

STÉPHANI CAROLINE DE LANA ARÊDES

**SIMULAÇÃO, AVALIAÇÃO TÉCNICO-ECONÔMICA E ANÁLISE DE RISCO DA
PURIFICAÇÃO DE DIFERENTES BIO-ÓLEOS OBTIDOS PELO PROCESSO DE
PIRÓLISE RÁPIDA**

Dissertação apresentada à Universidade Federal de Viçosa, como parte das exigências do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química, para obtenção do título de *Magister Scientiae*.

Orientador: Fábio de Ávila Rodrigues

Coorientadora: Betânia Hoss Lunelli

**VIÇOSA - MINAS GERAIS
2023**

**Ficha catalográfica elaborada pela Biblioteca Central da Universidade
Federal de Viçosa - Campus Viçosa**

T

A678s
2023

Arêdes, Stéphani Caroline de Lana, 1994-
Simulação, avaliação técnico-econômica e análise de risco
da purificação de diferentes bio-óleos obtidos pelo processo de
pirólise rápida / Stéphani Caroline de Lana Arêdes. – Viçosa,
MG, 2023.

1 dissertação eletrônica (102 f.): il.

Orientador: Fábio de Ávila Rodrigues.

Dissertação (mestrado) - Universidade Federal de Viçosa,
Departamento de Química, 2023.

Referências bibliográficas: f. 98-102.

DOI: <https://doi.org/10.47328/ufvbbt.2023.412>

Modo de acesso: World Wide Web.

1. Biocombustíveis - Purificação - Simulação por
computador. 2. Aspen Plus (Programa de computador).
3. Separação (Tecnologia). I. Rodrigues, Fábio de Ávila, 1981-.
II. Universidade Federal de Viçosa. Departamento de Química.
Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química. III. Título.

CDD 22. ed. 662.88

Bibliotecário(a) responsável: Alice Regina Pinto Pires CRB-6/2523

STÉPHANI CAROLINE DE LANA ARÊDES

**SIMULAÇÃO, AVALIAÇÃO TÉCNICO-ECONÔMICA E ANÁLISE DE RISCO DA
PURIFICAÇÃO DE DIFERENTES BIO-ÓLEOS OBTIDOS PELO PROCESSO DE
PIRÓLISE RÁPIDA**

Dissertação apresentada à Universidade Federal de Viçosa, como parte das exigências do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química, para obtenção do título de *Magister Scientiae*.

APROVADA: 28 de abril de 2023.

Assentimento:

Documento assinado digitalmente
 STEPHANI CAROLINE DE LANA AREDES
Data: 14/07/2023 09:42:03-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Stéphani Caroline de Lana Arêdes
Autora

Documento assinado digitalmente
 FABIO DE AVILA RODRIGUES
Data: 14/07/2023 10:21:31-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Fábio de Ávila Rodrigues
Orientador

AGRADECIMENTOS

A Deus que me nunca me desamparou e me permitiu concluir esse trabalho.

Aos meus familiares e amigos que me deram muito apoio e iniciativa para que eu nunca desistisse dos meus objetivos.

Ao meu orientador Fábio e minha coorientadora Betânia pelo apoio, paciência, ensinamentos atribuídos a mim durante esse período.

Aos meus colegas Lasipianos pela troca de conhecimentos, amizade e paciência.

À Universidade Federal de Viçosa, FAPEMIG, CAPES, ao Departamento de Química, e todos os membros do programa de pós-graduação que colaboraram para o desenvolvimento desse projeto.

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brasil (CAPES) – Código de Financiamento 001.

A todos que direta ou indiretamente contribuíram para meu crescimento pessoal e profissional.

RESUMO

ARÊDES, Stéphanie Caroline de Lana, M.Sc., Universidade Federal de Viçosa, abril de 2023. **Simulação, avaliação técnico-econômica e análise de risco da purificação de diferentes bio-óleos obtidos pelo processo de pirólise rápida.** Orientador: Fábio de Ávila Rodrigues. Coorientadora: Betânia Hoss Lunelli

A biomassa é um composto natural que tem origem em diversas formas de matéria orgânica. Como resultado da crescente demanda por energia e da busca por fontes renováveis de energia, a biomassa está sendo cada vez mais estudada como uma importante fonte de energia, combustíveis, produtos químicos e outros produtos. Uma forma de transformar a biomassa em produtos com valor agregado é através do processo de pirólise rápida, que é um processo termoquímico que produz compostos sólidos, líquidos e gasosos. O principal produto deste processo é o bio-óleo, que se encontra na fase líquida e contém uma ampla gama de compostos de valor agregado que podem ser obtidos através de extração e destilação. A simulação é uma ferramenta importante para prever, modelar e compreender a viabilidade do processo desejado, juntamente com a análise econômica, de riscos e incertezas, que são técnicas úteis para estudar a viabilidade de projetos. Neste contexto, este trabalho teve como objetivo realizar a simulação utilizando o simulador de processos Aspen Plus®, a análise de viabilidade econômica e a análise de riscos e incertezas do processo de separação e purificação dos compostos de bio-óleos, derivados de madeira de eucalipto, resíduos de eucalipto e bagaço de cana-de-açúcar. Após a conclusão dessas etapas, os projetos obtiveram um bom resultado, com produtos desejados sendo obtidos com grau de pureza entre 73 e 100%. Do ponto de vista econômico, todos os processos foram economicamente viáveis, obtendo um bom retorno do investimento e um curto prazo de retorno, ressaltando a Simulação 1 com melhor Taxa Interna de Retorno (TIR), Taxa de Lucratividade e menor tempo de Payback, porém a Simulação 3 obteve o melhor Valor Presente Líquido (VPL), um dos parâmetros mais avaliados para investimentos econômicos. Mesmo considerando riscos e incertezas, incluindo a variação do custo da matéria-prima e a capacidade de produção, os investimentos dos projetos apresentaram bons resultados, demonstrando que os projetos são economicamente viáveis mesmo nestas circunstâncias.

Palavras-chave: Aspen Plus. Bio-óleo. Separação. Simulação.

ABSTRACT

ARÊDES, Stéphani Caroline de Lana, M.Sc., Universidade Federal de Viçosa, April, 2023. **Simulation, technical-economic evaluation and risk analysis of the purification of different bio-oils obtained by the rapid pyrolysis process.** Adviser: Fábio de Ávila Rodrigues. Co-adviser: Betânia Hoss Lunelli

Biomass is a natural compound that originates from various forms of organic matter. As a result of the growing demand for energy and the search for renewable energy sources, biomass is being increasingly studied as an important source of energy, fuels, chemicals and other products. One way to transform biomass into value-added products is through the fast pyrolysis process, which is a thermochemical process that produces solid, liquid and gaseous compounds. The main product of this process is the bio-oil, which is in the liquid phase and contains a wide range of value-added compounds that can be obtained through extraction and distillation. Simulation is an important tool for predicting, modeling and understanding the feasibility of the desired process, along with economic analysis of risks and uncertainties, which are useful techniques for studying the feasibility of projects. In this context, this work aimed to carry out the simulation using the Aspen Plus® process simulator, the analysis of economic viability and the analysis of risks and uncertainties of the process of separation and purification of bio-oil compounds derived from eucalyptus wood, eucalyptus residues and sugarcane bagasse. After completing these steps, the projects achieved a good result, with desired products being obtained with a purity between 73 and 100%. From an economic point of view, all processes were economically viable, obtaining a good return on investment and a short return period, emphasizing Simulation 1 with better Internal Rates of Return (IRR), Profitability Rate and shorter Payback time, however Simulation 3 obtained the best Net Present Value (NPV), one of the most evaluated parameters for economic investments. Even considering risks and uncertainties, including the variation in the cost of raw materials and production capacity, the project investments showed good results, demonstrating that the projects are economically viable even under these circumstances.

Keywords: Aspen Plus. Bio-oil. Separation. Simulation.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1: Esquema conceitual do processo de pirólise rápida.	17
Figura 2: Aplicações do bio-óleo.	19
Figura 3: Fluxograma simplificado do processo de extração e destilação do bio-óleo.....	29
Figura 4: Configurações da alimentação de bio-óleo da Simulação 1.	30
Figura 5: Configurações da corrente de entrada do solvente na Simulação 1.....	31
Figura 6: Configurações da alimentação de bio-óleo da Simulação 2.	32
Figura 7: Configurações da corrente de entrada do solvente na Simulação 2.....	33
Figura 8: Configurações da alimentação de bio-óleo da Simulação 3.	34
Figura 9: Configurações da corrente de entrada do solvente na Simulação 3.....	35
Figura 10: Configuração da extração utilizando SEP (A) para Simulação 1.	36
Figura 11: Configuração do trocador de calor HEATER (B) para Simulação 1.....	37
Figura 12: Configuração da coluna de destilação RADFRAC (C) para Simulação 1.	38
Figura 13: Configuração do separador FSPLIT (D) para Simulação 1.....	38
Figura 14: Configuração da extração utilizando SEP (A) para Simulação 2.	39
Figura 15: Configuração do trocador de calor HEATER (B) para Simulação 2.....	40
Figura 16: Configuração da coluna de destilação RADFRAC (C) para Simulação 2.	40
Figura 17: Configuração da coluna de destilação RADFRAC (D) para Simulação 2.	41
Figura 18: Configuração da coluna de destilação DISTL (E) para Simulação 2.	41
Figura 19: Configuração do separador FSPLIT (H) para Simulação 2.....	42
Figura 20: Configuração da coluna de destilação RADFRAC (A) para Simulação 3.	42
Figura 21: Configuração do trocador de calor HEATER (B) para Simulação 3.....	43
Figura 22: Configuração da extração utilizando SEP (C) para Simulação 3.	44
Figura 23: Configuração da coluna de destilação RADFRAC (D) para Simulação 3.	45
Figura 24: Configuração da coluna de destilação RADFRAC (E) para Simulação 3.....	46
Figura 25: Configuração da coluna de destilação RADFRAC (F) para Simulação 3.....	46
Figura 26: Configuração da coluna de destilação RADFRAC (G) para Simulação 3.	47
Figura 27: Configuração da coluna de destilação RADFRAC (H) para Simulação 3.	47

Figura 28: Configuração do separador FSPLIT (I) para Simulação 3.	48
Figura 29: Diagrama de Fluxo de Processo da Simulação 1.....	51
Figura 30: Diagrama de Fluxo de Processo da Simulação 2.....	53
Figura 31: Diagrama de Fluxo de Processo da Simulação 3.	56
Figura 32: Gráfico referente ao Valor Presente em função do tempo para Simulação 1.....	71
Figura 33: Gráfico referente ao Valor Presente em função do tempo para Simulação 2.....	73
Figura 34: Gráfico referente ao Valor Presente em função do tempo para Simulação 3.....	75
Figura 35: Gráfico da distribuição cumulativa para o VPL do Projeto referente a variação do custo do bio-óleo (Simulação 1).....	77
Figura 36: Gráfico da distribuição cumulativa para o VPL do Projeto referente a variação do custo do bio-óleo (Simulação 2).....	77
Figura 37: Gráfico da distribuição cumulativa para o VPL do Projeto referente a variação do custo do bio-óleo (Simulação 3).....	78
Figura 38: Gráfico da distribuição cumulativa para o VPL do Projeto referente a variação da capacidade de produção (Simulação 1).	79
Figura 39: Gráfico da distribuição cumulativa para o VPL do Projeto referente a variação da capacidade de produção (Simulação 2).	79
Figura 40: Gráfico da distribuição cumulativa para o VPL do Projeto referente a variação da capacidade de produção (Simulação 3).	80
Figura 41: Gráfico da distribuição cumulativa para os Custos Operacionais referente a variação do custo do bio-óleo (Simulação 1).....	81
Figura 42: Gráfico da distribuição cumulativa para os Custos Operacionais referente a variação do custo do bio-óleo (Simulação 2).....	81
Figura 43: Gráfico da distribuição cumulativa para os Custos Operacionais referente a variação do custo do bio-óleo (Simulação 3).....	82
Figura 44: Gráfico da distribuição cumulativa para os Custos Operacionais referente a variação da capacidade de produção (Simulação 1).	83
Figura 45: Gráfico da distribuição cumulativa para os Custos Operacionais referente a variação da capacidade de produção (Simulação 2).	83
Figura 46: Gráfico da distribuição cumulativa para os Custos Operacionais referente a variação da capacidade de produção (Simulação 3).	84
Figura 47: Distribuição de probabilidade para o VPL do Projeto referente a variação do custo do bio-óleo (Simulação 1).	85
Figura 48: Distribuição de probabilidade para o VPL do Projeto referente a variação do custo do bio-óleo (Simulação 2).	86

Figura 49: Distribuição de probabilidade para o VPL do Projeto referente a variação do custo do bio-óleo (Simulação 3).	87
Figura 50: Distribuição de probabilidade para o VPL do Projeto referente a variação da capacidade de produção (Simulação 1).	88
Figura 51: Distribuição de probabilidade para o VPL do Projeto referente a variação da capacidade de produção (Simulação 2).	89
Figura 52: Distribuição de probabilidade para o VPL do Projeto referente a variação da capacidade de produção (Simulação 3).	90
Figura 53: Distribuição de probabilidade para os Custos Operacionais referente a variação do custo do bio-óleo (Simulação 1).	91
Figura 54: Distribuição de probabilidade para os Custos Operacionais referente a variação do custo do bio-óleo (Simulação 2).	92
Figura 55: Distribuição de probabilidade para os Custos Operacionais referente a variação do custo do bio-óleo (Simulação 3).	93
Figura 56: Distribuição de probabilidade para os Custos Operacionais referente a variação da capacidade de produção (Simulação 1).	94
Figura 57: Distribuição de probabilidade para os Custos Operacionais referente a variação da capacidade de produção (Simulação 2).	95
Figura 58: Distribuição de probabilidade para os Custos Operacionais referente a variação da capacidade de produção (Simulação 3).	96

LISTA DE TABELAS

Tabela 1: Análise elementar de diferentes tipos de biomassa.	15
Tabela 2: Rendimentos típicos obtidos para diversos tipos de pirólise.....	16
Tabela 3: Componentes do bio-óleo de madeira de eucalipto utilizados na Simulação 1.	26
Tabela 4: Componentes do bio-óleo de resíduo de eucalipto utilizados na Simulação 2.....	26
Tabela 5: Componentes do bio-óleo de bagaço de cana-de-açúcar utilizados na simulação. .	27
Tabela 6: Variação para o custo do bio-óleo.	50
Tabela 7: Variação da capacidade de produção.	50
Tabela 8: Descrição dos blocos utilizados na Simulação 1.....	51
Tabela 9: Composição das correntes da Simulação 1.	52
Tabela 10: Descrição dos blocos utilizados na Simulação 2.....	53
Tabela 11: Resultado das correntes da Simulação 2.	54
Tabela 12: Descrição dos blocos utilizados na Simulação 3.....	57
Tabela 13: Resultado das correntes da Simulação 3.	58
Tabela 14: Custo fixo de capital aplicado a Simulação 1.....	62
Tabela 15: Custo fixo de capital aplicado a Simulação 2.....	63
Tabela 16: Custo fixo de capital aplicado a Simulação 3.....	64
Tabela 17: Preço unitário, consumo e custo de matéria-prima e insumos utilizados na Simulação 1.	65
Tabela 18: Preço unitário, consumo e custo de matéria-prima e insumos utilizados na Simulação 2.	65
Tabela 19: Preço unitário, consumo e custo de matéria-prima e insumos utilizados na Simulação 3.	65
Tabela 20: Produção e preço do produto obtidos na Simulação 1.	66
Tabela 21: Produção e preço dos produtos obtidos na Simulação 2.	66
Tabela 22: Produção e preço dos produtos obtidos na Simulação 3.	66
Tabela 23: Mão de obra necessária para a operação da planta.....	66
Tabela 24: Custo e consumo das utilidades da Simulação 1.....	67
Tabela 25: Custo e consumo das utilidades da Simulação 2.....	67
Tabela 26: Custo e consumo das utilidades da Simulação 3.....	67

Tabela 27: Avaliação do lucro anual referente a Simulação 1.	68
Tabela 28: Avaliação do lucro anual referente a Simulação 2.	68
Tabela 29: Avaliação do lucro anual referente a Simulação 3.	69
Tabela 30: Fluxo de caixa, VP e VP acumulado para Simulação 1.	70
Tabela 31: Avaliação dos resultados do investimento para Simulação 1.....	71
Tabela 32: Fluxo de caixa, VP e VP acumulado para Simulação 2.	72
Tabela 33: Avaliação dos resultados do investimento para Simulação 2.....	73
Tabela 34: Fluxo de caixa, VP e VP acumulado para Simulação 3.	74
Tabela 35: Avaliação dos resultados do investimento para Simulação 3.....	75

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO E JUSTIFICATIVA	13
2. OBJETIVOS	14
2.1. Objetivo Geral	14
2.2. Objetivos Específicos	14
3. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	14
3.1. Biomassa	14
3.2. Pirólise	15
3.2.1. Pirólise rápida	16
3.3. Bio-óleo	18
3.3.1. Composição do bio-óleo	19
3.4. Métodos de separação do bio-óleo	21
3.4.1. Extração líquido-líquido (LLE)	21
3.4.2. Destilação	22
3.5. Simulação de processos	22
3.5.1. Modelos termodinâmicos	23
4. METODOLOGIA	25
4.1. Simulação	25
4.1.1. Inserção dos componentes	25
4.1.2. Escolha do pacote termodinâmico	28
4.1.3. Desenvolvimento da simulação do processo	28
4.1.3.1. Configurações dos blocos da Simulação 1	36
4.1.3.2. Configurações dos blocos da Simulação 2	38
4.1.3.3. Configurações dos blocos da Simulação 3	42
5. RESULTADOS E DISCUSSÕES	50
5.1. Resultados das simulações	50
5.1.1. Simulação 1	50
5.1.2. Simulação 2	53
5.1.3. Simulação 3	55
5.2. Resultados da avaliação econômica com análise de risco e incertezas	60
5.2.1. Custo fixo de capital	60
5.2.2. Matéria-prima e insumos	65
5.2.3. Produtos	65
5.2.4. Mão de obra	66
5.2.5. Utilidades	67
5.2.6. Lucro anual e fluxo de caixa	68

5.2.6.1. <i>Fluxo de caixa para Simulação 1</i>	69
5.2.6.3. <i>Fluxo de caixa para Simulação 2</i>	71
5.2.6.3. <i>Fluxo de caixa para Simulação 3</i>	73
5.2.7. <i>Análise de risco e incertezas</i>	76
6. CONCLUSÃO.....	97
5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	98

1. INTRODUÇÃO E JUSTIFICATIVA

Com o crescimento da população e seus anseios tecnológicos, a demanda de energia está aumentando rapidamente. No início do século XX, a produção mundial de energia teve como foco as indústrias de carvão mineral e petróleo, mas com a exploração desenfreada de reservas naturais e a questão das emissões de gases do efeito estufa, surgiu o interesse na produção sustentável de energia. As fontes de energia renováveis, tais como a biomassa, desempenham um papel fundamental no cenário energético, ambiental e socioeconômico. (DEMIRBAS, 2005; EVARISTO et al., 2022).

A pirólise de biomassa é um processo que vem sendo estudado. Ele promove a decomposição térmica da biomassa na ausência de oxigênio para produzir sólidos, líquidos e produtos gasosos. A concepção do reator de pirólise, parâmetros da reação (temperatura, velocidade de aquecimento, tempo de residência, pressão e catalisador), tipo de biomassa e características físicas (tamanho de partícula, forma e estrutura), são parâmetros que podem afetar os rendimentos e as propriedades do produto formado (MELO, 2019).

O produto líquido obtido da pirólise (bio-óleo ou óleo pirolítico) apresenta uma coloração marrom-escura e odor característico, além de ser considerado uma mistura complexa de água e compostos orgânicos (STEDILE et al., 2015). Em sua composição já foram identificados vários compostos, tais como ácidos, álcoois, aldeídos, ésteres, cetonas, fenóis, furanos, hidrocarbonetos e nitrogenados (GUO; SONG; BUHAIN, 2015), o que lhe confere grande potencial de aplicação como fonte de matéria-prima para produtos químicos, bem como na indústria dos combustíveis. A purificação do bio-óleo é uma rota atrativa para obtenção dos compostos nele presentes, uma vez que possuem valores agregados e grande potencial de utilização em inúmeras áreas, como química, bioquímica, saúde, agronomia e, até mesmo, na gastronomia (HASSEN-TRABELSI et al., 2014).

A indústria química utiliza a modelagem e a simulação como ferramentas que oferecem a possibilidade de prever condições operacionais ou simular equipamentos, sem interferir no processo. Além da economia de insumos, simular um processo de produção antes de implementá-lo em larga escala também economiza tempo (DENG et al., 2019).

O presente trabalho teve como objetivo realizar a simulação do processo de separação dos compostos do bio-óleo derivado da pirólise rápida de diferentes biomassas, utilizando o simulador de processos Aspen Plus®, além de avaliar a viabilidade econômica e de risco do processo.

2. OBJETIVOS

2.1. Objetivo Geral

Simular através do Aspen Plus, a separação e purificação dos componentes presentes no bio-óleo derivado de madeira de eucalipto, resíduo de eucalipto e bagaço de cana-de-açúcar, obtidos pelo processo de pirólise rápida, além de avaliar a viabilidade econômica, o risco e as incertezas do processo.

2.2. Objetivos Específicos

- Propor um sequenciamento de separação para obtenção dos principais componentes presentes nos bio-óleos;
- Realizar o dimensionamento dos equipamentos requeridos no processo;
- Realizar a análise econômica;
- Realizar a análise de risco e incertezas de implantação industrial através das variáveis que influenciam o processo, utilizando a ferramenta de simulação de Monte Carlo.

3. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

3.1. Biomassa

O termo biomassa foi criado por volta de 1975, para descrever os materiais naturais que podem ser utilizados como combustível. Inclui toda matéria orgânica de origem vegetal ou animal, inclusive os materiais procedentes de sua transformação natural ou artificial. A biomassa energética engloba todos aqueles materiais que, por serem biomassa, são passíveis de serem utilizados para fins energéticos. A biomassa é uma fonte de energia renovável, resultante do armazenamento da energia solar nas plantas (MESA PÉREZ, 2004).

A biomassa pode ser definida como um recurso renovável proveniente da atividade florestal, da agropecuária, de culturas agrícolas, de plantas aquáticas, do processamento de alimentos e seus resíduos, constituído de carbono, hidrogênio, oxigênio e nitrogênio, sendo que alguns tipos também podem apresentar enxofre e cinzas em sua composição. Na Tabela 1 pode-se observar a análise elementar de diferentes tipos de biomassa (GIRON, 2016).

Tabela 1: Análise elementar de diferentes tipos de biomassa.

Biomassa	Análise Elementar (%)				
	C	O	H	N	S
Resíduos florestais	52,7	41,1	5,4	0,7	0,1
Poda de pinheiro	51,9	41,3	6,3	0,5	0,0
Palha de milho	48,7	44,1	6,4	0,7	0,1
Palha de arroz	50,1	43,0	5,7	1,0	0,2
Casca de algodão	50,4	39,8	8,4	1,4	0,0
Fibra de casca de palmeira	51,5	40,1	6,6	1,5	0,3
Casca de arroz	49,3	43,7	6,1	0,8	0,1
Bagaço de cana-de-açúcar	49,8	43,9	6,0	0,2	0,1
Eucalipto	45,5	46,5	7,8	0,2	-

Fonte: (FÉLIX et al., 2017; VASSILEV et al., 2010)

Grande parte da biomassa é constituída essencialmente por material lignocelulósico, estando presente em grandes quantidades em países com intensa atividade agrícola e agroindustrial. Exemplos de materiais lignocelulósicos são madeiras e espécies herbáceas, resíduo de madeira, bagaços, plantas aquáticas e algas, resíduos da indústria de papel e celulose, da atividade agrícola, de processamento de alimentos, dentre outros (GIRON, 2016).

Os materiais lignocelulósicos estão inseridos neste conceito de biomassa e são uma opção interessante, principalmente se forem considerados os descartes desses materiais provenientes da indústria de celulose, agroindústrias, alimentícia etc. Além de estar disponível de forma abundante e com baixos custos, a utilização de descartes traz outros benefícios, como o fato de não haver a necessidade de uma área específica de plantio e a solução do problema de disposição destes resíduos. Agregado a isto, está o fato destes materiais serem considerados fontes de recursos renováveis (TORRI, 2013).

A biomassa pode ser convertida a compostos sólidos, líquidos ou gasosos que serão usados para gerar eletricidade, fornecerem calor ou para mover automóveis. Essa conversão é feita através de processos termoquímicos, bioquímicos, térmicos e mecânicos (TORRI, 2013).

3.2. Pirólise

Pirólise é a decomposição térmica de biomassas em temperaturas entre 300 e 800 °C na ausência de oxigênio. A biomassa é convertida em bio-óleo (produto líquido), biochar/carvão (produto sólido) e gases não condensáveis. A pirólise causa uma ruptura irreversível da matéria

orgânica provocando profundas mudanças nas propriedades físico-químicas da biomassa principalmente para a formação de bio-óleo (KANAUJIA et al., 2014).

A pirólise recebe diferentes denominações dependendo das condições utilizadas. Na Tabela 2 são mostrados alguns rendimentos dos produtos para diferentes condições de processo da pirólise (BRIDGWATER, 2012).

Tabela 2: Rendimentos típicos obtidos para diversos tipos de pirólise.

Processo	Condições operacionais	Líquido (%p/p)	Sólido (%p/p)	Gás (%p/p)
Rápida	~ 500°C, curto tempo de residência de vapor quente ~ 1 s	75	12	13
Intermediária	~ 500°C, tempo de residência de vapor quente ~ 10 - 30 s	50, duas fases	25	25
Carbonização (lenta)	~ 400°C, longas horas de residência de vapor → Dias	30	35	35
Gaseificação (lenta)	~ 750 – 900°C	5	10	85
Torrefação (lenta)	~ 290°C, sólido tempo de residência ~ 10 - 60 min	0-5	80	20

Fonte: (BRIDGWATER, 2012)

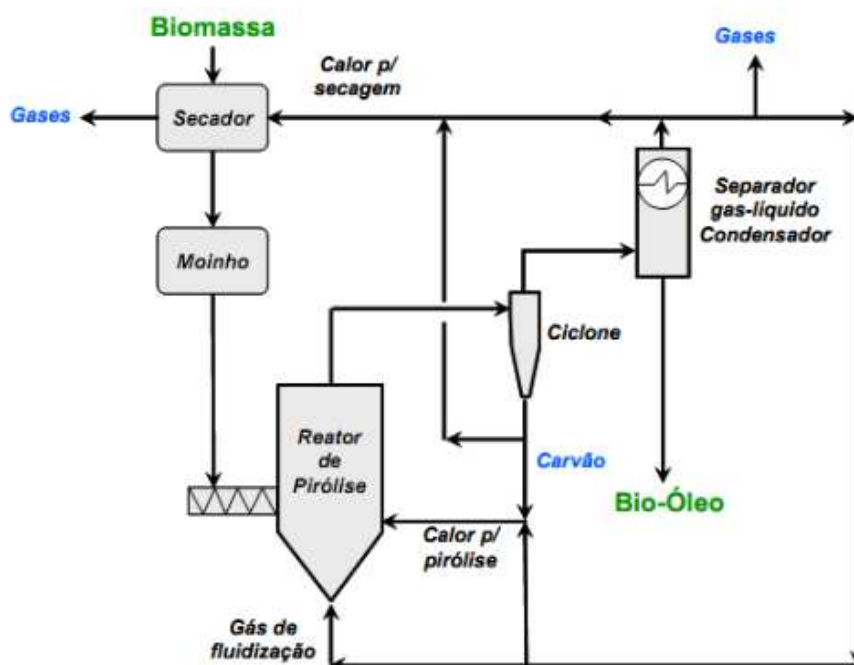
3.2.1. Pirólise rápida

A pirólise rápida de biomassas é um processo de conversão termoquímica, o qual permite a obtenção de bio-óleo, gás e carvão a partir das mais diversas fontes de biomassa. O principal produto desse processo é o bio-óleo, que devido as suas propriedades, pode ser utilizado como combustível e na produção de químicos com valor agregado. O rendimento e a qualidade desse produto podem variar de acordo com as condições de operação da planta. É necessário que o processo seja conduzido com planejamento de um sistema eficiente e robusto. A pirólise rápida para produção de líquidos é uma rota bastante atrativa, pois como o líquido tem maior viscosidade, pode ser transportado, estocado, e manuseado com maior facilidade e menor custo que a biomassa sólida (MELO, 2019).

Um esquema simplificado do processo de pirólise rápida pode ser observado na Figura 1. O processo de pirólise rápida compreende uma etapa de secagem da biomassa para retirar cerca de 10% de sua umidade, reduzindo a quantidade de água no produto líquido. Em seguida, há a moagem da biomassa obtendo tamanho de partículas em torno de 2 mm para o leito fluidizado. Depois, ocorre a reação de pirólise com temperaturas em torno de 500°C, com baixo tempo de residência dos vapores, tipicamente menor que 2 segundos. O ciclone separa o carvão

e o separador/condensador separa os gases e vapores e coleta o bio-óleo (BRIDGWATER; MEIER; RADLEIN, 1999).

Figura 1: Esquema conceitual do processo de pirólise rápida.



