

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE VIÇOSA**

**Simulação, análise técnico-econômica e de risco da valorização da acetona na  
produção de intermediários para biocombustíveis de aviação**

Tayla Luiza Pereira Borges  
*Magister Scientiae*

**VIÇOSA - MINAS GERAIS  
2025**

**TAYLA LUIZA PEREIRA BORGES**

**Simulação, análise técnico-econômica e de risco da valorização da acetona na produção de intermediários para biocombustíveis de aviação**

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: Andre Gustavo Sato

Coorientador: Fabio de Avila Rodrigues

**VIÇOSA - MINAS GERAIS  
2025**

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

T

B732s  
2025  
Borges, Tayla Luiza Pereira, 1999-  
Simulação, análise técnico-econômica e de risco da  
valorização da acetona na produção de intermediários para  
biocombustíveis de aviação / Tayla Luiza Pereira Borges. –  
Viçosa, MG, 2025.

1 dissertação eletrônica (200 f.): il. (algumas color.).

Inclui apêndices.

Orientador: André Gustavo Sato.

Dissertação (mestrado) - Universidade Federal de Viçosa,  
Departamento de Química, 2025.

Referências bibliográficas: f. 98-103.

DOI: <https://doi.org/10.47328/ufvbbt.2025.238>

Modo de acesso: World Wide Web.

1. Catálise heterogênea. 2. Monte Carlo, Método de.  
3. Biocombustíveis. 4. Furaldeído. I. Sato, André Gustavo,  
1977-. II. Universidade Federal de Viçosa. Departamento de  
Química. Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química.  
III. Título.

CDD 22. ed. 541.395

**TAYLA LUIZA PEREIRA BORGES**

**Simulação, análise técnico-econômica e de risco da valorização da acetona na produção de intermediários para biocombustíveis de aviação**

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: 17 de fevereiro de 2025.

Assentimento:

---

Tayla Luiza Pereira Borges  
Autora

---

Andre Gustavo Sato  
Orientador

Essa dissertação foi assinada digitalmente pela autora em 30/04/2025 às 21:14:01 e pelo orientador em 04/05/2025 às 11:07:45. As assinaturas têm validade legal, conforme o disposto na Medida Provisória 2.200-2/2001 e na Resolução nº 37/2012 do CONARQ. Para conferir a autenticidade, acesse <https://siadoc.ufv.br/validar-documento>. No campo 'Código de registro', informe o código **VPQR.IJPB.QEC7** e clique no botão 'Validar documento'.

## **AGRADECIMENTOS**

Agradeço primeiramente a Deus, que nunca me desamparou e me permitiu concluir este trabalho. A nossa senhora de Aparecida, por guiar meus caminhos na direção dos meus sonhos.

Aos meus familiares, meu namorado e amigos, pelo apoio incondicional e pelo incentivo constante para que eu nunca desistisse dos meus objetivos.

Ao meu orientador, professor André Gustavo Sato, e ao meu coorientador, professor Fábio de Ávila Rodrigues, pelo apoio, paciência e pelos valiosos ensinamentos compartilhados ao longo deste período.

Aos amigos do LaSiP, pelos cafés, companheirismo, troca de conhecimentos e paciência, tornando a rotina mais leve e prazerosa.

Aos membros da banca examinadora, agradeço ao Maurino Magno de Jesus Junior, pelos grandes ensinamentos e lições valiosas aprendidas durante esta jornada, e à professora Betânia Hoss Lunelli, pela paciência, calma e delicadeza ao me auxiliar no desenvolvimento da dissertação.

À Universidade Federal de Viçosa, ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química e ao Departamento de Química, pela oportunidade de realizar este trabalho. Este trabalho foi realizado com o apoio das seguintes agências de pesquisa brasileiras: Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brasil (CAPES) – Código de Financiamento 001, Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de Minas Gerais (FAPEMIG) e Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq).

“Nada na vida deve ser temido, apenas compreendido. Agora é hora de compreender mais, para temer menos.”  
(Marie Curie)

## RESUMO

BORGES, Tayla Luiza Pereira, M.Sc., Universidade Federal de Viçosa, fevereiro de 2025. **Simulação, análise técnico-econômica e de risco da valorização da acetona na produção de intermediários para biocombustíveis de aviação.** Orientador: Andre Gustavo Sato. Coorientador: Fabio de Avila Rodrigues.

A produção de biocombustíveis sustentáveis é uma estratégia essencial para reduzir a dependência de combustíveis fósseis e mitigar impactos ambientais. Nesse contexto, a condensação aldólica entre furfural (derivado da biomassa) e acetona surge como uma rota promissora para a síntese de intermediários, como o 1,4-pentadien-3-ona,1,5-di-2-furanil (F2Ac), utilizado na produção de biocombustíveis de aviação. A acetona, embora enfrente restrições regulatórias que dificultam sua comercialização, é amplamente gerada como subproduto industrial e pode ser valorizada como matéria-prima em processos inovadores como os biocombustíveis. Este trabalho avaliou a viabilidade técnica, econômica e os riscos do processo de condensação aldólica entre furfural e acetona por meio de simulações no software Aspen Plus, considerando oito cenários com variações de vazão de entrada (original: 10.957,7 kg/h; modificada: 13.697,1 kg/h, aumento de 25%) e dois diagramas de fluxo (PFD-1 e PFD-2). As condições reacionais foram de 2 h a 80°C, com razão mássica furfural: acetona de 1:0,8. A análise econômica considerou uma planta operando 7920 h/ano, com vida útil de 15 anos, taxa de retorno de 15% ao ano e payback de 3,6 anos. O cenário 7 apresentou o menor preço mínimo de venda (MSP) (12,47 USD/gal), enquanto o cenário 5 obteve o maior valor presente líquido (VPL) (96,53 milhões de dólares). A análise de riscos e incertezas, pela metodologia de Monte Carlo, considerou variações nos custos do furfural, da acetona e da capacidade produtiva, tendo o VPL e os custos operacionais como variáveis de resposta. O cenário 5 demonstrou o menor risco de investimento e melhor desempenho econômico. O estudo contribui com resultados relevantes para o desenvolvimento de rotas sustentáveis na produção de intermediários de biocombustíveis de aviação, com base na reação de condensação aldólica entre furfural e acetona, além de apoiar a avaliação da viabilidade econômica e dos riscos associados ao investimento.

Palavras-chave: Catálise Heterogênea; Condensação aldólica; Monte Carlo; SAF's; Furfural

## ABSTRACT

BORGES, Tayla Luiza Pereira, M.Sc., Universidade Federal de Viçosa, February, 2025. **Simulation, techno-economic, and risk analysis of acetone valorization for the production of intermediates for aviation biofuels.** Adviser: Andre Gustavo Sato. Co-adviser: Fabio de Avila Rodrigues.

The production of sustainable biofuels is a key strategy to reduce dependence on fossil fuels and mitigate environmental impacts. In this context, the aldol condensation between furfural (a biomass-derived compound) and acetone emerges as a promising route for the synthesis of intermediates such as 1,4-pentadien-3-one,1,5-di-2-furanyl (F2Ac), used in the production of aviation biofuels. Although acetone faces regulatory restrictions that hinder its commercialization, it is widely produced as an industrial by-product and can be valorized as a feedstock in innovative processes such as biofuel production. This study evaluated the technical and economic feasibility, as well as the risks associated with the aldol condensation process between furfural and acetone through simulations performed in the Aspen Plus software. Eight scenarios were analyzed, varying feed flow rates (original: 10,957.7 kg/h; modified: 13,697.1 kg/h, a 25% increase) and process flow diagrams (PFD-1 and PFD-2). The reaction conditions were set at 2 hours and 80°C, with a mass ratio of furfural:acetone of 1:0.8. The economic analysis considered a plant operating 7920 hours per year, with a 15-year lifetime, a return rate of 15% per year, and a payback period of 3.6 years. Scenario 7 resulted in the lowest minimum selling price (MSP) (12.47 USD/gal), while scenario 5 achieved the highest net present value (NPV) (96.53 million USD). The risk and uncertainty analysis, based on the Monte Carlo method, considered variations in furfural and acetone costs and production capacity, using NPV and operating costs as response variables. Scenario 5 showed the lowest investment risk and the best economic performance. This study provides relevant insights for the development of sustainable routes for the production of aviation biofuel intermediates based on the aldol condensation of furfural and acetone, as well as supporting the assessment of economic viability and investment risk.

Keywords: Heterogeneous Catalysis; Aldol condensation; Monte Carlo; SAF's; Furfural

## LISTA DE FIGURAS

Figura 1 - Acordos de compra futura de SAFs .....	16
Figura 2 - Ciclos de CO <sub>2</sub> para combustíveis derivados do petróleo e biomassa.....	24
Figura 3 - Resumo dos produtos químicos e biocombustíveis derivados do furfural .....	27
Figura 4 - Produção do Furfural .....	28
Figura 5 - Estrutura molecular Furfural.....	29
Figura 6 - Estrutura molecular Acetona.....	30
Figura 7 - Processo industrial de Acetona a partir do Cumeno .....	31
Figura 8 - Reação de condensação aldólica.....	33
Figura 9 - Rotas de reação deduzidas na condensação aldólica de furfural com acetona .....	35
Figura 10 - Mecanismo da reação de condensação aldólica.....	37
Figura 11 - Diagrama de blocos das etapas principais proposta para a simulação de produção de intermediários de biocombustíveis de aviação .....	48
Figura 12 - Fluxograma de blocos referente a proposta metodológica das simulações .....	49
Figura 13 - Rota de reação para a reação de condensação aldólica.....	51
Figura 14 - Diagramas de blocos do fluxo de processos cenários 1, 2, 5 e 6 .....	56
Figura 15 - Diagramas de blocos do fluxo de processos cenários 3, 4, 7 e 8 .....	57
Figura 16 - Diagrama PFD-1 para os cenários 1, 2, 5 e 6 .....	63
Figura 17 - Diagrama PFD-2 para os cenários 3, 4, 7 e 8 .....	64
Figura 18 - Diagrama de fluxo de processos (PFD) da etapa de reação.....	65
Figura 19 - Investimento de capital total .....	71
Figura 20 - Custo anual com utilidades (MM USD) de acordo com cada cenário.....	77
Figura 21 - Custos operacionais dos cenários propostos.....	78
Figura 22 - Fluxo de caixa líquido anual.....	79
Figura 23 - Resultados de investimento para todos os cenários .....	82

Figura 24 - Cenário 6: Distribuição cumulativa para o VPL referente a variação do custo de acetona .....	85
Figura 25 - Cenário 5: Distribuição cumulativa para o VPL referente a variação do custo de furfural e capacidade de produção .....	85
Figura 26: Gráfico da distribuição cumulativa para os Custos Operacionais referente a variação no custo do Furfural no Cenário 4 .....	88
Figura 27: Gráfico da distribuição cumulativa para os Custos Operacionais referente a variação no custo do Furfural no Cenário 5 .....	88
Figura 28: Gráfico da distribuição cumulativa para os Custos Operacionais referente a variação no custo do Furfural no Cenário 8 .....	89
Figura 29: Cenário 4 - distribuição de probabilidade para o VPL do Projeto referente a variação do custo da Acetona .....	91
Figura 30: Cenário 5 - distribuição de probabilidade para o VPL do Projeto referente a variação do custo da Acetona .....	92

## LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Propriedades físico-químicas do furfural .....	26
Tabela 2 - Propriedades físico-químicas da acetona.....	31
Tabela 3- Catalisadores e condições de reação.....	40
Tabela 4 - Frações mássicas dos reagentes na alimentação.....	50
Tabela 5 - Parâmetros cinéticos da reação.....	52
Tabela 6 - Preços estimados dos materiais utilizados no processo.....	59
Tabela 7 - Variação do custo da matéria-prima .....	60
Tabela 8 - Variação na capacidade de produção .....	61
Tabela 9 - Lista dos compostos utilizados na simulação .....	62
Tabela 10 - Resumo dos resultados de conversão rendimento e seletividade para os cenários produzidos .....	66
Tabela 11 - Comparação dos resultados médios de conversão rendimento e seletividade.....	67
Tabela 12 - Comparativo do custo anual com matéria-prima e solvente (MM \$/ano).....	72
Tabela 13 - Resultados produtos FAc e F2Ac em cada cenário .....	73
Tabela 14 - Preço mínimo de venda (MSP).....	74
Tabela 15 - Custo de mão de obra necessária para operação.....	76
Tabela 16 - Resultados de distribuição cumulativa para o VPL.....	84
Tabela 17 - Resultados de distribuição cumulativa para os custos operacionais.....	87
Tabela 18 - Resumo dos resultados dos histogramas de probabilidade para o VPL para todos os cenários .....	90
Tabela 19 - Resumo dos resultados dos histogramas de probabilidade para os custos operacionais em todos os cenários.....	93

## LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

IATA	Associação Internacional de Transportes Aéreos
SAF	Combustíveis de Aviação Sustentáveis
ICAO	Organização Internacional de Aviação Civil
GEE	Gases de efeito estufa
ppmv.	parte por milhão por volume
FAc (C8)	4-(2-furil)-3-buten-2-ona
F2Ac (C13)	1,4-pentadien-3-ona,1,5-di-2-furanil
FAc-OH (F-OH)	4-(2-furil)-4-hidroxi-2-butanona
F2Ac-OH	1,5-di(furan-2-yl)-5-hidroxipent-1-em-3-one
PFD	Diagramas de fluxo de processos
VPL	Valor Presente Líquido
TIR	Taxa interna de retorno
CO <sub>2</sub>	Dióxido de carbono
HMF	5-hidroximetilfurfural
O/C	Carbono-oxigênio
C-C	Carbono-Carbono
THF	Tetraidrofurano
HTC	Hidrotalcita
Å	Ångström
NRTL	Modelo <i>Non-Random Two Liquids</i>
UNIQUAC	<i>Universal Quasi-Chemical</i>
$\alpha$	Fator de aleatoriedade (NRTL)
$\tau$	Parâmetro de interação de energia binária

$\gamma$	Coeficiente de atividade
Ea	Energia de ativação
R <sup>2</sup>	Coeficiente de determinação
Ko	Fator pré-exponencial
TCI	Investimento de capital total
WC	Capital de giro
FCI	Investimento de capital fixo
MSP	Preço Mínimo de Venda
USD/gal	Dólares por galão
MM USD	Milhões de dólares
VP	Valor Presente
VPA	Valor Presente Acumulado

