada. Os dados de fornecedores utilizados foram organizados a partir de dados disponíveis em plataformas *online* ou contato com fornecedores. Os simuladores de processo utilizados para estimar os custos foram o Hyjack (plataforma de auxílio a projetos de hidrogênio), Aspen Plus (software de simulação para processos industriais) e o EACP (*Economic Analysis of Chemical Processes*) de Santos *et al.* (2022).

#### 3.1.2 Estimativa de custo por escala

Uma vez não existindo dados de custo disponíveis para um tamanho ou capacidade em particular, é necessário estimar esse valor a partir de um valor base. A metodologia adotada neste trabalho segue a regra do fator de seis décimos descrita em Peters & Timmerhaus (2003). A equação que rege esse procedimento estipula uma curva log-log com coeficiente angular de 0,6 que busca representar a variação do custo de uma determinada escala para outra. O comportamento dessa função fornece no eixo y o custo associado e no eixo x a capacidade. O erro associado a esta estimativa é em média de  $\pm$  25 %, dependendo se é uma estimativa de custo de processo ou equipamento, sendo este erro reduzido quando ocorre um maior detalhamento dos dados de origem e anualização do cenário. A Equação 9 descreve a adaptação da regra utilizada neste trabalho para estimativa de custos.

$$C_n = C_b \left(\frac{Cap_n}{Cap_b}\right)^{0,6} \frac{CEPCI_{2022}}{CEPCI_{base}}$$
Equação 9

Onde, C<sub>n</sub> representa o custo na nova escala; C<sub>b</sub> o custo base; Cap<sub>n</sub> a capacidade de interesse; Cap<sub>b</sub> a capacidade base; e o CEPCI o índice de anualização para 2022 dividido pelo CEPCI do ano base.

#### 3.1.3 Custo normalizado

O custo normalizado representa o fluxo de caixa descontado de uma taxa durante o tempo de vida de um empreendimento. Neste trabalho, o custo normalizado é utilizado para compilar os resultados de custo referentes ao custo médio hidrogênio, produção, do armazenamento transporte. sendo е respectivamente o LCOH (Levelised Cost of Hydrogen), LCOP (Levelised Cost of Production), LCOS (Levelised Cost of Storage) e LCOT (Levelised Cost of Transport). A equação utilizada para este cálculo leva em consideração todos os custos associados ao respectivo processo dividido pela quantidade mássica total de H<sub>2</sub>, realizando o desconto de uma taxa comumente associada a taxa mínima de atratividade ou o WACC (Weighted Average Cost of Capital) de um país ou empresa.

Neste estudo, a taxa de desconto pode ser escolhida em função do país com base em Mendelevitch *et al.* (2023) ou escolhida pelo usuário. A fórmula base é descrita na Equação 10 adaptada de Sekkesæter (2019).

$$LCOX\left(\frac{\$}{kg}\right) = \frac{\sum_{x=1}^{n} \frac{CAPEX(\$) + OPEX(\$) + Other Costs(\$)}{(1+i)^{x}}}{\sum_{x=1}^{n} \frac{Total hydrogen production(kg)}{(1+i)^{x}}}$$

Equação 10

Onde LCOX indica a possibilidade de uso para o LCOH, LCOP, LCOS e LCOT; *n* a quantidade de anos de análise descrita no tópico de parâmetros econômicos; *i* a taxa de desconto; *x* o ano do empreendimento.

#### 3.1.4 Algoritmo para os cálculos de custo

A Figura 40 descreve o algoritmo proposto para análise dos custos relativos as avaliações neste trabalho.



Figura 40. Algoritmo para cálculo de custos.

Fonte: Autor.

# 3.2 Parâmetros Ambientais

A análise do impacto ambiental associada a cadeia de produção do hidrogênio deve ser analisada através da ACV (Análise de Ciclo de Vida). Este processo envolve a definição das fronteiras do processo sobre análise, escolha do inventário e análise dos resultados. Referente ao tema de hidrogênio, o principal parâmetro de impacto é o GWP (*Global Warming Potential*) como descrito por Ji & Wang (2021). No que tange os resultados obtidos, podem ocorrer variações numéricas entre uma análise e outra, uma vez que a definição do inventário e o que se considera do processo varia dependendo da abordagem utilizada. Entretanto, a utilização de normas como a ISO 14044 e outros métodos para análise do ACV, como *FC-HyGuide* da União Europeia, auxiliam a manter um padrão de análise.

Diante disso, este trabalho optou por utilizar uma base de dados de análises de ACV voltados para o hidrogênio em diferentes etapas do processo. Além disso, para cálculo da intensidade de emissões da eletricidade brasileira foi adotada uma metodologia específica baseada em Sekkesæter (2019). Na Tabela 7 é apresentado o compilado de referências utilizadas para avaliar as emissões específicas de cada tecnologia. A Equação 11 abaixo ilustra o cálculo do CO<sub>2</sub> equivalente para um ano de operação, onde EECO<sub>2</sub> representa a emissão específica para uma etapa do processo de produção, armazenamento ou transporte.

$$CO_2 eq \left(\frac{ton}{ano}\right) = \left(\frac{EECO_2\left(\frac{kgCO_2}{kgH_2}\right)}{1000}\right) * \dot{V}_{H2} \left(\frac{kg}{h}\right) * H(\frac{h}{ano})$$

Equação 11

Tecnologia	Valor médio (CO₂eq/kg H₂)	Referência
Ciclo Termoquímico CuCl	0,62	Ozbilen <i>et al.</i> (2013); Acar & Dincer (2015); Dincer & Acar (2015); Ji & Wang (2021); Cetinkaya <i>et al.</i> (2012)
Ciclo Termoquímico Híbrido Enxofre*	0,60	Ozbilen <i>et al.</i> (2013); Acar & Dincer (2015); Dincer & Acar (2015); Ji & Wang (2021)
Ciclo Termoquímico Óxido de metais*	0,80	Ozbilen <i>et al.</i> (2013); Acar & Dincer (2015); Dincer & Acar (2015); Ji & Wang (2021)
Ciclo Termoquímico Enxofre lodo**	0,86	Ozbilen <i>et al.</i> (2013); Acar & Dincer (2015); Dincer & Acar (2015); Ji & Wang (2021)
Ciclo Termoquímico Ciclo de Ceria	0,80	Ozbilen <i>et al.</i> (2013); Acar & Dincer (2015); Dincer & Acar (2015); Ji & Wang (2021)
Ciclo Termoquímico ZnO/Zn*	0,80	Ozbilen <i>et al.</i> (2013); Acar & Dincer (2015); Dincer & Acar (2015); Ji & Wang (2021)
Fotocatálise	0,40	Dincer & Acar (2015); Acar & Dincer (2015)
Plasmólise	5,99	Dincer & Acar (2015)
Biomassa	4,18	Borole & Greig (2019); Ji & Wang (2021); Acar & Dincer (2015)
Reforma a vapor do metano	10,75	Ozbilen <i>et al.</i> (2013); Acar & Dincer (2015); Dincer & Acar (2015); Borole & Greig (2019); Okonkwo <i>et al.</i> (2021); Centinkaya <i>et al.</i> (2012); Ji & Wang (2021)
Reforma a vapor com captura de CO <sub>2</sub>	4,10	Borole & Greig (2019); Okonkwo <i>et al.</i> (2021); Ji & Wang (2021)
Fermentação escura	0,50	Dincer & Acar (2015)
Foto fermentação	0,50	Dincer & Acar (2015)
Eletrólise PEM***	2,27	Ozbilen <i>et al.</i> (2013); Acar & Dincer (2015); Dincer & Acar (2015); Centinkaya <i>et al.</i> (2012); Ji & Wang (2021)
Eletrólise PEM****	0,10	Ozbilen <i>et al.</i> (2013); Borole & Greig (2019); Centinkava <i>et al.</i> (2012): Ji & Wang (2021)

Tabela 7. Emissões específicas por tecnologia de produção.

\* solar; \*\* nuclear; \*\*\*solar e fotovoltaica; \*\*\*\* eólica

Fonte: Autor.

A seguir são descritos os métodos de cálculo de emissões para a eletrólise PEM, que faça uso da rede elétrica e a influência da intermitência quando considerada, além do transporte via navio, transporte via gasodutos, transporte via caminhão e os armazenamentos por NH<sub>3</sub>, gás comprimido, tolueno e hidrogênio líquido. Todas essas tecnologias possuem um balanço dependente do consumo de energia elétrica ou combustível fóssil. Dessa maneira, a base de cálculo para a

pegada de carbono segue um mesmo princípio, descrito nas Tabelas 8, 9 e Equação 12.

Fonte de Geração	Participação na matriz (%)		
Hidráulica	61,9		
Bagaço de Cana	4,7		
Eólica	11,8		
Solar Fotovoltaica	4,4		
Gás Natural	6,1		
Óleo Diesel	0,9		
Nuclear	2,1		
Licor Negro	2,5		
Outras Renováveis	0,8		
Importação	1,9		
Outras Não Renováveis	1,8		
Carvão	1,2		

# Tabela 8. Matriz Elétrica Brasileira.

Fonte: EPE (2023).

A partir da distribuição de fontes da matriz elétrica brasileira é possível estimar a emissão específica em (gCO<sub>2</sub>/kWh) utilizando a Tabela 9 que apresenta dados disponíveis na base *Carbon Intensity API*, uma plataforma que fornece estimativas de emissões em função das diferentes fontes de energia do Reino Unido e que pode ser utilizada como base para outros países. A Tabela 9 descreve as emissões específicas por fonte de geração de eletricidade.

Tabela 9. Emissões específicas por fonte de geração de eletricidade.

Tipo de Combustível	Emissão (gCO₂/kWh₀)
Biomassa	120
Carvão	937
Derivados do Petróleo	935
Gás Natural	651
Nuclear	0
Hidráulica	0
Eólica	0
Solar	0
Geotérmica	0

Fonte: Carbon Intensity API.

É considerado neste trabalho que todas as fontes de importação e outras não renováveis sejam de derivados do petróleo. As fontes da matriz brasileira licor negro, óleo de diesel e afins também foram designadas como derivadas do petróleo com o mesmo índice de emissão. A partir disso, seguindo a Equação 12, é possível estimar a taxa de emissão da matriz elétrica brasileira, onde *PnM* representa a participação em % da fonte específica; *x* a fonte de análise; e *n* quantidade de fontes presentes na matriz.

Fator de emissão da matriz elétrica 
$$\binom{kgCO_2}{kWh} = \left(\frac{\sum_{x}^{n} GHG_{específico} * PnM}{1000}\right)$$
  
Equação 12

Sendo assim, o fator utilizado para cálculo de emissões de tecnologias que façam uso da eletricidade brasileira neste trabalho é de 0,12298 kgCO<sub>2</sub>/kWh.

Para levar em conta a pegada de carbono que a intermitência proporciona nas estratégias que façam uso da eletrólise PEM (que utilizam a base de dados do fator de capacidade), a demanda faltante de energia é acrescentada como energia proveniente da rede e multiplicada pelo fator de emissão. Na seção de metodologia para eletrólise PEM esta abordagem é explicada de forma detalhada. Para as demais tecnologias, duas estratégias são utilizadas para obter o valor de consumo de eletricidade: (i) tecnologias de armazenamento utilizam dados de balanço de energia provenientes de Yang & Ogden (2008) e Sekkesæter (2019); (ii) tecnologias de transporte utilizam dados de balanço utilizados em Aarnes *et al.* (2018), Al-Breiki & Bicer (2020), Hurskain & Ihonen (2020), Wang *et al.* (2021) e Santos (2023). Nos subcapítulos sequentes, o cálculo detalhado para pegada de carbono em cada tecnologia é abordado.

## 3.2.1 Armazenamento comprimido

O consumo de eletricidade é considerado como função dependente da quantidade de hidrogênio armazenado e uma taxa específica para a pressão de operação. O cenário adotado modela o sistema de armazenamento para suportar a produção diária de hidrogênio, sendo esta produção definida a partir da escolha da vazão de produção de H<sub>2</sub> por hora no *software*. A Tabela 10 fornece os dados utilizados de consumo de eletricidade por pressão de armazenamento.

Pressão de armazenamento (bar)	Energia Elétrica (kWh/kg)	
100	1,0	
200	1,2	
700	1,6	
Fonte: Yang & Ogden (2008).		

Tabela 10. Consumo de energia elétrica em função da pressão de armazenamento.

# 3.2.2 Armazenamento de hidrogênio líquido

Para o armazenamento de hidrogênio líquido o consumo de eletricidade na planta de liquefação e regaseificação utiliza dados de Al Ghafri *et al.* (2022) e Sekkesæter (2019). O primeiro trabalho compila dados da literatura de estudos conceituais e processos estabelecidos num período entre 2010 até 2030, sendo o valor médio de consumo utilizado para este estudo uma vez que existe mais de uma tecnologia para liquefação, apesar da similaridade de processo entre elas. O segundo autor realiza simulações com Aspen Hysis para calcular o consumo de eletricidade necessário na regaseificação do H<sub>2</sub> líquido. Os valores utilizados nestes trabalhos são apresentados na Tabela 11.

Tabela 11. Consumo de eletricidade para liquefação e regaseificação do H<sub>2</sub>.

Processo	Consumo específico (kWh/kg H <sub>2</sub> )	
Liquefação	8,80	
Regaseificação	0,03	
Fonte: AL Chafri at al. (2022) a Caldyan mtar (2040)		

Fonte: Al Ghafri et al. (2022) e Sekkesæter (2019).

# 3.2.3 Armazenamento de hidrogênio via amônia e tolueno

Os balanços de energia das plantas de amônia e tolueno fazem uso considerável de energia térmica. Neste caso, foi considerado o processo de combustão completa do metano para geração de energia seguindo a Equação 13.

$$CH_{4(g)} + 2O_{2(g)} \rightarrow CO_{2(g)} + 2H_2O_{(l)} \quad \Delta H = -802 \ kJ/mol$$

Equação 13

A partir da equação 13 é obtida a relação de 2,74 kg CO<sub>2</sub> para cada kg de CH<sub>4</sub>. Considerando um fornecimento de energia de 0,22278 kWh por mol de metano, a demanda de energia térmica é associada a um valor consumido de CH<sub>4</sub> e a emissão de CO<sub>2</sub> é calculada. A Tabela 12 fornece os dados utilizados para o balanço de energia dos sistemas.

Tabela 12. Consumo de energia térmica.

Processo	Consumo específico (kWh/kg H <sub>2</sub> )
Desidrogenação do Tolueno	9,41
Craqueamento da Amônia	4,21

Fonte: Hurskain & Ihonen (2020), Sekkesæter (2019) e Wang et al. (2021).

# 3.2.4 Transporte via caminhão

O transporte via caminhão está associado a uma série de variáveis que interferem na quantidade de emissões por veículo. Modelo do motor, tipo de pista, combustível e distância são alguns fatores. Diante disso, Pádua (2014) comparou as emissões de diferentes veículos automotores de carga e identificou as emissões de diferentes cenários em gCO<sub>2</sub>/km. Neste trabalho foi utilizado o valor médio desses valores (0,846 kg CO<sub>2</sub>/km) que estão na Tabela 13.

Tabela 13. Emissões específicas de veículos automotores de carga.

Cenário	GWP (gCO2/km)	
1	593,85	
2	1120,98	
3	668,92	
4	700,00	
5	749,56	
6	835,86	
7	1253,05	
Fonto: Pádua (2014)		

Fonte: Pádua (2014).

## 3.2.5 Transporte via gasoduto

O transporte via gasoduto dentro da cadeia de hidrogênio é o modal que apresenta menor variação de GWP e menor taxa de emissão como descrito por Wulf *et al.* (2018), que avaliou o CO<sub>2</sub>eq do transporte via gasodutos em diferentes escalas (80, 40 e 10 ton/dia). Em comparação com os outros modais avaliados por Wulf *et al.* (2018) o transporte via gasodutos apresentou um valor médio de emissão de 0,23 kg CO<sub>2</sub>/kg H<sub>2</sub>, sendo o transporte via caminhão comprimido de 1,25 kg CO<sub>2</sub>/kg H<sub>2</sub>, o modal mais próximo em número de emissão específica. Sendo assim, para as diferentes escalas de gasodutos utilizadas neste trabalho, o valor de 0,23 kg CO<sub>2</sub>/kg H<sub>2</sub> foi utilizado considerando o sistema para suportar a vazão anual de H<sub>2</sub>.

## 3.2.6 Transporte via navio

As emissões para transporte de navios envolvem a utilização de HFO (*Heavy Fuel Oil*) como combustível. Em particular ao HFO, Santos (2023) avaliou as emissões desse combustível. Dentre os componentes estudados, os compostos nitrogenados (NO<sub>x</sub>) e CO<sub>2</sub> (que são gases contribuintes ao efeito estufa) foram quantificados por tonelada de combustível utilizado e estão listados na tabela 14. A contribuição dos compostos NO<sub>x</sub> convertidos para base de CO<sub>2</sub> equivalente ocorreu com a multiplicação por 265, como descrito pelo *Green House Protocol* de 2014.