Fonte: (MELO, 2019)

Existem várias tecnologias e configurações de reatores que podem ser utilizados para pirólise rápida, principalmente os reatores de leito fluidizado, também conhecidos como de leito fluidizado borbulhante, os de leito fluidizado circulante, os de leito transportado circulante, os reatores ciclônicos, e os de pirólise a vácuo. As configurações mais usadas são os reatores de leito fluidizado e os de leito fluidizado circulante devido à fácil operação e aumento de escala (scale-up). Geralmente, reatores do tipo leito fluidizado apresentam uma construção simples e de fácil operação. O desempenho típico, no que diz respeito à obtenção de líquidos, é de cerca de 70-75% em peso relativo à biomassa seca. O tempo de residência dos sólidos e dos vapores no reator é controlado pelo fluxo de gás de fluidização do leito do reator. O carvão deve ser separado rapidamente da fase vapor para evitar a reação com os compostos presentes nesta fase, utilizando para isso um efeito um ciclone na saída do reator (SORIA-VERDUGO et al., 2017).

No Brasil, o número de plantas de pirólise utilizadas para a conversão de biomassa ainda é pequeno, sendo a planta de pirólise rápida (PPR-200), da Bioware uma das primeiras em operação desde 2006. A Bioware é uma empresa especializada em tecnologia de pirólise e gaseificação, localizada em Campinas – SP, que trabalha juntamente com a Universidade de Estadual de Campinas para desenvolvimento de pesquisas e projetos referentes a pirólise. O

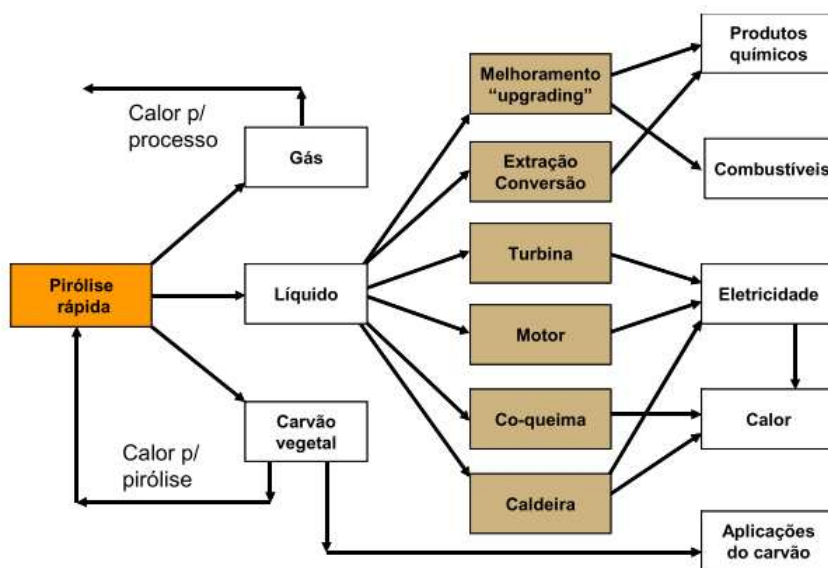
sistema para obtenção de biocombustível/bio-óleo, utilizado pela Bioware, é um conjunto de equipamentos baseado na tecnologia de leito fluidizado borbulhante, utilizando ar ou outro tipo de gás não oxidante como agente de fluidização. Além desta, existem outras empresas que estão desenvolvendo plantas para vários tipos de pirólises e diferentes biomassas, como a W2 e Bioenergia que trabalha com processos de gaseificação e pirólise, e a Bestan com planta de pirólise para uso da borracha como biomassa (TURMINA, 2021).

3.3. Bio-óleo

O bio-óleo também denominado óleo de pirólise, alcatrão pirolítico, licor pirolenhoso, líquido de madeira ou óleo de madeira, é um líquido de coloração marrom escura, quase negra, e odor característico de fumaça com composição elementar próxima à da biomassa. O bio-óleo é uma mistura complexa de compostos oxigenados com uma quantidade significativa de água, originada da umidade da biomassa e das reações, podendo conter ainda pequenas partículas de carvão e metais alcalinos dissolvidos oriundos das cinzas. Dependendo do tipo de biomassa, equipamento e da eficiência na separação do carvão e na condensação, pode-se obter composições diferentes de bio-óleo (BRIDGWATER, 2006, 2003).

O bio-óleo possui um número elevado de compostos oxigenados, incluindo ácidos, açúcares, álcoois, aldeídos, cetonas, ésteres, furanos, fenóis, oxigenados mistos, guaiacóis, seringóis. Essa mistura de compostos é primariamente originada da despolimerização e da fragmentação dos componentes principais: celulose, hemicelulose e lignina. Os oxigenados mistos, açúcares e furanos são produtos primários da pirólise da hemicelulose, enquanto os guaiacóis e seringóis são produtos da fragmentação da lignina. Os ácidos, álcoois, aldeídos, cetonas e ésteres são possivelmente originados da decomposição dos produtos primários da celulose e hemicelulose (HUBER; IBORRA; CORMA, 2006).

A fração líquida da pirólise pode ser utilizada em diversas aplicações, como exemplificada na Figura 2, podendo ser divididas em dois grandes grupos. O primeiro como combustível para fornecimento de calor e energia. O segundo grupo para obtenção de produtos químicos de alto valor agregado e podendo ser subdividido em dois. Os de uso direto, aproveitando-se dos grupos funcionais com maior concentração, e os em que se faz necessária a separação dos compostos. No primeiro encontram-se pesticidas e resinas fenólicas, enquanto no segundo encontram-se substâncias que podem ser utilizadas tanto como intermediários em reações quanto em produtos finais ligados às indústrias de fragrâncias, cosméticos e medicamentos (ZANATTA, 2016).

Figura 2: Aplicações do bio-óleo.

Fonte: (BRIDGWATER, 2006)

3.3.1. Composição do bio-óleo

Existem compostos presentes no bio-óleo que são de grande interesse na indústria química. Componentes estes que possuem um valor agregado na sua produção, uma vez que são utilizados em diversos processos, seja como intermediário ou como matéria-prima na formulação de novos produtos (MELO, 2019). Alguns desses compostos que estão presentes em maior quantidade em composições de diferentes bio-óleos possuem grande interesse comercial são: 3-metil-1,2-ciclopentanodiona, siringaldeído, acetosiringona, desaspidinol e ácido isovanílico (DAVID et al., 2018; KLAFKE, 2018; KUMAR; PANDA; SINGH, 2010).

- **3-Metil-1,2-ciclopentanodiona**

O 3-Metil-1,2-ciclopentanodiona (3-MeCPD) é um produto natural encontrado no extrato de café e responsável pelo seu aroma, e é um potencial antioxidante e elimina a atividade de algumas espécies reativas de oxigênio e nitrogênio, como óxido nítrico (NO), radical superóxido e seu subproduto peroxinitrito (ONOO⁻). O 3-MeCPD também desempenha um importante papel no processo anti-inflamatório e antienvhecimento do organismo vivo (SAMANTA et al., 2011).

- **Siringaldeído**

Siringaldeído (SA) ou 3,5-dimetoxi-4-hidroxibenzaldeído, pertencente à família dos aldeídos fenólicos, tem sido amplamente encontrado em uma variedade de plantas. O siringaldeído apresenta contaminantes da atmosfera e efluentes devido à pirólise da lignina e drenagem de efluentes da fábrica de celulose, e é um importante mediador redox natural da fermentação pois é usado principalmente como aditivo alimentar, como intensificador de sabor ou agente perfumado. SA, um composto fenólico que se apresenta na natureza em quantidades mínimas, principalmente de origem vegetal (WU et al., 2022) .

- **Acetosiringona**

A acetosiringona (3,5-dimetoxi-4-hidroxiacetofenona, AS) é um composto fenólico do tipo siringil dificilmente encontrado em plantas na forma livre. A AS tem um potenciador de atividade da lacase e antibacteriana quando combinado com peroxidase de rábano e peróxido de hidrogênio, sendo testados em bactérias patogênicas de plantas para detectar atividade antibacteriana e de efeitos antifúngicos (SZATMÁRI et al., 2021).

- **Desaspidinol**

Desaspidinol é uma droga anti-helmíntica utilizada para tratar infecções por vermes parasitas e é usada como aromatizante e aditivo alimentar (SOCOLSKY et al., 2003). De acordo com Toledano et al. (2013) a descoberta de desaspirinol como principal composto encontrado no bio-óleo fenólico, indica que tal derivado de siringila foi facilmente produzido a partir de lignina, independentemente da massa molar ou da pureza da matéria-prima empregada. Já Brienza et al. (2021) levaram a formação subsequente de desaspidinol a partir da decomposição de hemicelulose e lignina de madeira moída.

- **Ácido isovanílico**

O ácido isovanílico ou ácido 3-hidroxi-4-metoxibenzoico é um composto químico orgânico pertencente ao grupo dos ácidos fenólicos. A substância é derivada estruturalmente tanto do ácido benzóico como a partir do guaiacol (o-metoxifenol). É um isômero da vanilina, a partir do qual difere apenas pelas posições do grupo metoxi e do grupo hidroxila. A isovanilina pode ser oxidada enzimaticamente a ácido isovanílico. Estudos mostram que esses compostos, são ricos em substâncias bioativas e devem ser explorados pela indústria alimentícia e farmacêutica (FERNANDES DA SILVA, 2017; MELO et al., 2011)

3.4. Métodos de separação do bio-óleo

Existem algumas tecnologias para a recuperação dos compostos presentes no bio-óleo, dentre elas estão a destilação, extração com solvente e destilação molecular. Porém a destilação convencional e a extração por solventes são mais utilizadas (KIM, 2015).

3.4.1. Extração líquido-líquido (LLE)

O processo de extração líquido-líquido relaciona a transferência de massa de componentes entre duas fases líquidas imiscíveis. A transferência de um componente dissolvido entre as fases pode ser favorecida pela adição de agentes que beneficiam a separação de fases e/ou também pela utilização de reações químicas entre soluto e solvente (PERRY; GREEN, 2008).

A solução que contém os componentes a serem separados utilizando o processo de extração líquido-líquido é chamada de solução de alimentação. O componente líquido em maior quantidade na alimentação denomina-se diluente. O componente em menor concentração na solução é, frequentemente, denominado de soluto. O solvente é o líquido adicionado ao processo com o propósito de extrair o soluto a partir da alimentação, através de sua imiscibilidade ou miscibilidade parcial com o diluente da alimentação carregando o soluto. A fase rica no solvente saindo do extrator líquido-líquido é chamado de extrato. A outra fase, rica no diluente da alimentação, é denominada de refinado. A escolha do solvente para a extração líquido-líquido tem que ser avaliada por uma série de critérios, tais como estabilidade, viscosidade, volatilidade, seletividade, coeficiente de distribuição, miscibilidade em água, constante dielétrica, toxicidade, capacidade corrosiva e custo (SPRAKEL; SCHUUR, 2019).

A extração por solvente é uma alternativa promissora a ser utilizada na fração aquosa do bio-óleo para obtenção de produtos químicos de alto valor agregado. É considerada uma técnica tradicional que pode ser empregada para a extração de compostos orgânicos em muitas amostras aquosas, de mares, rios, efluentes industriais, domésticos, agrícolas, entre outros (SUNDARARAJAN; KARTHIKEYAN; KHADANGA, 2016).

A partição dos analitos entre a amostra e o solvente é governada por vários fatores, tais como, a polaridade do solvente e dos analitos, grupos funcionais dos compostos, pK_a e tipos de interações físicas e químicas. Em geral, a extração com solventes orgânicos pode ser realizada com benzeno, tolueno, hexano, diclorometano, clorofórmio, tetracloreto de carbono e acetato de etila (REN; YE; BOROLE, 2017).

3.4.2. Destilação

A destilação é um dos processos de separação física mais importantes em uma indústria. Por meio da destilação, podem-se separar frações de maior aplicação e valor agregado que a carga inicial, sendo largamente aplicado na produção de combustíveis, lubrificantes, bem como cargas para outros processos de separação e conversão (ROCHA et al., 2017).

Contendo uma vasta gama de compostos com diferentes intervalos de ebulição, a separação dos componentes por destilação pode ser utilizada para melhorar suas propriedades, porém, se operadas a altas temperaturas, pode ocorrer a polimerização. A volatilidade pode ser definida como a tendência à vaporização. Esta propriedade é uma importante base para a caracterização dos produtos da destilação. Através de métodos padronizados (ASTM, BSI, NBR), informações sobre as caracterizações dos produtos (frações) e suas propriedades, tais como ponto de fulgor, ponto de combustão e pressão de vapor são obtidas. A pressão de vapor é a pressão proporcionada por um vapor quando este está em equilíbrio com o líquido. A pressão de vapor é uma medida da tendência de evaporação de um líquido. Quanto maior for a sua pressão de vapor, mais volátil será o líquido, e menor será sua temperatura de ebulição com relação a outro líquido com menor pressão de vapor (SMITH; VAN NESS; ABBOTT, 2007).

Na indústria de processos químicos, o estudo do equilíbrio termodinâmico é muito importante, uma vez que inúmeras etapas destes podem envolver condições próximas do equilíbrio ou foram projetadas considerando-se que o equilíbrio é atingido. A condição de equilíbrio entre o líquido e o vapor é obtida quando ocorre a igualdade entre as pressões, temperaturas e fugacidades de cada componente em cada fase (SMITH; VAN NESS; ABBOTT, 2007).

3.5. Simulação de processos

Os simuladores de processos são programas computacionais que relacionam operações industriais e pacotes de informações físico-químicas para modelar, simular e controlar processos industriais (BRITO, 2013). Essas ferramentas são usadas para analisar processos completos e não apenas operações unitárias, a fim de criar operações eficientes (GOSLING, 2005).

O objetivo da simulação é modelar e prever o desempenho de um processo. Através de um simulador, é possível obter uma imagem abrangente de um processo em execução. Simuladores são ferramentas valiosas para compreender o funcionamento de uma planta de um

processo químico complexo, desta forma, podem ser utilizados para melhorar continuamente o processo ou para desenvolvimento de novos processos (RODRIGUES, 2019).

Os simuladores de processos comerciais e acadêmicos mais divulgados atualmente são: Speed Up[®], Aspen Plus[®], Design II[®], HYSYM[®], Aspen Hysys[®], CHEMCAD[®], e Pro II[®]. A maioria dos simuladores de processos são desenvolvidos seguindo uma abordagem orientada a objeto usando linguagens como C++ ou Java (CHAVES et al., 2016).

A simulação já está presente em muitos trabalhos envolvendo o processo de pirólise rápida, utilizando diferentes tipos de biomassa para produção de bio-óleo e produtos derivados. Como o Klafke (2018) que fez uso do papel e celulose, Melo (2019) que utilizou bagaço de cana-de-açúcar para caracterização e fracionamento do bio-óleo, Mesa Pérez (2004) que avaliou os critérios para otimização do processo de pirólise rápida. Como uma nova perspectiva de energia e obtenção de produtos agregados através do bio-óleo o estudo e simulação do processo está se tornando cada vez mais frequente, como por exemplo o de Zhang et al. (2020) que avaliou os efeitos do pré-tratamento de extração nas características do bio-óleo obtido de resíduos de ervas, Bittencourt (2020) simulou e analisou a viabilidade técnica-econômica de uma planta de pirólise multipropósito para obtenção de bio-óleo a partir de diferentes biomassas. Fardhyanti et al. (2019) estudaram o equilíbrio de fase líquida da extração de fenol a partir de bio-óleo produzido por pirólise de biomassa usando modelos termodinâmicos. Já Schena (2019) avaliou a abordagem analítica e econômica do aproveitamento de resíduos de coco através da pirólise. Além de Corrêa et al. (2021) que realizaram a purificação do bio-óleo produzido via pirólise de sementes de Açaí, Menezes et al. (2020) a caracterização do bio-óleo produzido na pirólise rápida de lignina kraft industrial submetida à torrefação, e Santos (2021) avaliou o processo de pirólise para a produção de bio-óleo a partir do resíduo agrícola de Feijão-Caupi (*Vigna unguiculata*).

3.5.1. Modelos termodinâmicos

A modelagem termodinâmica é um ponto de grande impacto na simulação de processos. A falta de propriedades ou parâmetros inadequados podem influenciar na precisão do modelo ou impedir a realização da simulação. Os parâmetros das propriedades não são conhecidos para todos os modelos termodinâmicos ou para todas temperaturas e pressões. Os modelos têm sido construídos sob pressupostos e limites práticos que possam ser aplicados (RODRIGUES, 2019).

Um dos modelos que podem ser utilizados para a simulação é o UNIQUAC (Universal Quasi-Chemical), ele fornece uma boa representação dos equilíbrios líquido-vapor (ELV) e

líquido-líquido (ELL) para misturas binárias e multicomponentes contendo uma variedade de não eletrólitos como hidrocarbonetos, cetonas, ésteres, água, aminas, álcoois, nitritos etc (SMITH; VAN NESS; ABBOTT, 2007). Em uma mistura multicomponente, a equação UNIQUAC para o coeficiente de atividade do componente (molecular) i é descrito pela Equação 1:

$$\ln \gamma_i = \ln \gamma_i^C + \ln \gamma_i^R \quad (1)$$

em que, γ_i é o coeficiente de atividade do componente i , γ_i^C é a parte combinatória do coeficiente de atividade do componente i e γ_i^R é a parte residual do coeficiente de atividade do componente i . Estas duas parcelas podem ser obtidas através das Equações 2 e 3:

$$\ln \gamma_i^C = \ln \frac{\Phi_i}{x_i} + \frac{z}{2} q_i \ln \frac{\Theta_i}{\Phi_i} + l_i - \frac{\Phi_i}{x_i} \sum_j x_j l_j \quad (2)$$

$$\ln \gamma_i^R = q_i \left[1 - \ln \left(\sum_j \Theta_j \tau_{ji} \right) \right] - \sum_j \frac{\Theta_j \tau_{ij}}{\sum_k \Theta_k \tau_{kj}} \quad (3)$$

em que, x_i é a fração em mol do componente i , r_i e q_i são, respectivamente, medidas de volumes moleculares de van der Waals e áreas de superfície molecular para componentes puros e z é um número de coordenação constante e igual a 10. Os termos Θ_i , Φ_i e τ_{ij} se referem a fração de área, a fração de segmento (que é semelhante à fração de volume) e um parâmetro ajustável em função de uma energia característica, respectivamente (FREDENSLUND; JONES; PRAUSNITZ, 1975; SMITH; VAN NESS; ABBOTT, 2007)

Outro modelo termodinâmico para tratamento de sistemas em equilíbrio de fases é o método UNIFAC (UNIQUAC Functional-group Activity Coefficients), seu princípio fundamental é de um modelo de solução de grupos, utilizando dados existentes de equilíbrio de fases para prever o equilíbrio de fases de sistemas para os quais não há dados experimentais disponíveis. É um modelo desenvolvido posteriormente baseado na equação UNIQUAC, no qual os coeficientes de atividade são calculados a partir de contribuições de vários grupos que formam as moléculas de uma solução a partir das Equações 4 e 5 (SMITH et al., 2022; SMITH; VAN NESS; ABBOTT, 2007):

$$\ln \gamma_i^C = 1 - J_i + \ln J_i - 5q_i \left(1 - \frac{J_i}{L_i} + \ln \frac{J_i}{L_i} \right) \quad (4)$$

$$\ln \gamma_i^R = q_i \left[1 - \sum_k \left(\theta_k \frac{\beta_{ik}}{s_k} - e_{ki} \ln \frac{\beta_{ik}}{s_k} \right) \right] \quad (5)$$

O modelo NRTL (Non-Random Two-Liquid Model) para misturas multicomponentes utiliza fração mássica como unidade de concentração, caracteriza-se por oferecer vantagem para sistemas que apresentem miscibilidade parcial, sistemas que contenham água com moléculas

orgânicas, mistura de substâncias polares e apolares. Esse modelo semiempírico é basicamente uma alteração do modelo de Wilson, onde se difere do mesmo pelo parâmetro de não aleatoriedade e foi obtido através de uma base molecular, ou seja, as energias de interação entre as moléculas foram o principal critério para o desenvolvimento do modelo, é descrito pela Equação 4 (REMÉDIO, 2017; SMITH et al., 2022)

$$\frac{G^E}{x_1 x_2 RT} = \frac{G_{21} \tau_{21}}{x_1 + x_2 G_{21}} + \frac{G_{12} \tau_{12}}{x_2 + x_1 G_{12}} \quad (4)$$

4. METODOLOGIA

4.1. Simulação

Para simular a separação da fração líquida do produto da pirólise rápida, foi utilizado o simulador comercial ASPEN PLUS versão 12.1.

4.1.1. Inserção dos componentes

Através da literatura foram obtidas as composições de três bio-óleos diferentes: derivado de madeira de eucalipto (KUMAR; PANDA; SINGH, 2010), resíduo de eucalipto (KLAFKE, 2018) e bagaço de cana-de-açúcar (DAVID et al., 2018), todos obtidos pelo processo de pirólise rápida. Devido as diferentes composições dos bio-óleos foram criadas três simulações diferentes 1, 2 e 3, respectivamente. Os componentes químicos das composições foram identificados por Cromatografia Gasosa acoplada a Espectrometria de Massas (CG-EM).

No ambiente *Properties* foram inseridos os componentes utilizados nas simulações. Nem todos os componentes convencionais foram encontrados no banco de dados do Aspen, desse modo foi necessário que as moléculas desses componentes fossem inseridas manualmente através da estrutura molecular e assim calculados suas propriedades. Esses componentes podem ser observados pelas Tabelas 3, 4 e 5.

Tabela 3: Componentes do bio-óleo de madeira de eucalipto utilizados na Simulação 1.

Nº de compostos	ID na simulação	Composto	Fórmula	Porcentagem (%)
1	FURFU-01	2-furano carboxaldeído	C ₅ H ₄ O ₂	4,54
2	GUAIA-01	2-metoxifenol	C ₇ H ₈ O ₂	9,28
3	4-MET-01	1-hidroxi-2-metoxi-4-metil benzeno	C ₈ H ₁₀ O ₂	11,05
4	4-ETH-01	4-etil-2-metoxifenol	C ₉ H ₁₂ O ₂	12,42
5	SYRIN-01	2,6-dimetoxifenol	C ₈ H ₁₀ O ₃	13,55
6	COMP6	Ácido 3-hidroxi-4-metoxibenzóico	C ₈ H ₈ O ₄	14,93
7	COMP7	Ácido 3-furano carboxílico	C ₅ H ₄ O ₃	16,00
8	COMP8	2,6-dimetoxi 4(2-propinil)fenol	C ₁₁ H ₁₄ O ₃	18,23

Fonte: (KUMAR; PANDA; SINGH, 2010)

Tabela 4: Componentes do bio-óleo de resíduo de eucalipto utilizados na Simulação 2.

Nº de compostos	ID da simulação	Composto	Fórmula	Porcentagem (%)
1	1-MET-01	1-metilimidazol	C ₄ H ₆ N ₂	0,53
2	2(5H)-01	2(5H)-furanona	C ₄ H ₄ O ₂	0,63
3	COMP3	2-hidroxi-2-ciclopenten-1-ona	C ₅ H ₆ O ₂	3,81
4	3-MET-01	3-metil-2-ciclopenten-1-ona	C ₆ H ₈ O	0,43
5	PHENO-01	fenol	C ₆ H ₆ O	0,53
6	COMP6	3-metil-2,4-imidazolidinediona	C ₄ H ₆ N ₂ O ₂	2,17
7	COMP7	2-hidroxi-3-metil-2-ciclopenten-1-ona	C ₆ H ₈ O ₂	2,28
8	O-CRE-01	2-metilfenol (o-Cresol)	C ₇ H ₈ O	0,46
9	2(3H)-01	γ-Caprolactona	C ₆ H ₁₀ O ₂	0,56
10	P-CRE-01	4-metilfenol (p-Cresol)	C ₇ H ₈ O	0,96
11	GUAIA-01	2-metóxi-4-metilfenol (Guaiacol)	C ₇ H ₈ O ₂	2,89
12	COMP12	3-etil-2-hidroxi-2-ciclopenten-1-ona	C ₇ H ₁₀ O ₂	0,57
13	DIMET-01	1,3-dimetóxi-4-metilfenol	C ₈ H ₁₀ O ₂	0,35
14	3:4-X-01	3,4-dimetilfenol	C ₈ H ₁₀ O	0,43
15	4:8-D-01	4,8-dimetil-1-nonanol	C ₁₁ H ₂₄ O	0,33
16	4-MET-01	2-metóxi-4-metilfenol	C ₈ H ₁₀ O ₂	1,95
17	PHENO-02	4-N-propilfenol	C ₉ H ₁₂ O	0,31
18	3-MET-02	3-metóxi-1,2-benzenodiol	C ₇ H ₈ O ₃	1,47
19	4-ETH-01	p-Etilguaiacol	C ₉ H ₁₂ O ₂	1,99
20	4-ETH-02	Vinilguaiacol	C ₉ H ₁₀ O ₂	4,12
i21	SYRIN-01	2,6-dimetóxi-4-metilfenol (Siringol)	C ₈ H ₁₀ O ₃	11,84

22	4-ALL-01	Eugenol	C ₁₀ H ₁₂ O ₂	2,15
23	4-PRO-01	2-metóxi-4-propil-fenol	C ₁₀ H ₁₄ O ₂	1,13
24	VANIL-01	2-metóxi-4-formilfenol (Vanilina)	C ₈ H ₈ O ₃	1,60
25	(E)-I-01	Isoeugenol	C ₁₀ H ₁₂ O ₂	14,97
26	COMP26	Isoeugenilmetileter	C ₁₁ H ₁₄ O ₂	0,76
27	ETHYL-01	Etilvanilina	C ₉ H ₁₀ O ₃	1,57
28	ACETO-01	Acetovanillona	C ₉ H ₁₀ O ₃	1,46
29	COMP29	3,4,5-trimetoxitolueno	C ₁₀ H ₁₄ O ₃	2,95
30	COMP30	1-(4-tidroxi-3-metóxi-fenil)-2- propanona	C ₁₀ H ₁₂ O ₃	0,63
31	COMP31	3,4-dimetóxiacetofenona	C ₁₀ H ₁₂ O ₃	11,55
32	COMP32	2,6-dimetóxi-4-(2-propenil)- fenol	C ₁₁ H ₁₄ O ₃	4,50
33	SYRIN-02	Siringaldeído	C ₉ H ₁₀ O ₄	6,08
34	4-ACE-01	Acetosiringona	C ₁₀ H ₁₂ O ₄	12,05

Fonte: (KLAFKE, 2018)

Tabela 5: Componentes do bio-óleo de bagaço de cana-de-açúcar utilizados na simulação.

Nº de compostos	ID da simulação	Composto	Fórmula	Porcentagem (%)
1	CARBO-01	Dióxido de carbono	CO ₂	1,23
2	PYRUV-01	Ácido 2-oxo-propanoico	C ₃ H ₄ O ₃	1,21
3	ACETA-01	Acetaldeído	C ₂ H ₄ O	1,21
4	ACETI-01	Ácido acético	C ₂ H ₄ O ₂	1,21
5	ACETO-01	1-hidroxi-2-propanona	C ₃ H ₆ O ₂	1,21
6	2-HYD-01	Monoacetato-1,2-etanodiol	C ₄ H ₈ O ₃	1,21
7	METHY-01	Éster metílico ácido 2-oxo-propanoico	C ₄ H ₆ O ₃	1,21
8	FURFU-02	Furfural	C ₅ H ₄ O ₂	2,69
9	FURFU-01	2-furanometanol	C ₅ H ₆ O ₂	1,15
10	COMP10	2-hidroxi-2-ciclopenten-1-ona	C ₅ H ₆ O ₂	2,75
11	METHY-02	Metil-ácido butanodióico	C ₅ H ₈ O ₄	2,41
12	COMP12	3-metil-2,4(3H,5H)-furandiona	C ₅ H ₆ O ₃	3,20
13	3-MET-01	3-metil-1,2-ciclopentanodiona	C ₆ H ₈ O ₂	3,14
14	GUAIA-01	2-metoxi-fenol	C ₇ H ₈ O ₂	3,06
15	3:4-X-01	3,4-dimetil-fenol	C ₈ H ₁₀ O	3,00
16	4-MET-01	2-metoxi-4-metil-fenol	C ₈ H ₁₀ O ₂	3,45
17	2:3-D-01	2,3-di-hidro-benzofurano	C ₈ H ₈ O	3,37
18	COMP18	1,4:3,6-dianhidro-α-D-glucopirranose	C ₆ H ₈ O ₄	1,94
19	4-ETH-01	4-etil-2-metoxi-fenol	C ₉ H ₁₂ O ₂	3,85

20	4-ETH-02	2-metoxi-4-vinilfenol	C ₉ H ₁₀ O ₂	3,79
21	SYRIN-01	2,6-dimetoxi-fenol	C ₈ H ₁₀ O ₃	4,32
22	VANIL-01	Vanilina	C ₈ H ₈ O ₃	4,24
23	ISOEU-01	2-metoxi-4-(1-propenil)-isoeugenol fenol	C ₁₀ H ₁₂ O ₂	4,60
24	4-PRO-01	2-metoxi-4-propil-fenol	C ₁₀ H ₁₄ O ₂	3,85
25	COMP25	3-metoxi-2,4,6-trimetil fenol	C ₁₀ H ₁₄ O ₂	4,24
26	LEVOG-01	Levoglucosano	C ₆ H ₁₀ O ₅	1,68
27	COMP27	3',5'-dimetoxiacetofenona	C ₁₀ H ₁₂ O ₃	4,63
28	SYRIN-02	4-hidroxi-3,5-benzaldeído	C ₉ H ₁₀ O ₄	5,11
29	COMP29	2,6-dimetoxi-4-(2-propenil)-fenol	C ₁₁ H ₁₄ O ₃	5,44
30	4-ACE-01	1-(4-hidroxi-3,5-dimetoxifenil)-etanona	C ₁₀ H ₁₂ O ₄	5,08
31	COMP31	Desaspidinol	C ₁₁ H ₁₄ O ₄	4,69
32	COMP32	3,5-dimetoxi-4-hidroxicinamaldeido	C ₁₁ H ₁₂ O ₄	5,84

Fonte: (DAVID et al., 2018)

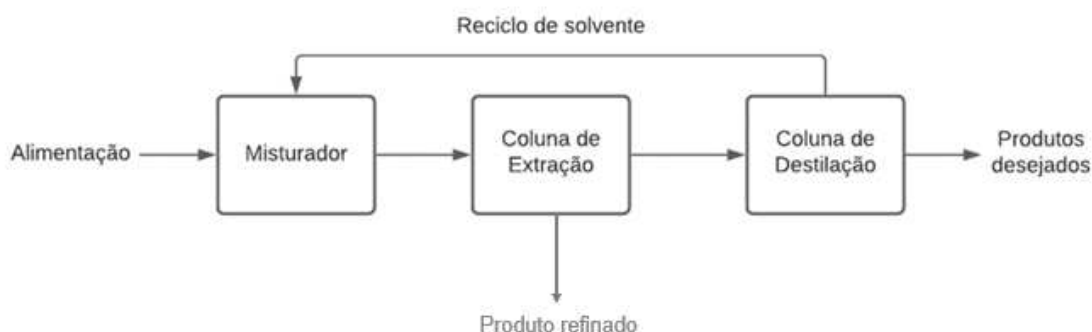
4.1.2. Escolha do pacote termodinâmico

A escolha do pacote termodinâmico foi determinada a partir de ajustes durante a realização das simulações. Dessa forma o modelo NRTL se adequou melhor aos resultados esperados.