## SUMÁRIO

1. MOTIVAÇÕES E JUSTIFICATIVA.....	15
2. INTRODUÇÃO.....	19
3. OBJETIVOS.....	22
3.1 Objetivo Geral.....	22
3.2 Objetivos Específicos.....	22
4. REVISÃO DE LITERATURA.....	23
4.1 Biocombustíveis de Aviação.....	23
4.2 Matérias-Primas para Biocombustíveis.....	26
4.2.1 Furfural.....	26
4.2.2 Acetona.....	30
4.3 Tecnologias de Produção de Biocombustíveis.....	32
4.3.1 Condensação aldólica.....	32
4.4 Cinética e Condições de Reação.....	36
4.4.1 Fatores que Influenciam a Velocidade de Reação.....	38
4.5 Catalisadores e condições de reação.....	39
4.6 Simulação computacional.....	44
4.6.1 Modelos termodinâmicos.....	45
4.6.1.1 Modelo Non-Random Two Liquids (NRTL).....	46
5. MATERIAL E MÉTODOS.....	48
5.1 Simulação Computacional.....	49
5.1.1 Configuração do ambiente de simulação.....	50
5.1.1.1 Especificação dos componentes.....	50
5.1.1.2 Pacote Termodinâmico.....	51

5.1.1.3 Cinética da reação.....	51
5.1.1.4 Cálculos de Conversão, rendimento e seletividade .....	53
5.1.2 Parâmetros utilizados nas etapas .....	53
5.1.2.1 Reação .....	53
5.1.2.2 Extração .....	55
5.1.2.3 Separação.....	55
5.2 Análise Econômica .....	58
5.3 Análise de Risco e Incertezas .....	59
6. RESULTADOS E DISCUSSÕES .....	62
6.1. Especificação dos componentes utilizados nas simulações.....	62
6.2 Diagramas de fluxo de processos (PFD) .....	62
6.3 Reação .....	65
6.4 Extração e separação da acetona .....	67
6.5 Apresentação dos cenários.....	68
6.5.1 Cenários com Líquido Refrigerante (1 a 4) .....	68
6.5.2 Cenários sem Líquido Refrigerante (5 a 8) .....	69
6.6 Análise econômica.....	70
6.6.1 Custo fixo de capital.....	71
6.6.2 Matéria-prima .....	72
6.6.3 Produtos.....	73
6.6.3.1 Preço mínimo de venda .....	74
6.6.4 Mão de obra .....	76
6.6.5 Utilidades.....	76
6.6.6 Lucro anual e fluxo de caixa.....	77
6.6.6.1 Custos operacionais .....	78

6.6.6.2 Fluxo de caixa líquido .....	79
6.6.6.3 Fluxo de caixa.....	80
6.6.6.4 VPL, TIR e Taxa de lucratividade .....	81
6.7 Análise de riscos e incertezas .....	83
7. CONCLUSÃO.....	95
8. SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS .....	97
9. REFERÊNCIAS .....	98
APÊNDICES .....	106

## 1. MOTIVAÇÃO E JUSTIFICATIVAS

Diante das incertezas sobre o futuro do petróleo e das crescentes preocupações ambientais, há uma urgência em redefinir o desenvolvimento econômico e reestruturar a matriz energética global. A transição para fontes de energia renovável, como a biomassa, não só reduziria as emissões de gases de efeito estufa, mas também teria impactos econômicos positivos. Nesse contexto, a produção de biocombustíveis emerge como uma opção estratégica, podendo complementar ou até substituir os derivados do petróleo. Além dos benefícios ambientais, essa transição oferece oportunidades econômicas significativas (GOLDEMBERG; COELHO; GUARDABASSI, 2008).

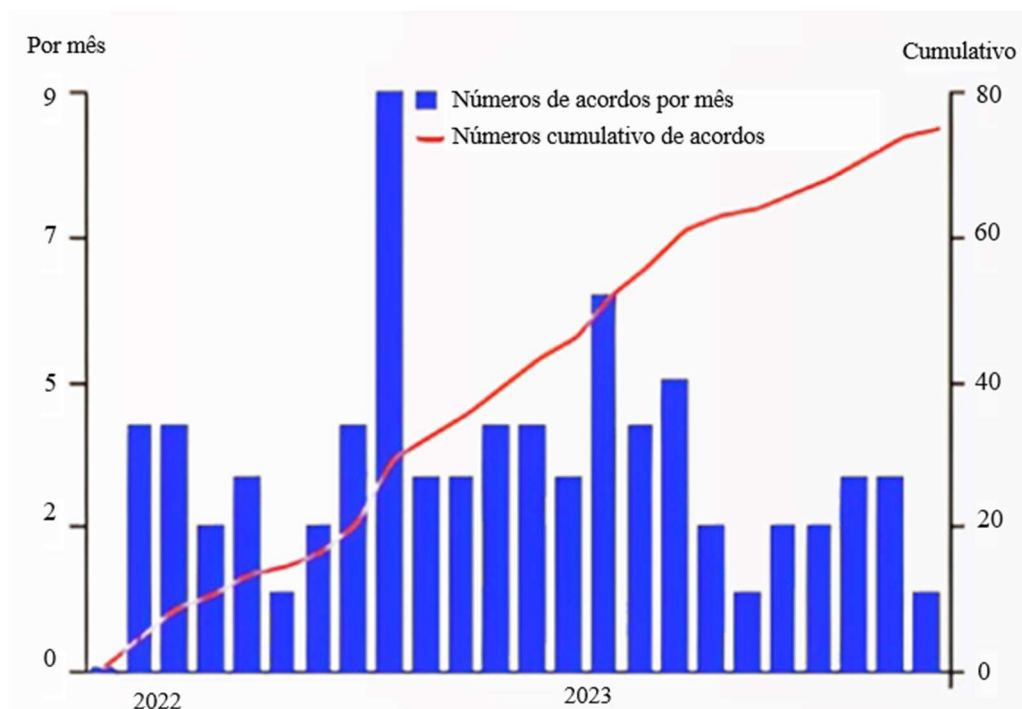
O furfural, derivado da biomassa lignocelulósica, é uma matéria-prima versátil com aplicação em diversos setores industriais, como química, farmacêutica, plásticos, tintas e vernizes. Um incremento na produção de furfural poderia revolucionar a indústria química, possibilitando seu uso como precursor químico em um conceito de biorrefinaria. Essa expansão não apenas diversificaria as fontes de matéria-prima na indústria química, mas também impulsionaria o desenvolvimento de produtos essenciais e fortalecendo a economia global. A partir da alta produção, aumentaria a diversidade de utilização, incluindo setores de alto impacto global como de combustíveis (HE et al., 2021; MILANEZ, 2021).

A acetona é um subproduto relevante na síntese de fenol a partir de cumeno, por meio de uma reação de oxidação amplamente empregada na indústria química para atender à demanda global por fenol. Para o setor industrial que gera acetona como co-produto, é essencial buscar alternativas que diminuam sua associação com drogas ilícitas e facilitem sua comercialização. Uma solução viável é direcionar a acetona para a produção de produtos não sujeitos a controle militar, o que não apenas abre novos mercados, mas também reduz os custos de produção e melhora a segurança financeira das empresas. A diversificação do uso da acetona para além dos setores restritos pela regulamentação militar é crucial para maximizar seu valor e impulsionar a rentabilidade da indústria (AGUADO-DEBLAS et al., 2020; LIEW et al., 2022).

Estima-se que o setor de aviação tenha alcançado um lucro de US\$ 27,4 bilhões em 2023, com perspectivas de aumento na lucratividade para 2024. De acordo com a Associação Internacional de Transportes Aéreos (IATA, 2024), cerca de 65% da redução de emissões de carbono necessária para alcançar a meta de zero líquido até 2050 depende do uso de Combustíveis de Aviação Sustentáveis (SAF). Embora a indústria tenha adquirido e utilizado toda a produção de SAF disponível, esse combustível representou apenas 0,2% do consumo total em 2023, evidenciando a insuficiência na sua produção.

Na Figura 1, observa-se os acordos de compra futura de combustível de aviação sustentável (SAF) firmados entre as companhias aéreas e os produtores desse combustível entre os anos de 2022 e 2023. Nota-se que o número cumulativo de acordos cresce consideravelmente ao longo dos anos. Em 2023, o custo unitário do SAF foi 2,8 vezes superior ao do combustível de aviação convencional, evidenciando o alto investimento realizado pelas companhias aéreas na redução da pegada de carbono.

Figura 1: Acordos de compra futura de SAFs



Fonte: IATA, (2024)

Em novembro de 2023, a Organização Internacional de Aviação Civil (ICAO) estabeleceu como meta uma redução de 5% nas emissões de CO<sub>2</sub> por meio do uso de SAF, reforçando a urgência de políticas públicas mais eficazes para estimular a produção desse combustível (HONG et al., 2025).

O Brasil, com sua robusta produção agropecuária, gera uma quantidade significativa de resíduos que se convertem em matéria-prima de baixo custo. Além disso, o país possui um mercado interno de transporte aéreo bem estabelecido e com grande potencial de crescimento. Combinados, esses fatores, juntamente com a disponibilidade tecnológica e políticas públicas adequadas, podem impulsionar a produção e o uso de biocombustíveis na aviação. Essas condições favoráveis colocam o Brasil em uma posição vantajosa para se tornar um importante produtor de biocombustíveis para aviação (MILANEZ, 2021).

Desenvolver processos eficientes e economicamente viáveis não apenas impulsiona o desenvolvimento econômico regional e nacional, mas também estimula investimentos em pesquisa e desenvolvimento. A simulação computacional de reações químicas emerge como uma abordagem eficaz para obter resultados sobre a produção de biocombustíveis, proporcionando uma série de benefícios, tais como:

- **Economia de Tempo e Recursos:** As simulações computacionais oferecem uma análise rápida e eficiente de várias condições de reação, eliminando a necessidade de experimentos laboratoriais ou piloto. Essa abordagem economiza tempo e recursos, permitindo a identificação ágil e eficiente das melhores condições de reação.
- **Otimização de Processos:** Simulando a cinética e termodinâmica da reação, é possível otimizar os parâmetros do processo, como temperatura, pressão e catalisadores, para maximizar a produção de intermediários valiosos para biocombustíveis. Esse procedimento pode resultar em processos mais eficientes e econômicos.
- **Viabilidade Técnica e Econômica:** As simulações computacionais possibilitam a avaliação da viabilidade técnica e econômica da produção de intermediários para biocombustíveis em diferentes cenários de produção. Isso auxilia na tomada de decisões sobre a implementação de novos processos ou tecnologias.

- **Análise de riscos e incertezas:** É uma abordagem amplamente utilizada no mercado financeiro para avaliar a viabilidade econômica de investimentos. Essa ferramenta permite identificar o impacto de variáveis do processo no desempenho econômico. Por meio dessa análise, é possível avaliar o fluxo de caixa do investimento e os custos associados, fornecendo uma base sólida para determinar o potencial de sucesso do projeto.

Realizar simulações computacionais de reações químicas para a produção de intermediários valiosos para biocombustíveis é uma estratégia poderosa e essencial para acelerar o desenvolvimento de processos mais eficientes, econômicos e sustentáveis na indústria de biocombustíveis. Isso promove uma mudança no cenário energético atual, construindo não apenas um legado ambientalmente responsável, mas também uma economia robusta e resiliente, preparada para enfrentar os desafios do século XXI.

## 2. INTRODUÇÃO

Diante da escassez de petróleo e preocupações ambientais, é crucial desenvolver processos eficientes para produzir combustíveis e produtos químicos de forma sustentável. A biomassa vegetal destaca-se como alternativa promissora na produção de biocombustíveis, sendo vantajosa pela ampla distribuição, reservas abundantes e custo reduzido em comparação com combustíveis fósseis. A conversão catalítica da biomassa, oferece benefícios ambientais, reduzindo emissões de gases de efeito estufa. Esses biocombustíveis buscam neutralidade nas emissões, priorizando métodos eficientes de produção sem comprometer as necessidades futuras (HUANG et al., 2024; HUBER; IBORRA; CORMA, 2006; ROMÁN-LESHKOV; CHHEDA; DUMESIC, 2006).

O setor de transportes, majoritariamente dependente de combustíveis não renováveis do petróleo, enfrenta desafios no uso do etanol devido à baixa densidade energética e contaminação por absorção de água. Essas limitações são agravadas pela falta de infraestrutura, restrições na mistura com gasolina e requisitos específicos para automóveis flexíveis. Como alternativa, propõe-se uma estratégia catalítica para converter biomassa renovável em combustível líquido, atendendo às necessidades do setor de transportes. (KEASLING et al., 2021; ROMÁN-LESHKOV et al., 2007)

Os biocombustíveis estão integrados a uma abordagem climática global que busca diminuir as emissões de gases de efeito estufa (GEE) geradas pela utilização de combustíveis fósseis. Essa política visa estabilizar a concentração atmosférica de dióxido de carbono (50 ppmv). A implementação de novas políticas ambientais torna a produção de combustíveis fósseis menos viável economicamente devido aos altos custos associados à redução de suas emissões. Como consequência, abre-se espaço para os biocombustíveis, incentivando sua adoção acelerada e promovendo sua inserção no mercado global (MELILLO et al., 2009)

Nas últimas décadas, estratégias catalíticas foram desenvolvidas para sintetizar intermediários, combustíveis e aditivos a partir de biomassa celulósica, visando reduzir a dependência de carbono fossilizado. O processo envolve reações químicas, como desidratação de açúcares e abertura do anel de furânicos, resultando em misturas de alcanos e éteres adequadas para diesel e combustível de aviação no setor de transportes (YADAV et al., 2024; SHYLESH et al., 2017).

A produção de biocombustíveis hidrocarbonetos verdes oferece compatibilidade com a infraestrutura energética existente, sem exigir modificações nos sistemas de transporte. Esse processo aproveita compostos derivados da biomassa, como celulose e hemicelulose, que são transformados em açúcares C5 e, posteriormente, em compostos furânicos, como o furfural, por desidratação em meio ácido. O furfural, considerado um precursor crucial, desempenha um papel central na fabricação de biocombustíveis de segunda geração. A funcionalidade do grupo carbonila presente nesses compostos promove a formação de ligações C–C, facilitada por reações de condensação aldólica com outras moléculas carbonílicas, como a acetona, resultando em intermediários altamente adequados para a síntese de biocombustíveis para aviação (SERRANO-RUIZ; DUMESIC, 2011; HUBER et al., 2005).