Componente	Emissão (ton/ton de combustível)	
CO <sub>2</sub>	3,114	
NOx	0,078	
Fonte: Santos (2023).		

Tabela 14. Emissões de gases do efeito estufa por consumo de HFO.

Para analisar a quantidade de combustível utilizada para o transporte de navio os trabalhos de Al-Breiki & Bicer (2020) e Wang *et al.* (2021) foram utilizados. Os autores avaliam estudos de caso em que o transporte de NH<sub>3</sub>, H<sub>2</sub> líquido e Tolueno é realizado via navio. A partir da regressão dos dados disponíveis foi possível obter o consumo de combustível em função da carga utilizada, descrito na Equação 14.

#### *Combustivel Requerido* (kg) = 0,1082 \* Carga(kg) - 0,1617

Equação 14

Como a quantidade de H<sub>2</sub> anual é uma variável de usuário, a quantidade de amônia e tolueno requerida para transportar uma quantidade x de H<sub>2</sub> utiliza a relação gravimétrica de H<sub>2</sub> presente em cada transportador. Considerando neste estudo 17,7 % de H<sub>2</sub> na NH<sub>3</sub> e 6,16% para o H<sub>2</sub> em tolueno. Com esses valores é possível estimar a carga necessária do navio e, consequentemente, as emissões associadas.

#### 3.2.7 Algoritmo para cálculo de emissões

Em síntese, o processo de avaliação de impacto ambiental da cadeia de hidrogênio considerando o CO<sub>2</sub> equivalente seguiu o algoritmo descrito na Figura 41.



Figura 41. Algoritmo para cálculo de emissões da cadeia de H<sub>2</sub>.

Fonte: Autor.

# 3.3 Cálculo das tecnologias de produção, armazenamento e transporte.

# 3.3.1 Produção por Ciclo Termoquímico (CT)

Seguindo a metodologia descrita em Parâmetros Econômicos, a modelagem do processo via ciclo termoquímico considerou os seguintes sistemas: CT do CuCl; CT híbrido de enxofre utilizando fonte solar; CT de óxido de metais com fonte solar; CT de enxofre e iodo com fonte nuclear; CT com ciclo de ceria; CT de zinco e óxido de zinco com fonte solar. A base de dados criada utiliza dados de Steinfeld (2002), Giaconia *et al.* (2007), Charvin *et al.* (2008), Graf *et al.* (2008), Ferrandon *et al.* (2008), Leybros *et al.* (2010), Corgnale & Summers (2011), El-Eman & Khamis (2017) e Moser *et al.* (2019). As Tabelas 15, 16, 17, 18, 19 e 20 compila os dados fornecidos para cada processo.

Tabela 15.	Dados base p	ara o CT de zinc	o e óxido de zinco	com fonte solar.
------------	--------------	------------------	--------------------	------------------

50	kg/h H <sub>2</sub>		250 kg	/h H	2
(	CAPEX		CAP	EX	
Helióstato	\$	1.645.000,00	Helióstato	\$	8.220.000,00
Torre	\$	1.000.000,00	Torre	\$	1.500.000,00
Terreno	\$	55.000,00	Terreno	\$	275.000,00
Reator Solar	\$	1.000.000,00	Reator Solar	\$	2.000.000,00
Hidrolisador	\$	500.000,00	Hidrolisador	\$	1.000.000,00
Armazenamento H <sub>2</sub>	\$	500.000,00	Armazenamento H <sub>2</sub>	\$	1.000.000,00
Outros	\$	1.000.000,00	outros	\$	2.000.000,00
	O&M		8O	Μ	
Pagamento	\$	420.000,00	Pagamento	\$	1.000.000,00
Reposição de óxido	\$	2.000,00	Reposição de óxido	\$	8.000,00

Fonte: Charvin et al. (2008).

Tabela 16. Dados base para CT do CuCl.

5208 kg/h H₂			
Custo de Investimento	\$	131.000.000,00	
O&M	\$	17.500.000,00	
Fonte: Ferrandon et al. (2008).			

5555 kg/h H₂			
Planta Solar			
Helióstato	\$125.700.000,00		
Receptor	\$ 10.100.000,00		
Torre e tubulação	\$ 29.000.000,00		
Armazenamento	\$ 23.300.000,00		
Controle	\$ 1.600.000,00		
BoP	\$ 18.300.000,00		
Planta de Eletrólise			
H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> Decomp.	\$ 82.400.000,00		
Eletrólise	\$ 31.700.000,00		
Utilidades	\$ 6.100.000,00		
Trocadores de calor			
Trocadores	\$ 8.000.000,00		
Compressor	\$ 4.000.000,00		
Tubulação	\$ 3.600.000,00		
O&M			
Empregados	\$ 2.300.000,00		
G&A	\$ 500.000,00		
Taxas	\$ 6.000.000,00		
Manutenção	\$ 8.300.000,00		
Agua	\$ 400.000,00		
Eletricidade	\$27.100.000,00		

Tabela 17. Dados base para CT híbrido de enxofre utilizando fonte solar.

Fonte: Corgnale & Summers (2011).

Tabela 18. Dados base para CT de óxido de metais com fonte solar.

473 kg/h H <sub>2</sub>				
	CAPEX			
Equipamento Solar	€	53.600.000,00		
Aplicação Química	€	16.500.000,00		
Tanques	€	1.500.000,00		
Sistema de Tubulação	€	5.000.000,00		
Infraestrutura	€	1.100.000,00		
Segurança	€	7.800.000,00		
Nitrogênio	€	40.000,00		
Terreno	€	3.400.000,00		
O&M				
Empregados	€	700.000,00		
Seguro	€	1.800.000,00		
Sistema Redox	€	2.500.000,00		
Eletricidade	€	9.800.000,00		
Água	€	40.000,00		
Nitrogênio (feed)	€	6.000,00		
Nitrogênio (recycling)	€	5.500.000,00		
<b>F</b> (	-			

Fonte: Graf et al. (2008).

Tabela 19. Dados base para CT de enxofre e iodo com fonte nuclear.

14383 kg/h H₂		
Descomissionamento	\$ 66.600.000,00	
Custo de Capital	\$ 666.000.000,00	
O&M	\$ 44.488.800,00	
Fonto: Louhron of ol (2010)		

Fonte: Leybros et al. (2010).

Tabela 20. Dados base para CT com ciclo de ceria.

59,6 kg/h H₂			
CAPEX	\$ 34.141.704,00		
OPEX	\$ 225.209,00		
<b>Outros custos</b> \$ 2.959.545,00			
Fonte: Moser <i>et al.</i> (2019).			

# 3.3.2 Produção por Biohidrogênio

O processo de produção através de bioprocessos compreende uma vasta possibilidade de rotas bioquímicas, fluxogramas base e matéria prima utilizada. Diante disso, foi criada uma extensa base de dados com base em diferentes rotas de fermentação que apresentam potencial para produção de H<sub>2</sub>, sendo as rotas (ou combinação de rotas) e suas respectivas biomassas: *solid state fermentation* + *dark fermentation* (resíduo de comida); *dark fermentation* + *anaerobic digestion* (resíduo de comida); *dark fermentation* (biomassa rica em hemicelulose); *dark fermentation* (resíduo de comida); *dark fermentation* (amido de milho); *dark fermentation* (melaço); *dark fermentation* (resíduo de agricultura); *photo fermentation* (algas).

A base de informação das conversões de cada biomassa, parâmetros econômicos, equipamentos e utilidades utilizam a base de: Lee & Chung (2010); Han *et al.* (2016); Han *et al.* (2016) – outro estudo de caso; Han *et al.* (2015); Han *et al.* (2016) – outro estudo de caso; Dinesh *et al.* (2018); Kannah *et al.* (2021); Jarunglumbert *et al.* (2018); Xu *et al.* (2022); Hosseinzadeh *et al.* (2022); Masilela & Pradhan (2022); Lunprom *et al.* (2019); Li *et al.* (2012); Ahmed *et al.* (2021); Chandrasekhar *et al.* (2020); Dell'Orto & Trois (2022); Sarma *et al.* (2013); Saratale *et al.* (2019); Show *et al.* (2019); Reith *et al.* (2003); Hankamer *et al.* (2007); Manish

& Banerjee (2008); Dahiya *et al.* (2021); Hosseinzadeh *et al.* (2022); Sathyaprakasan & Kannan (2015); Venegas *et al.* (2015); Amos (2004).

Utilizando a metodologia descrita em Parâmetros Econômicos, as equações de custo formuladas na tabela 21 foram utilizadas, onde  $\dot{V}$  representa a vazão de produção de H<sub>2</sub> em kg/h.

Rota	CAPEX	OPEX
solid state fermentation + dark fermentation (resíduo de comida)	$C(\$) = 553200 * \left(\frac{\dot{V}}{1,83}\right)^{0,6} * \left(\frac{760,57}{541,70}\right)$	$C(\$) = 366700,15 * \left(\frac{\dot{V}}{1,83}\right)^{0,6} * \left(\frac{760,57}{541,70}\right)$
dark fermentation + anaerobic digestion (resíduo de comida)	$C(\$) = (178990 * \left(\frac{\dot{V}}{0,41}\right)^{0,6} * \left(\frac{760,57}{541,70}\right))/0,49$	$C(\$) = 87915,84 * \left(\frac{\dot{V}}{0,41}\right)^{0,6} * \left(\frac{760,57}{541,70}\right)$
dark fermentation + photofermentation (biomassa rica em hemicelulose)	$C(EUR) = 4089635,31 * \left(\frac{\dot{V}}{39}\right)^{0,6} * \left(\frac{760,57}{541,70}\right)$	$C(EUR) = 978555,26 * \left(\frac{\dot{V}}{39}\right)^{0,6} * \left(\frac{760,57}{541,70}\right)$
<i>dark fermentation</i> (resíduo de comida Referência A)	$C(\$) = 1256987 * \left(\frac{\dot{V}}{50}\right)^{0,6} * \left(\frac{760,57}{603,10}\right)$	$\mathcal{C}(\$) = 83508 * \left(\frac{\dot{V}}{50}\right)^{0,6} * \left(\frac{760,57}{603,10}\right)$
dark fermentation (amido de milho)	$C(\$) = 751924 * \left(\frac{\dot{V}}{50}\right)^{0,6} * \left(\frac{760,57}{603,10}\right)$	$C(\$) = 746128 * \left(\frac{\dot{V}}{50}\right)^{0,6} * \left(\frac{760,57}{603,10}\right)$
dark fermentation (resíduo de comida Referência B)	$C(\$) = 1636560 * \left(\frac{\dot{V}}{9,2}\right)^{0,6} * \left(\frac{760,57}{596,20}\right)$	$C(\$) = 548568 * \left(\frac{\dot{V}}{9,2}\right)^{0,6} * \left(\frac{760,57}{596,20}\right)$
dark fermentation (melaço)	$C(\$) = 478200 * \left(\frac{\dot{V}}{0,23}\right)^{0,6} * \left(\frac{760,57}{596,20}\right)$	$C(\$) = 262170 * \left(\frac{\dot{V}}{0.23}\right)^{0.6} * \left(\frac{760.57}{596.20}\right)$
<i>dark fermentation</i> (resíduo de agricultura)	$C(\$) = 2097000 * \left(\frac{\dot{V}}{1,19}\right)^{0,6} * \left(\frac{760,57}{596,20}\right)$	$C(\$) = 1238000 * \left(\frac{\dot{V}}{1,19}\right)^{0,6} * \left(\frac{760,57}{596,20}\right)$
photo fermentation (algas)	$\mathcal{C}(\$) = 362667 \ast \dot{V} + 33333 \ast \left(\frac{760,57}{462,56}\right)$	$C(\$) = 9013,3 * \dot{V} - 11333 * \left(\frac{760,57}{462,56}\right)$
	Fonte: Autor.	

Tabela 21. Funções custo para processos bio fermentativos na produção de H<sub>2</sub>.

## 3.3.3 Produção por Eletrólise PEM

O modelo desenvolvido para análise do balanço de massa e energia da eletrólise PEM pode ser dividida em dois grandes blocos: balanço da planta (BoP) e balanço de geração de energia (BgE).

Dentro do BoP, 3 fontes de dados de fornecedores foram selecionadas, sendo um fornecedor para o sistema de eletrólise na capacidade de 5 MW e outro para 1 MW. A terceira fonte é uma plataforma que compila informações de fornecedores globais sobre os equipamentos do sistema de eletrólise PEM, o Hyjack. Nesta plataforma foram extraídos dados em função da potência do

eletrolisador variando de 1 MW a 30 MW, sendo os dados a partir de 19 MW extrapolados pelo sistema devido à escassez de fornecedores para especificações maiores. Dentre as informações coletadas estão o CAPEX e OPEX da unidade, vazão de H<sub>2</sub>, O<sub>2</sub>, consumo específico do sistema e consumo específico da *Stack*, ambos em kWh/Nm<sup>3</sup> de H<sub>2</sub>.

No que tange ao BgE, foram modeladas 8 maneiras de fornecimento de energia, descritos na Tabela 22, onde FC equivale à fator de capacidade:
Tabela	22.	Parâm	etros d	de c	cálculo	para	custo	е	derad	cão	de	energ	aia.
								-	J	5			J

Sistema de fornecimento de energia	Especificação	Equações
Eólica onshore	Modelo de turbina: SG 5.0 – 145 → 5 MW, diâmetro 145 m, coeficiente de potência 0,45	Equação Custo: $C\left(\frac{\$}{kW}\right) = (1E - 11x^4 - 2E - 7x^3 + 0,0014x^2 - 3,998x + 5537,4)n$ Equação potência: $pot(W) = 0,5\rho Av^3 C_p$ n – número de turbinas; x – pot em kW; $\rho$ – densidade em kg/m <sup>3</sup> do ar; A – área em m <sup>2</sup> ; v – velocidade (m/s)
Eólica offshore	Modelo de turbina: GE220 14 → 15 MW, altura 150 m, diâmetro 145 m, coeficiente de potência 0,45	Equação Custo: $C(\$) = 2000nPot$ Equação potência: $pot(W) = 0.5\rho Av^3 C_p$ n – número de turbinas; $\rho$ – densidade em kg/m <sup>3</sup> do ar; A – área em m <sup>2</sup> ; v – velocidade (m/s);
Eólica <i>onshore</i> 100% FC	Modelo de turbina: GE220 14 → 15 MW, altura 150 m, diâmetro 145 m, coeficiente de potência 0,45	Equação Custo: $C\left(\frac{\$}{kW}\right) = (1E - 11x^4 - 2E - 7x^3 + 0,0014x^2 - 3,998x + 5537,4)n$ n – número de turbinas; x – pot em kW
Eólica onshore FC	Modelo de turbina: SG 5.0 – 145 → 5 MW, diâmetro 145 m, coeficiente de potência 0,45	Equação Custo: $C\left(\frac{\$}{kW}\right) = (1E - 11x^4 - 2E - 7x^3 + 0,0014x^2 - 3,998x + 5537,4)n$ n – número de turbinas; x – pot em kW
Solar Fotovoltaica GHI	Potência do módulo de 670 W, área unitária de 3,094 m², eficiência de 21,5%, GHI anual <i>default</i> (kWh/m²/ano) de 2026,23 (Bahia)	Equação Custo: $C(\$) = n * Pot * 0,32$ Equação potência: $pot(GWh/ano) = \frac{A_t 0,215GHI}{10^6}$ n – número de placas solares; $A_t$ - área total em m <sup>2</sup> ; pot – potência do módulo em W
Solar fotovoltaica FC	Potência do módulo de 670 W, área unitária de 3,094 m², eficiência de 21,5 %	Equação Custo: $C(\$) = n * Pot * 0,32$ n – número de placas solares; pot - potência do módulo em W
Geração da rede	Valor da eletricidade do usuário em \$/kWh	Equação custo: C(\$/ano) = consumo de eletricidade(kWh/ano) $* preço da eletricidade(\frac{\$}{kWh})$
Dados de FC do usuário	Fator de capacidade	Equação Custo solar fotovoltaica: $C(\$) = n * Pot * 0,32$ Equação Custo eólica: $C\left(\frac{\$}{kW}\right) = (1E - 11x^4 - 2E - 7x^3 + 0,0014x^2 - 3,998x + 5537,4)n$ n – número de turbinas ou placa solar; x – pot em kW; pot – potência do módulo em W

Fonte: EPE, Eólica Offshore (2020), IEA, Offshore Wind outlook (2019), Siemens Gamesa (2020), Olateju et al. (2016), Groenemans et al. (2022), Clarke et al. (2009), Hyjack (2022), Sherif et al. (2005), ONS (2022). Os dados das plantas *default* para modelagem dos subsistemas BgE utilizando fator de capacidade foram do Conj. Caetité (UEE) e Conj. São Pedro (UFV), para eólica e solar fotovoltaica, respectivamente, os dados utilizados estão presentes no Anexo A. O processo de convergência utiliza a Equação 15.