4.1.3. Desenvolvimento da simulação do processo

As etapas envolvidas no processo de separação foram: extração utilizando hexano como solvente e destilação, tanto para recuperação do solvente quanto para obtenção de compostos. Em algumas simulações foram necessárias a utilização de uma coluna de destilação antecedente a extração para separar os componentes mais voláteis que o solvente. Um esquema simplificado do processo pode ser observado pela Figura 3.

Figura 3: Fluxograma simplificado do processo de extração e destilação do bio-óleo.



Fonte: Autoria própria.

O simulador de processos Aspen Plus® permite que todos os equipamentos sejam adicionados simultaneamente, especificando as condições de operação. Esses equipamentos são interligados por correntes materiais. Finalizando o fluxograma do processo, e determinando os balanços de massa e energia.

Como referência para elaboração inicial da simulação do processo, foram utilizados parâmetros e dados, como temperatura, pressão, condições de operações de equipamentos, composições de bio-óleo, além de outros que foram necessários para o processo. Para isso foram reproduzidas simulações de trabalhos disponíveis na literatura. Os trabalhos utilizados nesta etapa foram de Melo (2019) que realizou a caracterização e fracionamento do bio-óleo de bagaço de cana-de-açúcar, Rodrigues (2019) com a simulação de produção de energia através da reforma do bio-óleo, Jiang et al. (2021) com extração seletiva de monofenóis de bio-óleo de pirólise; Chan et al. (2020) realizaram o fracionamento e extração de bio-óleo para produção de combustível mais verde e produtos químicos. Gnana Prakash et al., (2022) estudaram a influência da qualidade do bio-óleo através metodologia de extração de lignina obtida pelo processo de despolimerização solvotérmica, além de Krause (2019) que usou [BNIM][HSO₄] para obter compostos nitrogenados do bio-óleo oriundos de resíduos industriais de produção de café solúvel.

Para a criação do fluxograma de processos no simulador Aspen Plus® com base na Figura 3, foram criadas 3 simulações, uma para cada composição. Ao iniciar a simulação, foi adicionada como *stream class* as formas MIXED e NCPSD como setup do ambiente *Simulation*. A adição de cada equipamento foi feita diretamente na *flowsheet*, e as correntes materiais entre cada um dos equipamentos foram inseridas de forma que reste apenas a configuração dos equipamentos. As correntes configuradas foram apenas as de entrada no processo, sendo que as demais são resultado das operações unitárias envolvidas.

Na sequência foram inseridos todos os equipamentos que compõem cada simulação (de acordo com a necessidade de cada processo). Cada equipamento foi nomeado por uma letra.

O processo foi alimentado por uma quantidade de 100 kg/h de bio-óleo em cada simulação, com suas respectivas composições e frações. Dessa mesma forma foi inserida no processo uma corrente de entrada com uma quantidade de solvente para que ao receber o reciclo o processo tivesse uma entrada de aproximadamente 100 kg/h desse solvente. Como são representadas pelas Figuras 4 a 9.

Figura 4: Configurações da alimentação de bio-óleo da Simulação 1.

Specifications

Flash Type: **Temperature** **Pressure**

State variables

Temperature	25	C
Pressure	1	bar
Vapor fraction		
Total flow basis	Mass	
Total flow rate	100	kg/hr
Solvent		

Reference Temperature

Volume flow reference temperature: C

Component concentration reference temperature: C

Composition

Mass-Frac

Component	Value
FURFU-01	0,0453965
GUAIA-01	0,0927841
4-MET-01	0,110472
4-ETH-01	0,124233
SYRIN-01	0,135541
COMP6	0,149291
COMP7	0,160015
COMP8	0,182268
N-HEX-01	
Total	1

Fonte: Autoria própria

Figura 5: Configurações da corrente de entrada do solvente na Simulação 1.

Main Flowsheet x Blocks x SOLVENTE (MATERIAL) x BIO-OLEO (MATERIAL) x +

Mixed CI Solid NC Solid Flash Options EO Options Costing Comments

Specifications

Flash Type Temperature Pressure

State variables

Temperature 25 C

Pressure 1 bar

Vapor fraction

Total flow basis Mass

Total flow rate 1 kg/hr

Solvent

Reference Temperature

Volume flow reference temperature C

Component concentration reference temperature C

Composition

Mass-Frac

Component	Value
FURFU-01	
GUAIA-01	
4-MET-01	
4-ETH-01	
SYRIN-01	
COMP6	
COMP7	
COMP8	
N-HEX-01	1

Total 1

Fonte: Autoria própria

Figura 6: Configurações da alimentação de bio-óleo da Simulação 2.

Main Flowsheet x Blocks x **BIO-OLEO (MATERIAL)** x +

Mixed CI Solid NC Solid Flash Options EO Options Costing Comments

Specifications

Flash Type **Temperature** **Pressure**

State variables

Temperature **C**

Pressure **bar**

Vapor fraction

Total flow basis **Mass**

Total flow rate **kg/hr**

Solvent

Reference Temperature

Volume flow reference temperature **C**

Component concentration reference temperature **C**

Composition

Mass-Frac

Component	Value
1-MET-01	0,00528291
2(5H)-01	0,00625608
COMP3	0,0380926
3-MET-01	0,00430975
PHENO-01	0,00528291
COMP6	0,0216878
COMP7	0,0227999
O-CRE-01	0,00458779
2(3H)-01	0,00556096
P-CRE-01	0,00959266
GUAIA-01	0,028917
COMP12	0,00569999
DIMET-01	0,0034756
3:4-X-01	0,00430975
4:8-D-01	0,00333658
4-MET-01	0,0194634
Total	1

Fonte: Autoria própria

Figura 7: Configurações da corrente de entrada do solvente na Simulação 2.

Main Flowsheet x Blocks x BIO-OLEO (MATERIAL) x **SOLVENTE (MATERIAL)** x +

Mixed CI Solid NC Solid Flash Options EO Options Costing Comments

Specifications

Flash Type **Temperature** **Pressure**

State variables

Temperature 25 C

Pressure 1 bar

Vapor fraction

Total flow basis **Mass**

Total flow rate 10 kg/hr

Solvent

Reference Temperature

Volume flow reference temperature C

Component concentration reference temperature C

Composition

Mass-Frac

Component	Value
4-ETH-02	
SYRIN-01	
4-ALL-01	
4-PRO-01	
VANIL-01	
(E)-I-01	
COMP26	
ETHYL-01	
ACETO-01	
COMP29	
COMP30	
COMP31	
COMP32	
SYRIN-02	
4-ACE-01	
N-HEX-01	1
Total	1

Fonte: Autoria própria

Figura 8: Configurações da alimentação de bio-óleo da Simulação 3.

Main Flowsheet x Results Summary - Streams x Blocks x **BIO-OLEO (MATERIAL)** x +

☒ Mixed ☐ CI Solid ☐ NC Solid ☐ Flash Options ☐ EO Options ☐ Costing ☐ Comments

Specifications

Flash Type **Temperature** **Pressure**

State variables

Temperature **C**

Pressure **bar**

Vapor fraction

Total flow basis **Mass**

Total flow rate **kg/hr**

Solvent

Reference Temperature

Volume flow reference temperature **C**

Component concentration reference temperature **C**

Composition

Mass-Frac

Component	Value
CARBO-01	0,0123491
PYRUV-01	0,0120685
ACETA-01	0,0120685
ACETI-01	0,0120685
ACETO-01	0,0120685
2-HYD-01	0,0120685
METHY-01	0,0120685
FURFU-02	0,026944
FURFU-01	0,0115072
COMP10	0,0275049
METHY-02	0,024137
COMP12	0,0319955
3-MET-01	0,0314342
GUAIA-01	0,0305922
3:4-X-01	0,0300309
4-MET-01	0,0345215
2:3-D-01	0,0336795
COMP18	0,0193657
4-ETH-01	0,0384507
Total	1

Fonte: Autoria própria

Figura 9: Configurações da corrente de entrada do solvente na Simulação 3.

The screenshot displays the Aspen Plus configuration for the solvent input stream. The 'Specifications' tab is selected, showing the following settings:

- Flash Type:** Temperature Pressure
- State variables:**
 - Temperature: 25 C
 - Pressure: 1 bar
 - Vapor fraction: (empty)
 - Total flow basis: Mass
 - Total flow rate: 6 kg/hr
 - Solvent: (empty)
- Reference Temperature:**
 - Volume flow reference temperature: (empty) C
 - Component concentration reference temperature: (empty) C

The **Composition** section shows a list of components with their respective values. The total value is 1.

Component	Value
3:4-X-01	
4-MET-01	
2:3-D-01	
COMP18	
4-ETH-01	
4-ETH-02	
SYRIN-01	
VANIL-01	
ISOEU-01	
4-PRO-01	
COMP25	
LEVOG-01	
COMP27	
SYRIN-02	
COMP29	
4-ACE-01	
COMP31	
COMP32	
N-HEX-01	1
Total	1

Fonte: Autoria própria

Logo após a configuração das correntes de entrada, todos os blocos foram configurados de modo com que esses parâmetros (vazões, temperaturas, pressões, ...) fossem responsáveis pelos resultados das correntes de saída.

4.1.3.1. Configurações dos blocos da Simulação 1

Através das Figuras 10 a 13 pode-se observar os parâmetros e condições de operação de cada equipamento utilizado na Simulação 1, referente ao processo de purificação do bio-óleo derivado de madeira de eucalipto.

A determinação do componente para ser obtido através da extração no equipamento A, foi levado em consideração alguns critérios, entre eles: valores de mercado, afinidade com o solvente e sua fração na composição. Através desse estudo o componente selecionado foi o COMP 6 (Ácido 3-Hidroxi-4-Metoxibenzóico).

Figura 10: Configuração da extração utilizando SEP (A) para Simulação 1.

Component ID	Specification	Basis	Value	Units
FURFU-01	Split fraction		0	
GUAIA-01	Split fraction		0	
4-MET-01	Split fraction		0	
4-ETH-01	Split fraction		0	
SYRIN-01	Split fraction		0	
COMP6	Split fraction		1	
COMP7	Split fraction		0	
COMP8	Split fraction		0	
N-HEX-01	Split fraction		0	

Fonte: Autoria própria

Figura 11: Configuração do trocador de calor HEATER (B) para Simulação 1.

The image shows the configuration window for a HEATER (B) unit in a simulation software. The window has a title bar with tabs: 'Main Flowsheet', 'B (Heater)', and a '+' icon. Below the title bar are four sub-tabs: 'Specifications' (selected), 'Flash Options', 'Utility', and 'Comments'. The 'Specifications' tab contains the following fields:

- Flash specifications** (grouped header)
- Flash Type**: Two dropdown menus, the first is set to 'Temperature' and the second to 'Pressure'.
- Temperature**: A text box containing '100' and a dropdown menu set to 'C'.
- Temperature change**: A text box and a dropdown menu set to 'C'.
- Degrees of superheating**: A text box and a dropdown menu set to 'C'.
- Degrees of subcooling**: A text box and a dropdown menu set to 'C'.
- Pressure**: A text box containing '1' and a dropdown menu set to 'bar'.
- Duty**: A text box and a dropdown menu set to 'cal/sec'.
- Vapor fraction**: A text box.
- Pressure drop correlation parameter**: A text box.
- ☐ **Always calculate pressure drop correlation parameter**
- Valid phases**: A dropdown menu set to 'Vapor-Liquid'.

Fonte: Autoria própria

Figura 12: Configuração da coluna de destilação RADFRAC (C) para Simulação 1.

Main Flowsheet × C (RadFrac) × +

☒ Configuration ☒ Streams ☒ Pressure ☒ Condenser ☒ Reboiler 3-Phase Comments

Setup options

Calculation type: *Equilibrium*

Number of stages: 30

Condenser: *Total*

Reboiler: *Kettle*

Valid phases: *Vapor-Liquid*

Convergence: *Standard*

Operating specifications

Distillate rate: *Mass* 100 kg/hr

Reflux ratio: *Mole* 5

Free water reflux ratio: 0

Fonte: Autoria própria

Figura 13: Configuração do separador FSPLIT (D) para Simulação 1.

Main Flowsheet × D (FSplit) × +

☒ Specifications ☐ Flash Options ☐ Key Components ☐ Comments

Flow split specification for outlet streams

Stream	Specification	Basis	Value	Units
RECICLO	<i>Flow</i>	<i>Mass</i>	99	kg/hr
PURGA				

Fonte: Autoria própria

4.1.3.2. Configurações dos blocos da Simulação 2

As Figuras 14 a 19 representam as configurações dos parâmetros e condições de operação de cada equipamento utilizada da Simulação 2, referente ao processo de purificação do bio-óleo derivado de resíduo de eucalipto.

Assim como na Simulação 1, a determinação do componente para ser obtido através da extração no equipamento A, foi levado em consideração os critérios de valores de mercado, afinidade com o solvente e sua fração na composição. Através desse estudo o componente selecionado foi o SYRIN-02 (Siringaldeído).

Figura 14: Configuração da extração utilizando SEP (A) para Simulação 2.

Main Flowsheet x A (Sep) x +

Specifications Feed Flash Outlet Flash Utility Comments

Outlet stream conditions

Outlet stream: SYRIN-02

Substream: MIXED

Component ID	Specification	Basis	Value	Units
3-MET-02	Split fraction		0	
4-ETH-01	Split fraction		0	
4-ETH-02	Split fraction		0	
SYRIN-01	Split fraction		0	
4-ALL-01	Split fraction		0	
4-PRO-01	Split fraction		0	
VANIL-01	Split fraction		0	
(E)-I-01	Split fraction		0	
COMP26	Split fraction		0	
ETHYL-01	Split fraction		0	
ACETO-01	Split fraction		0	
COMP29	Split fraction		0	
COMP30	Split fraction		0	
COMP31	Split fraction		0	
COMP32	Split fraction		0	
SYRIN-02	Split fraction		1	
4-ACE-01	Split fraction		0	
N-HEX-01	Split fraction		0	

Fonte: Autoria própria

Figura 15: Configuração do trocador de calor HEATER (B) para Simulação 2.

The screenshot shows the configuration window for a HEATER (B) unit. The 'Specifications' tab is selected. Under 'Flash specifications', the 'Flash Type' is set to 'Temperature' and 'Pressure'. The 'Temperature' is set to 150 C, and the 'Pressure' is set to 1 bar. Other parameters like 'Temperature change', 'Degrees of superheating', 'Degrees of subcooling', 'Duty', 'Vapor fraction', and 'Pressure drop correlation parameter' are left blank. There is a checkbox for 'Always calculate pressure drop correlation parameter' which is unchecked. Under 'Valid phases', 'Vapor-Liquid' is selected.

Fonte: Autoria própria

Figura 16: Configuração da coluna de destilação RADFRAC (C) para Simulação 2.

The screenshot shows the configuration window for a RADFRAC (C) unit. The 'Configuration' tab is selected. Under 'Setup options', the 'Calculation type' is set to 'Equilibrium', the 'Number of stages' is 25, and the 'Condenser' is set to 'Total'. The 'Reboiler' is set to 'Kettle', 'Valid phases' is 'Vapor-Liquid', and 'Convergence' is 'Standard'. Under 'Operating specifications', the 'Distillate rate' is set to 100 kg/hr, the 'Reflux ratio' is set to 2, and the 'Free water reflux ratio' is 0. There is a 'Feed Basis' button.

Fonte: Autoria própria

Além do composto desejado na extração, um segundo composto foi escolhido para ser obtido posteriormente através do processo de destilação. A escolha desse composto foi feita através do estudo das temperaturas de ebulição dos componentes, sua fração na composição e valor de mercado. Tendo em vista esse estudo, foi possível configurar as colunas de destilação representadas pela Figura 20 e 21, para se obter o componente 4-ACE-01 (Acetosiringona).

Figura 17: Configuração da coluna de destilação RADFRAC (D) para Simulação 2.

Main Flowsheet x D (RadFrac) x +

Configuration Streams Pressure Condenser Reboiler 3-Phase Comments

Setup options

Calculation type: Equilibrium

Number of stages: 40 Stage Wizard

Condenser: Total

Reboiler: Kettle

Valid phases: Vapor-Liquid

Convergence: Standard

Operating specifications

Distillate rate: 79,5 kg/hr (Mass)

Reflux ratio: 5 (Mole)

Free water reflux ratio: 0

Feed Basis

Fonte: Autoria própria

Figura 18: Configuração da coluna de destilação DISTL (E) para Simulação 2.

Main Flowsheet x E (Distl) x +

Specifications Convergence Comments

Column specifications

Number of stages: 20

Feed stage: 3

Reflux ratio: 7

Distillate to feed mole ratio: 0,765

Condenser type: Total

Pressure specifications

Condenser pressure: 1 bar

Reboiler pressure: 1 bar

Fonte: Autoria própria

Figura 19: Configuração do separador FSPLIT (H) para Simulação 2.

Stream	Specification	Basis	Value	Units
RECICLO	Flow	Mass	90	kg/hr
PURGA				

Fonte: Autoria própria

4.1.3.3. Configurações dos blocos da Simulação 3

As configurações dos parâmetros e condições de operação de cada equipamento utilizada da Simulação 3, referente ao processo de purificação do bio-óleo derivado do bagaço-de-cana de açúcar, podem ser observados pelos Figuras de 20 a 28.

Assim como na Simulação 1 e 2, a determinação do componente para ser obtido através da extração no equipamento A, foi levado em consideração os critérios de valores de mercado, afinidade com o solvente e sua fração na composição. Através desse estudo o componente selecionado foi o 3-MET-01 (3-Metil-1,2-Ciclopentanodiona).

Figura 20: Configuração da coluna de destilação RADFRAC (A) para Simulação 3.

Setup options

- Calculation type: Equilibrium
- Number of stages: 20
- Condenser: Total
- Reboiler: Kettle
- Valid phases: Vapor-Liquid
- Convergence: Standard

Operating specifications

- Distillate rate: Mass, 2.44 kg/hr
- Reflux ratio: Mole, 2
- Free water reflux ratio: 0

Fonte: Autoria própria

Figura 21: Configuração do trocador de calor HEATER (B) para Simulação 3.

Main Flowsheet × B (Heater) × +

Specifications Flash Options Utility Comments

Flash specifications

Flash Type Temperature Pressure

Temperature 25 C

Temperature change C

Degrees of superheating C

Degrees of subcooling C

Pressure 1 bar

Duty cal/sec

Vapor fraction

Pressure drop correlation parameter

☐ Always calculate pressure drop correlation parameter

Valid phases

Vapor-Liquid

Fonte: Autoria própria

Figura 22: Configuração da extração utilizando SEP (C) para Simulação 3.

Main Flowsheet x C (Sep) x +

Specifications Feed Flash Outlet Flash Utility Comments

Outlet stream conditions

Outlet stream **3-MET-01**

Substream **MIXED**

Component ID	Specification	Basis	Value	Units
CARBO-01	Split fraction		0	
PYRUV-01	Split fraction		0	
ACETA-01	Split fraction		0	
ACETI-01	Split fraction		0	
ACETO-01	Split fraction		0	
2-HYD-01	Split fraction		0	
METHY-01	Split fraction		0	
FURFU-02	Split fraction		0	
FURFU-01	Split fraction		0	
COMP10	Split fraction		0	
METHY-02	Split fraction		0	
COMP12	Split fraction		0	
3-MET-01	Split fraction		1	
GUAIA-01	Split fraction		0	
3:4-X-01	Split fraction		0	
4-MET-01	Split fraction		0	
2:3-D-01	Split fraction		0	
COMP18	Split fraction		0	
4-ETH-01	Split fraction		0	
4-ETH-02	Split fraction		0	
SYRIN-01	Split fraction		0	
VANIL-01	Split fraction		0	

Fonte: Autoria própria

Figura 23: Configuração da coluna de destilação RADFRAC (D) para Simulação 3.

The image shows the configuration interface for a RADFRAC distillation column. The 'Configuration' tab is selected. In the 'Setup options' section, the calculation type is set to 'Equilibrium', the number of stages is 30, the condenser is 'Total', the reboiler is 'Kettle', the valid phases are 'Vapor-Liquid', and the convergence criterion is 'Standard'. In the 'Operating specifications' section, the distillate rate is 100 kg/hr on a mass basis, and the reflux ratio is 5 on a mole basis. The free water reflux ratio is set to 0, and there is a 'Feed Basis' button.

Fonte: Autoria própria

Além do composto desejado na extração, outros compostos foram escolhidos para serem obtidos posteriormente através do processo de destilação. As escolhas desses compostos foram feitas através do estudo das temperaturas de ebulição dos componentes, suas frações na composição e valores de mercado. Tendo em vista esse estudo, foi possível configurar as colunas de destilação representadas pela Figura 27, 28, 29 e 30, para se obter os componentes SYRIN-02 (4-Hidroxi-3,5-Benzaldeído), 4-ACE-01 (1-(4-Hidroxi-3,5-Dimetoxifenil)-Etanona), COMP31 (Desaspidinol).

Figura 24: Configuração da coluna de destilação RADFRAC (E) para Simulação 3.

Main Flowsheet × E (RadFrac) × +

Configuration

Streams

Pressure

Condenser

Reboiler

3-Phase

Comments

Setup options

Calculation type

Equilibrium

Number of stages

40

Stage Wizard

Condenser

Total

Reboiler

Kettle

Valid phases

Vapor-Liquid

Convergence

Standard

Operating specifications

Distillate rate

Mass

72,07

kg/hr

Reflux ratio

Mole

5

Free water reflux ratio

0

Feed Basis

Fonte: Autoria própria

Figura 25: Configuração da coluna de destilação RADFRAC (F) para Simulação 3.

Main Flowsheet × F (RadFrac) × +

Configuration

Streams

Pressure

Condenser

Reboiler

3-Phase

Comments

Setup options

Calculation type

Equilibrium

Number of stages

45

Stage Wizard

Condenser

Total

Reboiler

Kettle

Valid phases

Vapor-Liquid

Convergence

Standard

Operating specifications

Distillate rate

Mass

5,1

kg/hr

Reflux ratio

Mole

7

Free water reflux ratio

0

Feed Basis

Fonte: Autoria própria

Figura 26: Configuração da coluna de destilação RADFRAC (G) para Simulação 3.

The screenshot shows the configuration window for RADFRAC (G). The 'Configuration' tab is active. Under 'Setup options', the calculation type is 'Equilibrium', the number of stages is 45, the condenser is 'Total', the reboiler is 'Kettle', the valid phases are 'Vapor-Liquid', and the convergence is 'Standard'. Under 'Operating specifications', the distillate rate is 5.08 kg/hr (Mass basis), the reflux ratio is 5 (Mole basis), and the free water reflux ratio is 0. A 'Feed Basis' button is also present.

Section	Parameter	Value	Unit/Basis
Setup options	Calculation type	Equilibrium	
	Number of stages	45	
	Condenser	Total	
	Reboiler	Kettle	
	Valid phases	Vapor-Liquid	
	Convergence	Standard	
Operating specifications	Distillate rate	5.08	kg/hr
	Reflux ratio	5	
	Free water reflux ratio	0	
	Feed Basis		

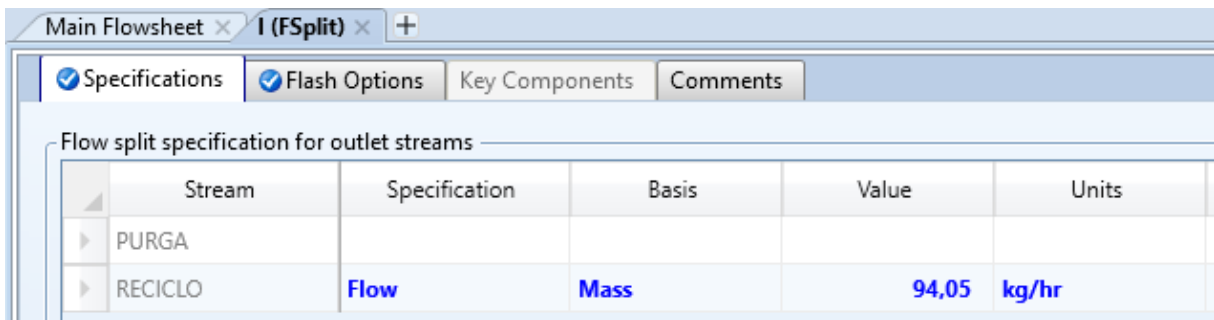
Fonte: Autoria própria

Figura 27: Configuração da coluna de destilação RADFRAC (H) para Simulação 3.

The screenshot shows the configuration window for RADFRAC (H). The 'Configuration' tab is active. Under 'Setup options', the calculation type is 'Equilibrium', the number of stages is 45, the condenser is 'Total', the reboiler is 'Kettle', the valid phases are 'Vapor-Liquid', and the convergence is 'Standard'. Under 'Operating specifications', the distillate rate is 5.84 kg/hr (Mass basis), the reflux ratio is 5 (Mole basis), and the free water reflux ratio is 0. A 'Feed Basis' button is also present.

Section	Parameter	Value	Unit/Basis
Setup options	Calculation type	Equilibrium	
	Number of stages	45	
	Condenser	Total	
	Reboiler	Kettle	
	Valid phases	Vapor-Liquid	
	Convergence	Standard	
Operating specifications	Distillate rate	5.84	kg/hr
	Reflux ratio	5	
	Free water reflux ratio	0	
	Feed Basis		

Fonte: Autoria própria

Figura 28: Configuração do separador FSPLIT (I) para Simulação 3.


Stream	Specification	Basis	Value	Units
PURGA				
RECICLO	Flow	Mass	94,05	kg/hr

Fonte: Autoria própria

4.2. Análise econômica

A avaliação econômica consistiu na dedução do investimento necessário para a construção da planta do processo de purificação de bio-óleo derivado de diferentes biomassas, com o objetivo de se obter compostos de valores agregados, e nas estimativas de receita frente a dado cenário econômico. As simulações foram realizadas com uma capacidade de 100 kg/h de bio-óleo, operando a 7.920 h/ano, correspondente a 330 dias anuais.

Foi realizada a análise econômica levando em consideração o custo de capital para construção da planta industrial, análise de rentabilidade do processo proposto, análise e seleção do melhor processo para geração do produto final, valor de venda e análise do potencial econômico do produto no mercado. Através do Aspen Plus foi estimado os custos dos equipamentos e utilidades gastas no processo. A partir destes dados foi realizada a análise econômica com auxílio de planilhas eletrônicas (PETERS; TIMMERHAUS; WEST, 2003; TURTON et al., 2009). As etapas adotadas para realizar o estudo de viabilidade econômica foram as seguintes:

- i. Definiu-se o custo de compra de cada equipamento do processo.
- ii. Na planilha “Custo fixo de capital”, foi inserido o custo total de compra dos equipamentos do processo para calcular o investimento de capital fixo e capital de giro.
- iii. Na planilha “Matéria-prima”, foi adicionado o preço das matérias-primas com suas respectivas vazões.
- iv. Na planilha “Produtos”, foi adicionado o preço dos produtos com suas respectivas vazões.
- v. Na planilha “Mão-de-obra”, inseriu-se o custo operacional.
- vi. Na planilha “Utilidades”, informou as quantidades de utilidades anuais necessárias com as unidades apropriadas.

vii. Na planilha “Lucro anual”, foi calculado o lucro líquido anual e o payback simples.

viii. Na planilha “Fluxo de caixa”, foi definido o fluxo de caixa e cálculo das medidas de rentabilidade comum, tais como, tempo de retorno do capital investido e retorno líquido.

Além disso, foi utilizado, paralelamente a este método, o simulador de processos Aspen Plus para mapeamento da planta e dimensionamento dos equipamentos.

4.3. Análise de risco e incertezas

Os valores utilizados na avaliação econômica estão sujeitos a incertezas. Um desses fatores é o custo do bio-óleo que pode variar dependendo do tipo de biomassa. Dessa forma, considerar a existência de incertezas em variáveis como investimento, custos das matérias primas, produção industrial, entre outros, significa admitir a presença de risco nas tomadas de decisões sobre a relevância do projeto. O resultado da análise de risco inclui uma série de informações sobre o risco potencial associado a decisão ou investimento (WATANABE; BONOMI, 2021).