Além disso, a utilização da acetona como matéria-prima nesse processo oferece uma oportunidade significativa de valorização. Apesar de ser amplamente produzida e utilizada na fabricação de plásticos de policarbonato e como solvente, a acetona é frequentemente subutilizada como subproduto em processos industriais, enfrentando desafios de comercialização (ALMANZALAWY et al., 2023). Ao integrá-la à produção de biocombustíveis sustentáveis, promove-se sua inserção em novas cadeias produtivas, agregando valor à indústria química e energética.

A condensação aldólica, inicialmente catalisada por bases homogêneas como hidróxido de sódio e cálcio, gera grandes volumes de águas residuais, causando impactos ambientais adversos e aumentando os custos de produção. Para superar esses desafios, pesquisadores concentram-se no desenvolvimento de novos catalisadores de base sólida, oferecendo vantagens como recuperação facilitada por filtração e reciclagem mais eficiente, contribuindo para a redução de impactos ambientais e eliminando problemas de corrosão (HORA et al., 2014; MARISCAL et al., 2016a).

A simulação detalhada exclusiva da condensação aldólica na produção dos precursores de biocombustível de aviação é crucial, permitindo prever rendimentos, produtividade e gastos anuais antes do desenvolvimento, facilitando a implementação industrial por meio da triagem computacional. A análise técnico-econômica completa e exclusiva da produção de combustível de aviação através da reação de condensação aldólica ainda é pouco explorada (KEASLING et al., 2021; YU; TSAI, 2020). De maneira semelhante, a análise de risco e incertezas desempenha um papel essencial ao fornecer estimativas mais precisas dos parâmetros econômicos, permitindo avaliar os riscos associados e identificar as condições mais favoráveis para a viabilidade econômica do projeto (HU et al., 2016).

O presente trabalho visa realizar a simulação, análise econômica e de risco e incertezas associados a implementação industrial da produção de precursores de biocombustíveis de aviação, através da reação de condensação entre furfural e acetona.

### 3. OBJETIVOS

#### 3.1 Objetivo geral

O presente trabalho tem como objetivo geral avaliar a viabilidade técnica, econômica e de risco da produção de intermediários de combustíveis de aviação pela reação de condensação aldólica entre furfural e acetona, com ênfase na valorização da acetona como matéria-prima, utilizando o simulador de processo Aspen Plus V14.

#### 3.2 Objetivos específicos

- Simular o processo de produção dos intermediários 4-(2-furil)-3-buten-2-ona (FAc) e 1,4-pentadien-3-ona,1,5-di-2-furanil (F2Ac);
- Desenvolver modelos detalhados do processo de produção;
- Investigar diferentes vazões de entrada, diagramas de fluxo de processos (PFD), e configurações de equipamentos para avaliar o impacto nas variáveis de processo e no desempenho econômico;
- Realizar a análise econômica do processo, determinando o preço mínimo de venda (MSP) dos precursores de combustíveis de aviação produzidos; analisando fluxo de caixa líquido, taxa interna de retorno (TIR) e taxa de lucratividade, considerando um payback fixo de 3,6 anos;
- Realizar a análise de riscos e incertezas do processo, avaliando variáveis econômicas relevantes, como valor presente líquido (VPL) e custos operacionais;
- Avaliar o melhor cenário entre as condições estabelecidas.

## **4. REVISÃO DE LITERATURA**

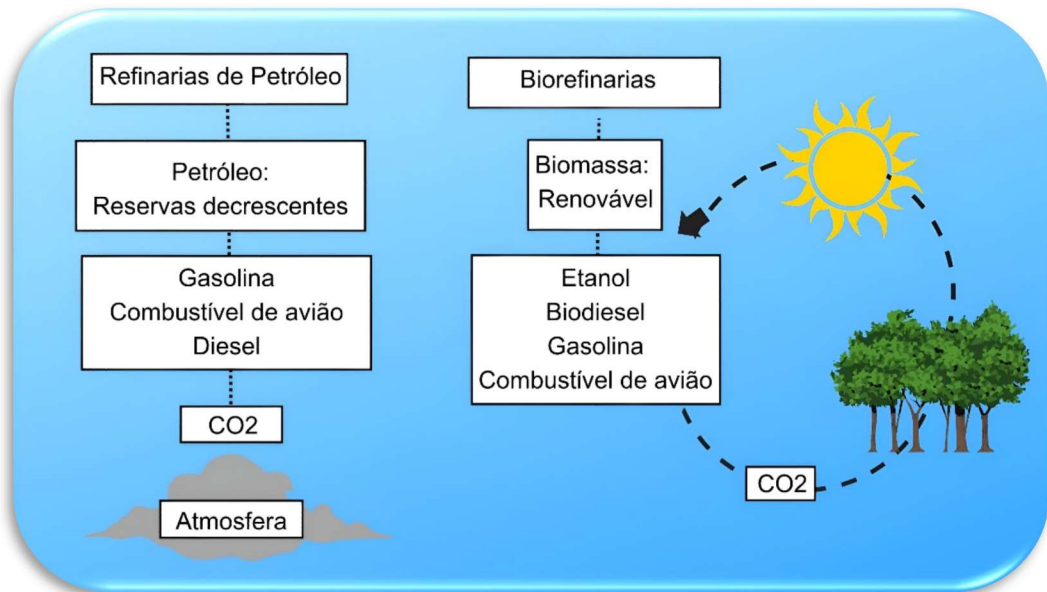
### **4.1 Biocombustíveis de Aviação**

No século XXI, a busca por fontes de energia alternativas é impulsionada pela crescente demanda, escassez de petróleo e preocupações ambientais. Os biocombustíveis surgem como uma opção promissora, oferecendo uma alternativa mais sustentável para o setor de transportes, além de contribuírem para a redução das emissões de CO<sub>2</sub> e apoiarem as economias agrícolas locais. Enquanto os biocombustíveis de primeira geração são derivados de açúcares, amidos e óleos vegetais, a lignocelulose se destaca como uma matéria-prima mais promissora devido à sua abundância e potencial sustentável. No entanto, sua conversão em biocombustíveis enfrenta desafios devido à sua resistência, exigindo processos complexos e dispendiosos (LANGE et al., 2012)

Diante desses desafios e das crescentes preocupações políticas e ambientais relacionadas aos combustíveis fósseis, há um renovado interesse em explorar de maneira mais eficiente os recursos energéticos renováveis. A biomassa, como uma fonte de energia renovável abundante e neutra em carbono, emerge como uma alternativa ideal para a produção de biocombustíveis, utilizando tecnologias catalíticas diversas em comparação aos métodos convencionais das refinarias de petróleo (DE; SAHA; LUQUE, 2015).

A proposta de biorrefinaria segue um processo semelhante, mas com a diferença crucial de utilizar biomassa em vez de petróleo. Essa biomassa, considerada fonte renovável de carbono, pode ser transformada em combustíveis e produtos químicos. Além de fornecer calor e energia, a utilização de derivados de biomassa ajuda a reduzir a emissão de GEE por meio de ciclos do carbono (Figura 2) (ALONSO; BOND; DUMESIC, 2010).

Figura 2: Ciclos de CO<sub>2</sub> para combustíveis derivados do petróleo e biomassa



Fonte: Adaptado de Alonso et al (2010)

A produção de biocombustíveis de alta qualidade para aviação, também conhecidos como SAF (*Sustainable Aviation Fuels*), tem atraído crescente atenção global devido ao impacto ambiental significativo da indústria aeronáutica. Com o aumento das emissões de carbono associado a esse setor, as empresas enfrentam uma pressão cada vez maior para adotar práticas mais sustentáveis e reduzir sua pegada de carbono. Nesse contexto, a Associação Internacional de Transporte Aéreo (IATA) estabeleceu uma meta: alcançar emissões líquidas zero de carbono até 2050, compromisso firmado por suas companhias aéreas associadas (CABRERA; DE SOUSA, 2022; HONG et al., 2025; HE et al., 2021).

Os combustíveis de aviação são complexas misturas de hidrocarbonetos que abrangem diversas classes, como parafina, nafteno e aromáticos. O principal padrão internacional que regulamenta os combustíveis à base de querosene para aviação comercial é o ASTM D1655 (Standard Specification for Aviation Turbine Fuels). Esse padrão estabelece os requisitos técnicos para os combustíveis Jet A e Jet A-1, amplamente utilizados atualmente. O Jet A é predominantemente empregado nos Estados Unidos, enquanto o Jet A-1 é o padrão adotado na maior parte dos outros países (CABRERA; DE SOUSA, 2022; XING et al., 2010). O principal requisito é que os componentes centrais sejam alcanos  $\geq C_{10}$ . Isso torna alcanos ramificados ou

cíclicos C10-C12 e alcanos multi-ramificados C13-C16 adequados como componentes para combustíveis de aviação (NAKAGAWA; TAMURA; TOMISHIGE, 2019).

As políticas públicas implementadas no Brasil desde a década de 1970, através do Proálcool, têm sido cruciais para impulsionar o setor de biocombustíveis. O país tem se destacado internacionalmente devido aos seus programas governamentais, que tem como objetivo elevar a presença dos biocombustíveis no cenário de transporte do Brasil, como o RenovaBio. Essa política pública está estruturada em três pilares principais: 1) Estabelecimento de Metas de Descarbonização; 2) Certificação da Produção de Biocombustíveis; e 3) Implementação de Créditos de Descarbonização (CBIO) (ANP, 2022). Conforme a Resolução ANP nº 856/2021 (Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis 2021).

Através de cálculos padronizados, o ciclo de vida do produto é analisado, gerando certificações e resultando na geração de créditos de carbono (CBio) de acordo com sua eficiência energética e modo de produção, os quais podem ser negociados no mercado, ampliando a lucratividade do setor (MILANEZ et al, 2021).

Os combustíveis de aviação utilizados no Brasil atualmente incluem, Jet-A1 ou QAV. O QAV alternativo é obtido a partir de fontes diversas, como biomassa, resíduos sólidos, carvão e gás natural, utilizando processos específicos e claramente estabelecidos (ANP, 2022).

As normas para os bioquerosenes de aviação são regulamentadas pela Resolução ANP nº 856/2021 (Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis 2021).Essa resolução define as especificações do querosene de aviação JET A, JET A-1, querosenes de aviação alternativos e o querosene de aviação C (JET C), além de estabelecer as exigências relacionadas ao controle de qualidade que devem ser cumpridas pelos agentes econômicos responsáveis pela comercialização desses produtos no Brasil (ANP, 2022).

Deste modo, os esforços mundiais concentrados em diversas tecnologias a fim de acabar com a dependência de combustíveis não renováveis. Percebe-se que, cada vez mais, os biocombustíveis avançam, para que em um futuro próximo sejam as principais rotas alternativas sustentáveis.

## 4.2 Matérias-Primas para Biocombustíveis

A lignocelulose, constituída por celulose, hemicelulose e lignina com cadeias de carbono de C6, C5–6 e C9, respectivamente, possui cadeias mais curtas do que as encontradas no diesel e no combustível de aviação. Todos esses componentes apresentam elevado teor de oxigênio. A produção de diesel e combustível de aviação a partir da lignocelulose demanda extensas conversões químicas. O desenvolvimento de catalisadores eficientes é essencial para realizar essas conversões (NAKAGAWA; TAMURA; TOMISHIGE, 2019).

### 4.2.1 Furfural

Novos métodos estão sendo explorados continuamente na síntese de precursores de combustíveis de alta qualidade, especialmente utilizando compostos furânicos oxigenados derivados de biomassa (HE et al., 2021). Os compostos furânicos, furfural e HMF, são fundamentais na produção de solventes industriais, polímeros e aditivos para combustíveis. As propriedades físico-químicas do Furfural são apresentadas na Tabela 1.

Tabela 1: Propriedades físico-químicas do furfural

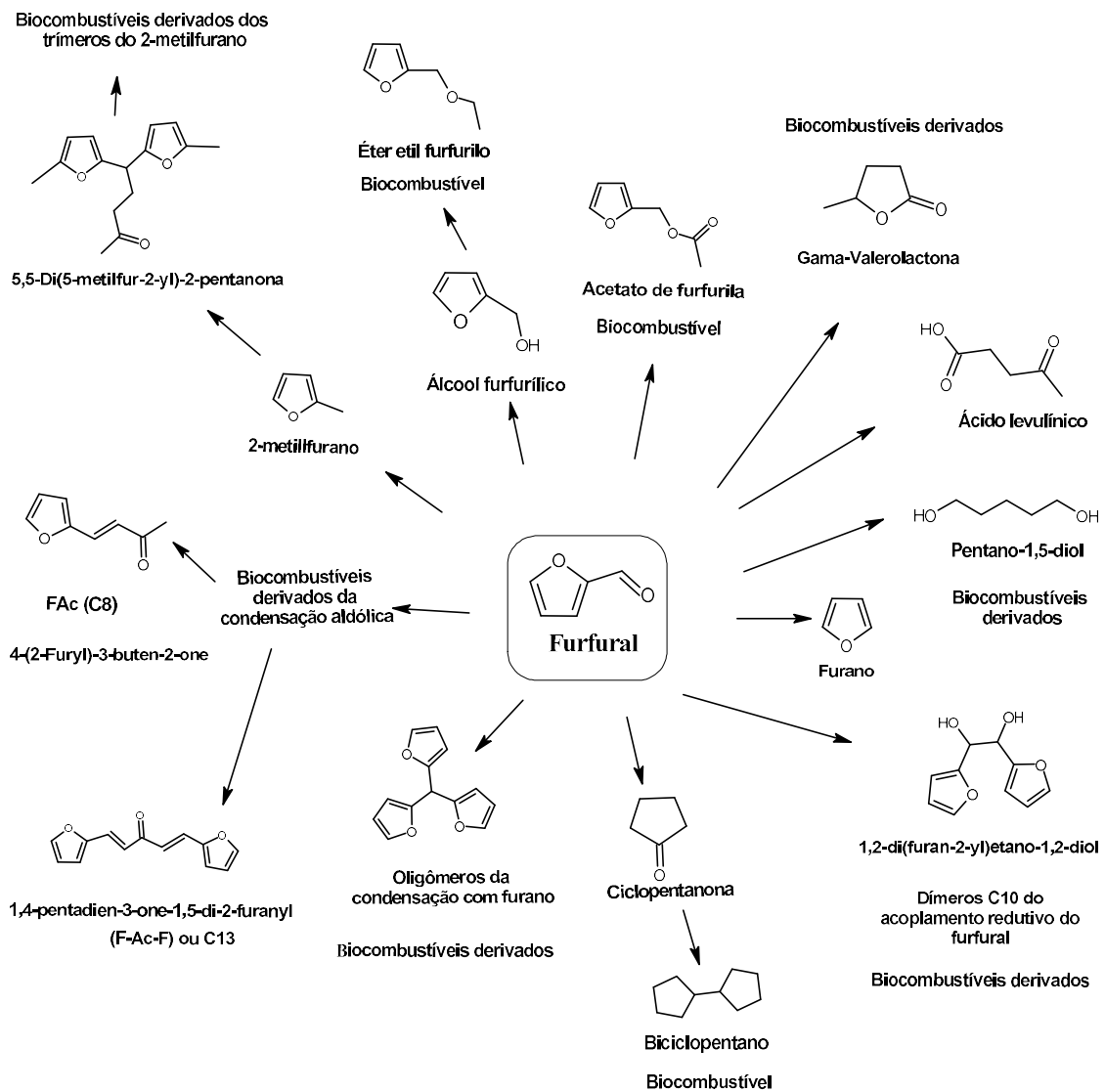
Peso molecular (g/mol)	96,09
Densidade (g/cm <sup>3</sup> )	1,16
Pressão de vapor (mmHg, 25 °C)	2,21
Ponto de ebulição (°C)	161,7
Ponto de fusão (°C)	-36,7
Ponto de fulgor (°C)	60

Fonte: Pohanish. (2012)

O furfural é obtido de forma consolidada a partir de açúcares C5 da xilose e se destaca como um produto químico relevante, a produção em grande escala de HMF, especialmente usando glicose como matéria-prima, enfrenta desafios devido à complexidade do processo. Ressalta-se que o furfural, por si só, não é adequado como combustível para motores devido à sua propensão à polimerização (HUBER; IBORRA; CORMA, 2006; SERRANO-RUIZ; DUMESIC, 2011).