Energia Anual Requerida (GWh) – Energia Anual Gerada(GWh) = 0

(Equação 15)

As equações de potência de cada subsistema ou plantas base utiliza como variável a quantidade de equipamentos necessários para atingir a meta da função objetivo. No caso do subsistema de eólica *onshore* 100 % FC, é adicionada a restrição da energia gerada ser maior que a energia requerida em todos os meses do ano.

A partir da base de dados descrita nessa seção para o BoP, foi possível utilizar as equações presentes na Tabela 23, onde x representa a potência do sistema em MW.

Variável	Equação
Vazão H₂ (kg/h)	18,776x - 3,6472
Demanda Específica Stack (kWh)	1302,500x - 0,3333
Consumo Diário Sistema (kWh)	31259 <i>x</i> – 7,9991
Custo da Stack (US\$)	$(6064 * (1000x)^{-0,2}) * 1000x$
Custo da Planta (US\$)	0,7 * Custo da Stack
Reposição Membrana (US\$)	0,32 * Custo da Stack
	_

Tabela 23. Equações de custo e processo BoP PEM.

Fonte: Autor.

### 3.3.4 Produção por Biomassa

O processo de modelagem para hidrogênio advindo da biomassa considerou a gaseificação utilizando vapor num reator de leito fluidizado, sendo essa estratégia uma das mais eficientes - dentre as técnicas de gaseificação - para maior rendimento de H<sub>2</sub>, como descrito por Marcantonio *et al.* (2019) e Mutlu & Zeng (2020). Embora existam diferentes fontes de matéria prima (advindas de resíduos da agricultura, alimentos etc.) para geração do H<sub>2</sub>, foi realizada uma simulação convencional de gaseificação variando a composição de entrada da biomassa com base no trabalho de Vassileve *et al.* (2010), onde são apresentadas as características de composição *Proximate* e *Ultimate* de uma série de biomassas. Utilizando o mesmo fluxograma de simulação e condições de operação, foram gerados dados variando a vazão de entrada de 10 kg/h de biomassa até 20000 kg/h para 7 composições médias de entrada. Desse modo, foram geradas equações de produção de H<sub>2</sub> em função da vazão de entrada de biomassa para os 7 tipos de matéria prima, para assim serem inseridas no modelo.

A Tabela 24 apresenta as matérias primas escolhidas e as equações geradas em função da vazão de entrada, onde  $\dot{V}$  representa a vazão em kg/h da respectiva biomassa. Tabela 25 fornece as composições médias das biomassas selecionadas para simulação em simulador de processos.

Biomassa	Produção de H <sub>2</sub>
Herbácea e agrícola	$H_2\left(\frac{kg}{h}\right) = 0,0518 * \dot{V} + 2,4634$
Palha	$H_2\left(\frac{kg}{h}\right) = 0,0510 * \dot{V} + 0,2100$
Madeira e biomassa lenhosa	$H_2\left(\frac{kg}{h}\right) = 0,0524 * \dot{V} + 1,1910$
Gramíneas	$H_2\left(\frac{kg}{h}\right) = 0,0520 * \dot{V} + 0,1865$
Aquática	$H_2\left(\frac{kg}{h}\right) = 0,0458 * \dot{V} + 0,3165$
Resíduos gerais	$H_2\left(\frac{kg}{h}\right) = 0,0494 * \dot{V} + 0,3171$
Composição média de biomassas	$H_2\left(\frac{kg}{h}\right) = 0,0512 * \dot{V} + 0,4128$
	Fonte: Autor.

Tabela 24. Equações de geração de H<sub>2</sub> por tipo de biomassa.

Diamagaa	Pr	Proximate analysis			Ultimate analysis				
Diomassa	VM	FC	Μ	Α	С	0	Н	Ν	S
Herbácea e agrícola	66,0	16,9	12,0	5,1	49,9	42,6	6,2	1,2	0,15
Palha	66,7	15,3	10,2	7,8	49,4	43,2	6,1	1,2	0,15
Madeira e biomassa lenhosa	62,9	15,1	19,3	2,7	52,1	41,2	6,2	0,4	0,08
Gramíneas	69,0	14,1	12,6	4,3	49,2	43,7	6,1	0,9	0,13
Aquática	45,1	23,1	10,7	21,1	43,2	45,8	6,2	2,2	2,60
Resíduos gerais	64,6	18,6	12,4	4,4	50,2	41,9	6,3	1,4	0,16
Composição média de biomassas	64,3	15,3	14,4	6,0	51,3	41,0	6,3	1,2	0,19

Tabela 25. Composição Proximate e Ultimate.

Fonte: Vassileve et al. (2010).

A simulação foi desenvolvida através do Aspen Plus V12 com base nos trabalhos de Kaushal & Tyagi (2017), Huang & Jin (2019), Pauls *et al.* (2016), Mutlu & Zeng (2020), Nikoo & Mahinpey (2008), Motta *et al.* (2019) e Marcantonio *et al.* (2019). A estratégia de simulação do reator de leito fluidizado, tratamento do gás e reações de *shift* para aumento do rendimento foi dividida em 4 seções: *dryer* – onde ocorre a pré desidratação da biomassa; *pyrolysis zone* – onde ocorre a queima em alta temperatura; *combustion and reduction* (C&R) *zone* – onde são consideradas as reações de oxidação e redução; *purification zone* – onde o gás é tratado para retirada de compostos sulfurosos, e, em sequência, reações *shift* e módulo de PSA. O reator de leito fluidizado é representado pelas etapas de *pyrolysis* e C&R. Correntes azuis representam o uso de utilidades e correntes vermelhas de resíduo, sendo o H<sub>2</sub> obtido a 10 bar na saída do fluxograma. A Figura 42 ilustra a simulação realizada.



Figura 42. Simulação em Aspen Plus da gaseificação com vapor da biomassa.

Fonte: Autor.

A análise de custo da planta utilizou o trabalho de Spath *et al.* (2005) no detalhamento e escalonamento do CAPEX e o de Salkuyeh *et al.* (2018) para estimativa de OPEX. A Tabela 26 fornece as equações utilizadas a partir da metodologia descrita em Parâmetros Econômicos. São considerados os custos com os sistemas de alimentação e secagem da biomassa, gasificação e reforma do tar, compressão e remoção de enxofre, reações de *shift* e PSA, compressão do H<sub>2</sub>, sistema de vapor e utilidades do processo além dos custos diretos e indiretos com o comissionamento da planta (pagamento, manutenção, depreciação etc.).

Tabela 26. Equações de custo da planta de gaseificação.

Parâmetro	Equação
OPEX	$C(EUR) = 3677384,64 * \left(\frac{760,57}{574}\right) * \left(\frac{Vazão H_2\left(\frac{kg}{h}\right)}{50}\right)^{0,67}$
CAPEX	$C(\$) = \frac{5012763,13 * \left(\frac{Vazão H_2\left(\frac{kg}{h}\right)}{6800}\right)^{0,67}}{0,6621} * \left(\frac{760,57}{574}\right)$
	Fonte: Autor.

### 3.3.5 Produção por Reforma a Vapor do Metano

O modelo de custo e balanço de planta da produção de hidrogênio por reforma leva em consideração além do custo de CAPEX da planta os custos de reposição do catalisador, preço de usuário para o gás natural e make-up de H<sub>2</sub>O. A razão de gás natural por cada kg de H<sub>2</sub> produzido foi obtida através da simulação do processo de reforma já presente no Aspen Plus V12. A partir disso, o custo de utilidade do gás natural é calculado paralelamente aos custos de CAPEX da planta que toma como base os dados fornecidos na nota técnica da EPE (Empresa de Pesquisa Energética) sobre H<sub>2</sub> cinza. A Tabela 27 compila os dados utilizados.

Parâmetro	Valor				
CAPEX Reforma a Vapor	$C(MMUS\$) = 3,1386 * Cap(ton/dia H_2)^{0,7788}$				
Demanda de Gás Natural	Vazão de $H_2(ton/h)/0,218$				
Reposição anual catalisador	$C(EUR) = 420000 * \left(\frac{Cap\left(\frac{ton}{dia}H_2\right)}{200}\right)^{0,6}$				
O&M	3% CAPEX				
Make-up H <sub>2</sub> O	4,5% CAPEX				

Tabela 27. Dados base para planta de produção de H<sub>2</sub> por reforma a vapor.

Fonte: Autor, Aspen Plus V12, Collodi et al. (2017) e EPE, NT H<sub>2</sub> Cinza (2022).

As propriedades do gás natural utilizadas, de acordo com (COMGAS, 2022), foram de 9400 kcal para 1 m<sup>3</sup> de combustível, 1 MMBTU equivalente a 26,8 m<sup>3</sup> de gás natural, densidade absoluta a 20 graus Celsius e 1 atm de 0,766 kg/m<sup>3</sup>. Para o preço de compra o *input* fica como variável do usuário.

3.3.6 Produção por Reforma a Vapor do Metano com Captura de CO2

A reforma com captura de CO<sub>2</sub> segue o mesmo método de cálculo explicado na reforma padrão, entretanto, é acrescentado o custo de uma planta de captura de CO<sub>2</sub> com base na regressão dos dados da Nota Técnica de Hidrogênio Azul da EPE. O armazenamento e transporte desse CO<sub>2</sub> não foi considerado, sendo esse processo função dependente do cenário de análise. A Equação 16 descreve o comportamento de CAPEX da planta de captura com um OPEX especificado pela nota técnica mencionada de 2,5% do CAPEX.

$$CAPEX(US\$) = 2 * 10^7 * Cap \left(\frac{ton}{dia} H_2\right)^{0,6001}$$

Equação 16

### 3.3.7 Produção por Plasmólise e Fotocatálise

As tecnologias de plasmólise e fotocatálise ainda se encontram com baixo TRL, estando ainda em provas de conceito e definição de melhores rotas. Diante disso, análise econômicas e de balanço de processo em maior escala que não laboratoriais são escassas na literatura. Sendo assim, a partir de dados de Rehman *et al.* (2012), Parthasarathy & Narayanan (2014) e Dincer & Acar (2015), foram utilizados os seguintes custos médios de hidrogênio presentes na Tabela 28.

Tabela 28. Dados base	para plasmólise e fotocatálise.
-----------------------	---------------------------------

Tecnologia	Custo de produção (\$/kg)				
Plasmólise	6,36				
Fotocatálise	6,83				
Fonte: Rehman et al. (2012) e Parthasarathy & Narayanan (2014)					

Fonte: Rehman et al. (2012) e Parthasarathy & Narayanan (2014).

## 3.3.8 Transporte por Navio

O transporte via navio utilizou o seguinte banco de dados para cálculo de custos e balanço de perdas, apresentado na Tabela 29. O dimensionamento do sistema considerou a produção anual de H<sub>2</sub>, tendo a disponibilidade de um navio que realiza a viagem de entrega da carga e retorno ao porto de origem.

	Hidr	ogênio Líquido		Amônia		Tolueno
CAPEX Navio (160000 m <sup>3</sup> )	€	179.944.000,00	€	134.924.800,00	€	99.600.000,00
OPEX variável (EUR/Navio/Ano)	€	9.900.000,00	€	9.047.000,00	€	15.604.000,00
OPEX (%)		0,04		0,04		0,04
Armazenamento no Terminal (EUR/MWh H <sub>2</sub> )		750		226		239
<b>OPEX Armazenamento (%)</b>		0,02		0,02		0,02
Boil-off diário (%/100)		0,05		0,00024		0
Eficiência de reconversão		1		1		0,9
Degradação tolueno (%/Ciclo)		0		0		0,1

Tabela 29. Parâmetros de dimensionamento para transporte via navio.

Fonte: Al-Breiki & Bicer (2020), Wang *et al.* (2021), Derking *et al.* (2019), Sekkesæter (2019) e Mendelevitch (2023).

# 3.3.9 Transporte por Gasoduto

O transporte via gasoduto considera duas opções de sistema, sendo localizado *onshore* e *offshore*. O sistema considera o processo de compressão do H<sub>2</sub> sendo entregue a 60 bar para o processo *offshore* e 30 bar *onshore*, seguindo o padrão de projetos relacionados a uso de H<sub>2</sub> em gasodutos. É avaliado o custo de

diferentes especificações de tubulação e, além disso, para cálculo do custo de eletricidade é utilizado o preço de energia em \$/kWh do usuário. As Tabelas 30, 31 e 32 apresentam os dados base para dimensionamento.

Sistema de tubulação							
Especificação	100% da capacidade	75% da capacidade	25% da capacidade				
48 inch (MWe/1000km)	434	183	6				
36 inch (MWe/1000km)	93	40	2				
20 inch (MWe/1000km)	26	6	0,6				
Sistema de Compressão							
Especificação	100% da capacidade	75% da capacidade	25% da capacidade				
CAPEX compressor 48 pol - 1000 km	€ 1.475.600.000,00	€ 622.200.000,00	€ 20.400.000,00				
CAPEX compressor 36 pol - 1000 km	€ 316.200.000,00	€ 136.000.000,00	€ 6.800.000,00				
CAPEX compressor 20 pol - 1000 km	€ 88.400.000,00	€ 20.400.000,00	€ 2.040.000,00				

Tabela 30. Parâmetros de dimensionamento para transporte via gasoduto *onshore* (Utilidade e compressão).

Fonte: Wang et al. (2021).

Tabela 31. Parâmetros de dimensionamento para transporte via gasoduto onshore

Diâmetro	Gasoduto	Custo (EUR/m)				
48 pol	novo	2750				
36 pol	novo	2200				
20 pol	novo	1510				
48 pol	reutilizado	500				
36 pol	reutilizado	400				
20 pol	reutilizado	275				

Fonte: Wang *et al.* (2021).

Sistema	Valor	
Sistema de compressão (EUR/kg)	3,421	
Sistema de compressão – OPEX (%)	2,500	
Sistema de compressão – Eletricidade (kWh/kg)	1,030	
Gasoduto offshore	$Custo(M\$) = A + 0,3555A + 0,57125A$ $A = 13,3 \left(\frac{D(km)}{16}\right)^{0,6}$	

Tabela 32. Parâmetros de dimensionamento para transporte via gasoduto offshore.

Fonte: World Bank Group (2020) e Santos et al. (2023).

## 3.3.10 Transporte por Caminhão

O transporte via caminhão de hidrogênio gasoso, líquido orgânico, amônia e hidrogênio líquido representa os custos associados apenas ao transporte da carga de análise, sendo os processos de conversão e reconversão calculados nas seções de armazenamento. A partir da regressão dos dados de Nazir *et al.* (2020) foi possível obter os dados da Tabela 33. Assim como nas demais metodologias, o custo considera a produção anual de H<sub>2</sub>.

|--|

Tipo de transporte	Função custo de transporte (\$/kg)	
H₂ gasoso	0,0031 * D(km) + 0,3231	
Carreador líquido orgânico	0,0014 * D(km) + 0,1214	
Amônia	0,0008 * D(km) + 0,0493	
H₂ líquido	0,0006 * D(km) + 0,1203	
<b>—</b> .	•	

Fonte: Autor.

# 3.3.11 Armazenamento por Amônia

O armazenamento através de amônia considera todas as etapas necessárias para conversão e reconversão do H<sub>2</sub>, sendo eles: unidade de separação do ar; unidade de síntese; unidade de PSA; unidade de armazenamento; unidade de craqueamento. O sistema de utilidades também leva em consideração o custo da eletricidade fornecida pelo usuário e um custo de vapor de 0,000002002 EUR/kWh com base em dados do Aspen Plus 12. As Tabelas 34 e 35 fornecem os dados

regredidos de Sekkesæter (2019) para as funções custo e consumo específico de energia.

Unidade	e Função Custo (EUR)	
Unidade de separação do ar	44931,00 * $C\left(\frac{ton}{dia}H_2\right) + 2 * 10^7$	
Unidade de síntese de NH <sub>3</sub>	$103107,00 * C\left(\frac{ton}{dia}H_2\right) + 3 * 10^7$	
Unidade de PSA	$3135,20 * C\left(\frac{ton}{dia}H_2\right) + 5 * 10^6$	
Unidade de armazenamento	$844,86 * C\left(\frac{ton}{dia}H_2\right) + 50150$	
Unidade de craqueamento de NH <sub>3</sub>	$59513,00 * C\left(\frac{ton}{dia}H_2\right) + 3 * 10^7$	
Fonte: Autor.		

Tabela 34. Funções custo das unidades de conversão e reconversão.

Tabela 35. Utilidades das unidades de processamento.