Uma técnica bastante utilizada para análise de risco e incertezas é Simulação de Monte Carlo. Ela consiste em utilizar números aleatórios como entradas para avaliar iterativamente um modelo determinístico. Esse método é especialmente útil quando o modelo é complexo, não-linear ou quando apresenta diversos parâmetros de incerteza (LIMA et al., 2008). Como resultado, são obtidos gráficos de distribuição de probabilidade dos resultados simulados, incluindo a média, o desvio padrão e a quantidade de resultados.

Neste trabalho foi utilizada a Simulação de Monte Carlo para avaliar as incertezas na análise de viabilidade econômica do processo para cada tipo de bio-óleo considerado. Para isso foram utilizadas planilhas eletrônicas já adaptadas para gerar valores aleatórios para distribuição de probabilidade. Foram avaliadas duas variáveis, Valor Presente Líquido (VPL) do Projeto, e Custos Operacionais em função de duas entradas de dados, custo de matéria prima (bio-óleo) e capacidade de produção.

Para as análises de risco realizadas em função da variação do custo de matéria prima, foi considerada uma variação de $\pm 20\%$ do valor de custo do bio-óleo, conforme dados apresentados na Tabela 6. Já a análise de risco realizada em função da capacidade de produção, considerou-se entre metade da capacidade estimada até o dobro dessa mesma capacidade, conforme apresentado na Tabela 7.

Tabela 6: Variação para o custo do bio-óleo.

	Máximo	Mais Provável	Mínimo
Custo Bio-óleo (R\$/kg)	1,76	1,47	1,18

Fonte: Autoria própria

Tabela 7: Variação da capacidade de produção.

	Máximo	Mais Provável	Mínimo
Consumo Bio-óleo (MM kg/ano)	1,58	0,792	0,40

Fonte: Autoria própria

5. RESULTADOS E DISCUSSÕES

5.1. Resultados das simulações

Inicialmente a intenção para simular o processo de extração dos compostos era utilizar uma coluna de extração, porém devido a vários testes realizados não foi possível concluir esse objetivo. Ao realizar várias tentativas para separar os componentes, foram testados dois modelos termodinâmicos que mais se adequavam ao tipo de processo, UNIFAC e NRTL. Para o processo de extração utilizando multicomponentes como foi o caso, não foi possível realizar a extração em ambos os modelos.

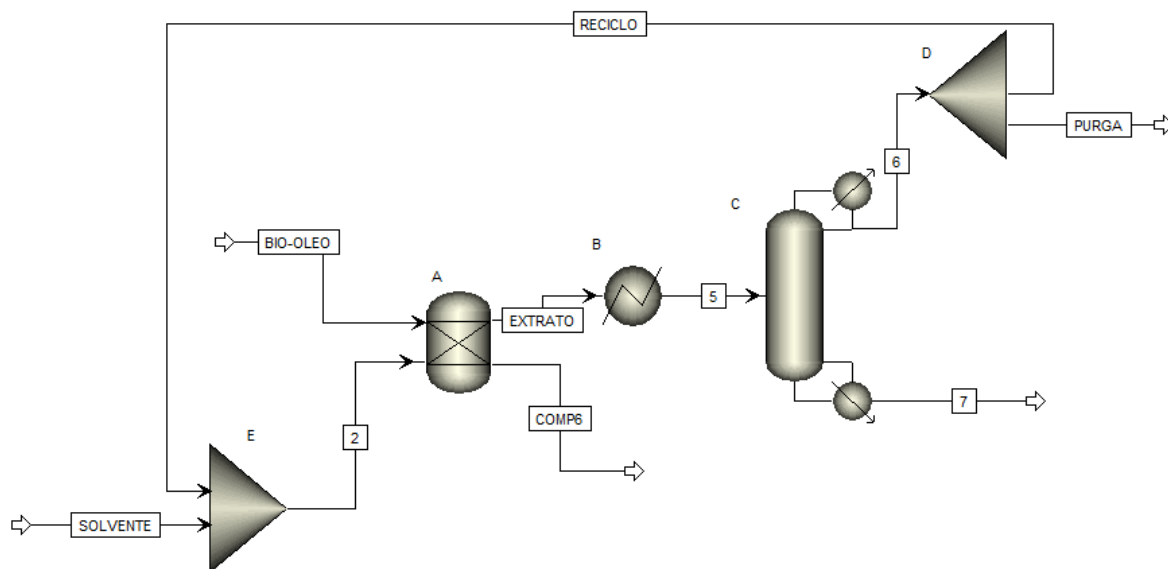
Uma possível explicação para o modelo UNIFAC seria o seu método de prever parâmetros entre a mistura de componentes do bio-óleo. Como ele relaciona parâmetros binários e a composição apresenta múltiplos componentes, há uma sensibilidade nos cálculos, impede que a simulação ocorra sem erros.

O modelo NRTL se baseia em dados experimentais, no entanto, devido ao banco de dados do Aspen não apresenta dados experimentais entre a mistura de compostos do bio-óleo, e esses dados também não estarem disponíveis na literatura, a simulação da coluna de extração não foi concluída com êxito, apresentando resultados sem a presença de erros.

Para tentar resolver o problema, e possivelmente obter um resultado satisfatório, foi utilizado um separador para simular a coluna de extração e obter apenas o componente desejado, utilizando um solvente que não teria afinidade com esse composto.

5.1.1. Simulação 1

Após inserir os blocos, correntes e suas respectivas configurações, foi possível obter o Diagrama de Fluxo de Processo (DFP) da Simulação 1 apresentado pela Figura 29, referente ao refino do bio-óleo de madeira de eucalipto.

Figura 29: Diagrama de Fluxo de Processo da Simulação 1.**Fonte:** Autoria própria

Na Tabela 8 são descritas as operações unitárias consideradas no processo da Simulação 1.

Tabela 8: Descrição dos blocos utilizados na Simulação 1.

Nome no simulador	Bloco ID	Descrição
SEP	A	Simula uma coluna de extração para separar o componente COMP6 dos demais, por incompatibilidade com solvente.
HEATER	B	Simula um trocador de calor para elevar a temperatura antes da entrada na coluna de destilação.
RADFRAC	C	Simula uma coluna de destilação para separar o solvente dos demais produtos.
FSPLIT	D	Simula um equipamento de separação para separar uma fração da corrente e recuperá-la ao processo.
MIXER	E	Simula um misturador para integrar a corrente de reciclo ao solvente de entrada.

Fonte: Próprio autor

Como citado anteriormente o componente de escolha para obtenção no refino foi o COMP6 (Ácido 3-Hidroxi-4-Metoxibenzóico), a partir disso ao se obter a corrente de produto a próxima etapa foi reciclar o solvente através de uma coluna de destilação. Os componentes não desejados, foram encaminhados para a corrente 7. Na Tabela 9 são apresentados os resultados obtidos na Simulação 1.

Tabela 9: Composição das correntes da Simulação 1.

Nº de compostos	Nomenclatura Aspen	Composto	BIO-ÓLEO	SOLVENTE	RECICLO	PURGA	COMP6
			Vazão mássica (kg/h)				
			100,00	1,00	99,00	1,00	14,93
							Fração
1	FURFU-01	2-Furano Carboxaldeído	4,54	-	-	-	-
2	GUAIA-01	2-Metoxifenol	9,28	-	-	-	-
3	4-MET-01	1-Hidroxi-2-Metoxi-4-Metil Benzeno	11,05	-	-	-	-
4	4-ETH-01	4-Etil-2-Metoxifenol	12,42	-	-	-	-
5	SYRIN-01	2,6-Dimetoxifenol	13,55	-	-	-	-
6	COMP6	Ácido 3-Hidroxi-4-Metoxibenzóico	14,93	-	-	-	1,00
7	COMP7	Ácido 3-Furano Carboxílico	16,00	-	-	-	-
8	COMP8	2,6-Dimetoxi 4(2-Propinil)Fenol	18,23	-	-	-	-
9	N-HEX-01	n-Hexano	-	1,00	99,00	1,00	-

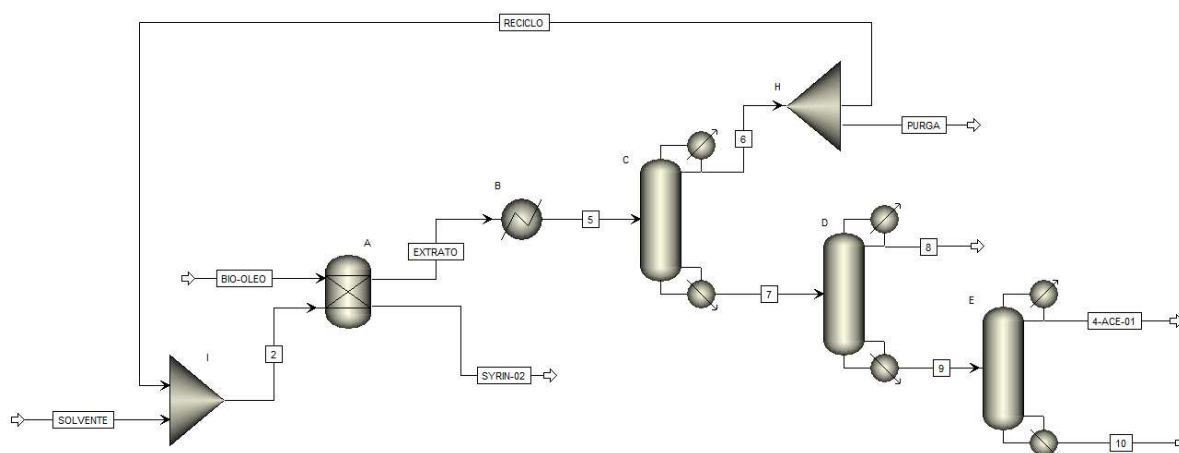
Fonte: Próprio autor

Podemos observar através dos resultados da simulação, que o produto desejado (COMP6) foi obtido com êxito, podendo ser recuperado 99% do solvente utilizado no processo.

5.1.2. Simulação 2

Após inserir os blocos, correntes e suas respectivas configurações, foi possível obter o Diagrama de Fluxo de Processo (DFP) da Simulação 2 apresentado pela Figura 30, referente ao refino do bio-óleo de resíduo de eucalipto.

Figura 30: Diagrama de Fluxo de Processo da Simulação 2.



Fonte: Autoria própria

Na Tabela 10 são descritas as operações unitárias considerados no processo da Simulação 2.

Tabela 10: Descrição dos blocos utilizados na Simulação 2.

Nome no simulador	Bloco ID	Descrição
SEP	A	Simula uma coluna de extração para separar o componente SYRIN-02 dos demais, por incompatibilidade com solvente.
HEATER	B	Simula um trocador de calor para elevar a temperatura antes da entrada na coluna de destilação.
RADFRAC	C	Simula uma coluna de destilação para separar o solvente dos demais produtos.
RADFRAC	D	Simula uma coluna de destilação para separar uma fração de compostos.
DISTL	E	Simula uma coluna de destilação para separar o componente 4-ACE-01 dos demais compostos.
FSPLIT	F	Simula um equipamento de separação para separar uma fração da corrente e recuperá-la ao processo.
MIXER	G	Simula um misturador para integrar a corrente de reciclo ao solvente de entrada.

Fonte: Autoria própria

Na Tabela 11 são mostrados os resultados das correntes após a simulação ter sido realizada.

Tabela 11: Resultado das correntes da Simulação 2.

Nº de compostos	Nomenclatura Aspen	Composto	BIO-ÓLEO	SOLVENTE	RECICLO	PURGA	SYRIN-02	4-ACE-01
			Vazão mássica (kg/h)					
			100,00	10,00	90,00	10,00	6,08	12,22
			Fração					
1	1-MET-01	1-Metilimidazol	0,53	-	-	-	-	-
2	2(5H)-01	2(5H)-Furanona	0,63	-	-	-	-	-
3	COMP3	2-Hidroxi-2-Ciclopenten-1-ona	3,81	-	-	-	-	-
4	3-MET-01	3-Metil-2-Ciclopenten-1-ona	0,43	-	-	-	-	-
5	PHENO-01	Fenol	0,53	-	-	-	-	-
6	COMP6	3-Metil-2,4-Imidazolidinediona	2,17	-	-	-	-	-
7	COMP7	2-Hidroxi-3-Metil-2-Ciclopenten-1-ona	2,28	-	-	-	-	-
8	O-CRE-01	2-Metilfenol (o-Cresol)	0,46	-	-	-	-	-
9	2(3H)-01	γ -Caprolactona	0,56	-	-	-	-	-
10	P-CRE-01	4-Metilfenol (p-Cresol)	0,96	-	-	-	-	-
11	GUAIA-01	2-Metóxi-1,2-Benzenodiol	2,89	-	-	-	-	-
12	COMP12	3-Etil-2-Hidroxi-2-Ciclopenten-1-ona	0,57	-	-	-	-	-
13	DIMET-01	1,3-Dimetóxi-1,2-Benzenodiol	0,35	-	-	-	-	-
14	3:4-X-01	3,4-Dimetilfenol	0,43	-	-	-	-	-
15	4:8-D-01	4,8-Dimetil-1-nonanol	0,33	-	-	-	-	-
16	4-MET-01	2-Metóxi-4-Metilfenol	1,95	-	-	-	-	-
17	PHENO-02	4-N-Propilfenol	0,31	-	-	-	-	-
18	3-MET-02	3-Metóxi-1,2-Benzenodiol	1,47	-	-	-	-	-
19	4-ETH-01	p-Etilguaiaicol	1,99	-	-	-	-	-
20	4-ETH-02	Vinilguaiaicol	4,12	-	-	-	-	-

21	SYRIN-01	2,6-Dimetóxi-fenol (Siringol)	11,84	-	-	-	-	-
22	4-ALL-01	Eugenol	2,15	-	-	-	-	-
23	4-PRO-01	2-Metóxi-4-Propil-Fenol	1,13	-	-	-	-	-
24	VANIL-01	2-Metóxi-4-Formilfenol (Vanilina)	1,60	-	-	-	-	-
25	(E)-I-01	Isoeugenol	14,97	-	-	-	-	-
26	COMP26	Isoeugenilmetileter	0,76	-	-	-	-	-
27	ETHYL-01	Etilvanilina	1,57	-	-	-	-	-
28	ACETO-01	Acetovanillona	1,46	-	-	-	-	0,02
29	COMP29	3,4,5-Trimetoxitolueno	2,95	-	-	-	-	-
30	COMP30	1-(4-Hidroxi-3-Metóxi-fenil)-2- Propanona	0,63	-	-	-	-	-
31	COMP31	3,4-Dimetóxiacetofenona	11,55	-	-	-	-	-
32	COMP32	2,6-Dimetóxi-4-(2-Propenil)- Fenol	4,50	-	-	-	-	-
33	SYRIN-02	Siringaldeído	6,08	-	-	-	1,00	-
34	4-ACE-01	Acetosiringona	12,05	-	-	-	-	0,98
35	N-HEX-01	n-Hexano	-	10,00	90,00	10,00	-	-

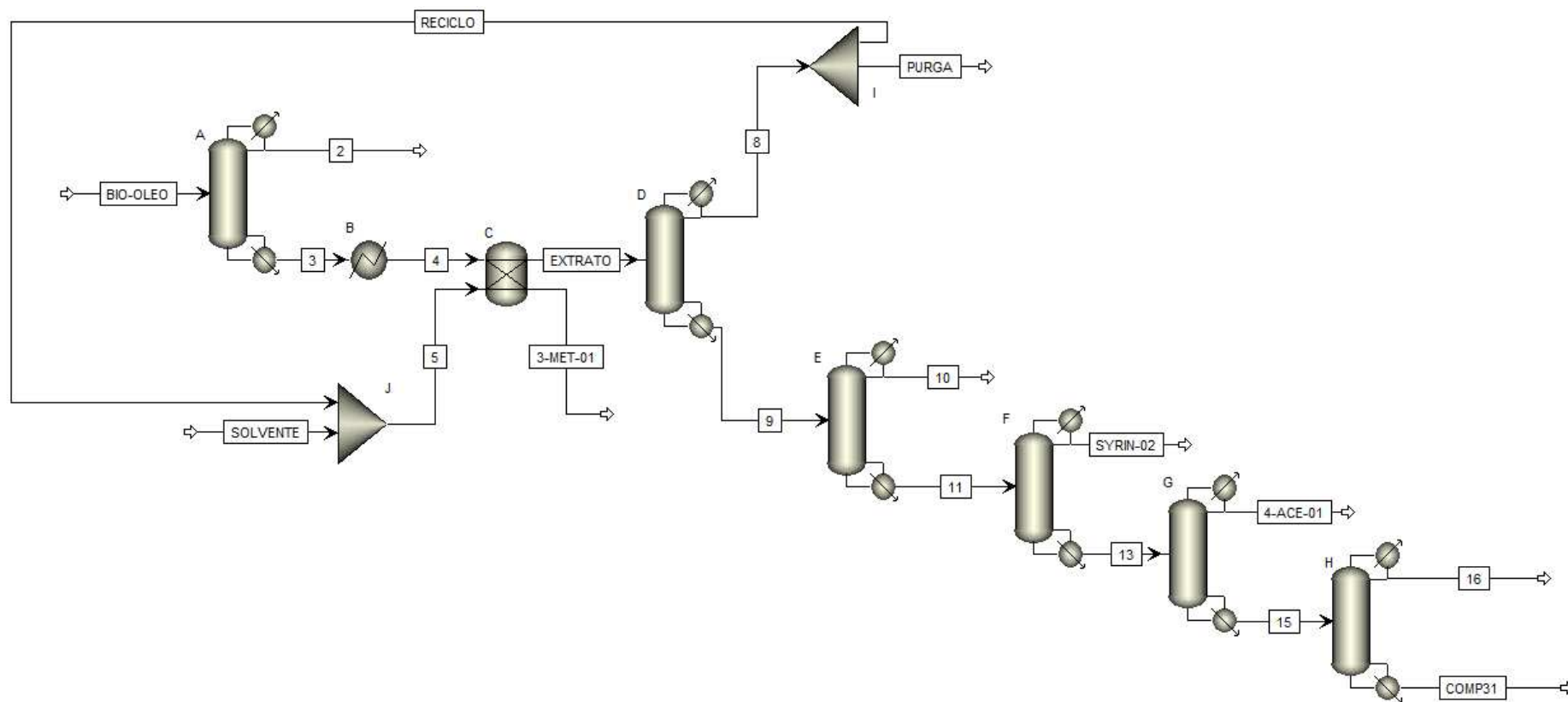
Fonte: Autoria própria

É possível observar que o componente SYRIN-02 foi obtido com êxito pela extração. Os demais componentes seguiram pelas próximas etapas do processo, sendo o solvente N-HEX-01, tendo uma recuperação de 90%, e assim sendo devolvido ao processo através da corrente de reciclo. Os demais componentes do bio-óleo foram direcionados as próximas colunas de destilação, obtendo através desse processo o composto 4-ACE-01 com 98% de pureza. Os demais componentes não desejados foram liberados pelas correntes 8 e 10.

5.1.3. Simulação 3

Após inserir os blocos, correntes e suas respectivas configurações, foi possível obter o Diagrama de Fluxo de Processo da Simulação 3 apresentado pela Figura 31, referente ao refino do bio-óleo do bagaço de cana-de-açúcar.

Figura 31: Diagrama de Fluxo de Processo da Simulação 3.



Fonte: Autoria própria

Na Tabela 12 são descritas as operações unitárias consideradas no processo da Simulação 2.

Tabela 12: Descrição dos blocos utilizados na Simulação 3.

Nome no simulador	Bloco ID	Descrição
RADFRAC	A	Simula uma coluna de destilação para separar os componentes do bio-óleo que são mais voláteis que o solvente.
HEATER	B	Simula um trocador de calor para diminuir a temperatura antes da entrada na coluna de extração.
SEP	C	Simula uma coluna de extração para separar o componente 3-MET-01 dos demais, por incompatibilidade com solvente.
RADFRAC	D	Simula uma coluna de destilação para separar o solvente dos demais produtos.
RADFRAC	E	Simula uma coluna de destilação para separar uma fração de compostos.
RADFRAC	F	Simula uma coluna de destilação para separar o componente SYRIN-02 dos demais componentes.
RADFRAC	G	Simula uma coluna de destilação para separar o componente 4-ACE-01 dos demais componentes.
RADFRAC	H	Simula uma coluna de destilação para separar o componente COMP31 dos demais componentes.
FSPLIT	H	Simula um equipamento de separação para separar uma fração da corrente e recuperá-la ao processo.
MIXER	I	Simula um misturador para integrar a corrente de reciclo ao solvente de entrada.

Fonte: Próprio autor

A Tabela 13 são mostrados os resultados das correntes após a simulação ter sido realizada.

Tabela 13: Resultado das correntes da Simulação 3.

Nº de compostos	Nomenclatura Aspen	Composto	BIO-ÓLEO	SOLVENTE	RECICLO	PURGA	3-MET-01	SYRIN-02	4-ACE-01	COMP31
			Vazão mássica (kg/h)							
			100,00	6,00	94,05	5,95	3,14	5,10	5,08	6,38
			Fração							
1	CARBO-01	Dióxido de Carbono	1,23	-	-	-	-	-	-	-
2	PYRUV-01	Ácido 2-oxo-Propanoico	1,21	-	-	-	-	-	-	-
3	ACETA-01	Acetaldeído	1,21	-	0,03	-	-	-	-	-
4	ACETI-01	Ácido Acético	1,21	-	-	-	-	-	-	-
5	ACETO-01	1-Hidroxi-2-Propanona	1,21	-	-	-	-	-	-	-
6	2-HYD-01	Monoacetato-1,2-Etanodiol	1,21	-	-	-	-	-	-	-
7	METHY-01	Éster Metílico Ácido 2-oxo-Propanoico	1,21	-	-	-	-	-	-	-
8	FURFU-02	Furfural	2,69	-	-	-	-	-	-	-
9	FURFU-01	2-Furanometanol	1,15	-	-	-	-	-	-	-
10	COMP10	2-Hidroxi-2-Ciclopenten-1-ona	2,75	-	-	-	-	-	-	-
11	METHY-02	Metil-ácido Butanodióico	2,41	-	-	-	-	0,01	-	-
12	COMP12	3-Metil-2,4(3H,5H)-Furandiona	3,20	-	-	-	-	-	-	-
13	3-MET-01	3-Metil-1,2-Ciclopentanodiona	3,14	-	-	-	1,00	-	-	-
14	GUAIA-01	2-Metoxi-Fenol	3,06	-	-	-	-	-	-	-
15	3:4-X-01	3,4-Dimetil-Fenol	3,00	-	-	-	-	-	-	-
16	4-MET-01	2-Metoxi-4-Metil-Fenol	3,45	-	-	-	-	-	-	-
17	2:3-D-01	2,3-Di-Hidro-Benzofurano	3,37	-	-	-	-	-	-	-
18	COMP18	1,4:3,6-Dianhidro- α -D-glucopirranose	1,94	-	-	-	-	-	-	-
19	4-ETH-01	4-Etil-2-Metoxi-Fenol	3,85	-	-	-	-	-	-	-
20	4-ETH-02	2-Metoxi-4-Vinilfenol	3,79	-	-	-	-	-	-	-

21	SYRIN-01	2,6-Dimetoxi-Fenol	4,32	-	-	-	-	-	-	-
22	VANIL-01	Vanilina	4,24	-	-	-	-	-	-	-
23	ISOEU-01	2-Metoxi-4-(1-Propenil)-Isoeugenol Fenol	4,60	-	-	-	-	-	-	-
24	4-PRO-01	2-Metoxi-4-Propil-Fenol	3,85	-	-	-	-	-	-	-
25	COMP25	3-Metoxi-2,4,6-Trimetil Fenol	4,24	-	-	-	-	-	-	-
26	LEVOG-01	Levoglusano	1,68	-	-	-	-	-	-	0,26
27	COMP27	3',5'-Dimetoxiacetofenona	4,63	-	-	-	-	-	-	-
28	SYRIN-02	4-Hidroxi-3,5-Benzaldeído	5,11	-	-	-	-	0,88	0,12	-
29	COMP29	2,6-Dimetoxi-4-(2-Propenil)-Fenol	5,44	-	-	-	-	-	-	-
30	4-ACE-01	1-(4-Hidroxi-3,5-Dimetoxifenil)-Etanona	5,08	-	-	-	-	0,11	0,88	-
31	COMP31	Desaspidinol	4,69	-	-	-	-	-	-	0,73
32	COMP32	3,5-Dimetoxi-4-Hidroxicinamaldeído	5,84	-	-	-	-	-	-	0,01
33	N-HEX-01	n-Hexano	-	6,00	94,02	5,95	-	-	-	-

Fonte: Autoria própria

Observando a Tabela 13 nota-se que o componente 3-MET-01 foi obtido com êxito pelo processo de extração. Assim, a corrente com o extrato foi direcionada a próxima etapa. O solvente foi recuperado através de uma coluna de destilação, sendo 94,02% direcionados para a corrente de reciclo que retornou ao processo. Os outros componentes obtidos pela corrente 9, foram encaminhados a uma sequência de colunas de destilação, onde os compostos SYRIN-02, 4-ACE-01 e COMP31 foram obtidos com 88%, 88% e 73% de pureza, respectivamente. Os componentes não desejados foram liberados pelas correntes, 10 e 16.

Após a obtenção dos resultados das três simulações, foi possível fazer um comparativo dos resultados e pureza dos compostos obtidos. Considerando que as três simulações obtiveram um produto com 100% de pureza através da extração, um meio de analisar melhor os resultados foi uma comparação entre a Simulação 2 e 3 que utilizaram a destilação para obter outros compostos. Considerando que a Simulação 2 teve uma recuperação de apenas um composto, este teve uma pureza considerável em comparação aos outros três compostos obtidos na simulação. Pode-se observar, que a simulação se torna mais complexa à medida que o objetivo é obter mais compostos isolados.

Os resultados das simulações podem ser comparados com o trabalho de Melo (2019), que realizou a caracterização e fracionamento do bio-óleo do bagaço de cana-de-açúcar, tendo como resultado 3 correntes com misturas distintas, obtendo um grau de pureza de no máximo 0,341 em um dos seus produtos.

São poucos os trabalhos que até o momento utilizaram a simulação para obter compostos presente no bio-óleo de diferentes biomassas, porém existe vários trabalhos que realizaram técnicas experimentais para extrair esses compostos e até mesmo algumas delas usando a simulação de processos (CAMPOS-FRANZANI et al., 2020; CHANG et al., 2013; CORRÊA et al., 2021; KRAUSE, 2019; MACHADO, 2014; MELO et al., 2014; WANG et al., 2010; XU et al., 2021)

Para melhor comparação entre os resultados das simulações, foram realizadas análises econômicas e análises de risco e incertezas para estudar melhor os três casos, e avaliar a viabilidade econômica e de risco para implementação dos projetos.

5.2. Resultados da avaliação econômica com análise de risco e incertezas

5.2.1. Custo fixo de capital

Utilizando o Aspen Economic Analyzer foi possível estimar o custo dos equipamentos e utilidades necessários para a implantação do processo de purificação dos bio-óleos. Através das metodologias de avaliação econômica propostas por Peters, Timmerhaus e West (2003) e Turton (2009), foi possível realizar a avaliação da viabilidade econômica para um período de 24 meses, referente a cada simulação.

Os valores dos equipamentos e utilidades fornecidos pelo Aspen Economic Analyzer foram obtidos em dólar, no entanto, como se deseja avaliar o processo considerando cenário nacional, esses valores forem convertidos a real de acordo com a cotação do dólar em setembro de 2022, obtido no *site* do Banco Central do Brasil (BCB, 2022), tendo um valor de 5,26 R\$

por dólar. Foram convertidos também os valores das matérias-primas e insumos utilizados no processo.

Como podemos observar nas Tabelas 14, 15 e 16, os valores dos equipamentos foram considerados nos cálculos dos percentuais dos custos diretos e indiretos, referentes ao processamento de fluidos. Para os custos diretos foram considerados os custos de aquisição de equipamentos, instalação, instrumentação e controle, tubulação, sistema elétrico, construção, melhorias no terreno, facilidade. Para os custos indiretos foram considerados os custos com engenharia, construção, despesas legais, taxa de contratação e contingência.

Tabela 14: Custo fixo de capital aplicado a Simulação 1.

INVESTIMENTO DE CAPITAL FIXO TOTAL					
CUSTOS	ITENS	INVESTIMENTO	INVESTIMENTO (%)	INVESTIMENTO NORMALIZADO (%)	CAPEX (MM R\$)
CUSTOS DIRETOS	Aquisição do Equipamento	100	27,78	19,84	1,43
	Instalação do Equipamento	47	13,06	9,33	0,67
	Instrumentação e Controle	36	10,00	7,14	0,51
	Tubulação	68	18,89	13,49	0,97
	Sistema elétrico	11	3,06	2,18	0,16
	Prédio	18	5,00	3,57	0,26
	Melhorias no terreno	10	2,78	1,98	0,14
	Facilidade	70	19,44	13,89	1,00
	TOTA CUSTOS DIRETOS	360	100,00		
CUSTOS INDIRETOS	Engenharia	33	22,92	6,55	0,47
	Construção	41	28,47	8,13	0,58
	Despesas legais	4	2,78	0,79	0,06
	Taxa de Contratação	22	15,28	4,37	0,31
	Contigência	44	30,56	8,73	0,63
	TOTAL CUSTOS INDIRETOS	144	100,00		
TOTAL DE INVESTIMENTO FIXO DE CAPITAL - (MM R\$)		504			\$7,18
CAPITAL DE GIRO		75,6		0,15	\$1,08
TOTAL DE INVESTIMENTO DE CAPITAL		580		\$1,15	\$8,26

Fonte: Autoria própria

Tabela 15: Custo fixo de capital aplicado a Simulação 2.