A produção de furfural apesar de relevante, enfrenta desafios, como baixos rendimentos (~50%) devido a reações indesejadas, incluindo formação de huminas, resinificação e fragmentação de xilose. Quimicamente, o furfural é um anel furano heteroaromático com um grupo funcional aldeído, sendo utilizado como solvente seletivo devido ao seu caráter aromático. Tendo como interesse atual sua aplicação como matéria-prima para biocombustíveis e produtos químicos de base biológica, com mais de 80 compostos derivados direta ou indiretamente como descritos na Figura 3 (MARISCAL et al., 2016b).

Figura 3: Resumo dos produtos químicos e biocombustíveis derivados do furfural

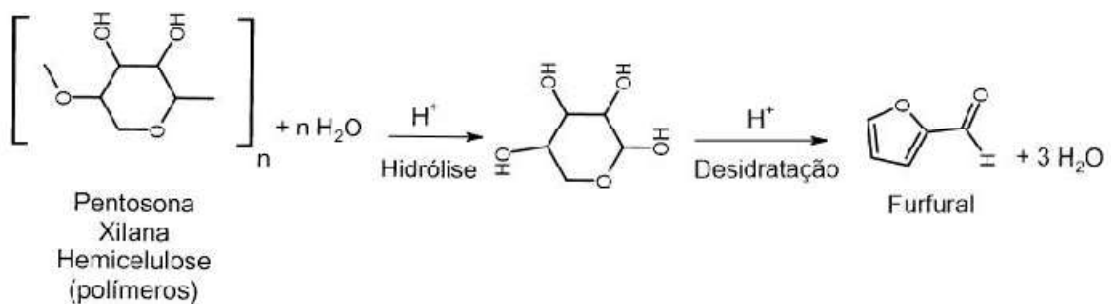


Fonte: Adaptado de Mariscal et al. (2016)

Nesse contexto, o furfural tem ganhado destaque recentemente como um dos produtos químicos de maior valor agregado provenientes da biomassa, sendo identificado como um dos principais produtos gerados em biorrefinarias lignocelulósicas. O furfural é obtido a partir de fontes renováveis agrícolas, como resíduos de culturas alimentares não comestíveis e resíduos de madeira. A China é o maior produtor, contribuindo com mais de 70% da capacidade total de produção. Outros países relevantes na produção incluem a República Dominicana com uma produção anual de 32 mil toneladas e a África do Sul com uma produção de 20 mil toneladas por ano. Somados, esses três países representam aproximadamente 90% da capacidade global de produção de furfural, que totaliza 280 mil toneladas (MARISCAL et al., 2016b).

O processo principal de produção de furfural envolve duas etapas essenciais: a hidrólise dos açúcares da hemicelulose para obtenção de xilose, seguida pela desidratação da xilose para formar furfural, como observado na Figura 4. A primeira etapa apresenta resultados satisfatórios para a reação, no entanto, a segunda etapa resulta na formação de reações colaterais indesejadas, que por consequência contribuem para o baixo rendimento de furfural (COUSIN et al., 2022).

Figura 4: Produção do Furfural



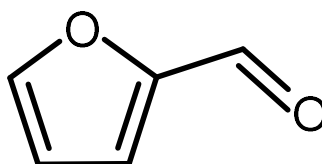
Fonte: Adaptado de COUSIN et al (2022)

Deste modo, diversas rotas químicas, estão sendo estudadas a fim de elevar a produção de combustíveis renováveis, entre elas, a condensação aldólica entre o furfural e a acetona vem ganhando cada vez mais atenção entre os pesquisadores, pelos altos níveis de conversão da reação em precursores para combustíveis de cadeias longas, ideais para a utilização como biocombustíveis de aviação.

Huber et al.(HUBER et al., 2005) introduziram um inovador processo catalítico para converter carboidratos derivados de biomassa em alcanos líquidos (C7-C15), adequados como componentes de combustíveis de aviação e diesel, em um reator de quatro fases. O trabalho utilizou compostos modelo para demonstrar o processo, começando com uma etapa de desidratação para gerar furfural a partir de açúcares C5 e 5-hidroximetilfurfural (HMF) a partir de açúcares C6. Posteriormente, Dumesic e colaboradores (CHHEDA; ROMÁN-LESHKOV; DUMESIC, 2007) desenvolveram um processo bifásico altamente eficiente que produz HMF e furfural com altos rendimentos. Esses compostos reagem com acetona, catalisados por base, em uma etapa de condensação aldólica, gerando precursores de alcanos, como monômeros e dímeros.

A condensação aldólica destaca-se como uma abordagem promissora devido às suas condições suaves e à facilitação por catalisadores ácidos ou básicos, resultando no alongamento das cadeias de carbono e na redução das razões O/C. Essa estratégia tem possibilitado a obtenção de diversos precursores de combustíveis com cadeias de carbono alongadas a partir de derivados furânicos de base biológica, envolvendo uma reação clássica em síntese orgânica com uma rede bem estabelecida de reações, incluindo enolização do grupo carbonila, acoplamento C – C e processos posteriores de desidratação (HE et al., 2021). Na Figura 5, é observado a estrutura molecular do furfural.

Figura 5: Estrutura molecular Furfural

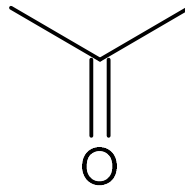


Fonte: Autora, 2024

#### 4.2.2 Acetona

Os processos industriais possuem uma alta dependência da acetona como um dos principais solventes orgânicos. A acetona é utilizada em ampla aplicação como solvente para fibras sintéticas e uma variedade de materiais plásticos, como poliestireno, policarbonato e polipropileno, utilizados na fabricação de garrafas, entre outros produtos. Além disso, a acetona desempenha um papel fundamental nas formulações de tintas e vernizes, sendo essencial em diversas aplicações industriais. Na Figura 6, observa-se a estrutura molecular da acetona (ELFASAKHANY, 2016).

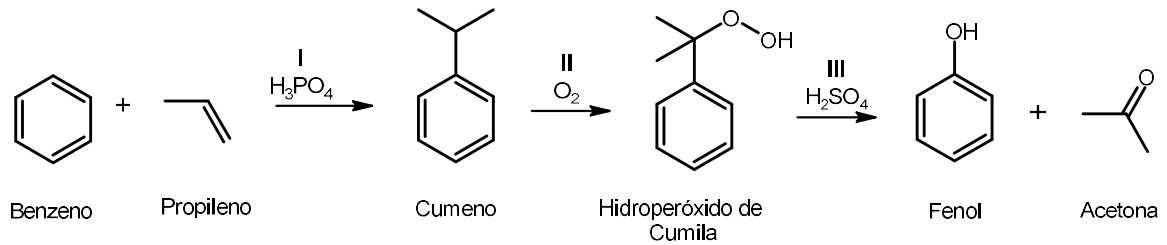
Figura 6: Estrutura molecular Acetona



Fonte: Autora, 2024

O processo industrial de produção da acetona, é apresentado na Figura 7. Na indústria A acetona é produzida principalmente como subproduto da produção de fenol (processo cumeno). Inicialmente o propano é convertido em propileno, predominantemente através do craqueamento a vapor. Em seguida, o propileno reage com benzeno para formar cumeno, que é subsequentemente oxidado produzindo hidroperóxido de cumila, para posteriormente produzir acetona e fenol (LIEW et al., 2022a; ROGOLINO et al., 2023).

Figura 7: Processo industrial de Acetona a partir do Cumeno



Fonte: Adaptado de Vellasco Júnior. (2011)

A acetona mostra potencial no setor de combustíveis, tanto para reduzir emissões como para aprimorar o desempenho dos combustíveis existentes. Desta forma, é considerada um precursor valioso para a produção de diesel verde e substitutos de combustível de aviação. Sua alta concentração de oxigênio contribui para uma melhor qualidade de combustão, aumentando a eficiência do motor e reduzindo a emissão de partículas poluentes. Essas características sugerem que uma alternativa viável tanto do ponto de vista técnico quanto econômico (AGUADO-DEBLAS et al., 2020; LIEW et al., 2022b). As propriedades físico-químicas da Acetona são apresentadas na Tabela 2.

Tabela 2: Propriedades físico-químicas da Acetona

Peso molecular (g/mol)	58,08
Densidade (g/cm <sup>3</sup> )	0,785
Pressão de vapor (mmHg, 25 °C)	231
Ponto de ebulição (°C)	56,08
Ponto de fusão (°C)	-94,90
Ponto de fulgor (°C)	-18

Fonte: Haynes. (2014-2015)

A acetona, possui um grupo nucleofílico em seu carbono alfa, o qual tem a capacidade de formar ligações C – C. Essa característica pode ser aproveitada para gerar hidrocarbonetos de massa molecular mais elevada, semelhantes aos encontrados nos combustíveis atuais para aviação e diesel (ANBARASAN et al., 2012).

De mesmo modo, visando a produção dos biocombustíveis, através da reação de condensação aldólica, a acetona pode ser reaproveitada de processo que a geram em excesso, e que não tenham um destino economicamente mais atrativo. Transformando desta forma, uma opção rentável para diversos processos industriais.

#### **4.3 Tecnologias de Produção de Biocombustíveis:**

Inicialmente, ocorre a condensação aldólica com moléculas contendo carbonila, formando ligações C-C e aumentando a molécula inicial. A acetona, proveniente da biomassa por pirólise rápida ou fermentação é considerada um produto químico valioso, é comumente utilizada como molécula de carbonila nesse processo (DE PAZ CARMONA et al., 2024).

##### **4.3.1 Condensação aldólica**

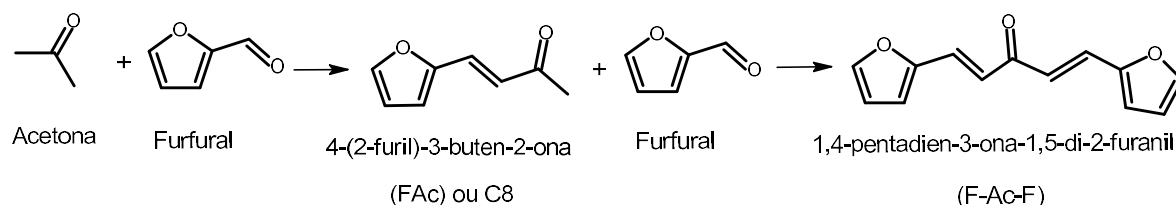
A reação aldólica e a condensação aldólica são reações orgânicas versáteis. Ambas envolvem dois compostos carbonílicos, atuando um como eletrófilo e outro como nucleófilo, podendo formar novas ligações simples ou duplas carbono-carbono, sendo esta última característica distintiva da condensação aldólica. Essas reações desempenham papel fundamental na síntese orgânica devido à capacidade de construir moléculas maiores a partir de menores, realizar ciclizações com controle estereoquímico (PERRIN; CHANG, 2016).

A condensação aldólica é uma reação crucial na produção de compostos orgânicos a partir de biomassa. Glicose e xilose não passam por essas reações devido a reações intramoleculares formadoras de estruturas em anel. Entretanto, ao desidratar glicose e xilose, são obtidos 5-hidroximetilfurfural (HMF) e furfural. Estes compostos, contendo grupos aldeídos, podem condensar-se com outras moléculas, como acetona, diidroxiacetona ou gliceraldeído (ALONSO; BOND; DUMESIC, 2010). A condensação aldólica cruzada desses compostos com acetona resulta na formação de espécies de monômeros (C8-C9) e dímeros (C13-C15) insolúveis em água, que podem passar por subsequente hidrogenação para formar produtos solúveis em água (FABA; DÍAZ; ORDÓÑEZ, 2012; BARRETT et al., 2006).

As reações visam criar hidrocarbonetos de cadeia longa, controlando ligações C-C e reduzindo ramificações indesejadas, desempenhando um papel crucial, aumentando o peso molecular dos hidrocarbonetos a partir da conversão de furanos, permitindo a produção seletiva de combustíveis de aviação e alcanos lineares na faixa do diesel, minimizando ramificações de carbono (ALONSO; BOND; DUMESIC, 2010). A condensação aldólica, uma reação clássica na síntese orgânica, utiliza catalisadores ácidos e básicos para formar compostos oxigenados de cadeia mais longa a partir de derivados furânicos biológicos. Tradicionalmente, soluções homogêneas de hidróxido de sódio em água são eficazes na condensação aldólica.