Utilidades		
Unidade de Separação do ar (kWhe/kg H <sub>2</sub> )	0,745	
Refrigeração (kWhe/kg NH₃)	0,145	
Síntese de NH <sub>3</sub> (kWhe/kg H <sub>2</sub> )	1,469	
Craqueamento de NH <sub>3</sub> (kWhe/kgNH <sub>3</sub> )	0,002	
Craqueamento de NH <sub>3</sub> (kWh <sub>t</sub> /kg H <sub>2</sub> )	4,213	
Fanta: Calificantes (2010)	-	

Fonte: Sekkesæter (2019).

## 3.3.12 Armazenamento por Tolueno

O processo de armazenamento via tolueno compreende o processo de hidrogenação e desidrogenação, sendo o H<sub>2</sub> liberado numa pressão de 40 bar e 20 graus Celsius. Os dados de dimensionamento da planta consideram informações de balanço, make-up e custo avaliadas por IEA (2019), Byun *et al.* (2022) e Sekkesæter (2019). Dentro destes balanços é considerado o make-up de tolueno considerando uma perda de 10% por ciclo. A Tabela 36 fornece os dados de custo base.

Parâmetro	Custo		
Desidrogenação (Capacidade base – 417 kg/h H₂)	€ 2.500.000,00		
Desidrogenação (Capacidade base – 35416 kg/h H <sub>2</sub> )	€ 56.000.000,00		
Hidrogenação (Capacidade base – 750 kg/h H <sub>2</sub> )	€ 5.000.000,00		
Hidrogenação (Capacidade base – 69593 kg/h H <sub>2</sub> )	€ 120.000.000,00		
Utilidade Elétrica (kWh/kg H <sub>2</sub> )	1,940		
Utilidade Térmica (kWh/kg H <sub>2</sub> )	9,411		
Tolueno (EUR/kg)	0,800		
Custo Vapor (EUR/kWh)	2,00E-06		
Custo Eletricidade (\$/kWh)	Usuário <i>input</i>		

Tabela 36. Parâmetros de custo para o armazenamento de H<sub>2</sub> utilizando tolueno.

Fonte: IEA, the future of Hydrogen (2019), Byun et al. (2022), Aspen Plus V12 e

Sekkesæter (2019).

## 3.3.13 Armazenamento por Hidrogênio Líquido

Para o dimensionamento do sistema de armazenamento através de H<sub>2</sub> líquido foram utilizados os trabalhos de Al Ghafri *et al.* (2022), Sekkesæter (2019), Abdin *et al.* (2021) e Yang & Ogden (2008). A base de dados considera o processo de liquefação do hidrogênio bem como os custos de regaseificação e consumo de utilidades, com saída de H<sub>2</sub> a 40 bar e 20 graus Celsius. Os dados da unidade de liquefação foram regredidos de Al Ghafri *et al.* (2022) a partir de um tratamento dos dados utilizando *boxsplot* sendo retirados pontos *outliers*. Estes e demais dados podem ser encontrados na Tabela 37.

Parâmetro	Valor	
Planta de liquefação	$LCOS\left(\frac{\$}{kg}\right) = 8,7537 * C\left(\frac{ton}{dia}H_2\right)^{-0,349}$	
Planta de regaseificação CAPEX (capacidade 50,83 kg/h H <sub>2</sub> )	€ 173.300.000,00	
Planta de regaseificação OPEX (capacidade 50,83 kg/h H <sub>2</sub> )	2,5%	
Consumo de eletricidade – Planta de regaseificação	0,03 kWh/kg H <sub>2</sub>	
Fonte: Autor, Sekkesæter (2019) e Yang & Ogden (2008).		

Tabela 37. Parâmetros de custo para o armazenamento de H<sub>2</sub> líquido.

# 4 RESULTADOS

## 4.1 Validação do modelo

A validação dos algoritmos e modelagem dos sistemas de produção foi realizada comparando diferentes estudos de caso com os resultados da ferramenta desenvolvida. A Tabela 38 compila as informações que representam o custo médio do hidrogênio para a tecnologia de análise.

Tabela 38. Comparação de dados da literatura com dados do software para o custo médio do hidrogênio em diferentes tecnologias.

Sistema	LCOH Literatura	LCOH Autor
Reforma a vapor CH <sub>4</sub>	1,35 - Riera, <i>et al.</i> (2023)	1,68
Reforma a vapor CC	2,01 - Al-Qahtani, et al. (2021)	2,26
Gaseificação da biomassa	2,41 - H2A (2020)	2,82
Ciclo termoquímico S-I	1,93 - Wang et al. (2010)	1,73
Eletrólise Ligada a Rede	4,83 - H2A (2020)	5,91
BioH <sub>2</sub>	2,83 - Younas (2022)	2,98
Fonte: Autor.		

Como observado, os valores da modelagem proposta estão próximos dos *outputs* da ferramenta. Ressalta-se que devido a variações de abordagem (considerações de componentes do sistema, taxas, ano de referência) na avaliação do custo médio do H<sub>2</sub>, é esperada uma variação característica em torno de 1 \$/kg para capacidades de produção similares. Além disso, é observado um padrão de valor maior para os resultados deste trabalho devido ao fator de ajuste de ano. A tecnologia de ciclo termoquímico foi a única nesta análise que teve resultado menor que o autor da literatura, isso deve-se ao conjunto de banco de dados utilizados que, por consequência, resultou numa estimativa menor que Wang *et al.* (2010).

### 4.2 Estudo de caso 1

A metodologia proposta foi utilizada no estudo de caso de Santos *et al.* (2023). O artigo avaliou o custo médio do H<sub>2</sub> na Bahia sendo produzido através da eletrólise PEM utilizando energia renovável, considerando armazenamento e transporte.

Foram criados 4 cenários no total, utilizando escalas de 50 MW e 100 MW para cada fonte renovável, sendo dois com utilização de uma usina solar fotovoltaica localizada no mesmo local que a produção de H<sub>2</sub> e dois com produção *offshore* de H<sub>2</sub>, acoplados aos aerogeradores numa distância de 13 km da costa baiana com transporte via gasoduto. Para modelagem do sistema de energia foram utilizados dados médios de irradiância solar e velocidade de vento nos respectivos locais da Bahia.



Figura 43. LCOH Solar PV and Offshore Wind Power 50 MW and 100 MW.

Como observado na Figura 43, a estratégia solar fotovoltaica apresenta o melhor desempenho no custo nivelado do hidrogênio. No entanto, é importante observar as vantagens e desvantagens de cada proposta. A energia solar fotovoltaica requer uma área maior do que a energia eólica *offshore*, e isso pode ser uma restrição na operação de uma usina. Além disso, a energia eólica *offshore* 

Fonte: Santos et al. (2023).

ainda está em processo de ser mais competitiva nos próximos anos e, apesar do custo mais alto no ano analisado, a tecnologia tem a vantagem de uma grande área disponível no mar (McDonagh, 2020). Além disso, com o objetivo do governo brasileiro de ampliar os projetos de descarbonização, decisões políticas e marcos regulatórios podem viabilizar a implementação da estratégia e reduzir custos.

Ademais, mesmo a energia solar fotovoltaica tendo o menor custo nessa análise, é importante ressaltar a disponibilidade intermitente dessa fonte durante o dia como a eólica (Minutillo, 2021). Portanto, isso deve ser uma restrição em um projeto. Neste caso, um esquema híbrido com energia eólica deve satisfazer esse problema que também afeta a usina eólica *offshore* (OWPP) com a velocidade variando ao longo do dia. Dessa forma, ambas as estratégias poderiam complementar a falta de fonte de energia durante um dia nublado ou um período com menor velocidade do vento, por exemplo.

Seguindo o estudo dos anos anteriores, a viabilidade de projetos renováveis está se tornando mais real, especialmente em países como o Brasil, onde as fontes renováveis são abundantes. O LCOH calculado já está atingindo o preço atual da reforma do metano a vapor, que é a tecnologia líder para produzir hidrogênio atualmente. No entanto, a intermitência das energias solar e eólica ainda é um desafio. Portanto, para descarbonizar a fonte de energia quase totalmente em uma planta de produção de hidrogênio, a intermitência de energia renovável deve ser superada.

Um dos principais resultados do artigo, além de enfatizar o potencial de produção na Bahia, foi ressaltar a necessidade de consideração de intermitência das energias renováveis para eletrólise PEM. Sendo assim, foi implementado após esse trabalho a possibilidade de utilizar o fator de capacidade por hora de plantas reais (de geração de energia) para avaliar o impacto no custo final do hidrogênio. Além disso, como a produção é considerada contínua por 8000 h, identificou-se a necessidade de avaliar o impacto na pegada de carbono, uma vez que, é considerado o uso de eletricidade da rede para suprir as intermitências da planta. Neste estudo específico não houve avaliação da pegada de carbono, entretanto serviu como base de desenvolvimento da metodologia e identificar pontos chave da modelagem que serão utilizados nos próximos estudos de caso.

#### 4.3 Estudo de caso 2

Para o segundo estudo de caso, foi definido o seguinte sistema para avaliar a funcionalidade da ferramenta: geração de energia utilizando dados de fator de capacidade da usina eólica, potência da planta de eletrólise de 10 MW, armazenamento comprimido com tanques tipo I, transporte via caminhão percorrendo 1000 km via H<sub>2</sub> líquido. O país de análise escolhido foi o Brasil, visto que a unidade de geração é localizada no país e foram utilizados os valores padrões da ferramenta de 8000 horas de operação anuais, considerando 20 anos de tempo de vida. Como resultado, as Figuras 44, 45 e 46 mostram o resultado dos custos de LCOH, as perdas associadas aos transportes e a pegada de carbono para as tecnologias selecionadas.



Figura 44. Distribuição do custo total de H<sub>2</sub>.

Fonte: Autor.

Como resultado, presente na Figura 44, a soma do LCOH totalizou 2,04 \$/kg de H<sub>2</sub> com participação do LCOP de 0,80 para a eletrólise, LCOS de 0,10 e LCOT de 1,13, demonstrando que neste cenário o transporte tem um impacto 41,25% maior que a produção, com contribuição pequena do armazenamento. Da perspectiva de projeto, é evidenciado um possível aperfeiçoamento do custo total focando na logística de distância do transporte do local de produção. As perdas associadas ao processo de *boil-off*, embutidas no cálculo do LCOH, podem ser observadas na

Figura 45. O resultado considerando as perdas permite ao projeto compreender se no cenário estudado existe uma perda significativa ou não durante o transporte. Uma vez que, o *boil-off* durante o transporte de H<sub>2</sub> líquido é um fenômeno que sempre ocorre, mantê-lo sobre controle é uma peça fundamental para avaliar positivamente ou negativamente a cadeia de suprimentos do H<sub>2</sub> e, consequentemente, os seus impactos no custo.



Figura 45. Perdas do transporte de H<sub>2</sub> líquido por caminhão.

Fonte: Autor.

Além do cenário base, utilizando a ferramenta da plataforma Hyjack, e com as mesmas especificações deste estudo de caso, foi calculado o custo de produção para a eletrólise alcalina, com o intuito de comparar uma tecnologia já consolidada, com uma em ascensão, neste caso, a eletrólise PEM. Para uma unidade de eletrólise de 10 MW, o Hyjack fornece um CAPEX de \$ 9.3778.132 e OPEX de 4% deste valor, utilizando a Equação 10 e a metodologia descrita no capítulo 3.1 de parâmetros econômicos, é obtido um LCOP de 0,89 \$/kg para a eletrólise alcalina. A proximidade com o valor de 0,80 \$/kg da eletrólise PEM, indica um beneficiamento da tecnologia PEM nesta escala, favorecendo a competitividade das tecnologias devido ao custo de produção similar. Entretanto, como nesta análise a eletricidade gerada para a eletrólise PEM utiliza dados do fator de capacidade de um local com abundância de energia renovável, há um favorecimento de custo para a tecnologia

PEM, tendo em vista que a tendência de menor custo é da eletrólise alcalina, uma vez que os materiais dos equipamentos da planta são menos custosos que a unidade de eletrólise PEM, onde os equipamentos utilizam metais mais raros na sua composição, como irídio e platina, para o eletrolisador. O ponto chave é compreender que o *trade-off* entre tecnologias mais caras e baratas é função dependente da principal variável do processo de eletrólise, a eletricidade, ou seja, caso haja disponibilidade de um custo de energia menor ao processo, é possível encontrar custos de produção similares para tecnologias mais sofisticadas, como neste estudo de caso, a eletrólise PEM frente a alcalina.

Para a pegada de carbono, o modelo considera as intermitências de geração com utilização de energia da rede, devido a isso, a seção de produção ocasiona em emissões maiores, podendo este ser mitigado com um dimensionamento adequado de geração de energia renovável, o que reduziria a necessidade de uso da rede. A Figura 46 extraída da ferramenta traz o resultado dividido por categoria, totalizando 3732 toneladas de CO<sub>2</sub> emitidas anualmente.



Figura 46. Pegada de carbono das tecnologias do estudo de caso 2.

Fonte: Autor.

É possível avaliar o impacto das diferentes etapas na cadeia de suprimentos do H<sub>2</sub> frente as emissões, observando maior contribuição da seção de produção e parcelas similares para armazenamento e transporte, mesmo este último tendo uma distância considerável de 1000 km.

Os resultados da ferramenta foram capazes de avaliar a distribuição de custo do estudo de caso com as tecnologias escolhidas. A partir das análises, decisões primárias de projeto podem ser mais bem direcionadas com os resultados preliminares e auxiliar no processo de tomada de decisão.

### 4.4 Estudo de caso 3

O estudo de caso 3 apresenta os resultados gerais da ferramenta para diferentes escalas de produção de H<sub>2</sub>, definidos para 100 e 1000 kg/h. O objetivo é compreender o comportamento do custo e da pegada de carbono dos sistemas em diferentes escalas e a relação entre os resultados. São apresentados diversos gráficos de resultado da ferramenta, para tanto, os valores *default*, apresentados na Tabela 39, com os parâmetros de entrada foram escolhidos. Além disso, foi considerado o preço do gás natural de 5 US\$/MMBtu, eletrólise PEM ligada a rede, o Brasil para o WACC e distâncias de 30, 500 e 3000 km para os transportes via gasoduto, caminhão e navio, respectivamente.

Parâmetro	Default	
Horas de operação	8000	
Boil-off LH2 Caminhão	0,10 %/dia	
Boil-off NH <sub>3</sub> Caminhão	0,04 %/dia	
Boil-off LH <sub>2</sub> Navio	0,05 %/dia	
Boil-off NH <sub>3</sub> Navio	0,00024 %/dia	
Preço eletricidade	0,07 (US\$/kWh)	
Capacidade do navio	160000 m <sup>3</sup>	
— · · · ·		

Tabela 39. Parâmetros default da ferramenta.

Fonte: Autor.

A Figura 47 apresenta o comportamento do LCOH das diferentes tecnologias para uma vazão de 100 kg/h de H<sub>2</sub>. As tecnologias de reforma a vapor do metano e produção de biohidrogênio utilizando resíduo de comida apresentaram os melhores resultados. Entretanto, é válido ressaltar que devido ao baixo TRL dos processos

bioquímico e as incertezas de escalonamento dessas tecnologias para manter uma produção contínua, este valor funciona como uma estimativa base utilizando dados da literatura e o auxílio da metodologia deste trabalho. No caso da reforma a vapor do metano, por se tratar de um processo versátil e consolidado, o comportamento do CAPEX e OPEX se ajustam bem à diferentes escalas de operação. Em contraste, a reforma a vapor do metano com captura de CO<sub>2</sub> performa um LCOH de 7,31, indicando que a adição do processo de captura em escalas menores não é o suficiente para manter o baixo custo de produção característico da reforma a vapor do metano.

Figura 47. Resultados do LCOH da ferramenta para vazão de 100 kg/h empregando diferentes tecnologias de produção de H<sub>2</sub>.



Fonte: Autor.

Por se tratar de uma vazão de 100 kg/h, tecnologias de ciclo termoquímico e gaseificação da biomassa apresentaram valores maiores que 10 dólares por kg de H<sub>2</sub>. Neste caso, a performance destes processos é beneficiada de vazões maiores e, como esperado, resultam em alto custo para vazões menores. A Figura 48 apresenta os resultados para as tecnologias de armazenamento.



Figura 48. Resultados do LCOS da ferramenta para vazão de 100 kg/h.

A análise nesta escala demonstrou que o armazenamento comprimido (Tipos I, II, III e IV) exibiu um menor LCOS) em comparação com os métodos de armazenamento envolvendo amônia, tolueno e criogênico, os quais demonstraram valores substancialmente mais elevados. Essa disparidade pode ser atribuída à maior complexidade inerente a esses processos. Por exemplo, a implementação de uma planta de captura de ar e síntese de amônia acarreta custos significativos ao projeto, exigindo uma vazão de produto mais elevada para compensar os custos operacionais da planta. Esse princípio é aplicável tanto ao tolueno quanto à liquefação. Os resultados do LCOT, conforme ilustrado na Figura 49, apresentam uma comparação das tecnologias disponíveis para o transporte na ferramenta.