INVESTIMENTO DE CAPITAL FIXO TOTAL					
CUSTOS	ITENS	INVESTIMENTO	INVESTIMENTO (%)	INVESTIMENTO NORMALIZADO (%)	CAPEX (MM R\$)
CUSTOS DIRETOS	Aquisição do Equipamento	100	27,78	19,84	4,78
	Instalação do Equipamento	47	13,06	9,33	2,25
	Instrumentação e Controle	36	10,00	7,14	1,72
	Tubulação	68	18,89	13,49	3,25
	Sistema elétrico	11	3,06	2,18	0,53
	Prédio	18	5,00	3,57	0,86
	Melhorias no terreno	10	2,78	1,98	0,48
	Facilidade	70	19,44	13,89	3,35
	TOTA CUSTOS DIRETOS	360	100,00		
CUSTOS INDIRETOS	Engenharia	33	22,92	6,55	1,58
	Construção	41	28,47	8,13	1,96
	Despesas legais	4	2,78	0,79	0,19
	Taxa de Contratação	22	15,28	4,37	1,05
	Contigência	44	30,56	8,73	2,10
	TOTAL CUSTOS INDIRETOS	144	100,00		
TOTAL DE INVESTIMENTO FIXO DE CAPITAL - (MM R\$)		504			\$24,10
WORKING CAPITAL		75,6		0,15	\$3,61
TOTAL DE INVESTIMENTO DE CAPITAL		580		\$1,15	\$27,71

Fonte: Autoria própria

Tabela 16: Custo fixo de capital aplicado a Simulação 3.

INVESTIMENTO DE CAPITAL FIXO TOTAL					
CUSTOS	ITENS	INVESTIMENTO	INVESTIMENTO (%)	INVESTIMENTO NORMALIZADO (%)	CAPEX (MM R\$)
CUSTOS DIRETOS	Aquisição do Equipamento	100	27,78	19,84	14,94
	Instalação do Equipamento	47	13,06	9,33	7,02
	Instrumentação e Controle	36	10,00	7,14	5,38
	Tubulação	68	18,89	13,49	10,16
	Sistema elétrico	11	3,06	2,18	1,64
	Prédio	18	5,00	3,57	2,69
	Melhorias no terreno	10	2,78	1,98	1,49
	Facilidade	70	19,44	13,89	10,46
	TOTA CUSTOS DIRETOS	360	100,00		
CUSTOS INDIRETOS	Engenharia	33	22,92	6,55	4,93
	Construção	41	28,47	8,13	6,13
	Despesas legais	4	2,78	0,79	0,60
	Taxa de Contratação	22	15,28	4,37	3,29
	Contigência	44	30,56	8,73	6,57
	TOTAL CUSTOS INDIRETOS	144	100,00		
TOTAL DE INVESTIMENTO FIXO DE CAPITAL - (MM R\$)		504			\$75,30
WORKING CAPITAL		75,6		0,15	\$11,29
TOTAL DE INVESTIMENTO DE CAPITAL		580		\$1,15	\$86,59

Fonte: Autoria própria

5.2.2. Matéria-prima e insumos

Os custos da matéria-prima e insumos utilizados nas simulações, bio-óleo e solvente, foram obtidas através de pesquisas de mercado, encontradas no *site* de vendas Alibaba (ALIBABA, 2022). As Tabelas 17, 18 e 19 apresentam os preços unitários das matérias-primas e insumos, além do consumo e custo para cada simulação.

Tabela 17: Preço unitário, consumo e custo de matéria-prima e insumos utilizados na Simulação 1.

MATÉRIA-PRIMA/INSUMOS	R\$/kg	CONSUMO (MM kg/ano)	CUSTO (MM R\$/ano)
Bio-óleo	1,47	0,79	1,16
n-Hexano	5,26	0,01	0,05
TOTAL	---	0,80	1,22

Fonte: Autoria própria

Tabela 18: Preço unitário, consumo e custo de matéria-prima e insumos utilizados na Simulação 2.

MATÉRIA-PRIMA/INSUMOS	R\$/kg	CONSUMO (MM kg/ano)	CUSTO (MM R\$/ano)
Bio-óleo	1,47	0,79	1,16
n-Hexano	5,26	0,08	0,42
TOTAL	---	0,87	1,58

Fonte: Autoria própria

Tabela 19: Preço unitário, consumo e custo de matéria-prima e insumos utilizados na Simulação 3.

MATÉRIA-PRIMA/INSUMOS	R\$/kg	CONSUMO (MM kg/ano)	CUSTO (MM R\$/ano)
Bio-óleo	1,47	0,79	1,17
n-Hexano	5,26	0,05	0,25
TOTAL	---	0,84	1,42

Fonte: Autoria própria

5.2.3. Produtos

Após a simulação ter sido concluída e os resultados das correntes obtidos, os produtos e seus respectivos valores de mercado foram inseridos das planilhas de análise econômica como podemos observar nas Tabelas 20, 21 e 22. Assim como a matéria-prima e os insumos, os valores de mercado dos produtos foram obtidos pelo *site* de vendas Alibaba (ALIBABA, 2022).

Tabela 20: Produção e preço do produto obtidos na Simulação 1.

PRODUTOS	R\$/kg	PRODUÇÃO (MM kg/ano)	CUSTO (MM R\$/ano)
Ácido 3-Hidroxi-4-Metoxibenzóico	R\$ 447,10	0,11795	R\$ 52,74
TOTAL			R\$ 52,74

Fonte: Autoria própria

Tabela 21: Produção e preço dos produtos obtidos na Simulação 2.

PRODUTOS	R\$/kg	PRODUÇÃO (MM kg/ano)	CUSTO (MM R\$/ano)
Siringaldeído	R\$ 536,52	0,04812	R\$ 25,82
Acetosiringona	R\$ 447,10	0,09518	R\$ 42,55
TOTAL			R\$ 68,37

Fonte: Autoria própria.

Tabela 22: Produção e preço dos produtos obtidos na Simulação 3.

PRODUTOS	R\$/kg	PRODUÇÃO (MM kg/ano)	CUSTO (MM R\$/ano)
3-Metil-1,2-Ciclopentanodiona	R\$ 5.260,00	0,02487	R\$ 130,81
4-Hidroxi-3,5-Benzaldeído	R\$ 536,52	0,03556	R\$ 19,08
1-(4-Hidroxi-3,5-Dimetoxifenil)-Etanona	R\$ 447,10	0,03548	R\$ 15,86
Desaspidinol	R\$ 447,10	0,03667	R\$ 16,39
TOTAL			R\$ 182,15

Fonte: Autoria própria

5.2.4. Mão de obra

Para calcular o custo de mão de obra necessária para a operação da planta, foram considerados três turnos de trabalho por dia, com três funcionários por turno, e uma carga horária de trabalho de oito horas diárias durante trezentos e trinta dias por ano. Na Tabela 23 é apresentado o custo anual com mão de obra para as três simulações realizadas.

Tabela 23: Mão de obra necessária para a operação da planta.

TURNOS POR DIA	MÉDIA SALARIAL R\$/HORA	NÚMERO DE FUNCIONARIOS	CUSTO ANUAL (MM R\$/ANO)
3	R\$ 177,10	3	R\$ 4,21

Fonte: Autoria própria

5.2.5. Utilidades

Utilizando o Aspen Economic Analyzer foi possível obter o consumo de utilidades de cada equipamento das simulações. As Tabelas 24, 25 e 26 apresentam os custos e o consumo anuais das utilidades necessárias das Simulações 1, 2 e 3, respectivamente.

Tabela 24: Custo e consumo das utilidades da Simulação 1.

UTILIDADE	CUSTO R\$	CONSUMO ANUAL*	CUSTO ANUAL (MM R\$/ANO)
Eletricidade (R\$/kWh)	0,20	415.855,44	0,10
Vapor saturado 3550 kPa (R\$/kg)	42,10	830,8	0,035
Vapor saturado 790 kPa (R\$/kg)	31,60	163,2	0,005
Água de resfriamento	0,40	34.207,7	0,014
TOTAL	---	451.057,2	0,15

*kWh ou kg

Fonte: Autoria própria

Tabela 25: Custo e consumo das utilidades da Simulação 2.

UTILIDADE	CUSTO R\$	CONSUMO ANUAL*	CUSTO ANUAL (MM R\$/ANO)
Eletricidade (R\$/kWh)	0,20	416.592	0,10
Vapor saturado 3550 kPa (R\$/kg)	42,10	273,0	0,011
Vapor saturado 790 kPa (R\$/kg)	31,60	292,0	0,009
Água de resfriamento	0,40	54.834,2	0,023
TOTAL	---	471.991,2	0,14

*kWh ou kg

Fonte: Autoria própria

Tabela 26: Custo e consumo das utilidades da Simulação 3.

UTILIDADE	CUSTO R\$	CONSUMO ANUAL*	CUSTO ANUAL (MM R\$/ANO)
Eletricidade (R\$/kWh)	R\$ 0,2	420.282,72	0,10
Vapor saturado 3550 kPa (R\$/kg)	R\$ 42,1	1186,8	0,050
Etano	R\$ 1,9	20,0	0,000
Água de resfriamento	R\$ 0,4	84.454,9	0,036
TOTAL	---	505.944,5	0,19

*kWh ou kg

Fonte: Autoria própria

5.2.6. Lucro anual e fluxo de caixa

Com os dados do investimento e a projeção dos fluxos de caixa de cada cenário avaliado, foi possível proceder ao estudo de viabilidade econômica. Os principais parâmetros avaliados foram, Taxa Interna de Retorno (TIR), Valor Presente Líquido (VPL) e o *payback* simples.

Para avaliar o lucro anual da implantação das plantas industriais representadas pelas simulações, foi considerado 28% de taxas e impostos sobre a receita anual e 10% de depreciação sobre o custo fixo de capital. Analisando as Tabelas 27, 28 e 29, pode-se observar o fluxo de caixa líquido referente a cada simulação.

Tabela 27: Avaliação do lucro anual referente a Simulação 1.

COMPONENTE	%	Valor (MM R\$)
Receita Anual		R\$ 52,74
(-) Taxas e Impostos	28	R\$ 14,77
= Receita Líquida		R\$ 37,97
(-) Custos Operacionais		R\$ 5,58
(-) Depreciação	10	R\$ 0,14
= Fluxo de Caixa Líquido		R\$ 32,25

Fonte: Autoria própria

Tabela 28: Avaliação do lucro anual referente a Simulação 2.

COMPONENTE	%	Valor (MM R\$)
Receita Anual		R\$ 68,37
(-) Taxas e Impostos	28	R\$ 19,14
= Receita Líquida		R\$ 49,23
(-) Custos Operacionais		R\$ 5,93
(-) Depreciação	10	R\$ 0,48
= Fluxo de Caixa Líquido		R\$ 42,81

Fonte: Autoria própria

Tabela 29: Avaliação do lucro anual referente a Simulação 3.

COMPONENTE	%	Valor (MM R\$)
Receita Anual		R\$ 182,15
(-) Taxas e Impostos	28	R\$ 51,00
= Receita Líquida		R\$ 131,15
(-) Custos Operacionais		R\$ 5,81
(-) Depreciação	10	R\$ 1,49
= Fluxo de Caixa Líquido		R\$ 123,84

Fonte: Autoria própria

A partir do valor de fluxo de caixa líquido foi possível estimar o Valor Presente Líquido dos projetos, durante o período de 24 meses com uma Taxa de Desconto (Taxa Mínima de Atratividade) de 13,75% ao mês. O VPL, pode ser definido como a soma algébrica dos valores descontados do fluxo de caixa a ele associado. Ou seja, é a diferença do valor presente das receitas menos o valor presente dos custos. O projeto que apresenta o VPL maior que zero (positivo) é economicamente viável, sendo considerado o melhor aquele que apresentar maior VPL (LOPES; FONTES, 2005).

Outro fator importante para avaliação econômica é a Taxa Interna de Retorno (TIR), também denominada como taxa de desconto do fluxo de caixa. A TIR é uma taxa de juros implícita numa série de pagamentos (saídas) e recebimentos (entradas), que desconta um valor futuro ou aplica o fator de juros sobre o valor presente (PEREIRA; ALMEIDA, 2008).

Além desses fatores, a análise econômica foi aplicada a Taxa de Lucratividade que relaciona a soma dos valores presentes e o investimento inicial, e o Tempo de *Payback* que seria o tempo gasto para recuperar o valor investido no processo, ou seja, quanto maior o TIR maior será o tempo de retorno (*payback*) e menor será o VPL.

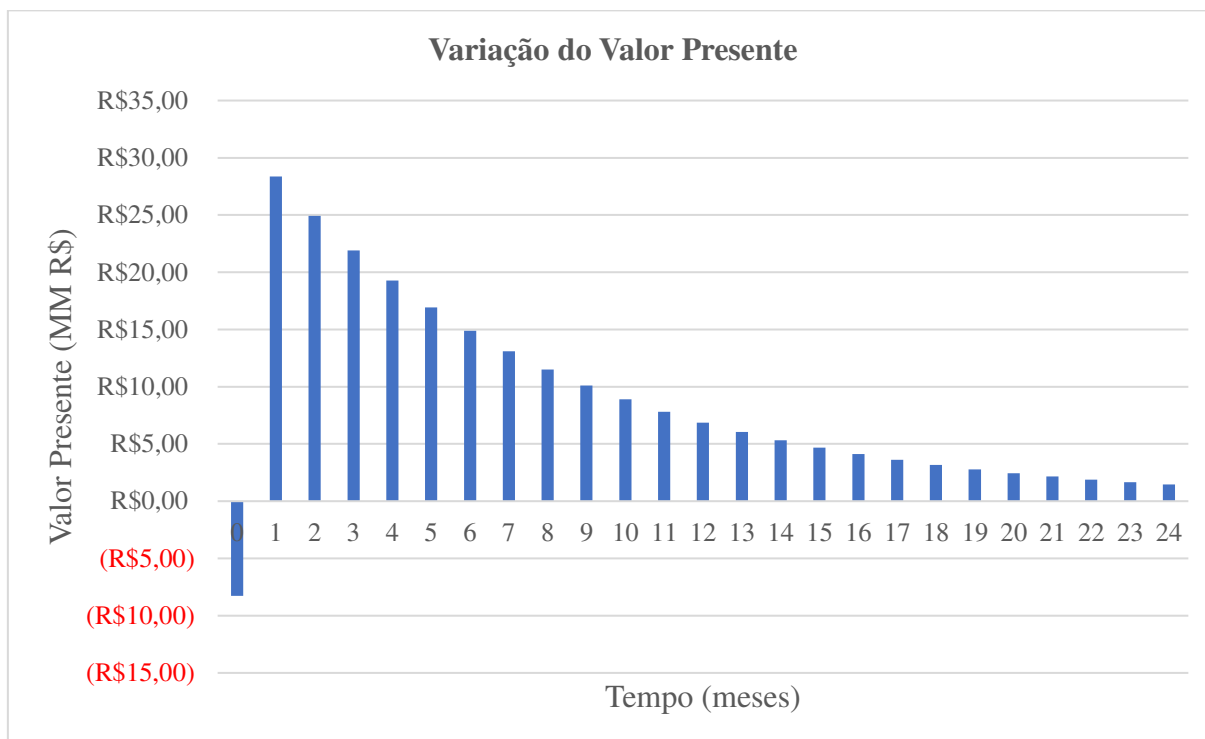
5.2.6.1. Fluxo de caixa para Simulação 1

O Valor Presente refere-se a quantia atual de uma série de pagamentos futuros. Observando a Tabela 30 e a Figura 32 é possível notar que essa quantia diminui ao longo do tempo.

Tabela 30: Fluxo de caixa, VP e VP acumulado para Simulação 1.

Período (Meses)	Fluxo de Caixa (MM R\$)	Valor Presente (MM R\$)	VP Acumulado (MM R\$)
0	-R\$ 8,26	-R\$ 8,26	-R\$ 8,26
1	R\$ 32,25	R\$ 28,35	R\$ 20,09
2	R\$ 32,25	R\$ 24,92	R\$ 45,01
3	R\$ 32,25	R\$ 21,91	R\$ 66,93
4	R\$ 32,25	R\$ 19,26	R\$ 86,19
5	R\$ 32,25	R\$ 16,93	R\$ 103,12
6	R\$ 32,25	R\$ 14,89	R\$ 118,01
7	R\$ 32,25	R\$ 13,09	R\$ 131,10
8	R\$ 32,25	R\$ 11,51	R\$ 142,61
9	R\$ 32,25	R\$ 10,12	R\$ 152,72
10	R\$ 32,25	R\$ 8,89	R\$ 161,61
11	R\$ 32,25	R\$ 7,82	R\$ 169,43
12	R\$ 32,25	R\$ 6,87	R\$ 176,30
13	R\$ 32,25	R\$ 6,04	R\$ 182,34
14	R\$ 32,25	R\$ 5,31	R\$ 187,66
15	R\$ 32,25	R\$ 4,67	R\$ 192,33
16	R\$ 32,25	R\$ 4,10	R\$ 196,43
17	R\$ 32,25	R\$ 3,61	R\$ 200,04
18	R\$ 32,25	R\$ 3,17	R\$ 203,21
19	R\$ 32,25	R\$ 2,79	R\$ 206,00
20	R\$ 32,25	R\$ 2,45	R\$ 208,45
21	R\$ 32,25	R\$ 2,16	R\$ 210,61
22	R\$ 32,25	R\$ 1,89	R\$ 212,50
23	R\$ 32,25	R\$ 1,67	R\$ 214,17
24	R\$ 32,25	R\$ 1,46	R\$ 215,63

Fonte: Autoria própria

Figura 32: Gráfico referente ao Valor Presente em função do tempo para Simulação 1.**Autor:** Autoria própria

O estudo da viabilidade econômica apresentado na Tabela 31, mostra que o projeto é viável, tendo um retorno de investimento a curto prazo, com um tempo de *Payback* de apenas 0,29 ano (aproximadamente 3 meses e meio).

Tabela 31: Avaliação dos resultados do investimento para Simulação 1.

Soma VPs (Meses 1 a 24) (R\$)	223,90
VPL do Projeto (R\$)	215,63
Taxa Interna de Retorno (TIR) (%)	390,3
Taxa de Lucratividade (%)	27,10
Tempo de Payback (anos)	0,29

Fonte: Autoria própria

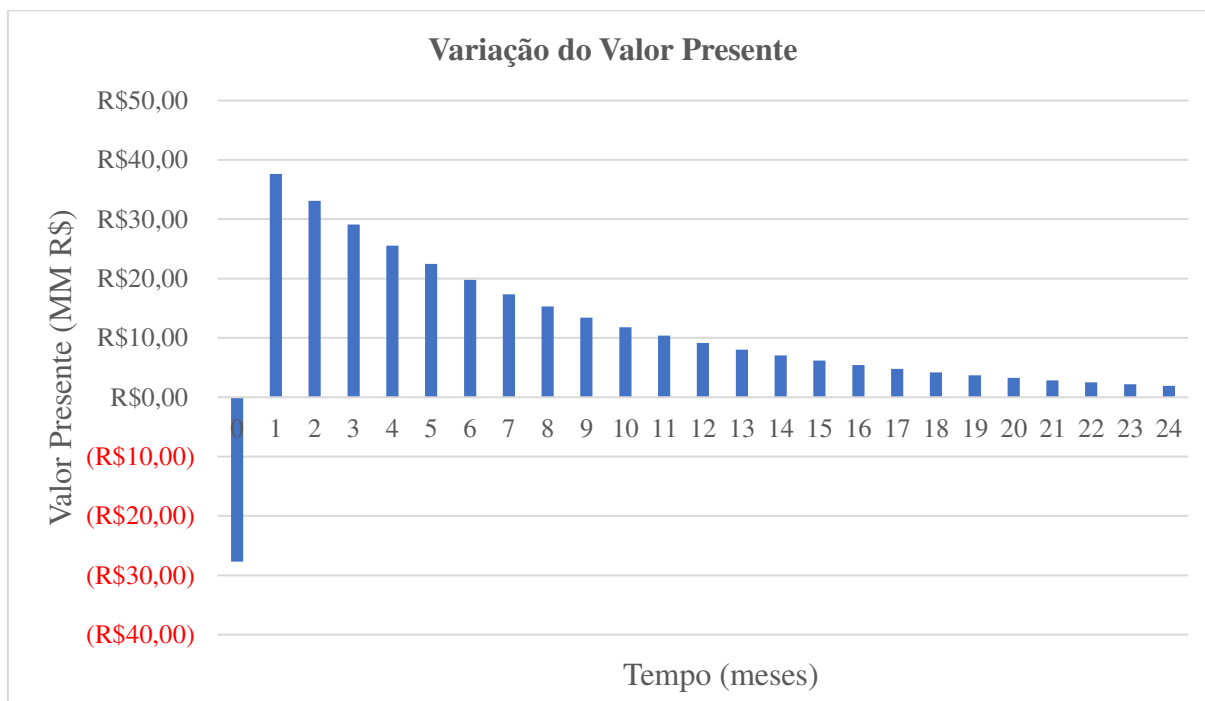
5.2.6.3. Fluxo de caixa para Simulação 2

Para o estudo da análise econômica da Simulação 2, podemos observar a Tabela 33 e a Figura 36. Nota-se que assim como a Simulação 1, o Valor Presente se torna positivo logo no primeiro mês de produtividade, diminuindo a quantia de pagamentos futuros ao longo do tempo.

Tabela 32: Fluxo de caixa, VP e VP acumulado para Simulação 2.

Período (Meses)	Fluxo de Caixa (MM R\$)	Valor Presente (MM R\$)	VP Acumulado (MM R\$)
0	-R\$ 27,71	-R\$ 27,71	-R\$ 27,71
1	R\$ 42,81	R\$ 37,64	R\$ 9,93
2	R\$ 42,81	R\$ 33,09	R\$ 43,02
3	R\$ 42,81	R\$ 29,09	R\$ 72,10
4	R\$ 42,81	R\$ 25,57	R\$ 97,68
5	R\$ 42,81	R\$ 22,48	R\$ 120,16
6	R\$ 42,81	R\$ 19,76	R\$ 139,92
7	R\$ 42,81	R\$ 17,37	R\$ 157,30
8	R\$ 42,81	R\$ 15,27	R\$ 172,57
9	R\$ 42,81	R\$ 13,43	R\$ 186,00
10	R\$ 42,81	R\$ 11,81	R\$ 197,81
11	R\$ 42,81	R\$ 10,38	R\$ 208,18
12	R\$ 42,81	R\$ 9,12	R\$ 217,31
13	R\$ 42,81	R\$ 8,02	R\$ 225,33
14	R\$ 42,81	R\$ 7,05	R\$ 232,38
15	R\$ 42,81	R\$ 6,20	R\$ 238,58
16	R\$ 42,81	R\$ 5,45	R\$ 244,03
17	R\$ 42,81	R\$ 4,79	R\$ 248,82
18	R\$ 42,81	R\$ 4,21	R\$ 253,03
19	R\$ 42,81	R\$ 3,70	R\$ 256,73
20	R\$ 42,81	R\$ 3,26	R\$ 259,99
21	R\$ 42,81	R\$ 2,86	R\$ 262,85
22	R\$ 42,81	R\$ 2,52	R\$ 265,36
23	R\$ 42,81	R\$ 2,21	R\$ 267,58
24	R\$ 42,81	R\$ 1,94	R\$ 269,52

Fonte: Autoria Própria

Figura 33: Gráfico referente ao Valor Presente em função do tempo para Simulação 2.**Fonte:** Autoria própria

O estudo da viabilidade econômica apresentado na Tabela 33, mostra que o projeto é viável, tendo um retorno de investimento a curto prazo, com um tempo de Payback de 0,74 ano (aproximadamente 9 meses).

Tabela 33: Avaliação dos resultados do investimento para Simulação 2.

Soma VPs (Meses 1 a 24) (R\$)	297,23
VPL do Projeto (R\$)	269,52
Taxa Interna de Retorno (TIR) (%)	154,5
Taxa de Lucratividade (%)	10,73
Tempo de Payback (anos)	0,74

Fonte: Autoria própria

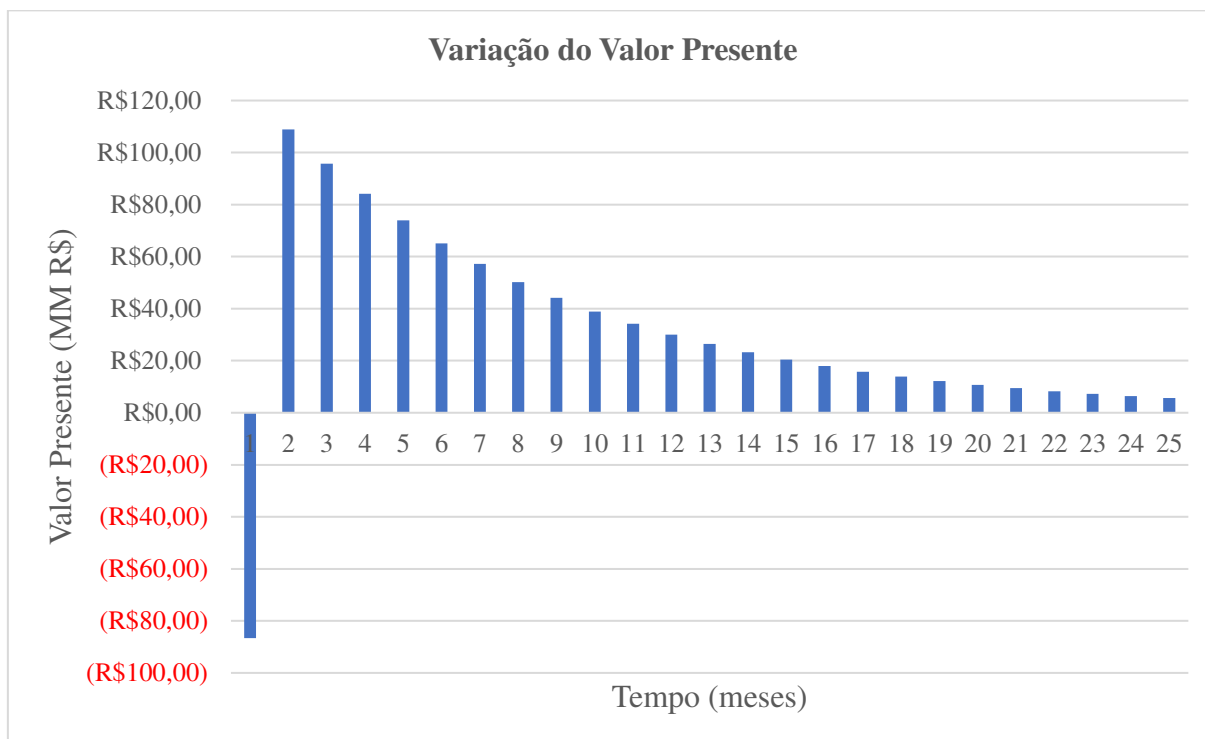
5.2.6.3. Fluxo de caixa para Simulação 3

Para o estudo da análise econômica da Simulação 3, podemos observar a Tabela 34 e a Figura 34, nota-se que assim como a Simulação 1 e 2, o Valor Presente se torna positivo logo no primeiro mês de produtividade, diminuindo a quantia de pagamentos futuros ao longo do tempo.

Tabela 34: Fluxo de caixa, VP e VP acumulado para Simulação 3.

Período (Meses)	Fluxo de Caixa (MM R\$)	Valor Presente (MM R\$)	VP Acumulado (MM R\$)
0	-R\$ 86,59	-R\$ 86,59	-R\$ 86,59
1	R\$ 123,84	R\$ 108,87	R\$ 22,28
2	R\$ 123,84	R\$ 95,71	R\$ 117,99
3	R\$ 123,84	R\$ 84,14	R\$ 202,14
4	R\$ 123,84	R\$ 73,97	R\$ 276,11
5	R\$ 123,84	R\$ 65,03	R\$ 341,14
6	R\$ 123,84	R\$ 57,17	R\$ 398,31
7	R\$ 123,84	R\$ 50,26	R\$ 448,57
8	R\$ 123,84	R\$ 44,18	R\$ 492,75
9	R\$ 123,84	R\$ 38,84	R\$ 531,59
10	R\$ 123,84	R\$ 34,15	R\$ 565,74
11	R\$ 123,84	R\$ 30,02	R\$ 595,76
12	R\$ 123,84	R\$ 26,39	R\$ 622,15
13	R\$ 123,84	R\$ 23,20	R\$ 645,35
14	R\$ 123,84	R\$ 20,40	R\$ 665,75
15	R\$ 123,84	R\$ 17,93	R\$ 683,68
16	R\$ 123,84	R\$ 15,76	R\$ 699,44
17	R\$ 123,84	R\$ 13,86	R\$ 713,30
18	R\$ 123,84	R\$ 12,18	R\$ 725,48
19	R\$ 123,84	R\$ 10,71	R\$ 736,19
20	R\$ 123,84	R\$ 9,42	R\$ 745,61
21	R\$ 123,84	R\$ 8,28	R\$ 753,89
22	R\$ 123,84	R\$ 7,28	R\$ 761,16
23	R\$ 123,84	R\$ 6,40	R\$ 767,56
24	R\$ 123,84	R\$ 5,62	R\$ 773,18

Fonte: Autoria Própria

Figura 34: Gráfico referente ao Valor Presente em função do tempo para Simulação 3.**Fonte:** Autoria própria

O estudo da viabilidade econômica apresentado na Tabela 35, mostra que o projeto é viável, tendo um retorno de investimento a curto prazo, com um tempo de Payback de 0,8 ano (aproximadamente 9 meses e meio).