Recentemente, o interesse tem se voltado para catalisadores heterogêneos na síntese de precursores de combustíveis a partir de derivados furânicos biológicos, devido à facilidade de reutilização e baixa corrosividade. A otimização da reação favorece a produção do monômero insaturado 4-(2-furil)-3-buten-2-ona (F-Ac ou C8), enquanto a combinação de 2 mols de furfural com 1 mol de acetona resulta no dímero 1,4-pentadieno-3-ona-1,5-di-2-furanil (F2Ac ou C13) (XING et al., 2010). Na Figura 8, observa-se a reação de condensação aldólica.

Figura 8: Reação de condensação aldólica



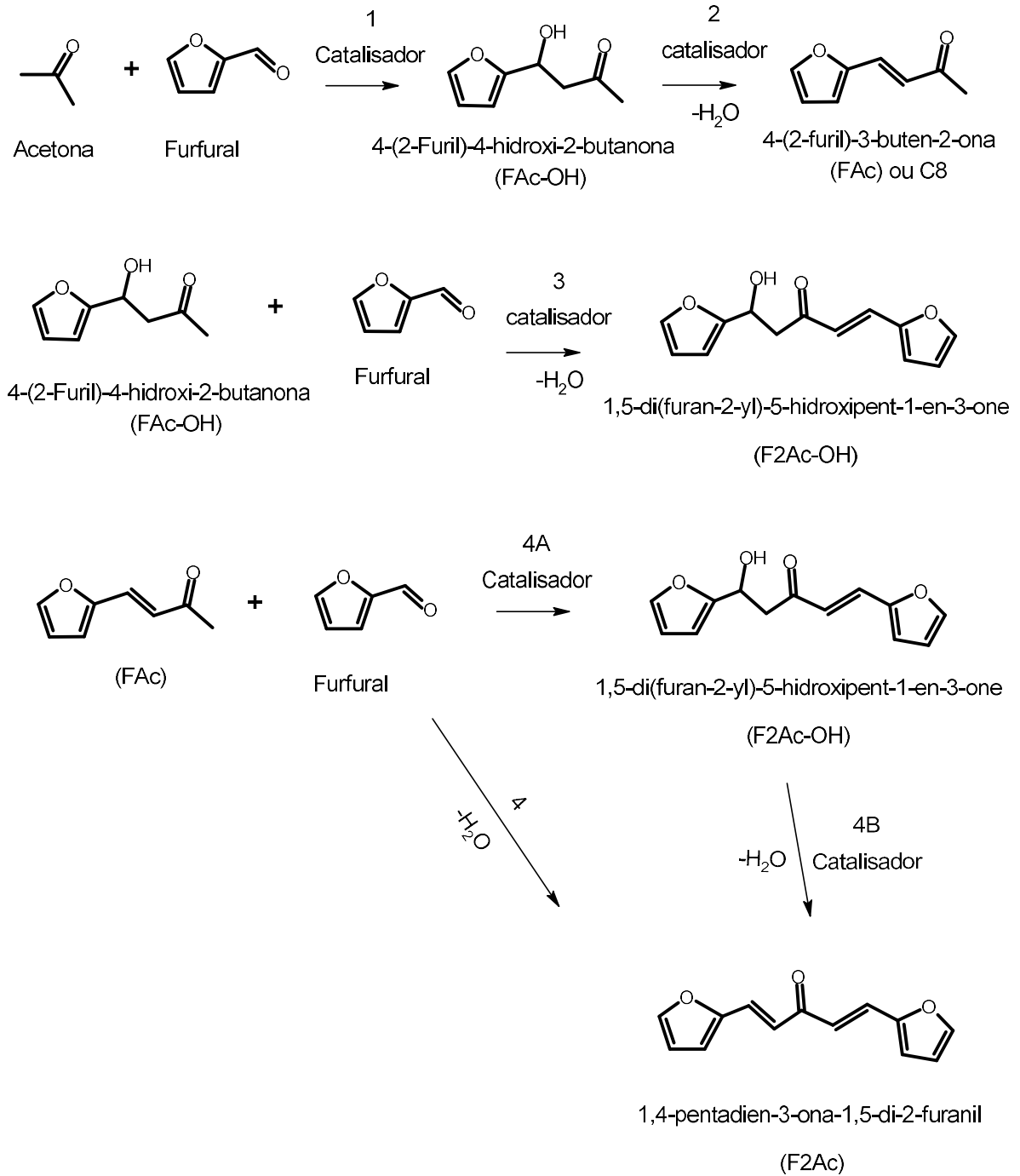
Fonte: Adaptado de Faria et al. (2018)

A seletividade do processo para os compostos é influenciada por fatores como temperatura de reação, solvente, razão molar dos reagentes, estrutura das moléculas reagentes e a natureza do catalisador (CHHEDA; HUBER; DUMESIC, 2007). Estes fatores são essenciais para o sucesso da reação, e também para uma simulação de processo eficaz e assertiva.

Uma rede de reação foi proposta por Kubicka (KOROLOVA et al., 2023) (Figura 9), relatando as rotas de produção completa de C8 e C13, evidenciando a formação de intermediários FAc-OH e F2Ac-OH. Como destacado pelo autor, a reação 3 não é espontânea, deste modo no âmbito da modelagem cinética ela não é considerada termodinamicamente viável, não sendo incluída na modelagem realizada.

De mesmo modo, nos experimentos realizados por Fang et al. (2020) com tempo reacional de 2 horas, apenas os adutos C8 e C13 foram detectados como produto, intensificando a influência do tempo reacional na formação dos produtos de interesse. Ao diminuir o tempo de reação dentro de 1 hora, os autores identificaram a presença do FAc-OH como intermediário do monômero C8. No entanto, os autores não detectaram a presença do precursor do aduto C13, atribuindo o rápido consumo de F2Ac-OH, para a formação direta do produto final.

Figura 9: Rotas de reação deduzidas na condensação aldólica de furfural com acetona



Fonte: Adaptada de Shao et al. (2023)

#### 4.4 Cinética e Condições de Reação

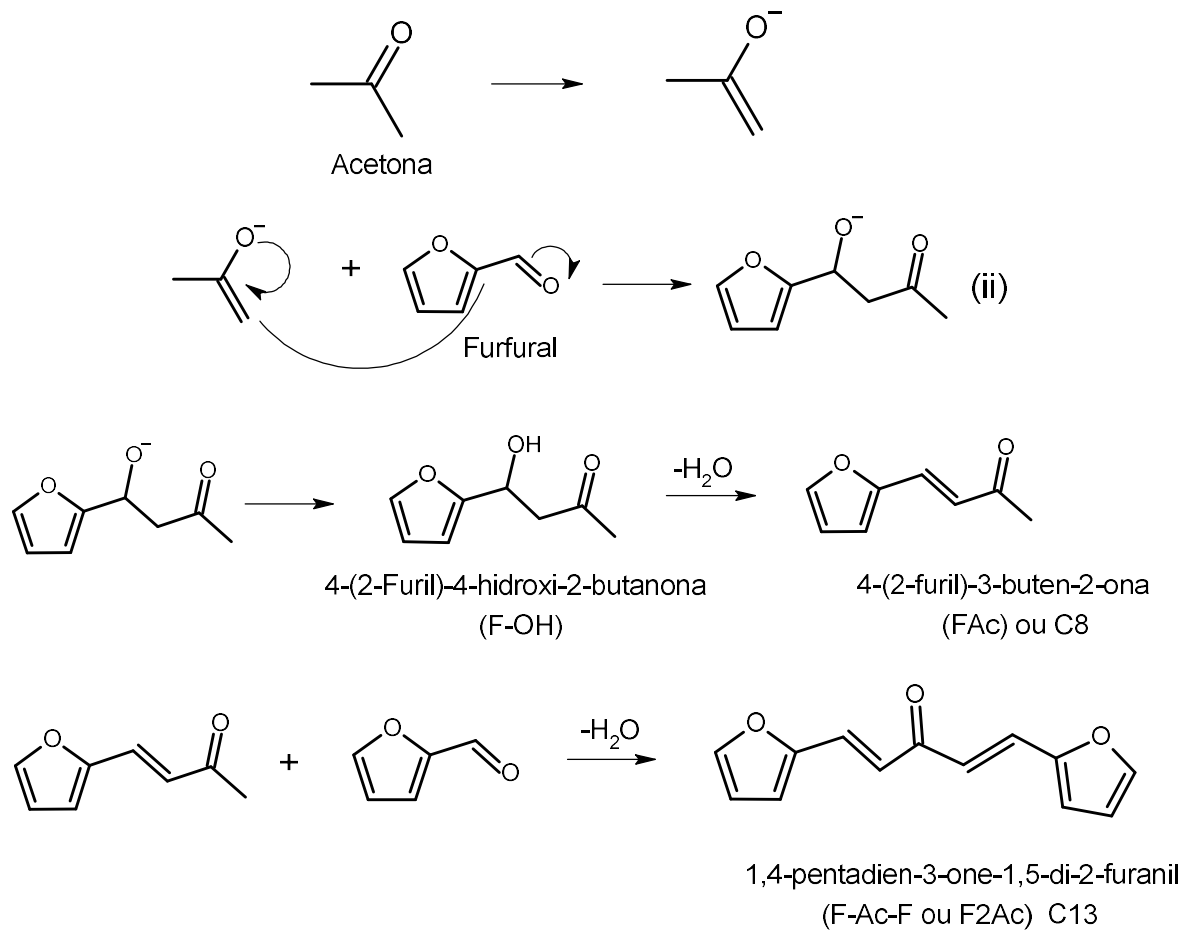
A reação de condensação aldólica em sítios básicos pode ser dividida em três etapas principais, conforme indicado por pesquisas anteriores.

(i) Primeiramente, ocorre a desprotonação, onde sítios básicos removem  $\alpha$ -H de cetonas/aldeídos adsorvidos, gerando um enolato de superfície.

(ii) Em seguida, ocorre a reação de adição nucleofílica entre o enolato e o carbono carbonílico de cetonas/aldeídos adsorvidos adjacentes, resultando na formação de um aduto aldólico.

(iii) Por fim, a reprotonação ocorre, onde o átomo de oxigênio aceita o próton transferido de volta da superfície, formando um intermediário conhecido como 4-(2-Furil)-4-hidroxi-2-butanona (F-OH). Esse intermediário passa por desidratação, resultando no produto monômero insaturado 4-(2-furil)-3-buten-2-ona (FAc) ou C8, que tem solubilidade limitada em água. O FAc pode, então, reagir com uma segunda molécula de furfural, formando o 1,4-pentadieno-3-ona-1,5-di-2-furanil (F2Ac) ou C13, um aduto aldólico desidratado (dímero), que tem solubilidade muito baixa em água devido à sua estrutura não polar, esta reação se dá através da abstração de  $\alpha$ -H do FAc. A concentração de sítios básicos e a força da distribuição de basicidade são fatores cruciais nesse processo (KONG et al., 2021; He et al., 2021; BARRETT et al., 2006). A Figura 10 é ilustrado o mecanismo dessa reação.

Figura 10: Mecanismo da reação de condensação aldólica



Fonte: Adaptada de Barrett et al. (2006); Kong et al. (2021).

#### 4.4.1 Fatores que Influenciam a Velocidade de Reação

Entre os fatores que influenciam na velocidade de reação, destaca-se a temperatura e a concentração de reagentes, bem como o tempo de reação. Como destacado por Ramos et al. (2016), a reação de condensação aldólica entre furfural e acetona, apresenta caráter exotérmico. No entanto, observa-se aumento na conversão dos reagentes com o aumento da temperatura. Deste modo, pode-se deduzir que a conversão do furfural não é limitada pelo equilíbrio termodinâmico (HORA et al., 2014).

Como observado por (BARRETT et al., 2006), apesar da reação ser favorecida com o aumento da temperatura, o rendimento total de carbono na solução aquosa após a condensação aldólica diminui em temperaturas acima de 80°C, provavelmente causadas pela formação de coque no catalisador durante a condensação aldólica. Os autores enfatizam que a temperatura em torno de 80°C, é ideal para a condensação aldólica do furfural, pois nessa faixa ocorre um equilíbrio favorável entre a seletividade para produtos mais pesados e o rendimento global de carbono. Conclui-se que o ajuste da temperatura não só aprimora a conversão dos reagentes, mas também influencia a seletividade para o produto desejado (MEEMANAH et al., 2023).

A seletividade do produto na condensação aldólica é influenciada pela razão molar dos reagentes, desempenhando um papel crucial no controle da reação. Um excesso de acetona, (proporção molar de furfural: acetona de 1:9), favorece a formação de monômeros. Aumentar a proporção para 1:1 resulta em um aumento de 31% na seletividade para espécies de dímeros, com um acréscimo adicional de 12% ao aumentar para 2:1. O aumento da proporção demanda mais tempo na etapa de condensação, indicado por um aumento de 24% na seletividade do dímero ao estender o tempo de reação para 56 horas em comparação com 24 horas (BARRETT et al., 2006).

Assim, para alcançar uma elevada conversão e seletividade na reação, a escolha do catalisador desempenha um papel crucial e essencial para tornar a reação de condensação aldólica furfural-acetona viável e economicamente sustentável a longo prazo.

#### 4.5 Catalisadores e condições de reação

A condensação aldólica, geralmente catalisada por substâncias de base homogênea como hidróxido de sódio e cálcio, produz resíduos aquosos significativos que requerem tratamento, impactando negativamente o meio ambiente e aumentando os custos de produção. Portanto, muitos pesquisadores estão concentrados no desenvolvimento de novos catalisadores sólidos para substituir os catalisadores homogêneos tradicionais (HORA et al., 2014).

O catalisador desempenha um papel crucial nas rotas de conversão, de mesmo modo, o suporte tem a função de obter uma dispersão ideal, estabilizar as espécies metálicas e garantir taxas de transferência de massa suficientes. Considerar as propriedades texturais dos suportes é essencial. Além disso, os materiais de suporte podem ter propriedades ácidas ou básicas, afetando reações, a formação de intermediários e, conseqüentemente, a eficiência, atividade geral e seletividade da transformação (RAMOS et al., 2016). A determinação das condições de reação para cada catalisador, desempenha um papel fundamental para o sucesso da reação, visto que, a partir do conhecimento destas condições é possível determinar atuações estratégicas a fim de maximizar a produção e reduzir gastos operacionais, como energia e produtos químicos.