Fonte: Autor.

Figura 49. Resultados do LCOT da ferramenta para vazão de 100 kg/h.





Novamente a escala de produção é evidenciada como fator chave para escolha de diferentes estratégias de transporte. No caso do transporte via gasoduto, principalmente para sistemas novos, existe um alto investimento associado para lidar com os riscos de transporte do H<sub>2</sub> (*embrittlement*) além dos custos de implementação que envolvem desde licitações de uso do terreno até os materiais e logísticas de construção. No caso das tubulações reutilizadas, apesar do menor LCOT e por existir reutilização de infraestruturas auxiliares, a baixa escala de produção reflete em um LCOS que varia de 23 a 166, inferior aos cenários de tubulação nova. Em outra análise, a performance do transporte via caminhão

apresentou menor LCOT por se tratar da escala de utilização adequada para esse modal e o baixo custo em comparação aos demais modais.

Na Figura 49, são apresentados os resultados das emissões anuais de CO<sub>2</sub> para o cenário de 100 kg/h.

Figura 50. Resultados do CO<sub>2</sub> da ferramenta para vazão de 100 kg/h nos sistemas de produção.



Fonte: Autor.

Os resultados do total de emissões para as tecnologias de produção evidenciaram uma comparação interessante de cenários entre a reforma convencional e a eletrólise PEM. Por fazer uso da eletricidade da rede, o total de emissões da eletrólise chegou próximo ao da reforma do gás natural, indicando que mesmo uma tecnologia considerada de baixo carbono pode apresentar alta taxa de emissão. Neste cenário, mesmo utilizando a matriz elétrica brasileira, uma das mais renováveis no mundo, a demanda energética intensiva da eletrólise indiretamente provoca emissões anuais de CO<sub>2</sub> comparáveis com a reforma convencional. O processo de reforma com captura, por sua vez, reduz consideravelmente a pegada de carbono, porém como evidenciado nos custos da Figura 47 – na escala de 100 kg/h – resulta em um LCOH menos atrativo.

Os resultados das emissões anuais para as diferentes tecnologias de armazenamento, que considera as utilidades de energia elétrica e térmica necessárias para operação, são apresentados na Figura 51.

Figura 51. Resultados do CO<sub>2</sub> da ferramenta para vazão de 100 kg/h nos sistemas de armazenamento.





No gráfico acima é observado o impacto do uso de energia térmica no processo. O armazenamento via LOHC, que requer a desidrogenação do H<sub>2</sub>, implica no uso intensivo de gás natural, que o faz se destacar a processos também intensivos energeticamente como liquefação e amônia. Entretanto, por não possuírem a mesma dinâmica de armazenamento que a destas tecnologias, acaba se destacando. Armazenamento comprimido por sua vez, por ser um processo mais simples e utilizando energia para manter as condições, apresenta valores menores de emissão.

As emissões associadas aos modais de transporte estão diretamente relacionadas a distância projetada, e são apresentados na Figura 52.



Figura 52. Resultados do CO<sub>2</sub> da ferramenta para vazão de 100 kg/h nos sistemas de transporte.

Nos sistemas de transporte por navio, tolueno apresenta maior emissão devido a maior carga necessária para transportar a mesma quantidade de H<sub>2</sub> que seria transportada via amônia, por exemplo. Este fato está diretamente ligado a densidade gravimétrica de cada componente, sendo assim, quanto maior for a carga necessária maior será a quantidade de combustível requerido que,

Fonte: Autor.

consequentemente, aumenta as taxas de emissões. Os transportes via caminhão e tubulação, em contrapartida, apresentaram valores significantemente menores, já que fazem uso de combustíveis menos poluentes que os de navio e, neste estudo de caso, foram modelados para distâncias menores, 30 km de tubulação, 500 km para transporte via caminhão e 3000 km para transporte via navio.

A Figura 53 apresenta os resultados de comparação do LCOH para as duas escalas do estudo de caso, 100 kg/h e 1000 kg/h.

Figura 53. Comparação do LCOH para as escalas de 1000 e 100 kg/h.



### Fonte: Autor.

Ao extrair da ferramenta os resultados para o cenário de 1000 kg/h, é observado na Figura 53 o beneficiamento de diversas tecnologias com o fator de escala de produção, principalmente gaseificação, processos bioquímicos e ciclos termoquímicos, já que são tecnologias projetadas para vazões maiores de operação. Nesta capacidade, a reforma com captura se aproxima dos 2 \$/kg do processo de

reforma convencional, indicando uma performance melhor que o sistema de 100 kg/h. Algumas tecnologias como reforma a vapor do metano e eletrólise, por outro lado, apresentaram pouca variação para a escala de análise, evidenciando uma maior estabilidade na variação de custo entre os sistemas avaliados. Plasmólise e fotocatálise – tecnologias com os menores TRL – resultam em estimativas equivalentes nas duas escalas. A Figura 54 apresenta a variação da escala para o LCOS.



Figura 54. Comparação do LCOS para as escalas de 1000 e 100 kg/h.

Assim como o LCOH, o LCOS traz como resultado, na Figura 54, o impacto causado pela escala nos sistemas mais complexos de amônia e liquefação, sem variação nos sistemas de compressão. Este sistema de compressão está mais correlacionado com a quantidade armazenada do que o custo específico por escala. O armazenamento via tolueno, por sua vez, apresentou pouca mudança com a escala, mas ainda assim uma redução de 4 e 6% considerando as etapas de desidrogenação e hidrogenação, respectivamente. Esse tipo de análise permite

Fonte: Autor.

identificar o comportamento do custo das tecnologias de armazenamento e, com o auxílio da ferramenta, podem ser avaliadas nas escalas de interesse do usuário e serem observadas as performances separadamente e a comparação com as demais tecnologias. A Figura 55 apresenta os custos das diferentes tecnologias de transporte para as duas escalas de análise deste estudo de caso, 100 kg/h e 1000 kg/h.



Figura 55. Comparação do LCOT para as escalas de 1000 e 100 kg/h.

Fonte: Autor.

No que se refere aos LCOTs, representados na Figura 54, além do beneficiamento considerável com a escala, é observado um comportamento similar do sistema comprimido para o modal caminhão. Os projetos de tubulação, neste cenário, são função dependente da vazão de operação e a distância percorrida, dessa maneira, é esperado um comportamento de diminuição do LCOT com o aumento da escala e redução da distância. Portanto, uma análise holística permite entender o beneficiamento de uma tecnologia de transporte ou o ponto em que ela passa a ser viável economicamente do ponto de vista do tomador de decisão.

Para as emissões, a correlação é mais direta com base na metodologia deste estudo, existindo um crescimento proporcional com a vazão de operação. Sendo assim, as Figuras 56, 57 e 58 apresentam resultados que evidenciam esse comportamento.



Figura 56. Comparação dos resultados emissões CO<sub>2</sub> da ferramenta para o LCOH.

Fonte: Autor.

Apesar do crescimento proporcional, é importante avaliar o quanto o aumento da escala de produção irá estar dentro da margem de aceitabilidade do projeto, podendo ser pautada em legislações, métricas de projeto ou especificação técnica.



Figura 57. Comparação dos resultados emissões CO2 da ferramenta para o LCOS.

Fonte: Autor.

Explorado nas Figuras 56, 57 e 58, a emissão de dióxido de carbono equivalente, dentro do período de um ano, neste caso, podendo ser alterado através da ferramenta o período, apresenta taxas específicas para cada tecnologia. Sendo assim, o ponto de interesse ao tomador de decisão é avaliar as diferentes taxas e os resultados em cada cenário de análise. Nas Figuras 57 e 58, por exemplo, o transporte de hidrogênio via navio e armazenamento por tolueno resultam nas maiores taxas de emissões anuais, diante disso, caso exista restrições de projeto, as demais tecnologias funcionam como outras opções a serem consideradas, como a escolha pelo transporte via caminhão e amônia neste estudo de caso, que apresentam os menores valores nas duas escalas.



Figura 58. Comparação dos resultados emissões CO2 da ferramenta para o LCOT.

Fonte: Autor.

## 4.5 Ferramenta DMMH2

Este tópico demonstra a interface desenvolvida para a ferramenta DMMH<sub>2</sub> (*Decision Making Model for Hydrogen*). Ilustrado na Figura 59, ao iniciar a ferramenta a janela principal é aberta. A divisão dos *inputs* é organizada em três seções: uma para configuração da eletrólise PEM, localizada a esquerda, com os dados necessários para o cálculo da geração de energia e dimensão do sistema de eletrólise; a segunda, no centro, define os parâmetros gerais utilizados para os cálculos dos processos de produção, armazenamento e transporte; e uma terceira seção a direita, com as opções de tecnologias a serem escolhidas com o intuito de gerar um gráfico de análise do usuário num cenário específico. Os Anexo B e C apresentam a descrição da ferramenta DMMH<sub>2</sub>.



Figura 59. Ferramenta DMMH<sub>2</sub>.



Após a escolha dos parâmetros e escolha por convergência no botão "convergir" (localizado no canto superior direito), os dados são inseridos nos respectivos módulos de cálculo. Nesta versão, os módulos apresentados na Figura 61 precisam ser acionados manualmente para o processo de convergência dos cálculos de balanço de massa, cálculo de perdas e resultados econômicos, sendo, especificamente, para as tecnologias de transporte via caminhão e navio e tecnologia de produção por gaseificação da biomassa.

Figura 60. Pacotes DMMH<sub>2</sub> com convergência manual.



Fonte: Autor.

As abas LCOX, CO<sub>2</sub>eq e User, apresentados na Figura 61, fornecem, respectivamente, os resultados gerados pela ferramenta para o custo médio do hidrogênio com todas as tecnologias, as emissões associadas a cada processo em função dos parâmetros do usuário e o bloco "User" compila informações do cenário de análise do usuário (informações do custo médio para as tecnologias escolhidas e perdas dos processos de transporte). O Anexo D apresenta a localização e interface inicial da ferramenta DMMH<sub>2</sub>.

Figura 61. Abas de seleção de resultados da ferramenta DMMH2.



Fonte: Autor.

Na Seção de configuração da geração de energia, como ilustrado na Figura 62, é possível fazer a escolha do método de convergência para diferentes fontes de energia da eletrólise PEM. Além disso, é permitido o uso de dados do fator de capacidade inseridos pelo usuário.

Figura 62. Configuração DMMH<sub>2</sub> para geração de energia.

			Eólica 100%
Eólica		Atualizar dador	
Edica I	Adicionar dados		
Solar			
Dados Usuário Eólica			dado macro eólica
Dados Usuário Solar Litergia Kequenua (Own/ano)	Convergir Solar	Convergir Eólica	4,97235988
114,0924303			



A ferramenta desenvolvida abrange a representação de 33 rotas de produção de hidrogênio, 7 opções de armazenamento e 26 métodos de transporte, facilitando a análise de variados cenários dentro da cadeia de produção, armazenamento e distribuição do hidrogênio. Além disso, é permitida uma quantificação detalhada das emissões geradas em cada processo, bem como a emissão total acumulada. Utilizando diferentes parâmetros para as tecnologias em questão, é possível realizar uma análise aprofundada, permitindo ao usuário compreender os impactos

específicos de cada escala operacional nas diversas fases da cadeia de valor do hidrogênio e nas respectivas emissões de CO<sub>2</sub> equivalente. Essa abordagem multifacetada contribui significativamente para o discernimento dos cenários mais sustentáveis e eficientes em termos econômicos e de emissões.

## 5 CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS

O desenvolvimento da ferramenta de auxílio a tomada de decisão para a cadeia de produção do hidrogênio, o DMMH<sub>2</sub>, foi capaz de gerar informações *up to date* utilizando uma extensa base de dados de acordo com a metodologia proposta. A modelagem matemática das tecnologias de geração de energia, produção, armazenamento e transporte, através de balanços de massa e energia, permitiu a utilização dos indicadores econômicos e ambientais escolhidos neste trabalho, dividindo-os em diferentes categorias e parâmetros globais de custo e emissões dos processos. Diante disso, diferentes interpretações de cenários puderam ser investigadas através dos estudos de caso avaliados, além disso, a capacidade da ferramenta permite o desenvolvimento de análises que estejam de acordo com a necessidade do usuário.

Da perspectiva técnica, os valores de resultado dos custos mostraram-se condizentes com outras ferramentas de análise como o H2A e Hyjack. Além disso, foi possível preencher lacunas no método de modelagem da cadeia do hidrogênio, considerando etapas e heurísticas necessárias aos sistemas de análise como o ajuste de escala para comparação de diferentes tecnologias, correção do ano de análise e sistematização do processo de modelagem da cadeia de suprimentos de forma integrada. Ao total, a ferramenta possui a capacidade de auxiliar e gerar *insights* em projetos de cadeia de suprimentos do H<sub>2</sub> com a representação de 33 rotas de produção, 7 tecnologias de armazenamento e 26 configurações de transporte.

Para trabalhos futuros e aperfeiçoamento da metodologia são apresentadas as seguintes sugestões:

 Atualização da base de dados das modelagens com dados mais recentes. Este trabalho reuniu base de informações disponíveis na literatura, *softwares* de simulação e informações de fornecedores até o período de 2023. Entretanto, com o amadurecimento do mercado de H<sub>2</sub>, novas informações,
bases de dados e comportamentos de custos de tecnologias podem sofrer variações;

- Aperfeiçoamento da modelagem de tecnologias presentes na ferramenta. Tecnologias de fotocatálise, plasmólise, eletrólise possuem melhorias a serem realizadas, como: inclusão do modelo de eletrólise alcalina, dados experimentais de fotocatalisadores e plasmólise;
- Inclusão de novas tecnologias, por se tratar de uma ferramenta capaz de fornecer estimativas iniciais para diferentes cenários de rotas de produção, armazenamento e transporte do H<sub>2</sub>, tecnologias que se mostrem promissoras podem ser inclusas, como é o caso da eletrólise de óxido sólido;
- Inventário do cálculo de emissões de CO<sub>2</sub>. O cálculo do GWP fez uso de uma série de análises de ciclo de vida disponíveis na literatura. A inclusão de novas metodologias e revisão de inventários podem ser modificadas com o desenvolvimento de novas tecnologias, contribuindo para uma análise mais precisa do impacto de emissões para diferentes tecnologias;
- A interface desta ferramenta foi implementada no Microsoft Excel com diversas rotinas em VBA, contudo, sua implementação em plataformas que forneçam maior diversidade de ferramentas de interface tornaria mais intuitiva a utilização, fazendo melhor uso dos recursos embutidos na ferramenta. Um exemplo de melhoria seria a implementação de construção de diferentes cenários fazendo uso de fluxogramas interativos onde os blocos seriam as opções de tecnologias disponíveis neste estudo (similar a interface *flowsheet* do Aspen Plus);
- Atualização do CEPCI, este estudo utilizou os índices disponíveis para o ano de 2022, com o lançamento dos novos valores a manutenção da confiabilidade dos valores financeiros deve ser acompanhada;
- Inclusão do tripé social da sustentabilidade no modelo desenvolvido. Sugerese a estruturação de um modelo multicritério capaz de considerar os impactos sociais durante todas as etapas de produção, armazenamento e transporte.

#### 6 REFERÊNCIAS

- ACAR, C., & Dincer, I. (2014). Comparative assessment of hydrogen production methods from renewable and non-renewable sources. In International Journal of Hydrogen Energy (Vol. 39, Issue 1, pp. 1–12). https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2013.10.060
- ACAR, C., Dincer, I., & Zamfirescu, C. (2014). A review on selected heterogeneous photocatalysts for hydrogen production. In International Journal of Energy Research (Vol. 38, Issue 15, pp. 1903–1920). John Wiley and Sons Ltd. https://doi.org/10.1002/er.3211
- AHLUWALIA, R.K, H.-S. Roh, J.-K. Peng, D. Papadias, A.R. Baird, E.S. Hecht, B.D. Ehrhart, A. Muna, J.A. Ronevich, C. Houchins, N.J. Killingsworth, S.M. Aceves, Liquid hydrogen storage system for heavy duty trucks: Configuration, performance, cost, and safety, International Journal of Hydrogen Energy, Volume 48, Issue 35, 2023, Pages 13308-13323, ISSN 0360-3199, https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2022.12.152.
- AHMED, S. F., Rafa, N., Mofijur, M., Badruddin, I. A., Inayat, A., Ali, M. S., Farrok, O., & Yunus Khan, T. M. (2021). Biohydrogen Production From Biomass
  Sources: Metabolic Pathways and Economic Analysis. In *Frontiers in Energy Research* (Vol. 9). Frontiers Media S.A. https://doi.org/10.3389/fenrg.2021.753878
- AL GHAFRI *et al.* Hydrogen liquefaction: a review of the fundamental physics, engineering practice and future opportunities. Energy & Envinronmental Science, 2022.
- AL-BREIKI, M. & Bicer, Y. Technical assessment of liquefied natural gas, ammonia, and methanol for overse energy transport based on energy and exergy analyses. Hydrogen Energy (2020).
- AL-BREIKI, M., & Bicer, Y. (2020). Comparative cost assessment of sustainable energy carriers produced from natural gas accounting for boil-off gas and social cost of carbon. *Energy Reports*, 6, 1897–1909. https://doi.org/10.1016/j.egyr.2020.07.013
- AMARAL, Marcelo Marques do. Avaliação técnica do transporte e do armazenamento de hidrogénio visando a descarbonização do sistema energético nacional. Universidade Nova de Lisboa, 2021.