Tabela 35: Avaliação dos resultados do investimento para Simulação 3.

Soma VPs (Meses 1 a 24) (R\$)	859,78
VPL do Projeto (R\$)	773,18
Taxa Interna de Retorno (TIR) (%)	143,0
Taxa de Lucratividade (%)	9,93
Tempo de Payback (anos)	0,80

Fonte: Autoria própria

O menor tempo de retorno do capital investido foi alcançado no cenário considerado na Simulação, que corresponde a 0,29 anos. No entanto, os três cenários apresentaram um *payback* baixo, menor que 01 ano. O que mostra a viabilidade do processo de purificação do bio-óleo. Esse tempo de retorno rápido está relacionado com o alto preço do produto. Os valores considerados no trabalho foram obtidos da literatura, no entanto, esses valores podem ter oscilações consideráveis dependendo da pureza e aplicação do produto.

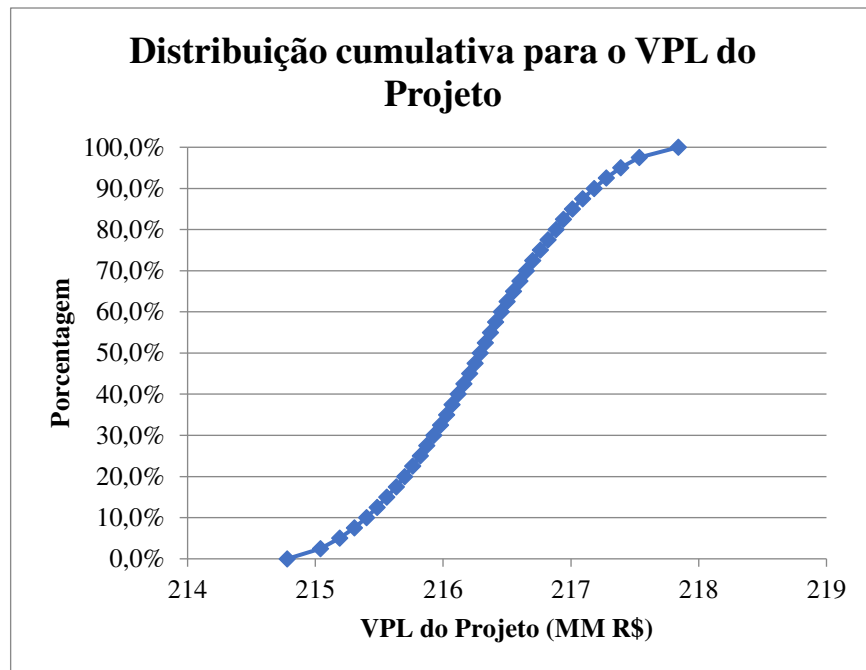
5.2.7. Análise de risco e incertezas

Por meio dos resultados do estudo de viabilidade econômica, foi possível avaliar o risco e as incertezas associadas a implantação dos projetos em virtude da variação de entrada dos dados. Utilizando a técnica de Monte Carlo e com o auxílio de planilhas eletrônicas foi possível gerar os resultados dessas análises. Como já descrito, foram avaliados quatro critérios: o VPL do Projeto e os Custos Operacionais em função da variação do custo do bio-óleo, e o VPL do Projeto e os Custos Operacionais em função da variação da capacidade de produção.

Para cada parâmetro de risco avaliado foi gerada uma distribuição de probabilidade para a implantação dos projetos.

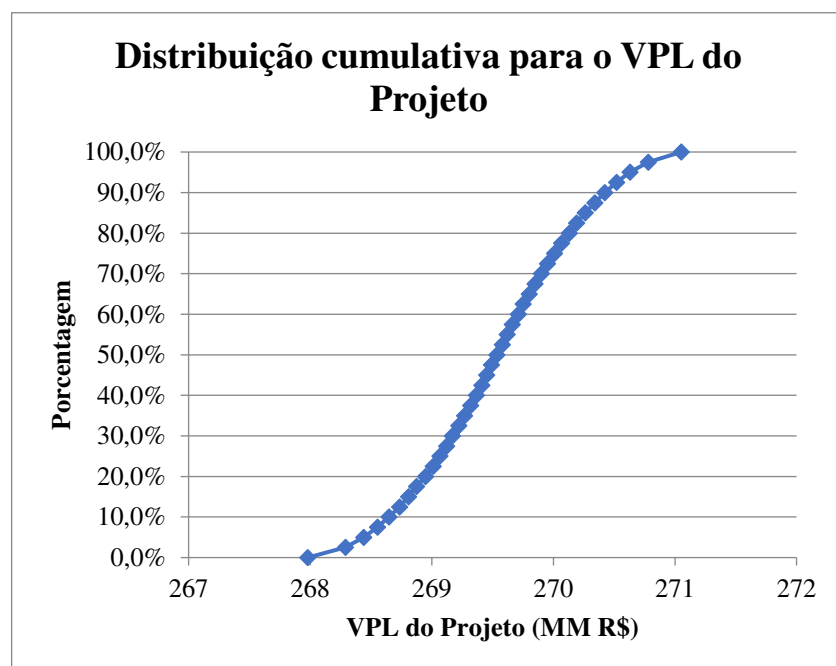
As Figuras 35 a 40 representam os gráficos de distribuição cumulativa para o VPL do Projeto referente a variação do custo do bio-óleo e a variação da capacidade de produção das três simulações em estudo. Os resultados mostram qual será o VPL acumulado para quando houver uma probabilidade de 100% do retorno do investimento.

Figura 35: Gráfico da distribuição cumulativa para o VPL do Projeto referente a variação do custo do bio-óleo (Simulação 1).



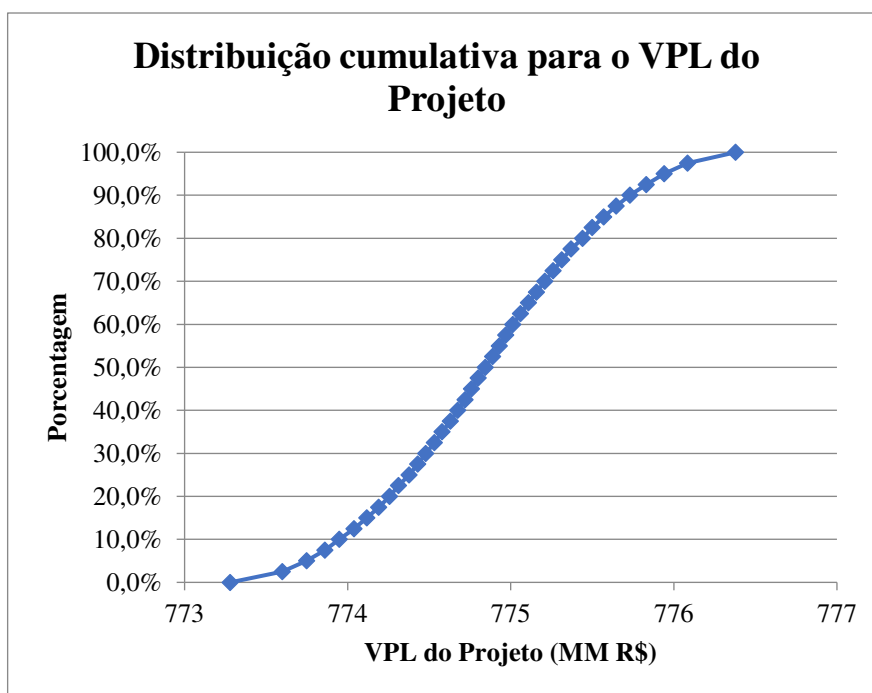
Fonte: Autoria própria

Figura 36: Gráfico da distribuição cumulativa para o VPL do Projeto referente a variação do custo do bio-óleo (Simulação 2).



Fonte: Autoria própria

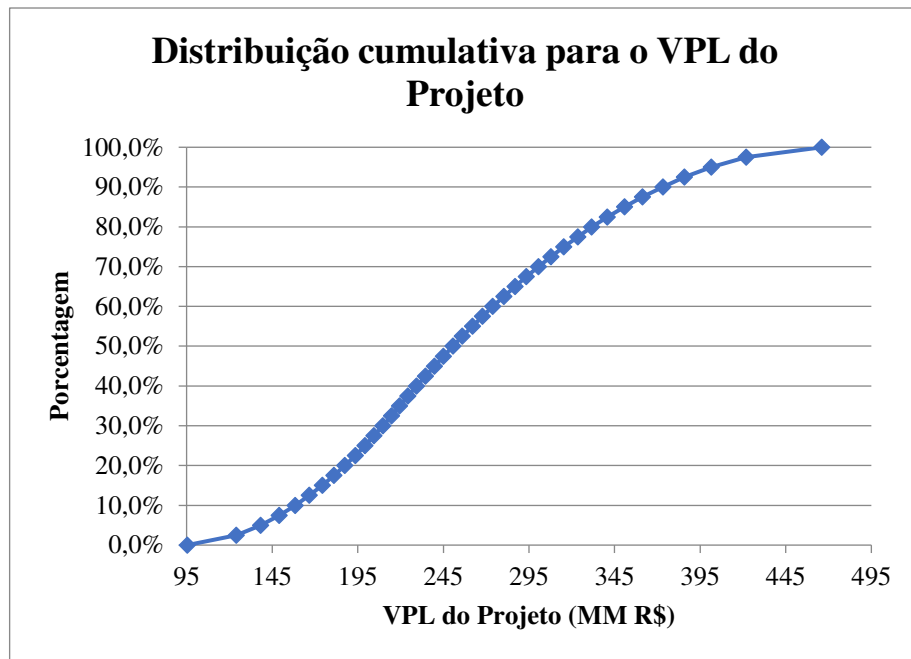
Figura 37: Gráfico da distribuição cumulativa para o VPL do Projeto referente a variação do custo do bio-óleo (Simulação 3).



Fonte: Autoria própria

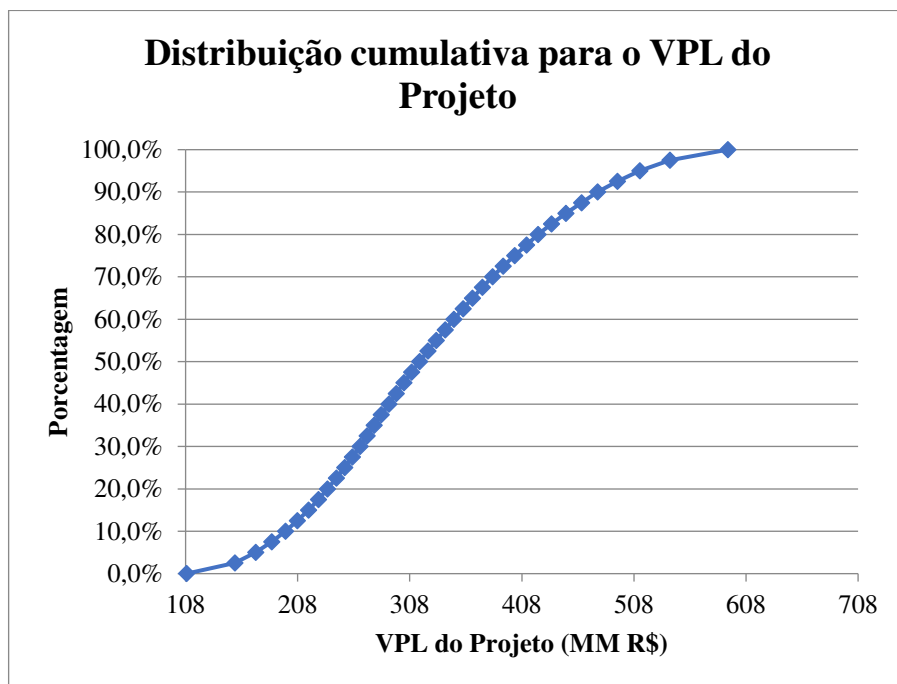
Avaliando as Figuras 35 a 37, é possível perceber que para uma distribuição cumulativa de 100%, o VPL do projeto é de 218 milhões de reais para as condições do Cenário 1 (Simulação 1). No Cenário 2 (Simulação 2) o VPL é 24% maior que o valor alcançado na Simulação 1. No cenário 3, o VPL (776 MM R\$) tem um aumento de 256% quando comparado ao Cenário 1 (218 MM R\$) e de 186% ao Cenário 2 (271 MM R\$).

Figura 38: Gráfico da distribuição cumulativa para o VPL do Projeto referente a variação da capacidade de produção (Simulação 1).



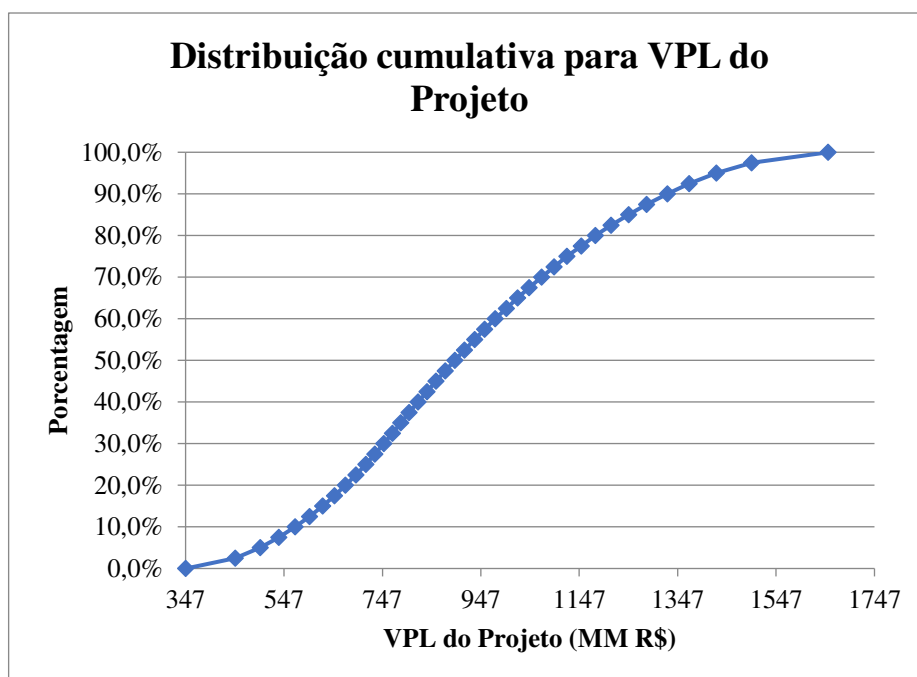
Fonte: Autoria própria

Figura 39: Gráfico da distribuição cumulativa para o VPL do Projeto referente a variação da capacidade de produção (Simulação 2).



Fonte: Autoria própria

Figura 40: Gráfico da distribuição cumulativa para o VPL do Projeto referente a variação da capacidade de produção (Simulação 3).

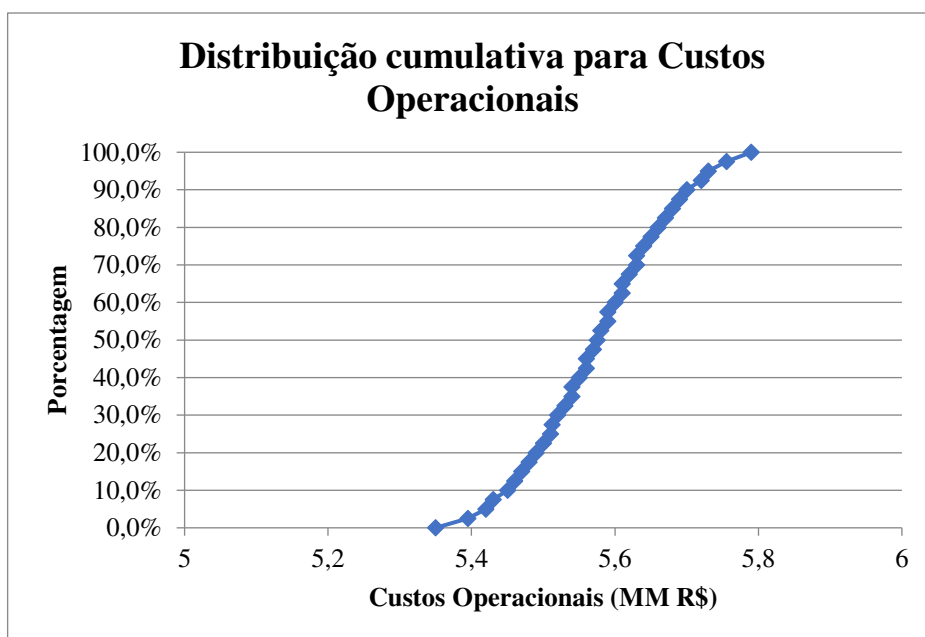


Fonte: Autoria própria

Avaliando as Figuras 38 a 40, referente à distribuição do projeto com variação da capacidade de produção, é possível perceber que para uma distribuição cumulativa de 100%, o VPL do projeto é de 466 milhões de reais para as condições do Cenário 1 (Simulação 1). No Cenário 2 (Simulação 2) o VPL é 27% maior que o valor alcançado na Simulação 1. No cenário 3, o VPL (1653 MM R\$) tem um aumento de 255% quando comparado ao Cenário 1 (466 MM R\$) e de 179% ao Cenário 2 (592 MM R\$).

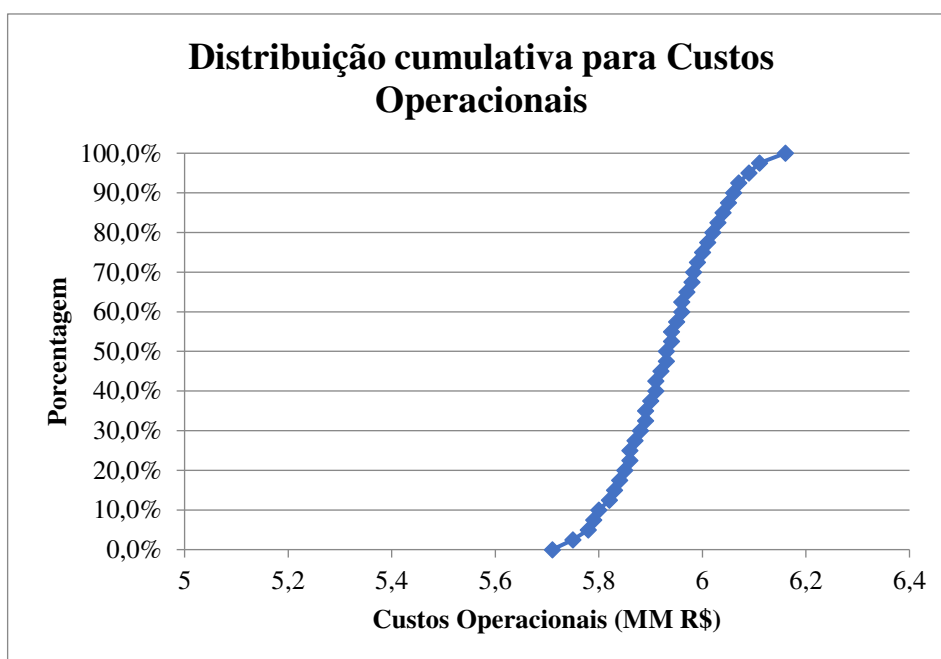
As Figuras 41 a 46 representam os gráficos de distribuição cumulativa para os Custos Operacionais referente a variação do custo do bio-óleo e a variação da capacidade de produção das três simulações em estudo. Os resultados dos gráficos mostram qual será o valor do Custo Operacional acumulado para quando houver uma probabilidade de 100% do retorno do investimento.

Figura 41: Gráfico da distribuição cumulativa para os Custos Operacionais referente a variação do custo do bio-óleo (Simulação 1).



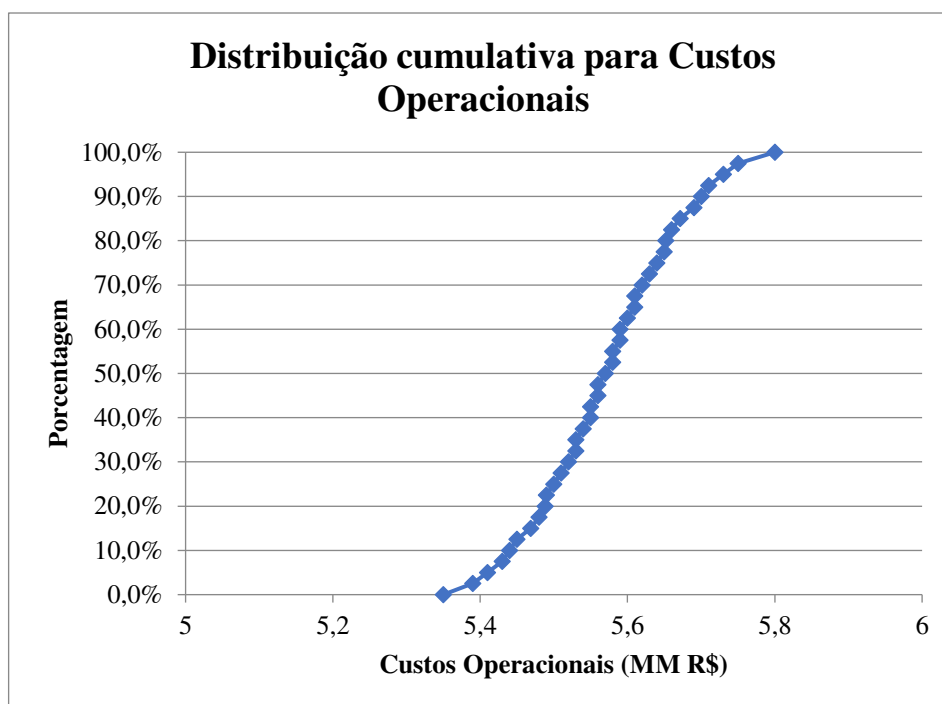
Fonte: Autoria própria

Figura 42: Gráfico da distribuição cumulativa para os Custos Operacionais referente a variação do custo do bio-óleo (Simulação 2).



Fonte: Autoria própria

Figura 43: Gráfico da distribuição cumulativa para os Custos Operacionais referente a variação do custo do bio-óleo (Simulação 3).

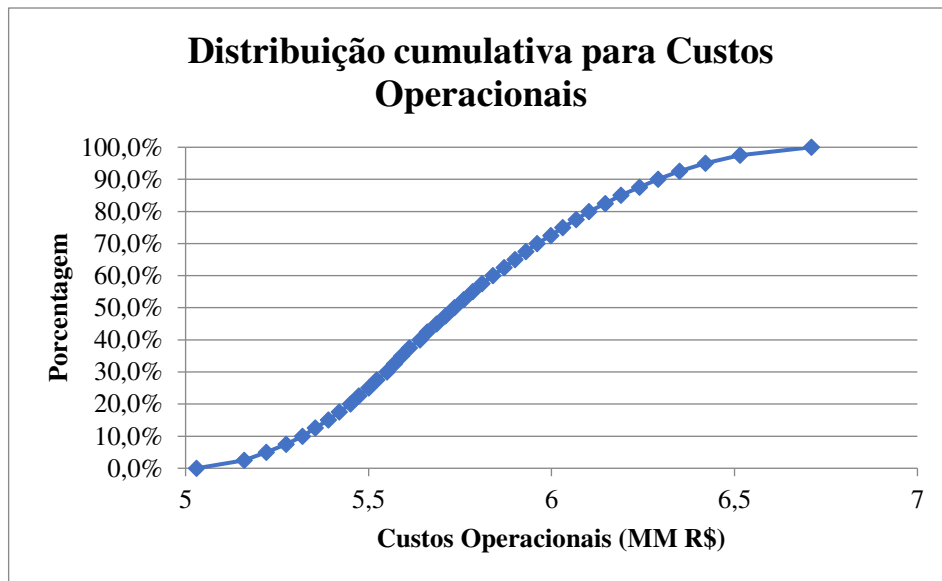


Fonte: Autoria própria

Conforme pode ser visualizado nas Figuras 41 a 43, o custo operacional alcançado nos três cenários (Simulação 1, 2 e 3) é de aproximadamente 6 MM R\$.

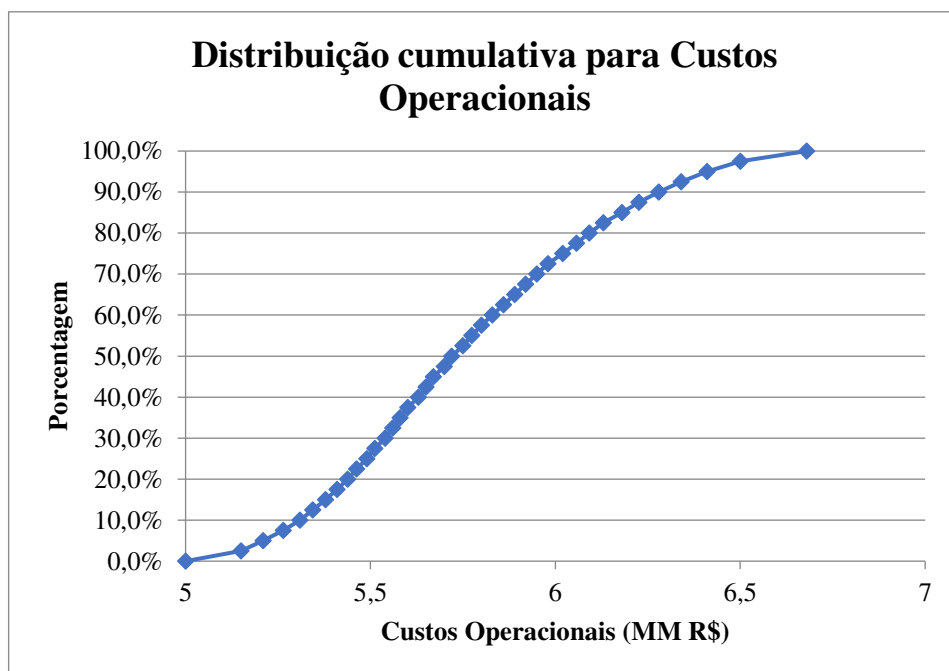
Quando a capacidade de produção é avaliada, o custo de produção é na ordem de aproximadamente 6,9 MM R\$ para os três cenários avaliados, conforme mostram as Figuras 47 a 49.

Figura 44: Gráfico da distribuição cumulativa para os Custos Operacionais referente a variação da capacidade de produção (Simulação 1).



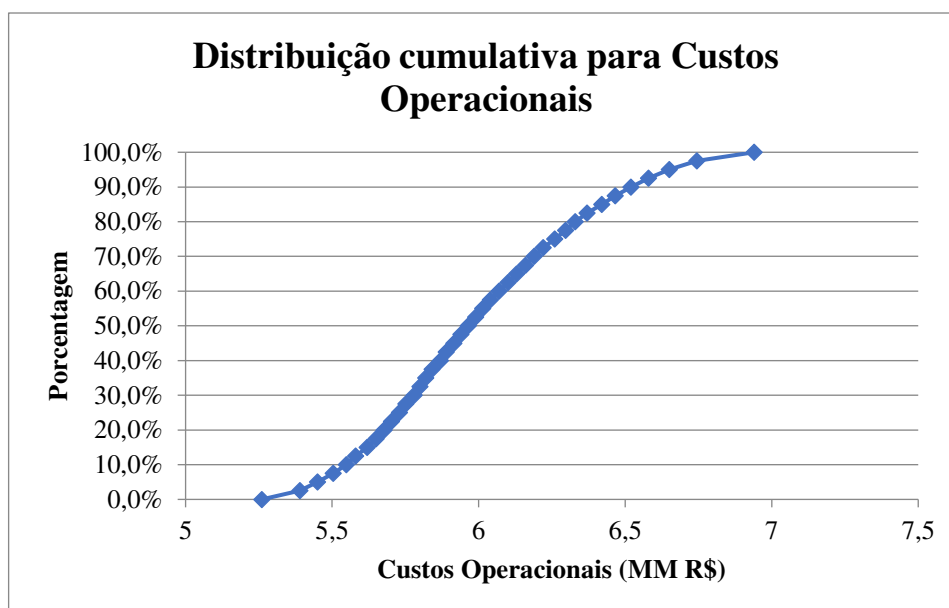
Fonte: Autoria própria

Figura 45: Gráfico da distribuição cumulativa para os Custos Operacionais referente a variação da capacidade de produção (Simulação 2).



Fonte: Autoria própria

Figura 46: Gráfico da distribuição cumulativa para os Custos Operacionais referente a variação da capacidade de produção (Simulação 3).