A Tabela 3, exibe alguns catalisadores para a reação de condensação aldólica entre furfural e acetona, bem como suas condições de reação, descrita pelos pesquisadores.

**Tabela 3:** Catalisadores e condições de reação

<b>Autor</b>	<b>Catalisador</b>	<b>T (°C)</b>	<b>P (bar)</b>	<b>t (h)</b>	<b>F:Ac</b>	<b>C8 (%)</b>	<b>C13 (%)</b>	<b>R(C13) (%)</b>	<b>Solvente</b>
Arhzaf et al. (2021)	Hidrotalcita MgXAl-CO <sub>3</sub>	90	N/I	2	1:10	78	23	21,9	Não
O'neill et al. (2014)	Dolomita ativada	49,9	20	<1	1:1	-	-	60	Água/Metanol
Fang et al. (2020)	Ca/ZSM-5	80	-	2	0.8:1 (Ac/F)	36,6	50,2	60,2	Metanol
Faba et al. (2012)	MgO-ZrO <sub>2</sub>	49,85	10	24	1:1	14,7	60	61,5	Água/Acetato de etila
Sádaba et al. (2011b)	Óxidos mistos de Mg-Zr	60	-	3	1:1	40	5	-	THF
Sádaba et al. (2011a)	Óxidos mistos de Mg-Zr co-precipitados	60	-	3,6	1:1	40	5	-	THF
Hora et al. (2015)	Mg-Al (LDH)	50	-	6	1:1	60	40	-	-
Parejas et al. (2019)	Óxidos mistos de Mg-Al	100	5	3	1:2	42,5	57,6	20,1	Tolueno
Kikhtyanin et al. (2015)	Hidrotalcita Mg/Al calcinada	50	5	<10	1:10	62	33	-	-
Kikhtyanin et al. (2017)	Hidrotalcitas de Mg-Al reconstruídas	25	-	3	1:05	20	25	-	-
Huber et al. (2005)	Óxido de Mg-Al	25	-	10	2:1	2,1	68,6	-	Metanol
Barrett et al. (2006)	Pd/MgO-ZrO <sub>2</sub>	79,85	10	24-26	2:1	15	48	-	Hexadecano

Hora et al. (2014)	Óxidos mistos de Hidrotalcitas Mg-Al	100	-	2	1:10	70	20	-	-
Cho et al. (2018)	Pt@HZSM-5	160	41,4	0,5	1:20	-	-	-	THF
Shao et al. (2023)	Ni/Mg-Al-O/AC	170	45	9	-	67	63	-	THF/Água
Arhzaf et al. (2024)	Hidrotalcitas de Mg-Al com ânions intercamadas	90	-	2	1:10	65	32	30	-

F:Ac= Proporção molar furfural/Acetona

C8 (%) = Seletividade F-Ac (C8)

C13(%) = Seletividade F2Ac (C13)

R(C13) (%) = Rendimento F2Ac (C13)

Os estudos pioneiros de Huber et al. (2005) foram fundamentais para o aprimoramento da reação de condensação aldólica entre furfural e acetona, seguida de hidrogenação com H<sub>2</sub>. O processo, composto por quatro etapas, utiliza um reagente orgânico solúvel em água, hexadecano como solvente, fluxo de gás H<sub>2</sub> e um catalisador sólido de óxido de Mg-Al. No presente trabalho, foi investigada uma abordagem alternativa para aumentar a seletividade do produto F2Ac (proporção 2:1). Uma mistura de furfural e acetona com NaOH foi preparada em um reator de vidro agitado à temperatura ambiente por 10 horas. Após a reação, a solução foi neutralizada com HCl, o solvente evaporado, e o produto final lavado com água para remover resíduos de NaCl.

Barret e Dumesic (2006) desenvolveram um catalisador bifuncional Pd/MgO-ZrO<sub>2</sub> para condensação aldólica e hidrogenação. Após ciclos de reação, houve uma perda de seletividade, mas ela foi recuperada com reciclagem e etapa intermediária de calcinação a 873 K. Experimentos com óxidos mistos de Mg-Al para a condensação aldólica entre HMF e acetona, semelhantes aos realizados por Huber et al., (2005), mostraram perda significativa de atividade, mesmo após calcinação. Quando misturados com Pd/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> para reação de hidrogenação, houve redução na seletividade e no rendimento total de carbono, indicando um efeito negativo deste catalisador no desempenho do catalisador misto de Mg-Al.

Hora et al. (2014) investigaram a condensação aldólica em fase líquida entre furfural e acetona, utilizando catalisadores de base sólida, como hidrotalcitas de Mg-Al e óxidos mistos de Mg-Al. O estudo avaliou o impacto da calcinação e de diferentes métodos de reidratação das hidrotalcitas no rendimento dos produtos. Os resultados mostraram que a temperatura e o tempo de reação foram fatores cruciais para a conversão de furfural, com melhores resultados em temperaturas mais altas. O catalisador HTC 3:1 apresentou o melhor desempenho, favorecendo a formação dos produtos desejados (FAc e F2Ac). No entanto, a reidratação ex situ reduziu tanto a conversão de furfural quanto a seletividade dos produtos, efeito observado em várias condições de temperatura.

No contexto da otimização de reações químicas, Cho et al. (2018) desenvolveram um catalisador ácido bifuncional capaz de conduzir simultaneamente as reações de condensação aldólica e hidrogenação. De forma semelhante, Barrett et al. (2006) utilizaram catalisadores nanoparticulados de Pt encapsulados em zeólitas (HZSM-5) para realizar essas reações de maneira eficaz em um único recipiente. Esse processo resultou na formação do aduto aldólico hidrogenado. Além disso, como relatado pelos autores, os catalisadores suportados facilitaram a hidrogenação do furfural antes da ocorrência da condensação aldólica. Contudo, apenas o produto C8 hidrogenado (Fac-HH) foi detectado, enquanto o produto C13, derivado da condensação aldólica entre FAc e furfural, não foi identificado. Os autores atribuíram essa ausência à restrição espacial imposta pelos poros presentes na topologia das zeólitas MFI.

Shao et al. (2023) sintetizaram catalisadores bifuncionais para realizar, em um único reator, a condensação aldólica e a hidrogenação, como descrito por Cho et al. (2018) e Barrett et al. (2006). A condensação foi mais eficiente na fase aquosa, mas a baixa solubilidade dos condensados nessa fase prejudicou a hidrogenação, reduzindo o rendimento de alcanos. Para resolver esse problema, os autores propuseram um sistema de solvente bifásico (fase aquosa e tetrahidrofurano, na proporção 2:1), otimizando a produção de alcanos na faixa de combustíveis de aviação. O catalisador Ni/Mg-Zr-O/AC alcançou rendimento de 75,6% e manteve desempenho após cinco reutilizações.

Arhzaf et al. (2024) investigaram o uso de hidrotalcitas calcinadas de Mg-Al para a reação de condensação aldólica entre furfural e acetona, utilizando ânions intercalados de nitrato (HT-NO<sub>3</sub>), carbonato (HT-CO<sub>3</sub>) ou acetato (HT-CH<sub>3</sub>COO). Os catalisadores com ânion acetato (cHT-CH<sub>3</sub>COO) ou carbonato (cHT-CO<sub>3</sub>) demonstraram maior basicidade e atividade catalítica. Entre eles, o cHT-CH<sub>3</sub>COO apresentou a maior seletividade para o produto F2A (32%), superando o cHT-CO<sub>3</sub> (18%). Além disso, os autores destacaram vantagens importantes dos catalisadores de hidrotalcita, como baixo custo de síntese e alta estabilidade térmica.

No presente estudo, a zeólita foi selecionada como catalisador para a reação de condensação aldólica entre furfural e acetona, devido à sua comprovada eficiência catalítica, conforme relatado por Choi et al. (2018) e Fang et al. (2020). A metodologia reacional adotada será a descrita por Fang et al. (2020), utilizando o catalisador Ca/ZSM-5 e sua respectiva cinética reacional.

Introduzido em 1756 por Crönsted, o termo "zeólita" refere-se a minerais naturais ou sintéticos formados por aluminossilicatos hidratados de metais alcalinos e alcalino-terrosos. Derivado do grego *zeo* (ebulir) e *lithos* (pedra), o nome alude ao vapor d'água liberado quando aquecidos. Uma característica marcante das zeólitas é sua alta porosidade, formada por canais e cavidades regulares (3-13 Å), o que resulta em uma área superficial interna significativamente maior que a área externa (FOLETTTO; KUHNEN; JOSÉ, 2000).

As zeólitas são amplamente reconhecidas como materiais ideais para encapsulamento, devido à sua elevada estabilidade térmica e química, estrutura microporosa bem definida e capacidade de incorporar diferentes tipos de sítios ácidos, o que confere alta versatilidade catalítica (CHO et al., 2018). Parte da família pentasil, a ZSM-5, cujo nome deriva de *Zeolite Socony Mobil*, possui abertura de poros de aproximadamente 5 Å e se distingue pelo elevado teor de silício em sua composição (Si/Al > 15). Graças à sua alta seletividade catalítica, estabilidade térmica e resistência a condições ácidas, a zeólita ZSM-5 é amplamente utilizada na indústria e tem sido investigada em diferentes condições de síntese para otimização de suas propriedades (FOLETTTO; KUHNEN; JOSÉ, 2000). ZSM-5 é caracterizada por um sistema de canais tridimensionais interconectados, alta área superficial externa e notáveis efeitos de seletividade, propriedades que a tornam um material de destaque para diversas aplicações catalíticas (SU et al., 2022).

## 4.5 Simulação computacional

As ferramentas computacionais tornaram-se indispensáveis nos estudos modernos, oferecendo insights sobre a funcionalidade de sistemas físico-químicos complexos e possibilitando o desenvolvimento, a análise e a otimização desses sistemas (GARUD; MARIAPPAN; KARIMI, 2019).

Em particular, a simulação computacional desempenha um papel central, podendo ser aplicada tanto na etapa de construção do modelo quanto após sua finalização. Durante a construção, ela auxilia na investigação de aspectos específicos do comportamento do sistema, permitindo avaliar a adequação do modelo proposto por meio da comparação entre resultados simulados e dados experimentais. Em modelos completos e validados, a simulação fornece informações valiosas sobre o comportamento do sistema, contribuindo para sua descrição, previsão e compreensão aprofundada (COBELLI; CARSON, 2019).

No contexto da engenharia química, uma representação precisa do design e das operações de uma planta é essencial para aprimorar seu desempenho. Ferramentas de simulação como o Aspen Plus permitem modelar processos, proporcionando insights que auxiliam no desenvolvimento de projetos mais eficientes e na otimização operacional. A produção dos fluxogramas de processos visa gerar os balanços de massa e energia necessários para calcular as demandas de matérias-primas, consumíveis, utilidades e energia (MONCADA; EL-HALWAGI; CARDONA, 2013; ASPEN TECH, 2023).

O Aspen Plus destaca-se como uma solução completa para resolver desafios críticos de engenharia e operação ao longo do ciclo de vida de processos químicos, sendo amplamente reconhecido por seu extenso conjunto de dados de propriedades físicas desenvolvido em parceria com o *National Institute of Standards and Technology* (NIST) (ASPEN TECH, 2023). Desta forma, o Aspen Plus é amplamente utilizado na engenharia química para o desenvolvimento de processos de produção de diversos produtos, consolidando-se como uma ferramenta essencial em simulações de processos (HAAS et al., 2006).

#### 4.6.1 Modelos termodinâmicos

Modelos termodinâmicos são ferramentas indispensáveis para a previsão de propriedades fundamentais, como entalpia e equilíbrio de fases. Eles se dividem em categorias, incluindo equações de estado, coeficientes de atividade e modelos empíricos ou projetados para sistemas específicos. A escolha do modelo adequado requer a consideração de variáveis como condições de pressão e temperatura, composição química do sistema e a disponibilidade de dados experimentais. Esses modelos não apenas auxiliam na compreensão detalhada do comportamento do sistema, mas também garantem que todas as reações simuladas respeitem o estado de equilíbrio (TILLMAN; DUONG; HARDING, 2012).

No contexto da simulação, a seleção de modelos termodinâmicos adequados é crucial para interpretar o sistema de forma realista e garantir resultados confiáveis. Essa escolha tem impacto direto na qualidade dos resultados e pode influenciar significativamente as conclusões de um estudo. Em alguns casos, é necessário realizar etapas preliminares, como estimar propriedades físicas de componentes ausentes na biblioteca do software ou determinar parâmetros com base em dados experimentais. Além disso, o modelo pode ser aplicado a todo o fluxograma ou configurado para unidades específicas do processo, sendo que a personalização das opções termodinâmicas em nível de unidade frequentemente aumenta a precisão dos resultados. Assim, o uso de uma base termodinâmica sólida é indispensável para modelagens avançadas e análises detalhadas (DIMIAN; BILDEA; KISS, 2014; WILHELMSSEN et al., 2017).

Modelos desenvolvidos para descrever propriedades termodinâmicas de misturas fluidas frequentemente utilizam dados experimentais de substâncias puras e misturas binárias como base. Com essas informações, tornam-se capazes de prever propriedades de misturas mais complexas. Entre os modelos mais utilizados estão os baseados na energia de Gibbs em excesso, como UNIQUAC e NRTL, além das equações de estado (EoS), que oferecem ampla aplicabilidade e confiabilidade preditiva (JIRASEK et al., 2022). No presente trabalho, o modelo termodinâmico NRTL foi utilizado, visando o melhor comportamento do sistema.

#### 4.6.1.1 Modelo Non-Random Two Liquids (NRTL)

Originalmente desenvolvido por Renon e Prausnitz (1966 e 1969), o NRTL foi criado para aperfeiçoar a equação de Wilson, viabilizando a descrição simultânea de equilíbrios líquido-vapor (VLE) e líquido-líquido (LLE), além de propriedades como calor de mistura e coeficientes de atividade em misturas binárias e multicomponentes. Estudos comparativos indicam que sua precisão na previsão da energia de Gibbs em excesso é superior a outros modelos, ao considerar as diferenças entre dados experimentais e calculados (RENON, 1985).