AMOS, W. A. (1999). Updated Cost Analysis of Photobiological Hydrogen Production from Chlamydomonas reinhardtii Green Algae: Milestone Completion Report. http://www.osti.gov/bridge

- ANDERSSON, J., & Grönkvist, S. (2019). Large-scale storage of hydrogen. In International Journal of Hydrogen Energy (Vol. 44, Issue 23, pp. 11901–11919). Elsevier Ltd. https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2019.03.063
- ATLAS H<sub>2</sub>. Atlas do hidrogênio verde na Bahia. Cimatec, 2023.
- ATLAS SOLAR BAHIA. Centro Universitário SENAI CIMATEC.
- AZIZ, M. Liquid Hydrogen: A Review on Liquefaction, Storage, Transportation, and Safety. Energies 2021, 14, 5917. <u>https://doi.org/10.3390/en14185917</u>
- BAYOTECH. Bulk hydrogen transport trailers. Disponível em: https://bayotech.us/bulk-hydrogen-transport-trailers/. Último acesso em 10 de dezembro de 2022.
- BESSARABOV, D., Millet, P., Pollet, B. (2018). In PEM Water Electrolysis (pp. i–iii). Elsevier. https://doi.org/10.1016/b978-0-08-102830-8.00006-0
- BUDAMA, V. K., Johnson, N. G., Ermanoski, I., & Stechel, E. B. (2021). Technoeconomic analysis of thermochemical water-splitting system for Coproduction of hydrogen and electricity. *International Journal of Hydrogen Energy*, 46(2), 1656–1670. https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2020.10.060
- BYUN, M. *et al.* Preliminary feasibility study for hydrogen storage using several promising liquid organic hydrogen carriers: Technical, economic, and envinronmental perspectives. Energy Conversion and Management (2022).
- CASTRO, de Nivalkde.Leal Braga, S., Pradelle, F., Chaves, A. C., & Chantre, C. (n.d.). **A Economia do Hidrogênio Transição, descarbonização e oportunidades para o Brasil.** 2023.
- CASTRO, J., Leaver, J., & Pang, S. (2022). Simulation and Techno-Economic Assessment of Hydrogen Production from Biomass Gasification-Based Processes: A Review. In *Energies* (Vol. 15, Issue 22). MDPI. https://doi.org/10.3390/en15228455

- CHANDRASEKHAR, K., Kumar, S., Lee, B. D., & Kim, S. H. (2020). Waste based hydrogen production for circular bioeconomy: Current status and future directions. In *Bioresource Technology* (Vol. 302). Elsevier Ltd. https://doi.org/10.1016/j.biortech.2020.122920
- CHARVIN, P., Stéphane, A., Florent, L., & Gilles, F. (2008). Analysis of solar chemical processes for hydrogen production from water splitting thermochemical cycles. *Energy Conversion and Management*, 49(6), 1547– 1556. https://doi.org/10.1016/j.enconman.2007.12.011
- CLARKE, *et al.* **Direct coupling of an electrolyser to a solar PV system for generating hydrogen.** Hydrogen Energy (2009).
- CLIMA EM CURSO; Aquecimento global; Disponível em: <u>https://www.climaemcurso.com.br/blog-1/</u>. Último acesso em 10 de dezembro de 2022.
- COLLODI, G., Azzaro, G., Ferrari, N., & Santos, S. (2017). Techno-economic Evaluation of Deploying CCS in SMR Based Merchant H2 Production with NG as Feedstock and Fuel. Energy Procedia, 114, 2690–2712. https://doi.org/10.1016/j.egypro.2017.03.1533
- COMGAS. Acesso em 1 de dezembro de 2022: <u>https://www.comgas.com.br/para-industria/caracteristicas-do-gas-natural/#:~:text=Densidade%20absoluta%3A%200%2C766%20kg%2Fm3,°C%3</u> <u>B%201%20atma</u>).
- CORGNALE, C., & Summers, W. A. (2011). Solar hydrogen production by the Hybrid Sulfur process. International Journal of Hydrogen Energy, 36(18), 11604–11619. https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2011.05.173
- CUI, J., & Aziz, M. (2023). Techno-economic analysis of hydrogen transportation infrastructure using ammonia and methanol. *International Journal of Hydrogen Energy*.https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2023.01.096
- DAHIYA, S., Chatterjee, S., Sarkar, O., & Mohan, S. V. (2021). Renewable hydrogen production by dark-fermentation: Current status, challenges and perspectives. In *Bioresource Technology* (Vol. 321). Elsevier Ltd. https://doi.org/10.1016/j.biortech.2020.124354

- DELL'ORTO, A., & Trois, C. (2022). Considerations on bio-hydrogen production from organic waste in South African municipalities: A review. South African Journal of Science, 118. https://doi.org/10.17159/sajs.2022/12652
- DERKING, H., van der Togt, L., Keezer, M., & Bv, C. (n.d.). *Liquid Hydrogen Storage: Status and Future Perspectives.*
- DINCER, I. & Acar, C. Review and evaluation of hydrogen production methods for better sustainability. Hydrogen energy (2015).
- DINESH, G. K., Chauhan, R., & Chakma, S. (2018). Influence and strategies for enhanced biohydrogen production from food waste. In *Renewable and Sustainable Energy Reviews* (Vol. 92, pp. 807–822). Elsevier Ltd. https://doi.org/10.1016/j.rser.2018.05.009
- DOS SANTOS, G. D. S., Marinho, B., Santana, L. O. S., Bispo, A. S., Pessoa, F. L. P., Almeida, J. L. G., & Calixto, E. S. Hydrogen production using renewable energy: solar PV and offshore wind power-An economic evaluation in Bahia. ESCAPE 33.
- DUTTA, A., Talmadge, M., Hensley, J., Worley, M., Dudgeon, D., Barton, D., Groenendijk, P., Ferrari, D., Stears, B., Searcy, E. M., Wright, C. T., & Hess, J. R. (2007). Process Design and Economics for Conversion of Lignocellulosic Biomass to Ethanol: Thermochemical Pathway by Indirect Gasification and Mixed Alcohol Synthesis. http://www.osti.gov/bridge
- EL-EMAM, R. S., & Khamis, I. (2017). International collaboration in the IAEA nuclear hydrogen production program for benchmarking of HEEP. International Journal of Hydrogen Energy, 42(6), 3566–3571. https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2016.07.256
- ENERGY AGENCY, I. IEA. Offshore Wind Outlook 2019: World Energy Outlook Special Report. www.iea.org/t&c/
- EPE, **Bases para a consolidação da estratégia brasileira do hidrogênio**. Ministério de Minas e Energia. 2021.

- EPE, **Hidrogênio Azul: Produção a partir da reforma do gás natural com CCUS**. Ministério de Minas e Energia. 2022.
- EPE, **Produção e consumo de hidrogênio em refinarias no Brasil**. Ministério de Minas e Energia. 2022.
- EPE. Hidrogênio azul: produção a partir da reforma do gás natural com CCUS. Ministério de Minas e Energia 2022.
- EPE, Empresa de Pesquisa Energética. Roadmap Eólica Offshore. **Perspectivas e caminhos para a energia eólica marítima**. Ministério de Minas e Energia, 2020.
- ESTÊVÃO, Tânia Esmeralda Rodrigues. **O Hidrogénio como combustível**. Universidade do Porto, 2008.
- FANGXUAN CHEN, Zhiwei Ma, Hadi Nasrabadi, Bailian Chen, Mohamed Zakaria Saad Mehana, Jolante Van Wijk, Capacity assessment and cost analysis of geologic storage of hydrogen: A case study in Intermountain-West Region USA, International Journal of Hydrogen Energy, Volume 48, Issue 24, 2023, Pages 9008-9022, ISSN 0360-3199, https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2022.11.292.
- FARAJI, M., & Saidi, M. (2021). Hydrogen-rich syngas production via integrated configuration of pyrolysis and air gasification processes of various algal biomass: Process simulation and evaluation using Aspen Plus software. International Journal of Hydrogen Energy, 46(36), 18844–18856. https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2021.03.047
- FERRANDON, M., Ferrandon, M. S., Lewis, M. A., Tatterson, D. F., Nankani, R. v, Kumar, M., Wedgewood, L. E., & Nitsche, L. C. (2008). The hybrid Cu-Cl thermochemical cycle. I. Conceptual process design and H2A cost analysis. II. Limiting the formation of CuCl during hydrolysis Hydrogenation of Ethene on single-site NU-1000 catalysts View project THE HYBRID CU-CL THERMOCHEMICAL CYCLE. I. CONCEPTUAL PROCESS DESIGN AND H2A COST ANALYSIS. II. LIMITING THE FORMATION OF CUCL DURING HYDROLYSIS. https://www.researchgate.net/publication/239555289
- GIACONIA, A., Grena, R., Lanchi, M., Liberatore, R., & Tarquini, P. (2007). Hydrogen/methanol production by sulfur-iodine thermochemical cycle

powered by combined solar/fossil energy. International Journal of Hydrogen Energy, 32(4), 469–481. https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2006.05.013

- GIZ, Deutsche Gesellschaft für Internationale Zusammenarbeit. Conceitos do H<sub>2</sub> PtX. 2022.
- GIZ, Mapeamento do setor de H2 brasileiro. Ministério de Minas e Energia. 2021.
- GRAF, D., Monnerie, N., Roeb, M., Schmitz, M., & Sattler, C. (2008). Economic comparison of solar hydrogen generation by means of thermochemical cycles and electrolysis. *International Journal of Hydrogen Energy*, 33(17), 4511–4519. https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2008.05.086
- GRIGORIEV, S. A., Fateev, V. N., Bessarabov, D. G., & Millet, P. (2020). Current status, research trends, and challenges in water electrolysis science and technology. International Journal of Hydrogen Energy, 45(49), 26036–26058. https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2020.03.109

GROENEMANS, H., Saur, G., Mittelsteadt, C., Lattimer, J., & Xu, H. (2022). Technoeconomic analysis of offshore wind PEM water electrolysis for H2 production. In *Current Opinion in Chemical Engineering* (Vol. 37). Elsevier Ltd. https://doi.org/10.1016/j.coche.2022.100828

- GUARIEIRO, L. L. N., dos Anjos, J. P., da Silva, L. A., Santos, A. Á. B., Calixto, E. E. S., Pesso, F. L. P., de Almeid, J. L. G., Filho, M. A., Marinho, F. S., da Rocha, G. O., & de Andrade, J. B. (2022). Technological Perspectives and Economic Aspects of Green Hydrogen in the Energetic Transition: Challenges for Chemistry. In Journal of the Brazilian Chemical Society (Vol. 33, Issue 8, pp. 844–869). Sociedade Brasileira de Quimica. https://doi.org/10.21577/0103-5053.20220052
- H2A **Production Model Version 3.2018 User Guide** DRAFT 11/9/18. Departamento de Energia dos Estados Unidos, 2018.
- HAN, W., Fang, J., Liu, Z., & Tang, J. (2016). Techno-economic evaluation of a combined bioprocess for fermentative hydrogen production from food waste. *Bioresource Technology*, 202, 107–112. https://doi.org/10.1016/j.biortech.2015.11.072
- HAN, W., Hu, Y. Y., Li, S. Y., Li, F. F., & Tang, J. H. (2016). Biohydrogen production from waste bread in a continuous stirred tank reactor: A

techno-economic analysis. *Bioresource Technology*, 221, 318–323. https://doi.org/10.1016/j.biortech.2016.09.055

- HAN, W., Liu, Z., Fang, J., Huang, J., Zhao, H., & Li, Y. (2016). Techno-economic analysis of dark fermentative hydrogen production from molasses in a continuous mixed immobilized sludge reactor. *Journal of Cleaner Production*, 127, 567–572. https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2016.04.055
- HAN, W., Yan, Y., Gu, J., Shi, Y., Tang, J., & Li, Y. (2016). Techno-economic analysis of a novel bioprocess combining solid state fermentation and dark fermentation for H2 production from food waste. International Journal of Hydrogen Energy, 41(48), 22619–22625. https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2016.09.047
- HANKAMER, B., Lehr, F., Rupprecht, J., Mussgnug, J. H., Posten, C., & Kruse, O. (2007). Photosynthetic biomass and H2 production by green algae: From bioengineering to bioreactor scale-up. *Physiologia Plantarum*, 131(1), 10–21. https://doi.org/10.1111/j.1399-3054.2007.00924.x
- HASSAN, I. A., Ramadan, H. S., Saleh, M. A., & Hissel, D. (2021). Hydrogen storage technologies for stationary and mobile applications: Review, analysis and perspectives. In Renewable and Sustainable Energy Reviews (Vol. 149). Elsevier Ltd. <u>https://doi.org/10.1016/j.rser.2021.111311</u>
- HOLLADAY, J. D., Hu, J., King, D. L., & Wang, Y. (2009). An overview of hydrogen production technologies. In Catalysis Today (Vol. 139, Issue 4, pp. 244–260). https://doi.org/10.1016/j.cattod.2008.08.039
- HOSSEINZADEH, A., Zhou, J. L., Li, X., Afsari, M., & Altaee, A. (2022). Technoeconomic and environmental impact assessment of hydrogen production processes using bio-waste as renewable energy resource. In *Renewable* and Sustainable Energy Reviews (Vol. 156). Elsevier Ltd. https://doi.org/10.1016/j.rser.2021.111991
- HU, X., & Gholizadeh, M. (2019). Biomass pyrolysis: A review of the process development and challenges from initial researches up to the commercialisation stage. In *Journal of Energy Chemistry* (Vol. 39, pp. 109– 143). Elsevier B.V. <u>https://doi.org/10.1016/j.jechem.2019.01.024</u>

- HURSKAINEN, M., & Ihonen, J. (2020). Techno-economic feasibility of road transport of hydrogen using liquid organic hydrogen carriers. International Journal of Hydrogen Energy, 45(56), 32098–32112. https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2020.08.186
- HYJACK. Sizing and Costing. **Hydrogen Tech Online**. Disponível em: <hyjack.tech/components>. Acessado em Agosto de 2023.
- INTERNATIONAL ENERGY AGENCY (IEA). The Future of Hydrogen: Seizing today's opportunities. Report prepared by the IEA for the G20, Japan, June 2019. Disponível em: https://www.iea.org/reports/the-future-of-hydrogen
- ISHIMOTO, Y., Voldsund, M., Nekså, P., Roussanaly, S., Berstad, D., & Gardarsdottir, S. O. (2020). Large-scale production and transport of hydrogen from Norway to Europe and Japan: Value chain analysis and comparison of liquid hydrogen and ammonia as energy carriers. International Journal of Hydrogen Energy, 45(58), 32865–32883. https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2020.09.017
- JACKSON, Clare *et al.* **Ammonia to Green Hydrogen Project Feasibility Study**. Siemens, 2020.
- JANOŠOVSKÝ, J., Boháčiková, V., Kraviarová, D., & Variny, M. (2022). Multicriteria decision analysis of steam reforming for hydrogen production. Energy Conversion and Management, 263. https://doi.org/10.1016/j.enconman.2022.115722
- JARUNGLUMLERt, T., Prommuak, C., Putmai, N., & Pavasant, P. (2018). Scalingup bio-hydrogen production from food waste: Feasibilities and challenges.
  In International Journal of Hydrogen Energy (Vol. 43, Issue 2, pp. 634–648).
  Elsevier Ltd. https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2017.10.013

JOPEK, A. G. Hydrogen Storage Technologies. Wiley (2012).