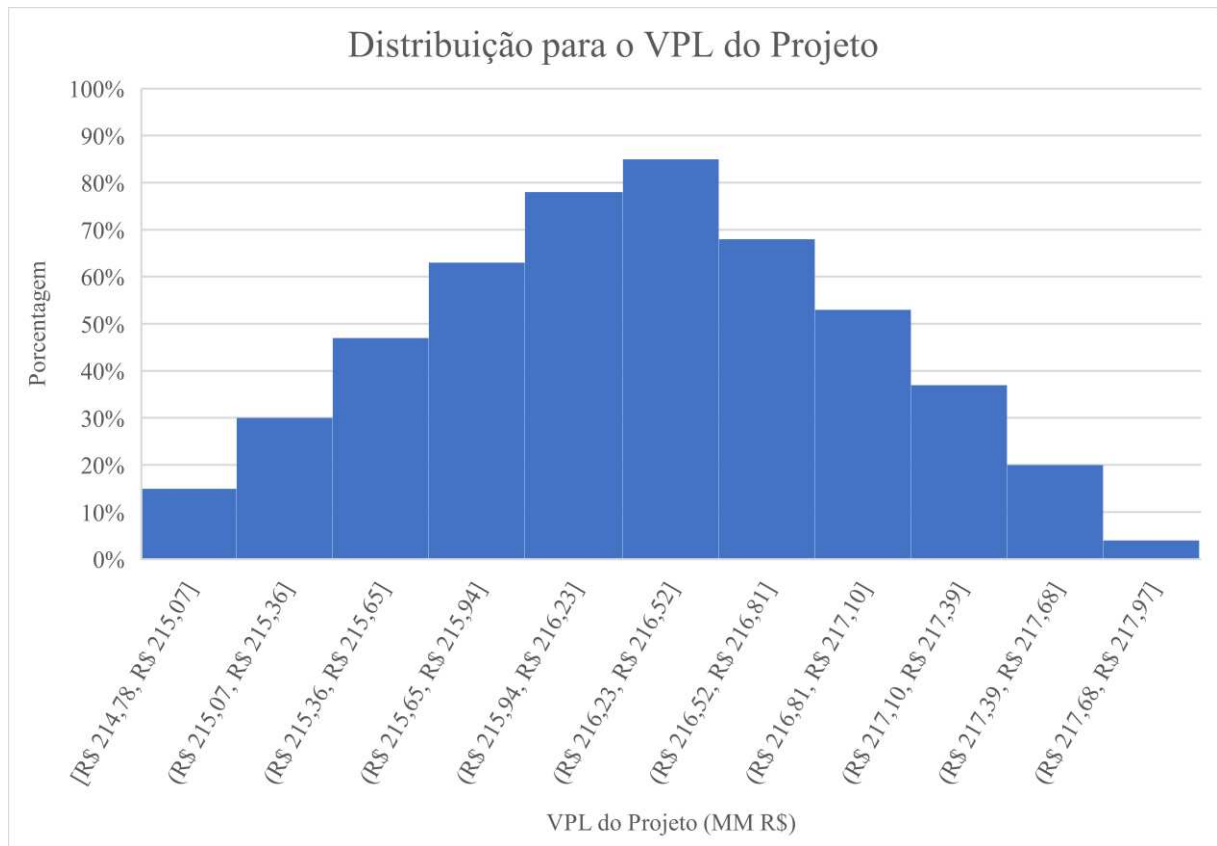


Fonte: Autoria própria

Para complementar o estudo na análise de risco dos projetos, são apresentadas as distribuições de probabilidade para os mesmos quatros critérios anteriores. Nesse caso, as distribuições mostram o valor mais provável do VPL e dos Custos Operacionais, ou seja, qual a melhor faixa de valores para se trabalhar dadas as variações de custos do bio-óleo e capacidade de produção.

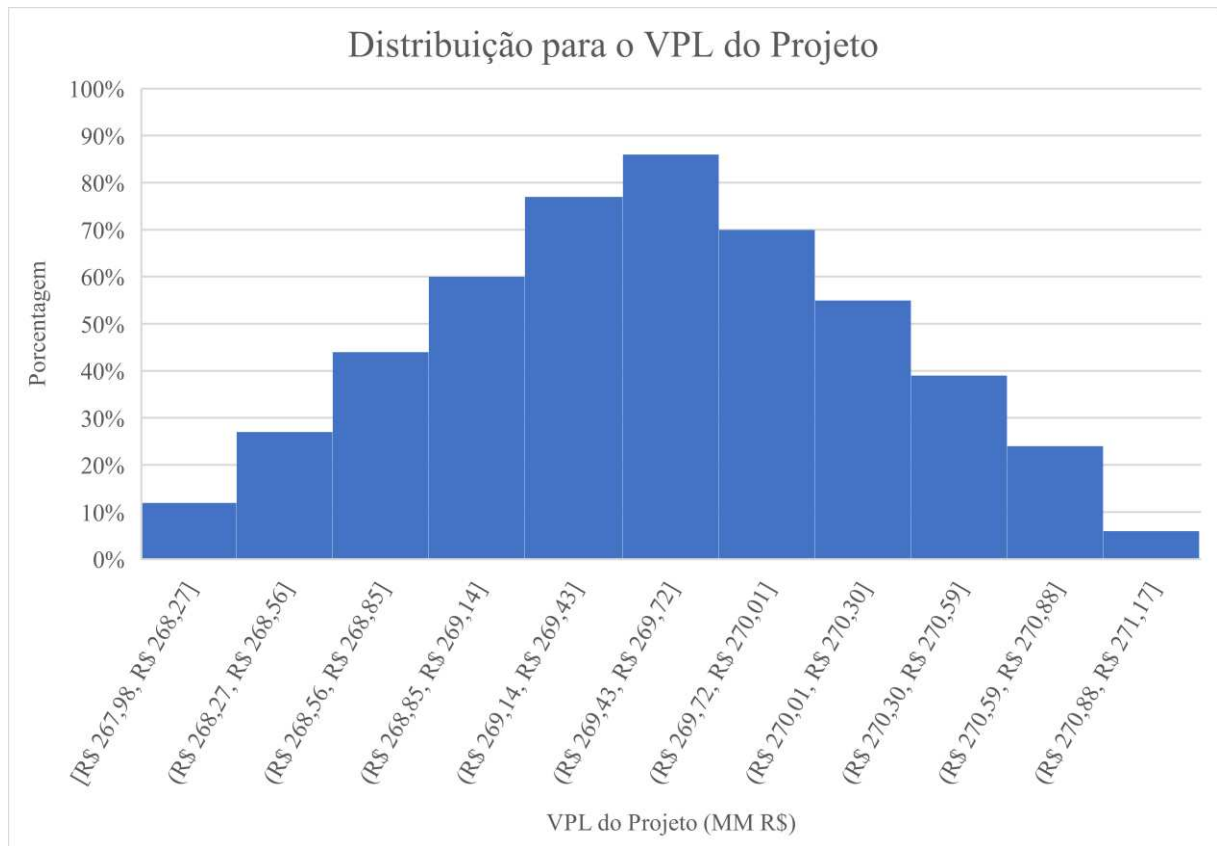
As Figuras 47 a 52 representam os histogramas da distribuição para o VPL do Projeto referente a variação do custo do bio-óleo e a variação da capacidade de produção das três simulações.

Figura 47: Distribuição de probabilidade para o VPL do Projeto referente a variação do custo do bio-óleo (Simulação 1).



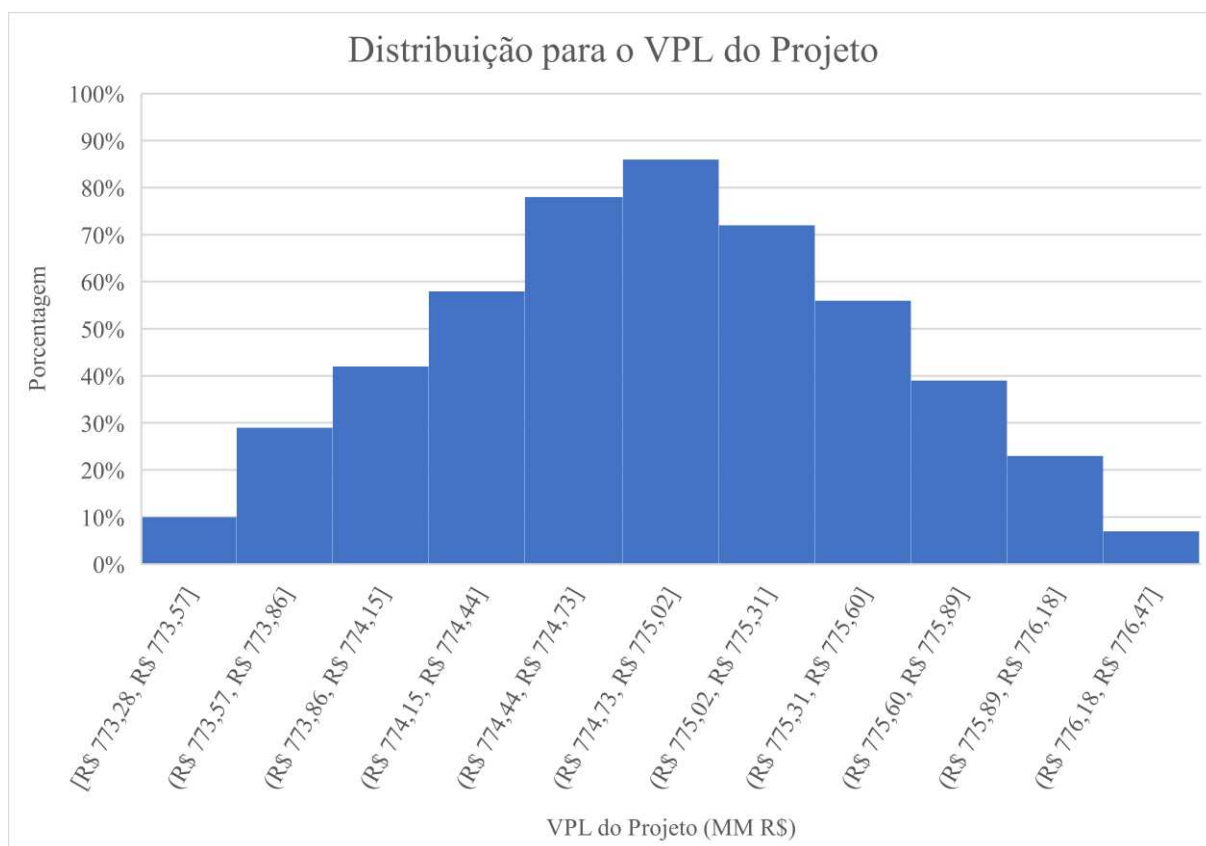
Fonte: Autoria própria

Figura 48: Distribuição de probabilidade para o VPL do Projeto referente a variação do custo do bio-óleo (Simulação 2).



Fonte: Autoria própria

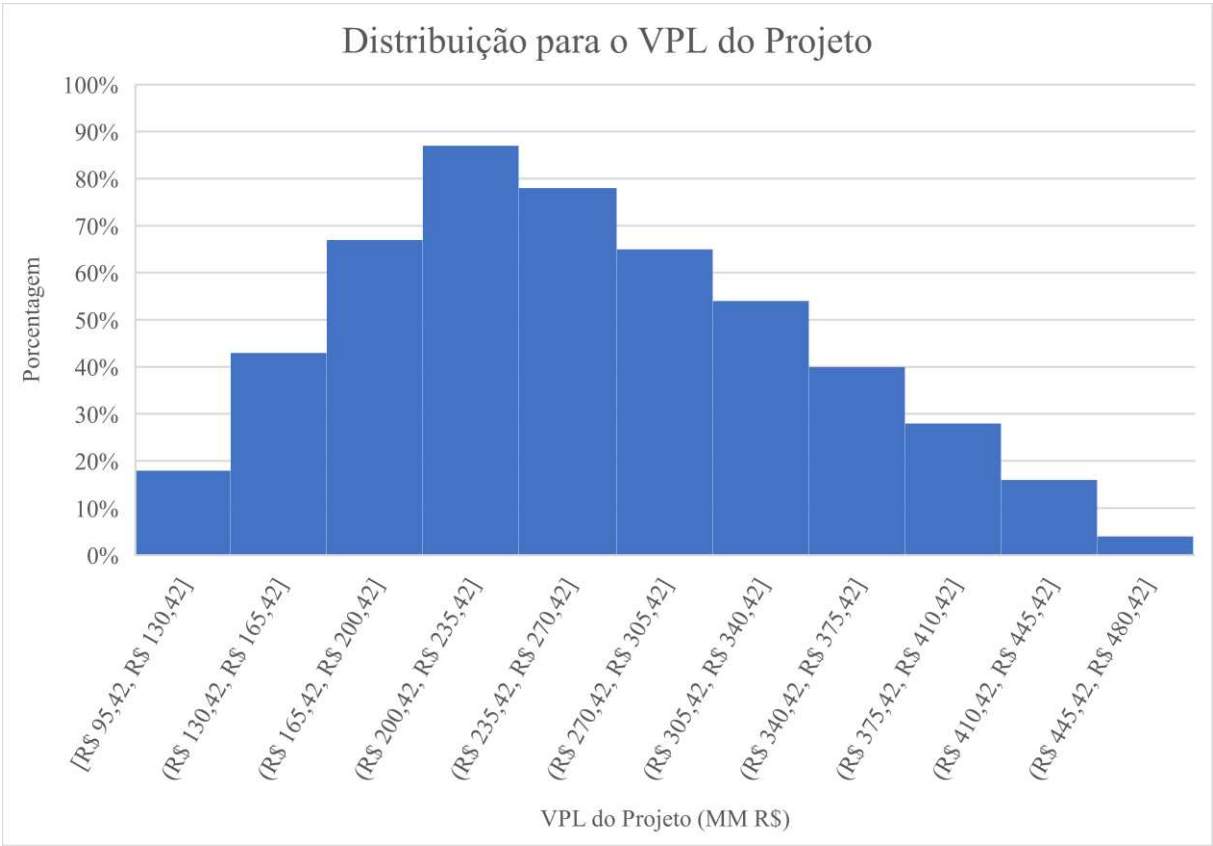
Figura 49: Distribuição de probabilidade para o VPL do Projeto referente a variação do custo do bio-óleo (Simulação 3).



Fonte: Autoria própria

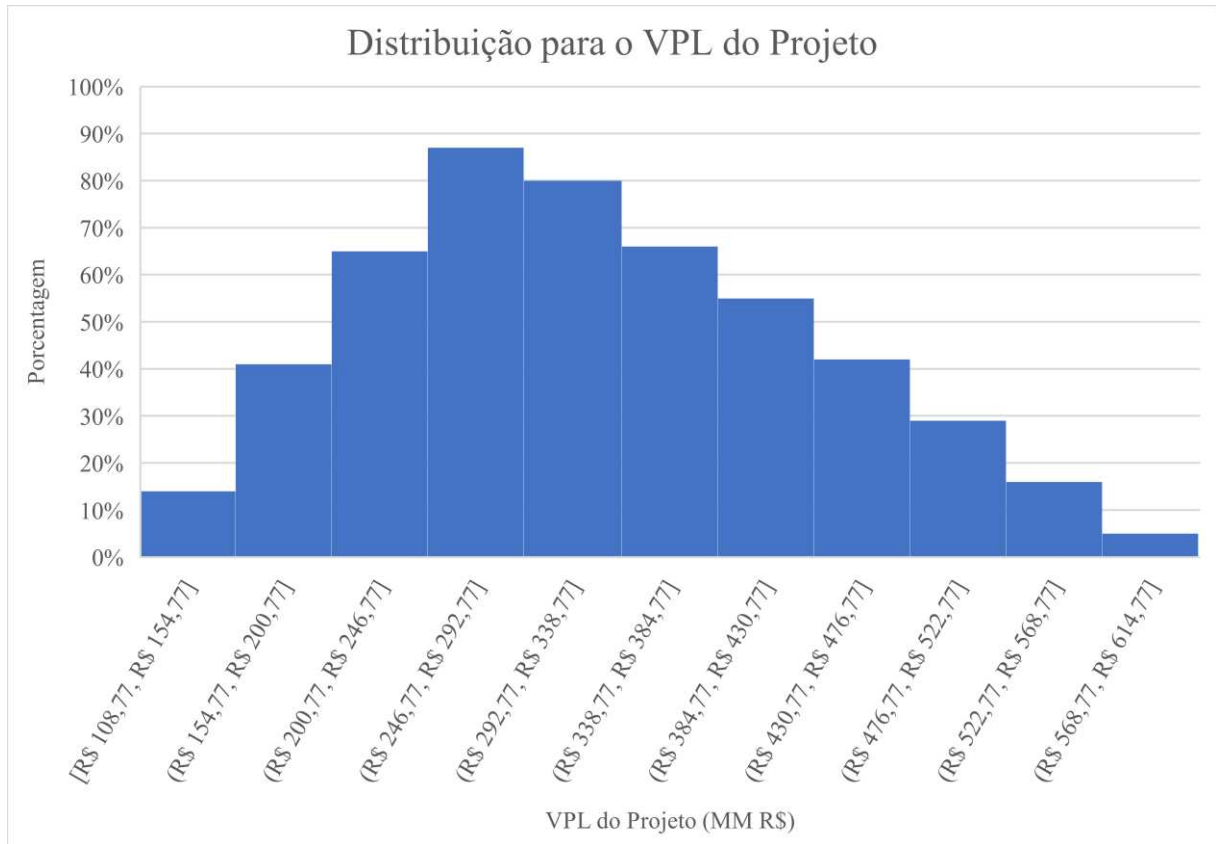
Dentro das premissas adotadas, existe uma probabilidade de 85% de que no cenário considerado na Simulação 1 o VPL esteja entre MM R\$ 216,23 e R\$ 216,52, o que mostra viabilidade econômica do projeto, juntamente com rápido retorno do capital fixo investido. Já na Simulação 2, se tem 86% de probabilidade do VPL estar entre MM R\$ 269,43 e 269,72. Na Simulação 3, o VPL está entre MMR\$ 774,43 e 775,02, com 86% de probabilidade.

Figura 50: Distribuição de probabilidade para o VPL do Projeto referente a variação da capacidade de produção (Simulação 1).



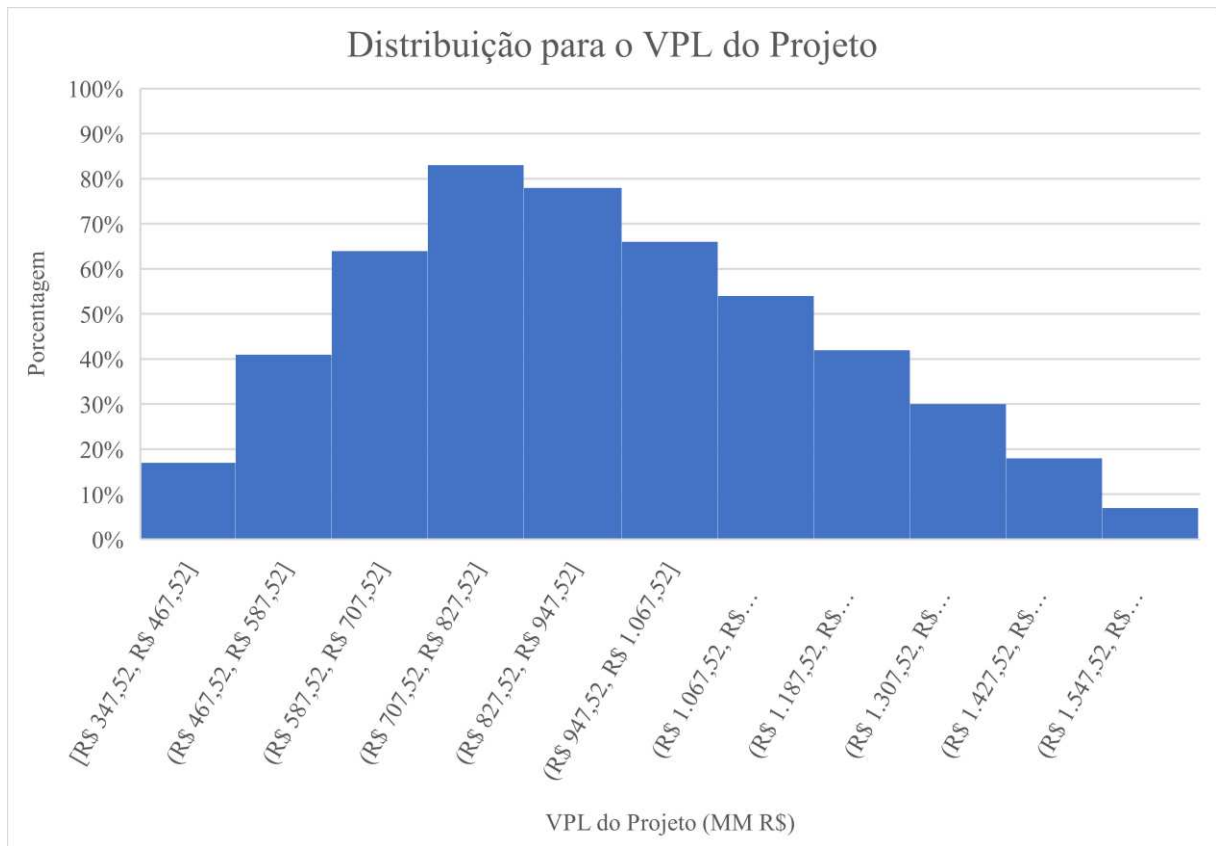
Fonte: Autoria própria

Figura 51: Distribuição de probabilidade para o VPL do Projeto referente a variação da capacidade de produção (Simulação 2).



Fonte: Autoria própria

Figura 52: Distribuição de probabilidade para o VPL do Projeto referente a variação da capacidade de produção (Simulação 3).

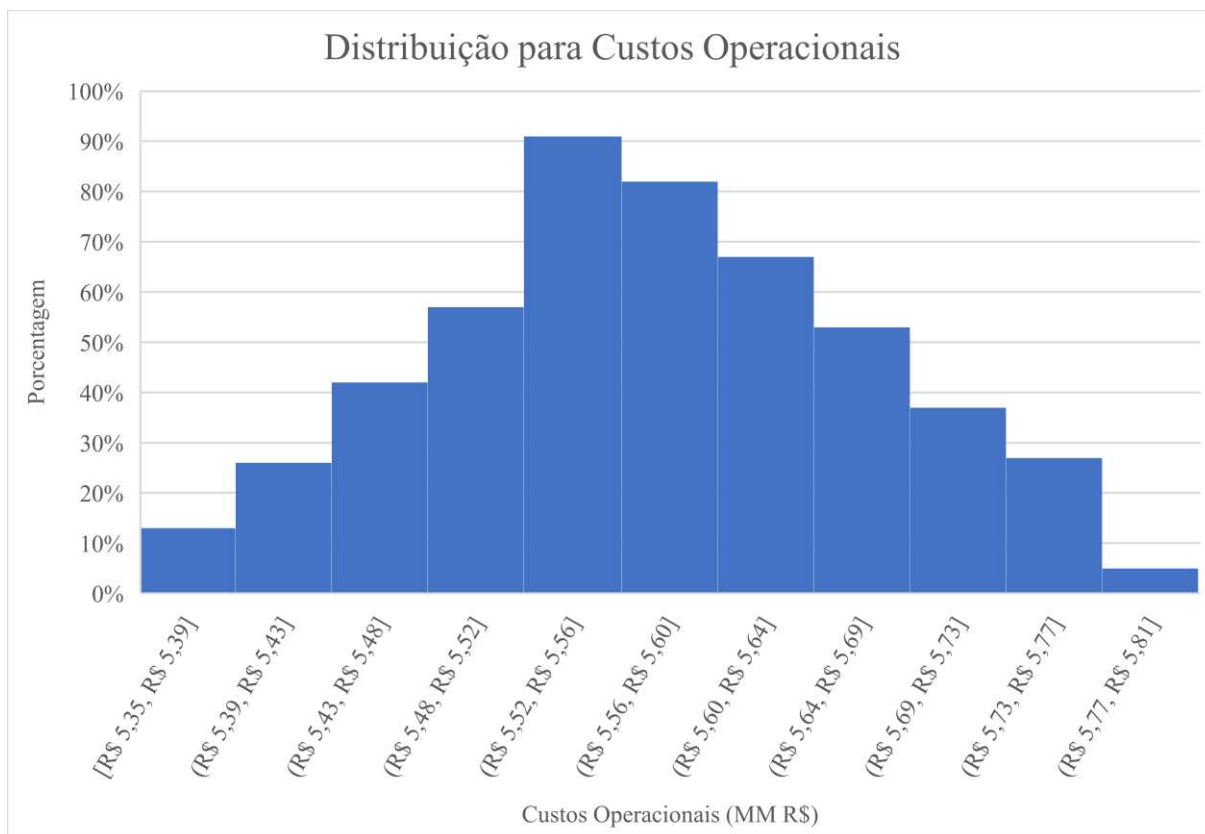


Fonte: Autoria própria

Para avaliação da distribuição de probabilidade do VPL em relação a capacidade de produção, existe uma probabilidade de 87% que no cenário considerado na Simulação 1 o VPL esteja entre MM R\$ 200,42 e R\$ 235,42, o que mostra viabilidade econômica do projeto, juntamente com rápido retorno do capital fixo investido. Já na Simulação 2, se tem 87% de probabilidade do VPL estar entre MM R\$ 246,77 e 292,77. Na Simulação 3, o VPL está entre MMR\$ 707,52 e 827,52, com 86% de probabilidade.

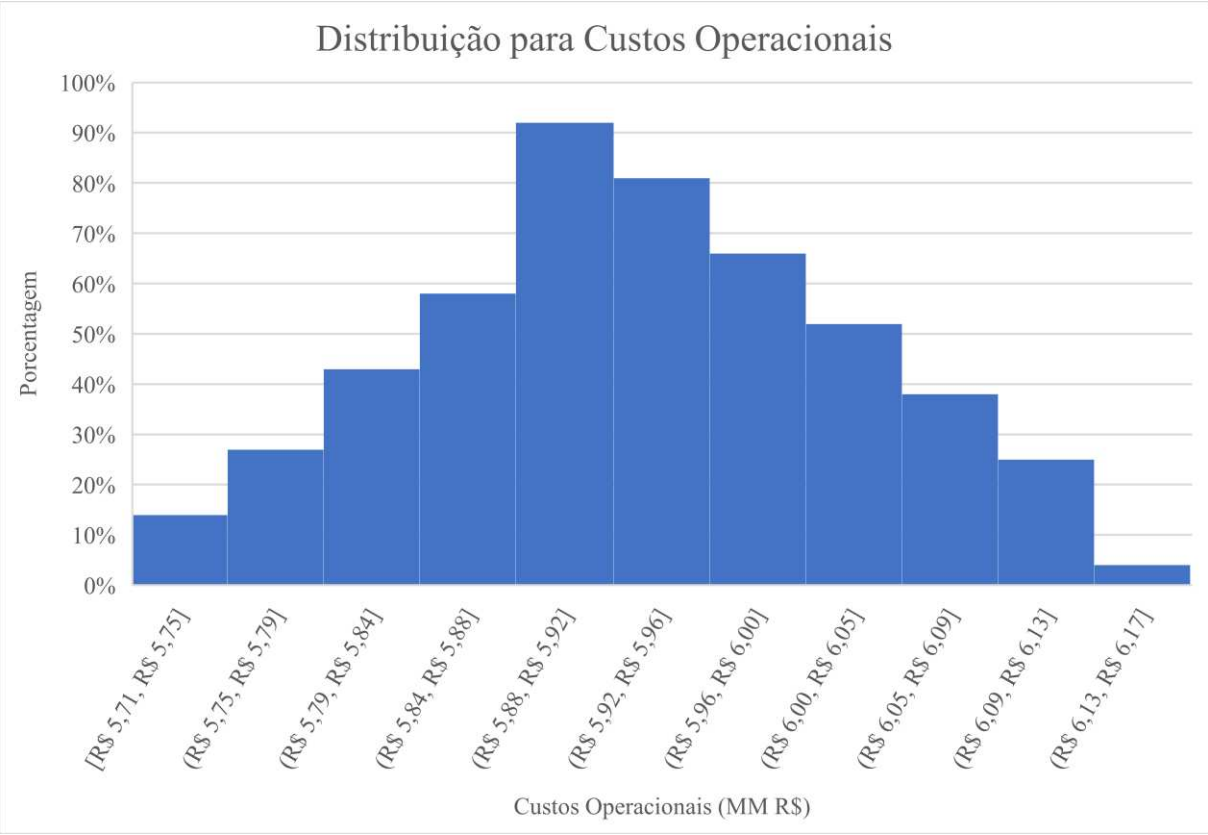
As Figuras 53 a 58 representam os histogramas da distribuição para os Custos Operacionais referente a variação do custo do bio-óleo e a variação da capacidade de produção das três simulações.

Figura 53: Distribuição de probabilidade para os Custos Operacionais referente a variação do custo do bio-óleo (Simulação 1).