O modelo NRTL, fornece uma abordagem empírica eficiente para descrever equilíbrios de fases. Esse modelo pode ser interpretado como uma equação para representar a energia de Gibbs em excesso em misturas multicomponentes, utilizando parâmetros ajustáveis (RENON; PRAUSNITZ, 1968), como observado na Equação 1.

$$\frac{g^E}{RT} = x_1 x_2 \left[ \frac{\tau_{21} G_{21}}{x_1 + x_2 G_{21}} + \frac{\tau_{12} G_{12}}{x_2 + x_1 G_{12}} \right] \quad (\text{Eq.1})$$

O coeficiente de atividade presentes em uma mistura binária, é calculado pelo modelo termodinâmico, como apresentado nas Equações 2-5. As frações molares dos compostos são representados na equação pelos termos  $x_1$  e  $x_2$ . Os parâmetros de interação do modelo NRTL desempenham um papel fundamental no processo de regressão. Eles definem as interações locais associadas à energia livre de Gibbs em excesso, utilizadas para calcular o coeficiente de atividade  $\gamma$ .

$$\ln \gamma_1 = x_2^2 \left[ \tau_{21} \left( \frac{G_{21}}{x_1 + x_2 G_{21}} \right)^2 + \frac{\tau_{12} G_{12}}{(x_2 + x_1 G_{12})^2} \right] \quad (\text{Eq.2})$$

$$\ln \gamma_2 = x_1^2 \left[ \tau_{12} \left( \frac{G_{12}}{x_2 + x_1 G_{12}} \right)^2 + \frac{\tau_{21} G_{21}}{(x_1 + x_2 G_{21})^2} \right] \quad (\text{Eq.3})$$

$$G_{12} = \exp(-\alpha_{12} \tau_{12}) \quad (\text{Eq.4})$$

$$G_{21} = \exp(-\alpha_{21} \tau_{21}) \quad (\text{Eq.5})$$

Sendo  $\alpha$  o fator de aleatoriedade, e  $\tau$  o parâmetro de interação de energia binária (YI et al., 2024). Os coeficientes de interação binária ( $a_{12}, \tau_{12}, \tau_{21}$ ) são dependentes da temperatura, e necessitam de um conjunto de parâmetros obtidos experimentalmente ( $b_{12}, b_{21}, c_{12}, c_{21}, d_{12}, d_{21}, e_{12}$  e  $e_{21}$ ), onde são calculados pelas Equações 6 a 8.

$$\tau_{12} = a_{12} + \frac{b_{12}}{T} + e_{12} \cdot \ln(T) + f_{12} \cdot T \quad (\text{Eq.6})$$

$$\tau_{21} = a_{21} + \frac{b_{21}}{T} + e_{21} \cdot \ln(T) + f_{21} \cdot T \quad (\text{Eq.7})$$

$$a_{12} = c_{12} + d_{12}(T - T^{\text{ref}}) \quad (\text{Eq.8})$$

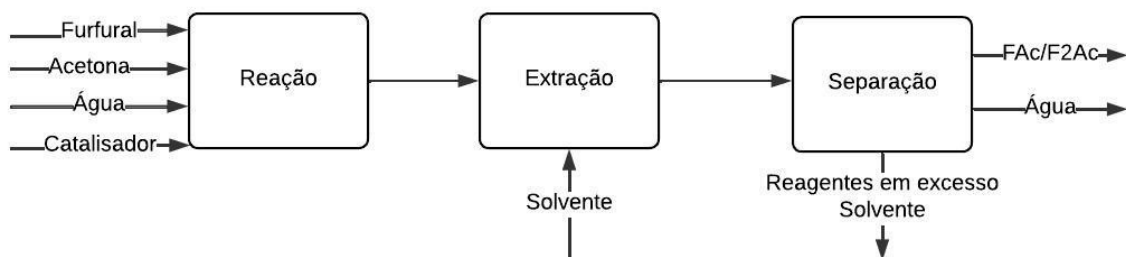
## 5. MATERIAL E MÉTODOS

### 5.1 Simulação Computacional

A simulação do processo de produção dos intermediários de combustíveis de aviação (FAc e F2Ac) a partir da reação de condensação aldólica entre furfural e acetona, utilizando catalisador heterogêneo foi desenvolvida utilizando o simulador Aspen Plus, disponível no Laboratório de Simulação, Projetos e Catálise do Departamento de Química na Universidade Federal de Viçosa.

O processo de condensação aldólica para a produção de intermediários de biocombustíveis de aviação possui três etapas principais: reacional, extração e separação, conforme ilustrado na Figura 11. A simulação computacional dessas etapas permite identificar os pontos críticos do processo de produção, além de possibilitar a otimização das fases, visando a melhoria do desempenho e eficiência da planta química.

Figura 11: Diagrama de blocos das etapas principais proposta para a simulação de produção de intermediários de biocombustíveis de aviação



Fonte: Autora, 2025

A simulação computacional foi estruturada em dois conjuntos de cenários base. O primeiro conjunto consistiu em duas simulações que consideraram a vazão mássica original de 10957,7 kg/h seguindo a metodologia estabelecida por Yu et al (2020), porém, com diagrama de fluxo de processos (PFD) diferentes. O segundo conjunto também incluiu duas simulações com PFD diferentes, mas com um aumento de 25% na vazão mássica original (vazão modificada: 13.697,1 kg/h). A variação da vazão foi adotada com o objetivo de realizar uma análise de sensibilidade, avaliando o impacto desse parâmetro no desempenho econômico do processo.

Durante a execução das simulações, foi necessário desenvolver um novo conjunto de simulações, ajustando as configurações dos equipamentos para remover o líquido refrigerante adicionado automaticamente pelo simulador na etapa anterior. Isso ocorreu porque, devido às baixas pressões em alguns equipamentos, como as colunas de destilação, o simulador adicionou Freon-12 para facilitar a condensação dos compostos. Nessas condições, a temperatura necessária para a condensação era muito baixa, exigindo o auxílio de um fluido refrigerante.

Com essa modificação, eliminou-se uma variável que aumentava significativamente os custos operacionais relacionados às utilidades. O novo conjunto possui as mesmas configurações do conjunto anterior (duas simulações com vazões mássicas originais e PFD diferentes, e duas simulações com vazões mássicas com acréscimo de 25% em cada reagente e PFD diferentes). A Figura 12 exibe um fluxograma explicativo da metodologia proposta referente as simulações realizadas.

Figura 12: Fluxograma de blocos referente a proposta metodológica das simulações

<b>Simulação base</b>		<b>Simulação modificada</b>	
Vazão mássica original	Vazão mássica aumento 25%	Vazão mássica original	Vazão mássica aumento 25%
Simulação 1	Simulação 2	Simulação 5	Simulação 6
Simulação 4	Simulação 3	Simulação 8	Simulação 7

Para atingir os objetivos deste trabalho, a pesquisa foi conduzida com base em dados e parâmetros obtidos na literatura. Isso permite compreender o comportamento do sistema em um ambiente industrial de larga escala, além de possibilitar a comparação dos resultados com cenários propostos por outros estudos.

### 5.1.1 Configuração do ambiente de simulação

#### 5.1.1.1 Especificação dos componentes

O início da simulação da planta envolveu a escolha dos componentes relacionados ao processo, abrangendo os reagentes e os solventes empregados. No simulador, foram inseridos todos os componentes necessários para as simulações, como reagentes, solventes e produtos, exceto o catalisador, que é considerado fixo no reator. Sua ação é contemplada diretamente nas equações cinéticas e na energia de ativação do próprio reator cinético, dispensando sua inclusão como componente separado.

Na corrente de entrada da matéria-prima no processo, foi inserida a fração mássica de cada reagente baseada nos experimentos conduzida por Fang et al. (2020), como apresentada na Tabela 4. A vazão mássica de entrada adotada segundo Yu et al. (2020).

Tabela 4: Frações mássicas dos reagentes na alimentação

<b>Componente</b>	<b>Fração mássica</b>
Furfural	0,474
Acetona	0,229
Água	0,297

Fonte: Adaptado de Fang et al. (2020)

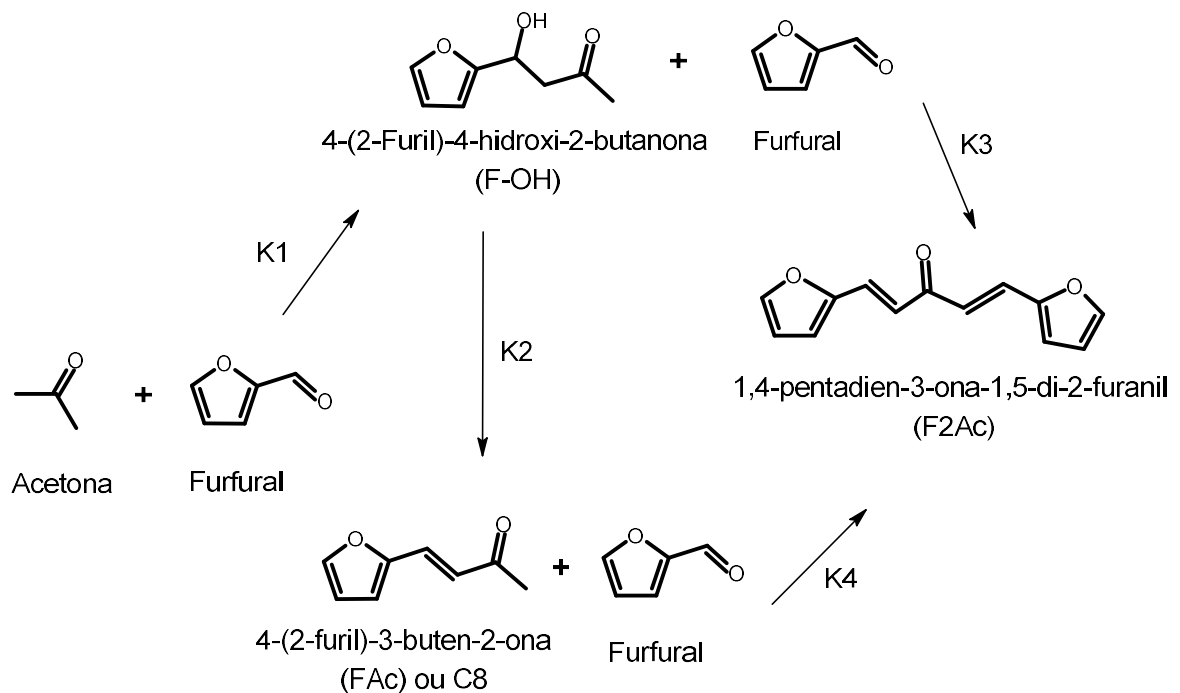
### 5.1.1.2 Pacote Termodinâmico

O modelo termodinâmico NRTL (Non-Random Two-Liquid) foi adotado conforme a metodologia proposta por Yu et al. (2020) e validado neste trabalho por apresentar o melhor desempenho em comparação com outros métodos. Os parâmetros binários estimados pelo simulador foram complementados pelos fornecidos pelo autor, denominados APV140 VLE-IG e USER, respectivamente. Essa complementação se fez necessária, uma vez que o Aspen não disponibilizava todas as interações essenciais para uma análise robusta, exigindo o uso dos parâmetros adicionais propostos pelo autor. No Apêndice A, são apresentados os valores dos parâmetros binários do modelo NRTL.

### 5.1.1.3 Cinética da reação

A malha reacional adotada neste estudo segue a descrição de Fang et al. (2020) e está representada na Figura 13. Com base nessa modelagem e na temperatura de reação empregada, os parâmetros cinéticos fornecidos pelo autor, sob a ação do catalisador heterogêneo Ca/ZSM-5, são apresentados na Tabela 5. Os dados cinéticos do autor foram obtidos em um reator batelada e, portanto, serão utilizados no reator cinético apenas para fins de comparação.

Figura 13: Rota de reação para a reação de condensação aldólica



Fonte: Adaptado de Fang et al. (2020)

Tabela 5: Parâmetros cinéticos da reação

	<b>Ea (kJ/mol)</b>	<b>ko (/min)</b>	<b>R<sup>2</sup></b>
k1	22,1	35,5	0,98
k2	29,2	2876,4	0,99
k3	41,9	37496,4	0,97
k4	10,4	0,485	0,99

Fonte: Fang et al. (2020)

Com base nas rotas de reação propostas pelo autor, cada etapa apresenta uma dependência de primeira ordem em relação à concentração de cada reagente. A evolução detalhada das concentrações de reagentes e produtos é descrita pelas equações diferenciais (Eq. 9, 10, 11, 12 e 13).

$$\frac{dc_{\text{FOH}}}{dt} = k_1 \cdot C_{\text{ACE}} \cdot C_{\text{FF}} - k_2 \cdot C_{\text{FOH}} - k_3 \cdot C_{\text{FOH}} \cdot C_{\text{FF}} \quad (\text{Eq. 9})$$

$$\frac{dc_{\text{FAC}}}{dt} = k_2 \cdot C_{\text{FOH}} - k_4 \cdot C_{\text{FAC}} \cdot C_{\text{FF}} \quad (\text{Eq.10})$$

$$\frac{dc_{\text{F2Ac}}}{dt} = k_3 \cdot C_{\text{FOH}} \cdot C_{\text{FF}} + k_4 \cdot C_{\text{FAC}} \cdot C_{\text{FF}} \quad (\text{Eq.11})$$

$$\frac{dc_{\text{Acetona(ACE)}}}{dt} = k_1 \cdot C_{\text{ACE}} \cdot C_{\text{FF}} \quad (\text{Eq.12})$$

$$\frac{dc_{\text{Furfural (FF)}}}{dt} = k_1 \cdot C_{\text{ACE}} \cdot C_{\text{FF}} + k_3 \cdot C_{\text{FOH}} \cdot C_{\text{FF}} + k_4 \cdot C_{\text{FAC}} \cdot C_{\text{FF}} \quad (\text{Eq.13})$$

A energia de ativação (Ea) e o fator pré-exponencial (Ko) de cada etapa foram calculados localmente de acordo com a equação de Arrhenius (Eq.14).

$$\ln k = \frac{E_a}{RT} + \ln k_0 \quad (\text{Eq.14})$$

#### 5.1.1.4 Cálculos de Conversão, rendimento e seletividade

A metodologia de cálculo do rendimento e da seletividade baseada nos átomos de carbono foi adotada para permitir uma comparação direta com os resultados de Fang et al. (2020). Como esse autor utilizou essa abordagem na apresentação dos resultados reacionais, a mesma metodologia foi aplicada neste trabalho para assegurar a consistência na análise e comparação dos dados.