KHALILPOUR, K. R., Pace, R., & Karimi, F. (2020). Retrospective and prospective of the hydrogen supply chain: A longitudinal techno-historical analysis.
International Journal of Hydrogen Energy, 45(59), 34294–34315.
https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2020.02.099

- KIRNBAUER, F., Wilk, V., & Hofbauer, H. (2013). Performance improvement of dual fluidized bed gasifiers by temperature reduction: The behavior of tar species in the product gas. *Fuel*, 108, 534–542. https://doi.org/10.1016/j.fuel.2012.11.065
- KOMATSU, Rafael Cordilha. **Produção de hidrogênio via nuclear com reatores de alta**. Escola Politécnica da Universidade Federal do Rio de Janeiro, 2018.
- KOMBE, E. Y., Lang'at, N., Njogu, P., Malessa, R., Weber, C. T., Njoka, F., & Krause, U. (2022). Process modeling and evaluation of optimal operating conditions for production of hydrogen-rich syngas from air gasification of rice husks using aspen plus and response surface methodology. *Bioresource Technology*, 361. https://doi.org/10.1016/j.biortech.2022.127734
- LEE, Y. W., & Chung, J. (2010). Bioproduction of hydrogen from food waste by pilot-scale combined hydrogen/methane fermentation. International Journal of Hydrogen Energy, 35(21), 11746–11755. https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2010.08.093
- LEYBROS, J., Gilardi, T., Saturnin, A., Mansilla, C., & Carles, P. (2010). Plant sizing and evaluation of hydrogen production costs from advanced processes coupled to a nuclear heat source. Part I: Sulphur-iodine cycle. International Journal of Hydrogen Energy, 35(3), 1008–1018. https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2009.11.054
- LI, Y. C., Liu, Y. F., Chu, C. Y., Chang, P. L., Hsu, C. W., Lin, P. J., & Wu, S. Y. (2012). Techno-economic evaluation of biohydrogen production from wastewater and agricultural waste. *International Journal of Hydrogen Energy*, 37(20), 15704–15710. <u>https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2012.05.043</u>
- LORA, E. S., & ANDRADE, R. v. (2009). Biomass as energy source in Brazil. In Renewable and Sustainable Energy Reviews (Vol. 13, Issue 4, pp. 777–788). https://doi.org/10.1016/j.rser.2007.12.004.
- LUNPROM, S., Phanduang, O., Salakkam, A., Liao, Q., & Reungsang, A. (2019). A sequential process of anaerobic solid-state fermentation followed by dark fermentation for bio-hydrogen production from Chlorella sp. *International*

 Journal
 of
 Hydrogen
 Energy,
 3306–3316.

 https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2018.06.012

 3306–3316.

 3306–3316.

- Lv, P., Wu, C., Ma, L., & Yuan, Z. (2008). A study on the economic efficiency of hydrogen production from biomass residues in China. *Renewable Energy*, 33(8), 1874–1879. https://doi.org/10.1016/j.renene.2007.11.002
- MANISH, S., & Banerjee, R. (2008). Comparison of biohydrogen production processes. International Journal of Hydrogen Energy, 33(1), 279–286. https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2007.07.026
- MASILELA, P., & Pradhan, A. (2022). Systematic literature review of the sustainability and environmental performance of dark fermentative biohydrogen production. In *Journal of Cleaner Production* (Vol. 372). Elsevier Ltd. <u>https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2022.133541</u>
- MCDONAGH, S., Ahmed, S., Desmond, C., & Murphy, J. D. (2020). Hydrogen from offshore wind: Investor perspective on the profitability of a hybrid system including for curtailment. Applied Energy, 265. https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2020.114732
- MENDELEVITCH, R., Heinemann, C., Krieger, S., Dünzen, K., Göckeler, K., Haller,
   M., & Winger, C. *PTX Business Opportunity Analyser (BOA): Data Documentation Documentation of data sources and data processing Further information*. www.oeko.de
- MOLINARI, R., Marino, T., & Argurio, P. (2014). Photocatalytic membrane reactors for hydrogen production from water. In International Journal of Hydrogen Energy (Vol. 39, Issue 14, pp. 7247–7261). Elsevier Ltd. https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2014.02.174
- MOSER, M., Pecchi, M., & Fend, T. (2019). Techno-economic assessment of solar hydrogen production by means of thermo-chemical cycles. *Energies*, 12(3). https://doi.org/10.3390/en12030352
- MUTHUKUMAR, P., Kumar, A., Afzal, M., Bhogilla, S., Sharma, P., Parida, A., Jana, S., Kumar, E. A., Pai, R. K., & Jain, I. P. (2023). Review on large-scale hydrogen storage systems for better sustainability. In International Journal of Hydrogen Energy (Vol. 48, Issue 85, pp. 33223–33259). Elsevier Ltd. https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2023.04.304

- MUTLU, Ö. Ç., & Zeng, T. (2020). Challenges and Opportunities of Modeling
   Biomass Gasification in Aspen Plus: A Review. In Chemical Engineering and
   Technology (Vol. 43, Issue 9, pp. 1674–1689). Wiley-VCH Verlag.
   https://doi.org/10.1002/ceat.202000068
- MWANDILA, G. (2010). DETERMINATION OF DESIGN PARAMETERS AND INVESTIGATION ON OPERATION PERFORMANCE FOR AN INTEGRATED GAS CLEANING SYSTEM TO REMOVE TARS FROM BIOMASS GASIFICATION PRODUCER GAS.
- NASIR UDDIN, M., Daud, W. M. A. W., & Abbas, H. F. (2013). Potential hydrogen and non-condensable gases production from biomass pyrolysis: Insights into the process variables. In Renewable and Sustainable Energy Reviews (Vol. 27, pp. 204–224). <u>https://doi.org/10.1016/j.rser.2013.06.031</u>
- NAZIR, H., Muthuswamy, N., Louis, C., Jose, S., Prakash, J., Buan, M. E., Flox, C., Chavan, S., Shi, X., Kauranen, P., Kallio, T., Maia, G., Tammeveski, K., Lymperopoulos, N., Carcadea, E., Veziroglu, E., Iranzo, A., & Kannan, A. M. (2020). Is the H2 economy realizable in the foreseeable future? Part II: H2 storage, transportation, and distribution. In *International Journal of Hydrogen Energy* (Vol. 45, Issue 41, pp. 20693–20708). Elsevier Ltd. https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2020.05.241
- NICODEMUS, J. H., McGuinness, M., & Maharjan, R. (2015). A thermodynamic and cost analysis of solar syngas from the Zn/ZnO cycle. Journal of Solar Energy Engineering, Transactions of the ASME, 137(1). https://doi.org/10.1115/1.4028189
- NOGUCHI, H., Takegami, H., Kasahara, S., Tanaka, N., Kamiji, Y., Iwatsuki, J., Aita, H., & Kubo, S. (2017).
   R&D status in thermochemical water-splitting hydrogen production iodine-sulfur process at JAEA. *Energy Procedia*, 131, 113–118. https://doi.org/10.1016/j.egypro.2017.09.459
- OKONKWO, E. C., Al-Breiki, M., Bicer, Y., & Al-Ansari, T. (2021). Sustainable hydrogen roadmap: A holistic review and decision-making methodology for production, utilization and exportation using Qatar as a case study. In International Journal of Hydrogen Energy (Vol. 46, Issue 72, pp. 35525–35549). Elsevier Ltd. https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2021.08.111

- OLATEJU, et al. A techno-economic assessment of large scale wind-hydrogen production with energy storage in Western Canada. Hydrogen Energy (2016).
- OLIVEIRA, Samuel Manzini de. Produção fotocatalítica de hidrogênio utilizando catalisadores baseados no dióxido de titânio. Universidade Federal de Uberlândia. 2015.
- ONS, Operador Nacional do Sistema Elétrico. Histórico da geração eólica e fotovoltaica.
- *OWR.* **Our World in data**. Disponível em: https://ourworldindata.org. Último acesso em 10 de dezembro de 2022.
- OZBILEN, A., Dincer, I., & Rosen, M. A. (2011). A comparative life cycle analysis of hydrogen production via thermochemical water splitting using a Cu-Cl cycle. International Journal of Hydrogen Energy, 36(17), 11321–11327. https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2010.12.035
- OZCAN, H., & Dincer, I. (2017). Exergoeconomic optimization of a new four-step magnesium–chlorine cycle. International Journal of Hydrogen Energy, 42(4), 2435–2445. https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2016.03.098
- PÁDUA, Z. M. C. Avaliação das emissões de CO<sub>2</sub> por veículos de transporte de cargas pelo método botton-up em rodovias com pista dupla e simples. Centro Universitário de Araraquara.
- PARKER, Nathan. Using Natural Gas Transmission Pipeline Costs to Estimate Hydrogen Pipeline Costs. Institute of Transportation Studies. University of California, 2003.
- PARTHASARATHY, P & Narayan K., S.. Hydrogen production from steam gasification of biomass: Influence of process parameters on hydrogen yield – a review. Renewable Energy (2014).
- PNH2, Programa Nacional do Hidrogênio. Ministério de Minas e Energia. 2023.
- PUIG-GAMERO, M., Pio, D. T., Tarelho, L. A. C., Sánchez, P., & Sanchez-Silva, L. (2021). Simulation of biomass gasification in bubbling fluidized bed reactor

using aspen plus<sup>®</sup>. Energy Conversion and Management, 235. https://doi.org/10.1016/j.enconman.2021.113981

- RAAB, M., Körner, R., & Dietrich, R. U. (2022). Techno-economic assessment of renewable hydrogen production and the influence of grid participation. International Journal of Hydrogen Energy, 47(63), 26798–26811. https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2022.06.038
- REDDI, K., Elgowainy, A., Rustagi, N., & Gupta, E. (2018). Techno-economic analysis of conventional and advanced high-pressure tube trailer configurations for compressed hydrogen gas transportation and refueling. *International Journal of Hydrogen Energy*, 43(9), 4428–4438. <u>https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2018.01.049</u>
- REHMAN, Fahad, et al. Hydrogen production from water vapor plasmolysis using DBD-Corona hybrid reactor. Energy & Fuels (2013).
- REITH, J. H., & Wijffels, R. H. (René H.). (2003). Bio-methane & bio-hydrogen : status and perspectives of biological methane and hydrogen production. Dutch Biological Hydrogen Foundation.
- REN, J., Musyoka, N. M., Langmi, H. W., Mathe, M., & Liao, S. (2017). Current research trends and perspectives on materials-based hydrogen storage solutions: A critical review. In International Journal of Hydrogen Energy (Vol. 42, Issue 1, pp. 289–311). Elsevier Ltd. https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2016.11.195
- RIERA, J. A., Lima, R. M., & Knio, O. M. (2023). A review of hydrogen production and supply chain modeling and optimization. In International Journal of Hydrogen Energy (Vol. 48, Issue 37, pp. 13731–13755). Elsevier Ltd. https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2022.12.242
- ROSHA, P., & Ibrahim, H. (2022). Technical feasibility of biomass and paper-mill sludge co-gasification for renewable fuel production using Aspen Plus. *Energy*, 258. https://doi.org/10.1016/j.energy.2022.124883
- SAFARI, F., & Dincer, I. (2020). A review and comparative evaluation of thermochemical water splitting cycles for hydrogen production. In *Energy*

Conversion and Management (Vol. 205). Elsevier Ltd. https://doi.org/10.1016/j.enconman.2019.112182

- SALKUYEH, Y. K., Saville, B. A., & MacLean, H. L. (2018). Techno-economic analysis and life cycle assessment of hydrogen production from different biomass gasification processes. International Journal of Hydrogen Energy, 43(20), 9514–9528. https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2018.04.024
- SAND, M., Skeie, R. B., Sandstad, M., Krishnan, S., Myhre, G., Bryant, H., Derwent, R., Hauglustaine, D., Paulot, F., Prather, M., & Stevenson, D. (2023). A multimodel assessment of the Global Warming Potential of hydrogen.
   Communications Earth and Environment, 4(1). https://doi.org/10.1038/s43247-023-00857-8
- SANTANA LOS, CALIXTO EES, PESSOA FLP, Uncertainty analysis applied to the calculation of the bubble temperature of mixtures. VII SIINTEC, 2021.
- SARATALE, G. D., Saratale, R. G., Banu, J. R., & Chang, J. S. (2019). Biohydrogen
   Production From Renewable Biomass Resources. In Biomass, Biofuels,
   Biochemicals: Biohydrogen, Second Edition (pp. 247–277). Elsevier.
   https://doi.org/10.1016/B978-0-444-64203-5.00010-1
- SARKAR, S., & Kumar, A. (n.d.). TECHNO-ECONOMIC ASSESSMENT OF BIOHYDROGEN PRODUCTION FROM FOREST BIOMASS IN WESTERN CANADA. Transactions of the ASABE, 52(2), 519–530.
- SARMA, S. J., Brar, S. K., le Bihan, Y., & Buelna, G. (2013). Bio-hydrogen production by biodiesel-derived crude glycerol bioconversion: A technoeconomic evaluation. *Bioprocess and Biosystems Engineering*, 36(1), 1–10. https://doi.org/10.1007/s00449-012-0755-8
- SATHYAPRAKASAN, P., & Kannan, G. (2015). Economics of Bio-Hydrogen Production. International Journal of Environmental Science and Development, 6(4), 352–356. https://doi.org/10.7763/IJESD.2015.V6.617

- SCHULTZ, K. (2003). Thermochemical Production of Hydrogen from Solar and Nuclear Energy Presentation to the Stanford Global Climate and Energy Project.
- SEKKESÆTER, Øyvind. Evaluation of Concepts and Systems for Marine Transportation of Hydrogen. 2019. Master's thesis - Norwegian University of Science and Technology, Faculty of Engineering, Department of Energy and Process Engineering.
- SHADDIX, C. R. (n.d.). SANDIA REPORT An Assessment of Current Understanding of the Greenhouse Gas Impacts from H 2 Emissions. https://classic.ntis.gov/help/order-methods/
- SHAHABUDDIN, M., Krishna, B. B., Bhaskar, T., & Perkins, G. (2020). Advances in the thermo-chemical production of hydrogen from biomass and residual wastes: Summary of recent techno-economic analyses. In Bioresource Technology (Vol. 299). Elsevier Ltd. https://doi.org/10.1016/j.biortech.2019.122557
- SHERIF, et al. Wind energy and the hydrogen economy Review of the technology. SOLAR ENERGY (2005).
- SHIVA KUMAR, S., & Himabindu, V. (2019). Hydrogen production by PEM water electrolysis – A review. In Materials Science for Energy Technologies (Vol. 2, Issue 3, pp. 442–454). KeAi Communications Co. https://doi.org/10.1016/j.mset.2019.03.002
- SHOW, K. Y., Yan, Y. G., & Lee, D. J. (2019). Biohydrogen production: Status and perspectives. In Biomass, Biofuels, Biochemicals: Biofuels: Alternative Feedstocks and Conversion Processes for the Production of Liquid and Gaseous Biofuels (pp. 693–713). Elsevier. <u>https://doi.org/10.1016/B978-0-12-816856-1.00028-2</u>
- SOLLI, C., Strømman, A. H., & Hertwich, E. G. (2006). Fission or fossil: Life cycle assessment of hydrogen production. *Proceedings of the IEEE*, *94*(10), 1785–1793. https://doi.org/10.1109/JPROC.2006.883701

- SPATH, P., Aden, A., Eggeman, T., Ringer, M., Wallace, B., & Jechura, J. (2005).
   Biomass to Hydrogen Production Detailed Design and Economics Utilizing the Battelle Columbus Laboratory Indirectly-Heated Gasifier. http://www.osti.gov/bridge
- STEINFELD, A. (2002). Solar hydrogen production via a two-step water-splitting thermochemical cycle based on Zn=ZnO redox reactions. In International Journal of Hydrogen Energy (Vol. 27). www.elsevier.com/locate/ijhydene
- TAPIA-VENEGAS, E., Ramirez-Morales, J. E., Silva-Illanes, F., Toledo-Alarcón, J., Paillet, F., Escudie, R., Lay, C. H., Chu, C. Y., Leu, H. J., Marone, A., Lin, C. Y., Kim, D. H., Trably, E., & Ruiz-Filippi, G. (2015). Biohydrogen production by dark fermentation: scaling-up and technologies integration for a sustainable system. In *Reviews in Environmental Science and Biotechnology* (Vol. 14, Issue 4, pp. 761–785). Springer Netherlands. https://doi.org/10.1007/s11157-015-9383-5
- TOBIAS PROLL, P., Rauch, R., Aichernig, C., Hofbauer, H., & Pröll, T. (n.d.). INTERNATIONAL JOURNAL OF CHEMICAL REACTOR ENGINEERING Fluidized Bed Steam Gasification of Solid Biomass-Performance Characteristics of an 8 MWth Combined Heat and Power Plant
- TONG, H., Ouyang, S., Bi, Y., Umezawa, N., Oshikiri, M., & Ye, J. (2012). Nanophotocatalytic materials: Possibilities and challenges. Advanced Materials, 24(2), 229–251. https://doi.org/10.1002/adma.201102752
- U.S. DEPARTMENT OF ENERGY. Committee on Alternatives and Strategies for Future Hydrogen Production and Use. The Hydrogen Economy: Opportunities, Costs, Barriers, and R&D Needs. United States, 2004. https://doi.org/10.2172/882095
- UTGIKAR, V., & Ward, B. (2006). Life cycle assessment of ISPRA Mark 9 thermochemical cycle for nuclear hydrogen production. Journal of Chemical Technology and Biotechnology, 81(11), 1753–1759. https://doi.org/10.1002/jctb.1598
- VAN DER SPEK, M., Banet, C., Bauer, C., Gabrielli, P., Goldthorpe, W., Mazzotti, M., Munkejord, S. T., Røkke, N. A., Shah, N., Sunny, N., Sutter, D., Trusler, J. M., & Gazzani, M. (2022). **Perspective on the hydrogen economy as a pathway to**

reach net-zero CO2 emissions in Europe<sup>†</sup>. Energy and Environmental Science, 15(3), 1034–1077. <u>https://doi.org/10.1039/d1ee02118d</u>