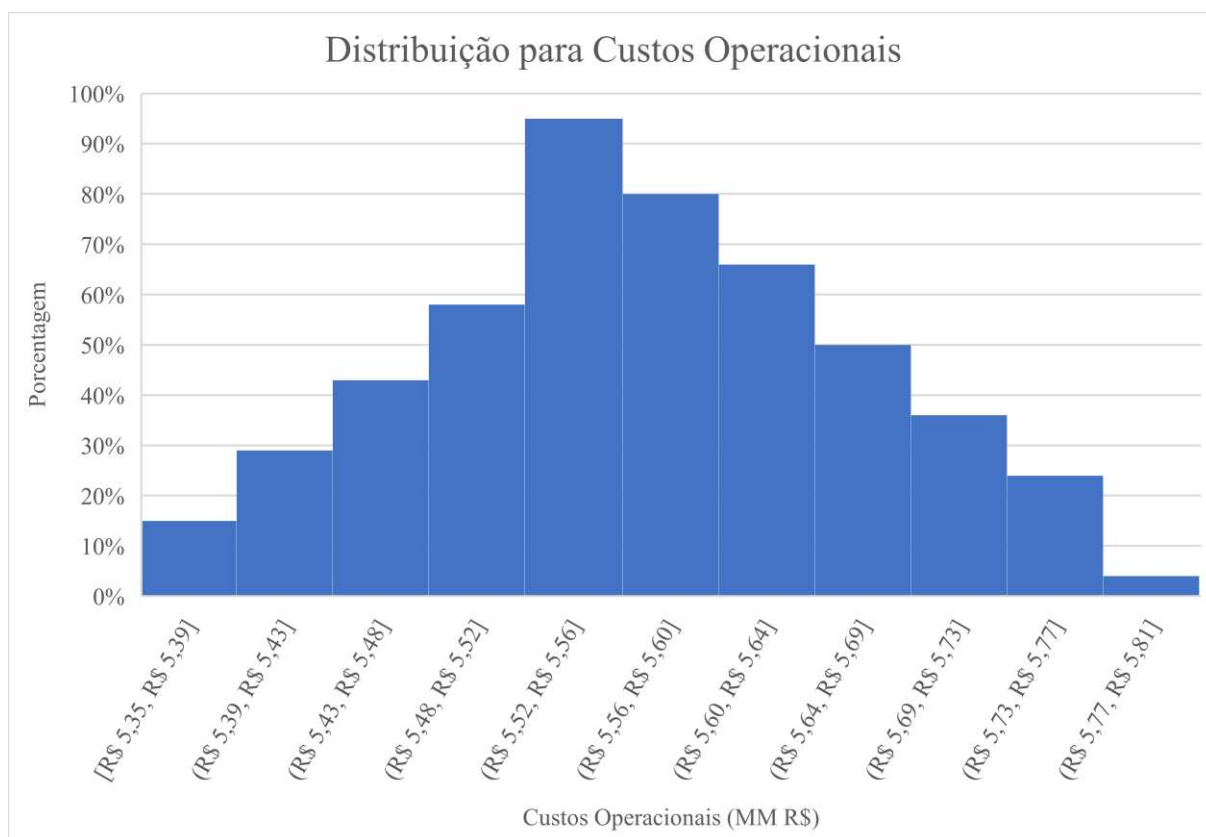
Fonte: Autoria própria

Figura 54: Distribuição de probabilidade para os Custos Operacionais referente a variação do custo do bio-óleo (Simulação 2).



Fonte: Autoria própria

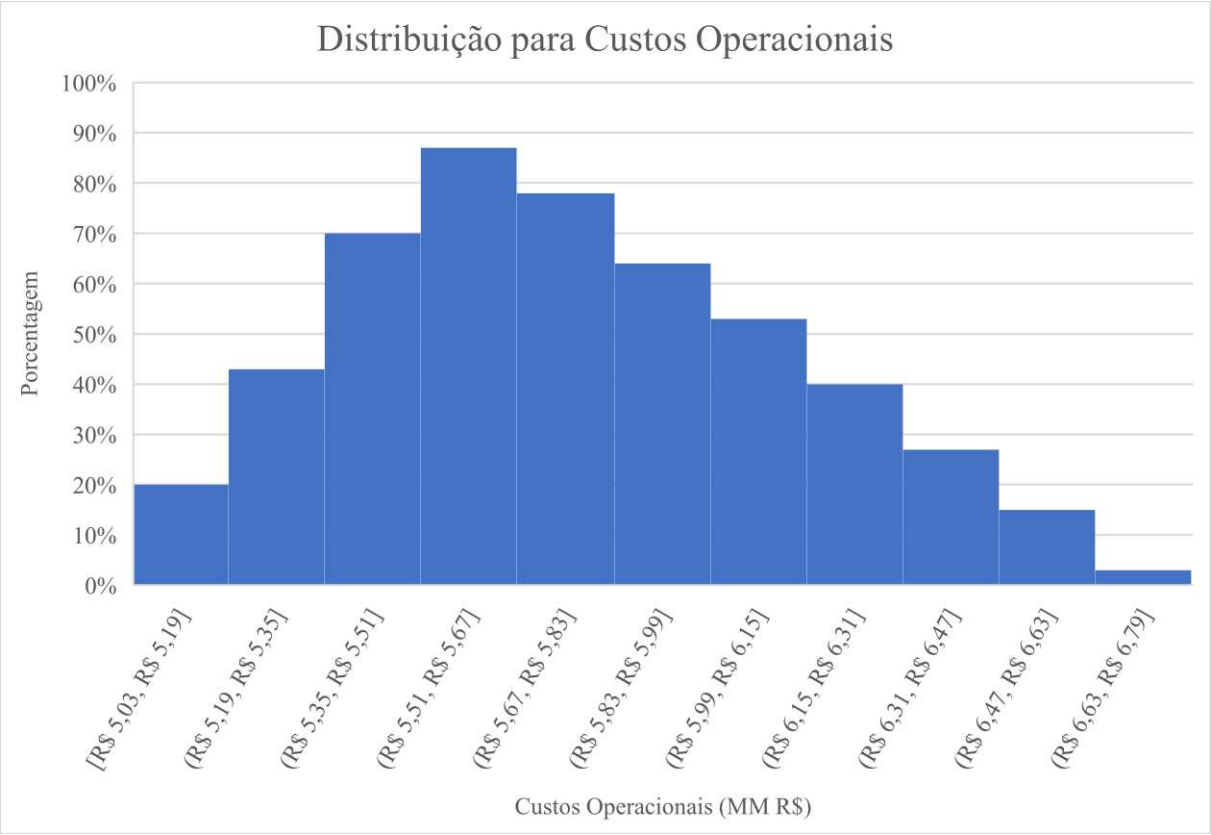
Figura 55: Distribuição de probabilidade para os Custos Operacionais referente a variação do custo do bio-óleo (Simulação 3).



Fonte: Autoria própria

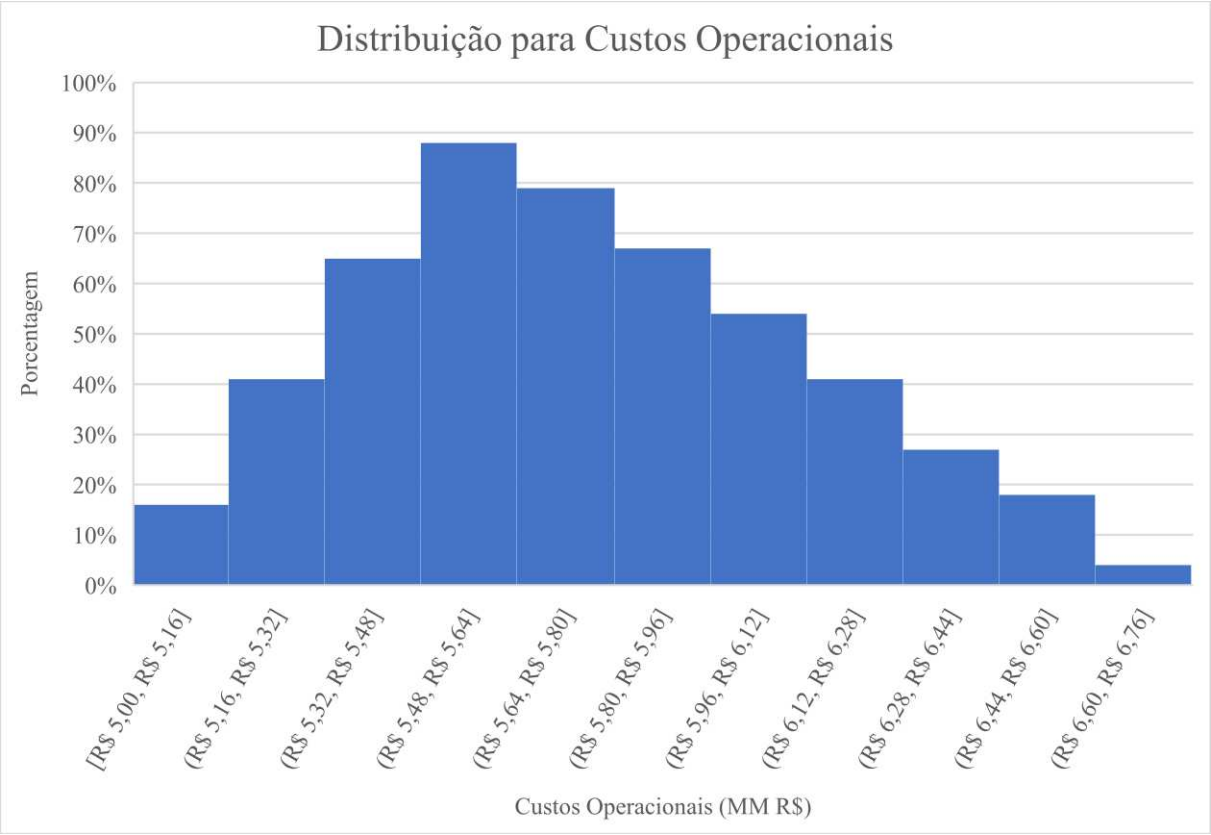
Avaliando a distribuição de probabilidade dos Custos Operacionais em relação ao custo do bio-óleo, há uma probabilidade de 91% no cenário apresentado pela Simulação 1, em que os custos operacionais estejam entre MM R\$ 5,52 e R\$ 5,56, podendo observar a viabilidade econômica do projeto, além do rápido retorno do capital fixo investido. Podendo também observar um bom resultado na Simulação 2, tendo 92% de probabilidade dos Custos Operacionais estarem entre MM R\$ 5,88 e 5,92. Na Simulação 3, os Custos Operacionais estão entre MMR\$ 5,52 e 5,56, com 95% de probabilidade.

Figura 56: Distribuição de probabilidade para os Custos Operacionais referente a variação da capacidade de produção (Simulação 1).



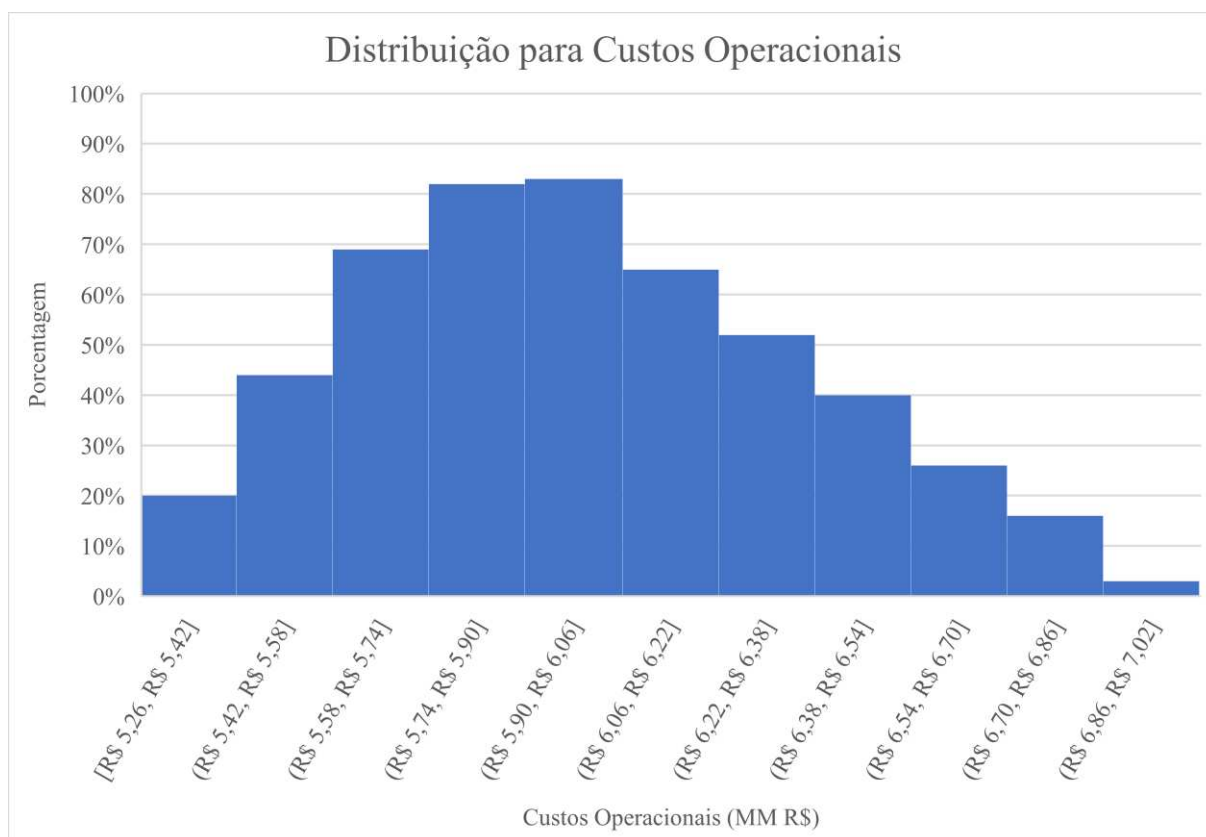
Fonte: Autoria própria

Figura 57: Distribuição de probabilidade para os Custos Operacionais referente a variação da capacidade de produção (Simulação 2).



Fonte: Autoria própria

Figura 58: Distribuição de probabilidade para os Custos Operacionais referente a variação da capacidade de produção (Simulação 3).



Fonte: Autoria própria

Avaliando a distribuição de probabilidade dos Custos Operacionais em relação a capacidade de produção, existe uma probabilidade de 87% no cenário apresentado pela Simulação 1, em que os custos operacionais estejam entre MM R\$ 5,51 e R\$ 5,67, podendo observar a viabilidade econômica do projeto, além do rápido retorno do capital fixo investido. Podendo também observar um bom resultado na Simulação 2, tendo 88% de probabilidade dos Custos Operacionais estarem entre MM R\$ 5,48 e 5,64. Na Simulação 3, os Custos Operacionais estão entre MMR\$ 5,90 e 6,06, com 83% de probabilidade.

6. CONCLUSÃO

Com base na avaliação dos resultados das simulações, podemos inferir que foram obtidos os produtos desejados. O nível de pureza dos componentes varia de acordo com a sua composição, uma vez que, em alguns casos, pode ser desafiador obter a separação devido ao ponto de ebulição semelhante em relação a outros compostos. Por consequência, o processo pode tornar-se complexo quando a meta é recuperar produtos distintos.

Após analisar a viabilidade econômica dos três cenários, é possível observar que a Simulação 1 (bio-óleo derivado de madeira de eucalipto) se mostrou um cenário mais positivo quando avaliados a Taxa Interna de Retorno (TIR), Taxa de Lucratividade e tempo de Payback. Porém, um dos parâmetros econômicos mais observados quando se quer fazer um investimento financeiro é o Valor Presente Líquido (VPL), levando isto em consideração o cenário mais atrativo é o representado pela Simulação 3 (bio-óleo derivado de bagaço de cana-de-açúcar) que obteve o maior VPL.

Ao comparar os resultados de riscos e incertezas para os projetos, assim como na análise econômica em que o VPL da Simulação 3 é o mais recomendado, considerando o custo do bio-óleo e a capacidade de produção. Constata-se que, do ponto de vista de risco, a Simulação 1 apresenta menor risco de investimento em relação aos Custos Operacionais nas condições simuladas.

A realização do projeto pode contribuir significativamente para a área da indústria química e termoquímica, uma vez que o bio-óleo é uma fonte de energia renovável, derivado de matéria prima muitas vezes proveniente de resíduos industriais. Os compostos nele presentes possuem alto valor agregado, sendo empregados na fabricação de produtos fármacos, químicos, entre outros, além de contribuir para o desenvolvimento, otimização e avaliação de investimentos em processos termoquímicos para obtenção de tais produtos.

5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ALIBABA. **Alibaba**. Disponível em: <<https://www.alibaba.com/>>. Acesso em: 18 set. 2022.
- BCB. **Banco Central do Brasil**. Disponível em: <<https://www.bcb.gov.br/estabilidadefinanceira/historicocotacao>>. Acesso em: 24 set. 2022.
- BITTENCOURT, F. P. **Simulação e análise técnico-econômica de uma planta de pirólise multipropósito para obtenção de bio-óleo a partir de diferentes biomassas**. Niterói: Universidade Federal Fluminense, 2020.
- BRIDGWATER, T. Biomass for energy. **Journal of the Science of Food and Agriculture**, v. 86, n. 12, p. 1755–1768, 12 set. 2006.
- BRIDGWATER, A. V. Renewable fuels and chemicals by thermal processing of biomass. **Chemical Engineering Journal**, v. 91, p. 87–102, 2003.
- BRIDGWATER, A. V. Review of fast pyrolysis of biomass and product upgrading. **Biomass and Bioenergy**, v. 38, p. 68–94, mar. 2012.
- BRIDGWATER, A. V.; MEIER, D.; RADLEIN, D. An overview of fast pyrolysis of biomass. 1999.
- BRIENZA, F. et al. Enhancing lignin depolymerization via a dithionite-assisted organosolv fractionation of birch sawdust. **Green Chemistry**, v. 23, n. 9, p. 3268–3276, 7 maio 2021.
- BRITO, F. DE O. **Desenvolvimento de usina de produção de biodiesel a partir de óleo de fritura usando simuladores de processo: Aspectos operacionais e ambientais**. Fortaleza: Universidade Federal do Ceará, 2013.
- CAMPOS-FRANZANI, M. I. et al. Extraction of guaiacol from hydrocarbons as an alternative for the upgraded bio-oil purification: Experimental and computational thermodynamic study. **Fuel**, v. 280, 15 nov. 2020.
- CHAN, Y. H. et al. Fractionation and extraction of bio-oil for production of greener fuel and value-added chemicals: Recent advances and future prospects. **Chemical Engineering Journal**, v. 397, 1 out. 2020.
- CHANG, S. et al. Effect of hydrothermal pretreatment on properties of bio-oil produced from fast pyrolysis of eucalyptus wood in a fluidized bed reactor. **Bioresource Technology**, v. 138, p. 321–328, 2013.
- CHAVES, I. D. G. et al. *Process Analysis and Simulation in Chemical Engineering*. 2016.
- CORRÊA, F. DA S. et al. Purificação do bio-óleo produzido via pirólise de sementes de Açaí (*Euterpe Oleracea*, Mart). **Brazilian Journal of Development**, v. 7, n. 2, p. 18260–18277, 2021.
- DAVID, G. F. et al. Thermochemical conversion of sugarcane bagasse by fast pyrolysis: High yield of levoglucosan production. **Journal of Analytical and Applied Pyrolysis**, v. 133, p. 246–253, 1 ago. 2018.
- DEMIRBAS, A. Potential applications of renewable energy sources, biomass combustion problems in boiler power systems and combustion related environmental issues. **Progress in Energy and Combustion Science**, v. 31, n. 2, p. 171–192, 2005.

- DENG, N. et al. Simulation analysis of municipal solid waste pyrolysis and gasification based on Aspen plus. **Frontiers in Energy**, v. 13, n. 1, p. 64–70, 2019.
- EVARISTO, R. B. W. et al. Evaluation of waste biomass gasification for local community development in central region of Brazil. **Biomass Conversion and Biorefinery**, v. 12, n. 7, p. 2823–2834, 1 jul. 2022.
- FARDHYANTI, D. S. et al. Liquid phase equilibrium of phenol extraction from bio-oil produced by biomass pyrolysis using thermodynamic models. **Chinese Journal of Chemical Engineering**, v. 27, n. 2, p. 391–399, 1 fev. 2019.
- FÉLIX, C. R. DE O. et al. Pirólise rápida de biomassa de eucalipto na presença de catalisador Al-MCM-41. **Revista Materia**, v. 22, 2017.
- FERNANDES DA SILVA, D. Eficácia dos flavonóides hesperidina e naringenina e o fenol ácido isovanílico complexados com mg (ii), para o controle da bactéria *Xanthomonas citri* ssp. *Citri*. p. 1–137, 2017.
- FREDENSLUND, A.; JONES, R. L.; PRAUSNITZ, J. M. Group-contribution estimation of activity coefficients in nonideal liquid mixtures. **AIChE Journal**, v. 21, n. 6, p. 1086–1099, 1975.
- GIRON, B. B. **Simulação do processo de pirólise de resíduo lignocelulósico para produção de insumos químicos**. São Bernardo do Campo: CENTRO UNIVERSITÁRIO FEI, 2016.
- GNANA PRAKASH, D. et al. Extraction methodology of lignin from biomass waste influences the quality of bio-oil obtained by solvothermal depolymerization process. **Chemosphere**, v. 293, 1 abr. 2022.
- GOSLING, I. **Process Simulation and Modeling for Industrial Bioprocessing: Tools and Techniques**. [s.l.] Industrial Bioprocessing, 2005. v. 1
- GUO, M.; SONG, W.; BUHAIN, J. Bioenergy and biofuels: History, status, and perspective. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, v. 42, p. 712–725, 2015.
- HASSEN-TRABELSI, A. B. et al. Pyrolysis of waste animal fats in a fixed-bed reactor: Production and characterization of bio-oil and bio-char. **Waste Management**, v. 34, n. 1, p. 210–218, jan. 2014.
- HUBER, G. W.; IBORRA, S.; CORMA, A. Synthesis of transportation fuels from biomass: Chemistry, catalysts, and engineering. **Chemical Reviews**, v. 106, n. 9, p. 4044–4098, set. 2006.
- JIANG, G. et al. Selective extraction of monophenols from pyrolysis bio-oil based on a novel three-dimensional visualization model. **Separation and Purification Technology**, v. 272, 1 out. 2021.
- KANAUIA, P. K. et al. Review of analytical strategies in the production and upgrading of bio-oils derived from lignocellulosic biomass. **Journal of Analytical and Applied Pyrolysis**, v. 105, p. 55–74, 2014.
- KIM, J. S. Production, separation and applications of phenolic-rich bio-oil - A review. **Bioresource Technology**, v. 178, p. 90–98, 1 fev. 2015.
- KLAFKE, A. F. **Torrefação de resíduos da indústria de papel e celulose como pré-tratamento para produção de bio-óleo via pirólise rápida**. Porto Alegre: Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2018.

KRAUSE, M. C. **Uso de [BMIM][HSO₄] na separação de compostos nitrogenados obtidos a partir do bio-óleo da pirólise dos resíduos industriais da produção e café solúvel.** [s.l.] Universidade Tiradentes, 2019.

KUMAR, G.; PANDA, A. K.; SINGH, R. K. Optimization of process for the production of bio-oil from eucalyptus wood. **Ranliao Huaxue Xuebao/Journal of Fuel Chemistry and Technology**, v. 38, n. 2, p. 162–167, 2010.

LIMA, E. C. P. et al. Simulação de Monte Carlo auxiliando a análise de viabilidade econômica de projetos. **IV Congresso Nacional de Excelência em gestão**, 2008.

LOPES, M. L. DA; FONTES, A. A. DISCUSSÃO SOBRE OS CRITÉRIOS DE AVALIAÇÃO ECONÔMICA: VALOR PRESENTE LÍQUIDO (VPL), VALOR ANUAL EQUIVALENTE (VAE) E VALOR ESPERADO DA TERRA (VET). **Sociedade de Investigação Florestais**, v. 29, n. 6, p. 931–936, 2005.

MACHADO, N. T. **MODELAGEM E SIMULAÇÃO DO PROCESSO DE FRACIONAMENTO, PURIFICAÇÃO E DESACIDIFICAÇÃO DO PRODUTO LÍQUIDO ORGÂNICO OBTIDO VIA CRAQUEAMENTO TERMO-CATALÍTICO DE ÓLEOS VEGETAIS.** 2014.

MELO, A. C. C. et al. **EQUILÍBRIO LÍQUIDO-LÍQUIDO APLICADO A SEPARAÇÃO DE PRODUTOS DA PIRÓLISE DE BIOMASSA.** 2014.

MELO, A. C. C. DE. **Caracterização e fracionamento do bio-óleo obtido pela pirólise rápida do bagaço de cana-de-açúcar.** Recife: Universidade Federal de Pernambuco, 2019.

MELO, P. S. et al. Composição fenólica e atividade antioxidante de resíduos agroindustriais. **Ciência Rural**, v. 41, n. 6, p. 1088–1093, 2011.

MENEZES, A. L. DE et al. **Caracterização do bio-óleo produzido na pirólise rápida de lignina kraft industrial submetida à torrefação.** Cíbio, 2020.

MESA PÉREZ, J. M. **Testes em uma planta de pirólise rápida de biomassa em leito fluidizado: critérios para sua otimização.** Campinas: Universidade Estadual de Campinas, 2004.

PEREIRA, W. A.; ALMEIDA, L. DA S. MÉTODO MANUAL PARA CÁLCULO DA TAXA INTERNA DE RETORNO. **Revista Objetiva**, 2008.

PERRY, R. H.; GREEN, D. W. **Perry's chemical engineers' handbook.** [s.l.] McGraw-Hill, 2008.

PETERS, M. S.; TIMMERHAUS, K. D.; WEST, R. E. **Plant Design and Economics for Chemical Engineers.** . 2003.

REMÉDIO, B. R. **Estudo do comportamento do equilíbrio líquido-líquido nas etapas de decantação e lavagem de biodiesel etílicos por meio da modelagem termodinâmica nrtl.** Poços de Caldas: Universidade Federal de Alfenas, 2017.

REN, S.; YE, X. P.; BOROLE, A. P. Separation of chemical groups from bio-oil water-extract via sequential organic solvent extraction. **Journal of Analytical and Applied Pyrolysis**, v. 123, p. 30–39, 1 jan. 2017.

ROCHA, L. B. et al. **Simulação rigorosa de colunas de destilação em Aspen Plus ® para produção de etanol hidratado e etanol anidro.** , 2017.

RODRIGUES, C. T. **Simulação de um processo de produção de energia baseado na reforma de bio-óleo**. Goiânia: Universidade Federal de Goiás, 2019.

SAMANTA, A. K. et al. Intra- and intermolecular H-bond mediated tautomerization and dimerization of 3-methyl-1,2-cyclopentanedione: Infrared spectroscopy in argon matrix and CCl₄ solution. **Journal of Molecular Structure**, v. 994, n. 1–3, p. 97–103, 17 maio 2011.

SANTOS, R. M. **Estudo da pirólise para a produção de bio-óleo a partir do resíduo agrícola de Feijão-Caupi (Vigna unguiculata)**. [s.l.] Universidade Federal do Sergipe, 2021.

SCHENA, T. **Aproveitamento dos Resíduos de Coco através da Pirólise: Uma Abordagem Analítica e Econômica**. [s.l.] Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2019.

SMITH, J. M. et al. **Introduction to chemical engineering thermodynamics**. , 2022.

SMITH, J. M.; VAN NESS, H. C.; ABBOTT, M. M. **Introdução à termodinâmica da Engenharia Química**. , 2007.

SOCOLSKY, C. et al. Bioactive new bitter-tasting p-hydroxystyrene glycoside and other constituents from the fern *Elaphoglossum spathulatum*. p. 347–355, 2003.

SORIA-VERDUGO, A. et al. Pyrolysis of sewage sludge in a fixed and a bubbling fluidized bed – Estimation and experimental validation of the pyrolysis time. **Energy Conversion and Management**, v. 144, p. 235–242, 2017.

SPRAKEL, L. M. J.; SCHUUR, B. Solvent developments for liquid-liquid extraction of carboxylic acids in perspective. **Separation and Purification Technology**, v. 211, p. 935–957, 18 mar. 2019.

STEDILE, T. et al. Comparison between physical properties and chemical composition of bio-oils derived from lignocellulose and triglyceride sources. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, v. 50, p. 92–108, 1 out. 2015.

SUNDARARAJAN, S.; KARTHIKEYAN, R.; KHADANGA, M. K. Spatial distribution of polycyclic aromatic hydrocarbons in Ennore estuary and coastal waters, Chennai, India. **Asian Journal of Chemistry**, v. 28, n. 1, p. 35–38, 2016.

SZATMÁRI, Á. et al. A pattern-triggered immunity-related phenolic, acetosyringone, boosts rapid inhibition of a diverse set of plant pathogenic bacteria. **BMC Plant Biology**, v. 21, n. 1, 1 dez. 2021.

TOLEDANO, A. et al. Fractionation of organosolv lignin from olive tree clippings and its valorization to simple phenolic compounds. **ChemSusChem**, v. 6, n. 3, p. 529–536, mar. 2013.

TORRI, I. D. V. Caracterização de bio-óleos obtidos por pirólise da serragem de *Eucalyptus* sp. (hardwood) e *Picea abies* (softwood) utilizando técnicas de cromatografia gasosa acoplada à espectrometria de massas. p. 122, 2013.

TURMINA, ÁGATHA G. **Aprendizado de máquina aplicado à análise da operação de uma planta piloto para gaseificação de carvão mineral**. , 2021.

TURTON, R. et al. **Analysis, Synthesis, and Design of Chemical Processes**. 3. ed. [s.l.] New Jersey: Prentice Hall, 2009.

VASSILEV, S. V. et al. An overview of the chemical composition of biomass. **Fuel**, v. 89, n. 5, p. 913–933, maio 2010.

WANG, J. et al. Separation of Biomass Pyrolysis Oil by Supercritical CO₂ Extraction. **Smart Grid and Renewable Energy**, v. 01, n. 02, p. 98–107, 2010.

WATANABE, M. D. B.; BONOMI, A. **Avaliação econômica de bioprocessos**. 2. ed. São Paulo: Engenharia Bioquímica, 2021. v. 2

WU, J. et al. A narrative review: The pharmaceutical evolution of phenolic syringaldehyde. **Biomedicine and Pharmacotherapy**, v. 153, 1 set. 2022.

XU, J. et al. Chemical characteristics of bio-oil from beech wood pyrolysis separated by fractional condensation and water extraction. **Journal of the Energy Institute**, v. 99, p. 186–197, 1 dez. 2021.

ZANATTA, F. G. **Potencial econômico e aplicação do bio-óleo da pirólise rápida de casca de arroz cmo pesticida**. [s.l.] Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2016.

ZHANG, C. et al. Pyrolysis of herb waste: Effects of extraction pretreatment on characteristics of bio-oil and biochar. **Biomass and Bioenergy**, v. 143, 1 dez. 2020.