- VAN GERWEN, R., Eijgelaar, M., & Bosma, T. (n.d.). HYDROGEN IN THE ELECTRICITY VALUE CHAIN.
- VASSILEV, S. v., Baxter, D., Andersen, L. K., & Vassileva, C. G. (2010). An overview of the chemical composition of biomass. In *Fuel* (Vol. 89, Issue 5, pp. 913–933). https://doi.org/10.1016/j.fuel.2009.10.022
- VIKTORSSON, L., Heinonen, J. T., Skulason, J. B., & Unnthorsson, R. (2017). A step towards the hydrogen economy - A life cycle cost analysis of a hydrogen refueling station. Energies, 10(6). https://doi.org/10.3390/en10060763
- WANG, A., Jens, J., Mavins, D., Moultak, M., Schimmel, M., van der Leun, K., Peters, D., & Buseman, M. (2021). *Analysing future demand, supply, and transport of hydrogen EUROPEAN HYDROGEN BACKBONE Executive summary*. https://transparency.entsog.eu/
- WANG, Z. L., Naterer, G. F., Gabriel, K. S., Gravelsins, R., & Daggupati, V. N. (2010). Comparison of sulfur-iodine and copper-chlorine thermochemical hydrogen production cycles. *International Journal of Hydrogen Energy*, 35(10), 4820–4830. https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2009.09.006
- WILK, V., & Hofbauer, H. (2016). Analysis of optimization potential in commercial biomass gasification plants using process simulation. *Fuel Processing Technology*, 141, 138–147. https://doi.org/10.1016/j.fuproc.2015.07.035
- WULF, C. *et al.* Life cycle assessment of hydrogen transport and distribution **Options.** Cleaner Production (2018).
- XU, X., Zhou, Q., & Yu, D. (2022). The future of hydrogen energy: Bio-hydrogen production technology. In International Journal of Hydrogen Energy (Vol. 47, Issue 79, pp. 33677–33698). Elsevier Ltd. https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2022.07.261
- YANG, C., & Ogden, J. M. (2008). Determining the Lowest-Cost Hydrogen Delivery Mode. UC Davis: Institute of Transportation Studies. Retrieved from <u>https://escholarship.org/uc/item/0st9s56s</u>

- YANG, C., & Ogden, J. M. (n.d.). UC Davis Working Papers. Determining the Lowest-Cost Hydrogen Delivery Mode Publication Date. https://escholarship.org/uc/item/0st9s56s
- YAO, J., Kraussler, M., Benedikt, F., & Hofbauer, H. (2017). Techno-economic assessment of hydrogen production based on dual fluidized bed biomass steam gasification, biogas steam reforming, and alkaline water electrolysis processes. Energy Conversion and Management, 145, 278–292. https://doi.org/10.1016/j.enconman.2017.04.084
- YAO, X., Zhang, Y., Wei, Z., Chen, M., & Shangguan, W. (2020). Plasma-Catalytic Conversion of CO2and H2O into H2, CO, and Traces of CH4over NiO/Cordierite Catalysts. Industrial and Engineering Chemistry Research, 59(43), 19133–19144. https://doi.org/10.1021/acs.iecr.0c01764
- YATES et al., Cell Reports Physical Science 1, 100209 October 21, 2020 a 2020 The Authors. https://doi.org/10.1016/j.xcrp.2020.100209
- YOUNAS, M., Shafique, S., Hafeez, A., Javed, F., & Rehman, F. (2022). An Overview of Hydrogen Production: Current Status, Potential, and Challenges. In *Fuel* (Vol. 316). Elsevier Ltd. https://doi.org/10.1016/j.fuel.2022.123317
- YUKESH KANNAH, R., Kavitha, S., Preethi, Parthiba Karthikeyan, O., Kumar, G., Dai-Viet, N. V., & Rajesh Banu, J. (2021). Techno-economic assessment of various hydrogen production methods – A review. In *Bioresource Technology* (Vol. 319). Elsevier Ltd. <u>https://doi.org/10.1016/j.biortech.2020.124175</u>
- ZAMAN, S. A., & Ghosh, S. (2021). A generic input–output approach in developing and optimizing an Aspen plus steam-gasification model for biomass. Bioresource Technology, 337. https://doi.org/10.1016/j.biortech.2021.125412
- ZIVAR, D., Kumar, S., & Foroozesh, J. (2021). **Underground hydrogen storage: A comprehensive review**. International Journal of Hydrogen Energy, 46(45), 23436–23462. <u>https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2020.08.138</u>

#### 7 ANEXOS

# 7.1 ANEXO A – DADOS DE FATOR DE CAPACIDADE USINA EÓLICA E SOLAR FOTOVOLTAICA

Hora	Janeiro F.C. (%)	Fevereiro F.C. (%)	Março F.C. (%)	Abril F.C. (%)	Maio F.C. (%)	Junho F.C. (%)	Julho F.C. (%)	Agosto F.C. (%)	Setembro F.C. (%)	Outubro F.C. (%)	Novembro F.C. (%)	Dezembro F.C. (%)
00:00	0	0	0	0	0,00086798 1	0	0	0	0	0,00086618 9	0,0008	0,00092129 6
01:00	0	0	0	0	0,00084289 1	0	0	0	0	0,00087096 8	0,00086111 1	0,00088425 9
02:00	0	0	0	0	0,00091039 4	0	0	0	0	0,00088888 9	0,00085123 5	0,00094444 4
03:00	0	0	0	0	0,00090621 3	0	0	0	0	0,00087873 4	0,00083703 7	0,00090277 8
04:00	0	0	0	0	0,00085543	0	0	0	0	0,00090501 8	0,00084074 1	0,00086111
05:00	0,00171863 8	7,27513E- 05	0	0	0,00078494 6	0	0	0	0,00083765 4	0,01646415 8	0,01872407 4	0.019125
06:00	0,11273536 4	0,10084259 3	0,11734826 8	0,08655925 9	0,08935424	0,05147469 1	0.0454319	0,09519354 8	0,20653456 8	0,35399103 9	0,21102098 8	0,27820370 4
07:00	0,35303584 2	0,40320238	0,53050716 8	0,45771851 9	0,54858004 8	0,52055617 3	0,52668458 8	0,62204121 9	0,66751913 6	0.69184767	0,36694444 4	0,48553935 2
08:00	0,51563799 3	0,50314418	0,71851135	0,65930185 2	0,71061350 1	0,74914691 4	0,75929271 2	0,76841158 9	0,77719567 9	0,80783871	0,53229753 1	0,56465740 7
09:00	0,63234229 4	0,59534523 8	0,78577299 9	0,77767963	0,74685603 3	0,77368827 2	0,78192473 1	0,76104719 2	0,82429938 3	0,83018757 5	0,60251728 4	0,50152314 8
10:00	0,69630824 4	0,66163293 7	0,80876045 4	0,79980679	0,75151135	0,76856666 7	0,74816965 4	0,80459796 9	0,83714506 2	0,85111111 1	0,63160802 5	0,51518981 5
11:00	0,73351075 3	0,67274338 6	0,82252509	0,76372098 8	0,75679032 3	0,75931234 6	0,72354659 5	0,8030227	0,81497654 3	0,78170728 8	0,61529259 3	0,58475463
12:00	0,74563022 7	0,69089616 4	0,79652986 9	0,71686851 9	0,73565053 8	0,75469135 8	0,72914814 8	0,79099462 4	0,83821172 8	0,74147491	0,61647222 2	0,68776157 4
13:00	0,68266069 3	0,70046494 7	0,72507885 3	0,69258024 7	0,71436499 4	0,75280370 4	0,72312485 1	0,75783811 2	0,80391049 4	0,67431660 7	0,56661111 1	0,76671296 3
14:00	0,61679032 3	0,60132672	0,69268219 8	0,62632963	0,64801612 9	0,72341543 2	0,71427538 8	0,74233393 1	0,7399	0,63601254 5	0,40098580 2	0,61859953 7
15:00	0,49809856 6	0,51689881	0,72454838 7	0,60080123 5	0,59631481 5	0,68293086 4	0,67497550 8	0,69132855 4	0,63967407 4	0,50422461 2	0,26602284	0,50131944 4
16:00	0,39393787 3	0,36454563 5	0,56627060 9	0,41714444 4	0,37706391 9	0,39609012 3	0,47777718	0,54374492 2	0,48289012 3	0,38552747 9	0,16587284	0,41342592 6
17:00	0,19063799 3	0,14356944 4	0,14713620 1	0,05547469 1	0,02442413 4	0,02336049 4	0,04313560 3	0,06505376 3	0,06160185 2	0,06856093 2	0,04116975 3	0,1194375
18:00	0,00860215 1	0,00460912 7	0,00078315 4	0	0,00173954 6	0	0	0	0	0,00657765 8	0,00229506 2	0,01831944 4
19:00	0	0	0	0	0,00083034 6	0	0	0	0	0,00078136 2	0,00074814 8	0,00810648 1
20:00	0	0	0	0	0,00081780 2	0	0	0	0	0,00080346 5	0,00075	0,00065046 3
21:00	0	0	0	0	0,00080227	0	0	0	0	0,00081720 4	0,00075987 7	0,00068981 5
22:00	0	0	0	0	0,00084050 2	0	0	0	0	0,00080227	0,00088642	0,00078472 2
23:00	0	0	0	0	0,00081959 4	0	0	0	0	0,00084528 1	0.00087037	0,00074074

### Dados fator de capacidade Conj. São Pedro (UFV)

Hora	Janeiro F.C. (%)	Fevereiro F.C. (%)	Março F.C. (%)	Abril F.C. (%)	Maio F.C. (%)	Junho F.C. (%)	Julho F.C. (%)	Agosto F.C. (%)	Setembro F.C. (%)	Outubro F.C. (%)	Novembro F.C. (%)	Dezembro F.C. (%)
00:00	0,631192671	0,53640306 1	0,787414966	0,61351473 9	0,676746215	0,587195011	0,70211158 7	0,748054093	0,74875	0,77330316	0,49028684 8	0,67727253 4
01:00	0,630807	0,55772048 1	0,779546302	0,59766213 2	0,673288896	0,579511905	0,69115646 3	0,749041036	0,72124319 7	0,75920726 4	0,50547845 8	0,66977466
02:00	0,615787799	0,53986819 7	0,765391156	0,61271428 6	0,654337283	0,56847619	0,70178187 4	0,747915844	0,71451190 5	0,74727616 9	0,53019727 9	0,67389455 8
03:00	0,585110819	0,51916363	0,74577957	0,61807426 3	0,625724709	0,5686661	0,71416556 9	0,756101602	0,71469217 7	0,74426267 3	0,53685260 8	0,64116496 6
04:00	0,588615317	0,49894679 3	0,73259436	0,61806349 2	0,627653061	0,566519841	0,70407011 2	0,757475313	0,70621485 3	0,73897959 2	0,55356405 9	0,58857142 9
05:00	0,554617621	0,48362730 8	0,717071538	0,58816496 6	0,617934496	0,576828798	0,70175060 3	0,756815339	0,68448412 7	0,73543504 5	0,56182993 2	0,57780399 7
06:00	0,516091727	0,47110483 5	0,693359118	0,58209410 4	0,604891925	0,574794218	0,70582510 4	0,741260149	0,67395464 9	0,72834320 8	0,55386904 8	0,59274234 7
07:00	0,497103906	0,44713678 3	0,669823897	0,57197902 5	0,598146259	0,555048753	0,69493965 3	0,733373382	0,64796712	0,69504169 4	0,50908276 6	0,57294217 7
08:00	0,448288896	0,35701895	0,624064626	0,55022562 4	0,555704959	0,523180272	0,63672372 2	0,611598639	0,60895918 4	0,65662113 2	0,46642006 8	0,49778699
09:00	0,418629581	0,31936528 2	0,581875686	0,54571882 1	0,520731293	0,49329932	0,56483377 2	0,593190147	0,57663265 3	0,63287195 5	0,40370238 1	0,42710459 2
10:00	0,361926706	0,27758381 9	0,557451174	0,48707596 4	0,455612245	0,45526644	0,52052062 8	0,599116195	0,54659353 7	0,56992484 1	0,33084693 9	0,38887755 1
11:00	0,322797345	0,25513666 2	0,494342769	0,41168990 9	0,372360105	0,407197846	0,48396093 9	0,562068795	0,49776870 7	0,48165514 6	0,27887641 7	0,35455782 3
12:00	0,289031161	0,20358782 8	0,404455234	0,34585544 2	0,319828286	0,326422902	0,45935922 8	0,497821483	0,46332539 7	0,40358733 8	0,22712755 1	0,36544217 7
13:00	0,282084156	0,16229409 6	0,311554751	0,28785487 5	0,273044766	0,262755102	0,45627551	0,412553215	0,42598356	0,34130952 4	0,22091836 7	0,32325255 1
14:00	0,274084376	0,15125182 2	0,269030612	0,25938208 6	0,261911894	0,232836168	0,43551075 3	0,354297235	0,39839002 3	0,32133585 7	0,20784693 9	0,32427721 1
15:00	0,290218345	0,15259596 7	0,254995611	0,22778288	0,264589642	0,233647959	0,44367401 8	0,33274029	0,38478741 5	0,33593866 6	0,21014455 8	0,32655824 8
16:00	0,31814187	0,14383989 3	0,288599408	0,22710997 7	0,256825214	0,231001134	0,43150098 7	0,361957977	0,38915192 7	0,40274193 5	0,23026814 1	0,34772959 2
17:00	0,352240509	0,14997449	0,331513605	0,28245748 3	0,314940202	0,27675737	0,45741990 3	0,425627606	0,45707596 4	0,47570934 8	0,27721088 4	0,38669430 3
18:00	0,436392912	0,22204689	0,486652952	0,42973015 9	0,445300636	0,367651927	0,53709238 5	0,52517336	0,56939852 6	0,57618992 8	0,35234467 1	0,54158375 9
19:00	0,530180492	0,34225643 8	0,613776059	0,54707086 2	0,535640224	0,440521542	0,64773644 9	0,617306342	0,63496655 3	0,68428022 8	0,41381519 3	0,63336522 1
20:00	0,570760369	0,39160957 2	0,695460829	0,61035657 6	0,570962804	0,515113379	0,68783519 9	0,694466206	0,70330272 1	0,73687568 6	0,47222165 5	0,67451105 4
21:00	0,618656463	0,435	0,744245117	0,65426870 7	0,58914582	0,546598073	0,69041694 1	0,742218016	0,73960544 2	0,76188391 5	0,50735884 4	0,68361394 6
22:00	0,637502743	0,50719266 3	0,769859008	0,63849149 7	0,643828725	0,558220522	0,70068411 2	0,767571867	0,74809750 6	0,76439324 1	0,50362018 1	0,67526360 5
23:00	0,621335308	0,53755527 2	0,788705837	0,62837471 7	0,679028418	0,566416667	0,70394448 1	0,758897301	0,75136564 6	0,75922975 6	0,51839059	0,68921343 5

# Dados fator de capacidade Conj. Caetité (UEE)

### 7.2 ANEXO B – DETALHAMENTO DA INTERFACE DMMH2



# 7.3 ANEXO C – SUMÁRIO REDUZIDO DE OPÇÕES DE TECNOLOGIAS DISPONÍVEIS NO DMMH2



### 7.4 ANEXO D – PAINEL INICIAL DA FERRAMENTA DMMH2

DMMU2 Medele da tarra	ia da dasistia das s-t d	a praducão a distrik…'-*-	da blidragânia						_	a	_
DMMH2 - Modelo de toma	ta de decisão das rotas d	e produção e distribuição	do Hidrogénio					Abrir Programa	Acessar código	0 ×	
< > fc dadd	VBA ENERGIA	JCM Navio V1	Truck transport	Biomassa	parametros	O2eq User	+		14	<b></b> ,	٠

## 8 PRODUÇÃO TÉCNICA E CIENTÍFICA

- DOS SANTOS, G. D. S., Marinho, B., Santana, L. O. S., Bispo, A. S., Pessoa, F. L. P., Almeida, J. L. G., & Calixto, E. S. *Hydrogen production using renewable energy: solar PV and offshore wind power-An economic evaluation in Bahia.* ESCAPE 33.
- Santos, G., Santana, L. de, Santos, A., & Pessoa, F. ANALYSIS OF THE IMPACT OF COMPOSITION VARIABILITY FROM WOOD BIOMASS IN HYDROGEN PRODUCTION USING STEAM GASIFICATION. 24 COBEQ 2023.