Considerando a acetona o reagente limitante, a conversão, rendimento e seletividade dos produtos foram calculados através das Equações 15, 16 e 17 respectivamente.

$$\text{Conversão (mol\%)} = \frac{\text{Reagente inicial} - \text{Reagente final}}{\text{Reagente inicial}} \cdot 100\% \quad (\text{Eq. 15})$$

$$\text{Rendimento (mol\%)} = \frac{\text{Átomos de carbono dos produtos}}{\text{Átomos totais de carbono de furfural (t=0) e acetona (t=0)}} \cdot 100\% \quad (\text{Eq. 16})$$

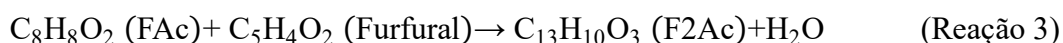
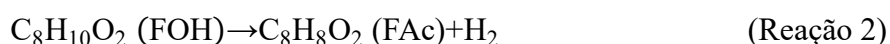
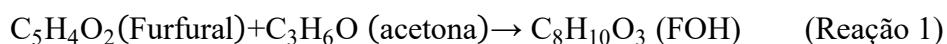
$$\text{Seletividade (mol\%)} = \frac{\text{Átomos de carbono do produto}}{\text{Átomos de carbono totais de furfural e acetona convertidos}} \cdot 100\% \quad (\text{Eq. 17})$$

### 5.1.2 Parâmetros utilizados nas etapas

#### 5.1.2.1 Reação

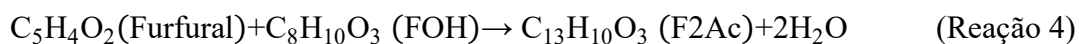
A etapa reacional visa converter os reagentes (furfural e acetona) nos produtos de interesse (FAc e F2Ac) por meio do catalisador heterogêneo Ca/ZSM-5, selecionado por sua alta seletividade em reações catalíticas e estabilidade térmica e ácida (Folletto et al., 2000). Para a simulação do processo, foram adotados os parâmetros de condições operacionais e cinética da reação estabelecidos por Fang et al. (2020), que determinaram as constantes cinéticas por meio de experimentos. As condições operacionais consideradas foram: 2 horas de reação a 80 °C, com uma proporção mássica de furfural-acetona de 1:0,8.

As reações inseridas no simulador (reator cinético) contemplaram as etapas da condensação aldólica entre furfural e acetona, gerando o intermediário 4-(2-Furil)-4-hidroxi-2-butanona (F-OH), como produtos finais, 4-(2-Furil)-3-buten-2-ona (FAc) e 1,4-pentadien-3-ona,1,5-di-2-furanil (F2Ac), conforme descrito nas Reações 1, 2 e 3 respectivamente.



Embora a água não participe diretamente como reagente no sistema reacional, ela pode influenciar tanto a atividade catalítica quanto o equilíbrio das reações envolvidas. Pode-se sugerir que a atividade do catalisador Ca/ZSM-5 seja ativada pela formação de  $\text{Ca}(\text{OH})_2$ , derivada da hidratação de CaO na presença de água. Além disso, a presença de água também pode impactar o equilíbrio da reação, alterando as conversões dos reagentes e os rendimentos dos produtos, uma vez que a água é gerada simultaneamente na reação (FANG et al, 2020).

Conforme a rota de reação descrita por Fang et al. (2020) e ilustrada na Figura 12, uma nova reação foi adicionada ao reator, com o objetivo de incorporar as constantes cinéticas calculadas pelo autor no ambiente de simulação. Nessa etapa, o intermediário (F-OH) reage com o furfural, formando o produto F2Ac por uma rota paralela (Reação 4).



### 5.1.2.2 Extração

Como relatado por Shao et al. (2023), os condensados de acetona e furfural são sólidos, o que torna necessário o uso de solventes para melhorar a transferência de massa nas reações de condensação aldólica e facilitar a separação dos produtos dos reagentes em excesso. O metanol foi selecionado como solvente por suas propriedades orgânicas e seu potencial para otimizar a separação (Huber et al., 2005). Além disso, os produtos gerados têm rendimento superior em solventes orgânicos em comparação com solventes aquosos, devido à baixa solubilidade dos condensados na fase aquosa (SHAO et al., 2023).

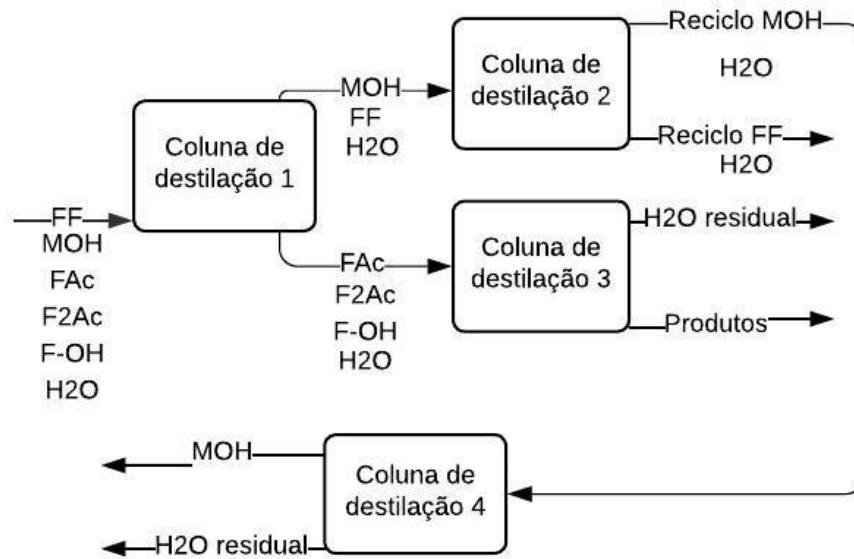
Neste trabalho, utilizou-se a metodologia proposta por Yu et al. (2020), porém foi necessária uma modificação no equipamento para otimizar a etapa e facilitar a separação dos produtos. Assim, foi empregada uma coluna de extração, cujos parâmetros operacionais foram: vazão de metanol (kg/h), temperatura de 25 °C e pressão de 1,01 bar. A vazão de metanol varia de acordo com a necessidade de cada cenário.

### 5.1.2.3 Separação

A escolha do método de separação em processos industriais considera fatores econômicos, nível de pureza e eficiência de recuperação do produto, além de variáveis como capacidade planejada e composição da alimentação. Neste trabalho, colunas de destilação foram empregadas para separar os produtos de interesse e recuperar os reagentes em excesso por meio de ciclos (BERNARDO; DRIOLI; GOLEMME, 2009).

O processo de separação proposto inicia-se após a etapa de extração. Para essa etapa, foram desenvolvidos dois processos de separação diferentes. O primeiro, apresentado na Figura 17, abrange os cenários 1, 2, 5 e 6, enquanto a segunda versão, ilustrada na Figura 18, contempla os cenários 3, 4, 7 e 8. As duas versões possibilitam analisar o impacto da quantidade de equipamentos e da configuração das colunas na análise econômica do processo. Uma vez que, os parâmetros são alterados de acordo com a vazão de alimentação do processo.

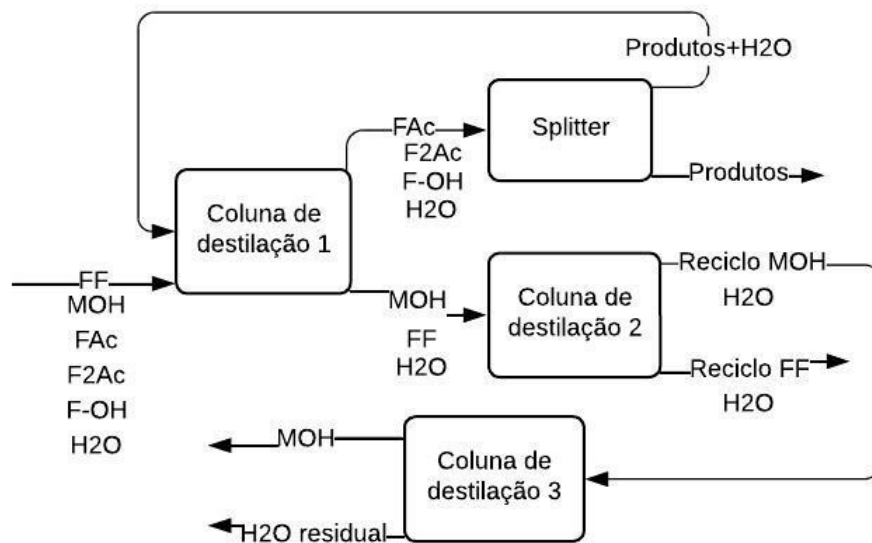
Figura 14: Diagramas de blocos do fluxo de processos cenários 1, 2, 5 e 6



Fonte: Autora, 2025

No primeiro processo, os produtos são separados do furfural e do metanol por destilação (coluna de destilação 1). Em seguida, os produtos passam por outra coluna para remover a água e atingir uma pureza superior a 90% (coluna de destilação 2). O topo da primeira coluna, contendo furfural e metanol, é enviado para uma nova etapa de destilação. Nessa fase, o furfural é separado e retornado à alimentação como reciclo (coluna de destilação 3). O metanol passa por mais uma destilação para remover a água residual e, então, é enviado de volta à coluna de extração como reciclo (coluna de destilação 4). As águas residuais são direcionadas para tratamento, mas essa etapa não será considerada no presente trabalho.

Figura 15: Diagramas de blocos do fluxo de processos cenários 3, 4, 7 e 8



Fonte: Autora, 2025

Na segunda versão do diagrama de fluxo de processos, assim como na primeira, os produtos são inicialmente separados do furfural e do metanol por destilação. Na sequência, a corrente de fundo contendo os produtos passa por um splitter, que direciona uma fração mássica dessa corrente de volta para a coluna de destilação. O objetivo dessa reciclagem é concentrar o produto FAc, que anteriormente apresentava dificuldades de separação devido à sua baixa concentração e ao elevado teor de água. Com essa etapa adicional, foi possível aumentar a concentração do FAc e facilitar sua separação da água, resultando em uma corrente de produto com menor teor de água e pureza superior a 98%.

A fração mássica direcionada pelo splitter foi definida de modo que, após retornar à coluna de destilação, os resultados finais permanecessem próximos aos obtidos em simulações com o PFD-1, que utilizam uma coluna de destilação a mais para essa etapa. Essa escolha assegura a coerência dos resultados.

## 5.2 Análise Econômica

De acordo com Peters et al. (2003), realizar a análise econômica de um fluxograma de processo é crucial para selecionar as condições mais favoráveis para a indústria, já que o objetivo principal de qualquer projeto é garantir sua viabilidade técnico-econômica. Essa análise considera os custos de equipamentos, construção e operação, incluindo matérias-primas, serviços públicos e salários dos operadores. Além disso, deve avaliar a viabilidade futura do processo, considerando possíveis mudanças nos custos operacionais, nos preços dos produtos e nas regulamentações governamentais.

Portanto, a análise econômica deste estudo foi conduzida com base nas metodologias apresentadas por Peters et al. (2003) e Turton et al. (2009), utilizando planilhas eletrônicas como ferramenta principal, onde os valores são divididos em abas. Os custos com equipamentos e utilidades foram estimados a partir das simulações realizadas no software Aspen Plus Economic Analyzer.

Para avaliação econômica das simulações, considerou-se uma capacidade operacional da planta de 7.920 horas por ano, correspondente a 330 dias de operação anuais, com tempo de vida útil de 15 anos. A taxa de retorno sobre o investimento foi estabelecida em 15% ao ano, enquanto o período de retorno esperado (payback) foi definido em 3,6 anos Peters et al. (2003).

Os valores inseridos nas planilhas foram organizados em abas, conforme descrito a seguir:

- I. “Custo fixo de capital”, o custo dos equipamentos utilizados no processo, a fim de calcular o investimento de capital fixo e capital de giro.
- II. "Matéria-prima", abrange os preços de venda dos produtos e os custos das matérias-primas empregadas na simulação, juntamente com as respectivas vazões requeridas. A Tabela 6 traz os custos das matérias-primas, do solvente e do catalisador utilizados nos processos, com valores obtidos na literatura. Para o catalisador, foi considerada uma substituição anual.
- III. “Produtos”, foi adicionado o preço dos produtos com suas respectivas quantidades produzidas.
- IV. “Mão-de-obra” é inserido o custo com operadores do projeto, sendo considerado a quantidade de turnos por dia, média salarial e números de funcionários por turno.

- V. “Utilidades” é informado as utilidades do processo, bem como seu custo unitário e consumo anual, de acordo com suas respectivas unidades.
- VI. “Lucro anual” é calculado através dos dados fornecidos nas outras abas, a receita líquida, bem como os custos operacionais do projeto e fluxo de caixa líquido.
- VII. “Fluxo de caixa” é calculado o fluxo de caixa, bem como cálculos de rentabilidade como, tempo de retorno do investimento (Payback), taxa interna de retorno (TIR) e valor presente líquido (VPL).

Tabela 6: Preços estimados dos materiais utilizados no processo

<b>Material</b>	<b>Preço (\$/kg)</b>	<b>Referência</b>
Furfural	1,4	(LANGE, 2024)
Acetona	0,97	(PENG et al., 2021)
Água	0,0004	(XIE; LI; ZHANG, 2023)
Metanol	0,43	(INTRATEC, 2019)
Ca/ZSM-5	25	(ANEKWE et al., 2024)

### 5.3 Análise de Risco e Incertezas

Diversos fatores associados à avaliação econômica estão sujeitos a risco e incertezas. Entre eles, destacam-se o custo da matéria-prima, que pode variar de acordo com o mercado global, e as incertezas relacionadas à produção, que podem impedir a realização da quantidade planejada. Esses fatores incluem atrasos na obtenção de matérias-primas, variações nos rendimentos produtivos, falhas em equipamentos, limitações nos prazos de entrega e decisões sobre o estoque. As incertezas impactam o desempenho das cadeias de suprimentos e, portanto, devem ser consideradas nas tomadas de decisão (AWUDU; ZHANG, 2012).

Uma técnica amplamente utilizada para análise de risco e incertezas é Simulação de Monte Carlo. Essa técnica estatística é aplicada na previsão de resultados com base na variabilidade de dados de entrada e na incerteza dos parâmetros do sistema. Esses dados são modelados a partir de distribuições probabilísticas ou conjuntos específicos de valores. O método se apoia em amostragens repetidas, permitindo que os parâmetros e variáveis do modelo assumam valores distintos em cada execução (KISSELL, 2021). Essa abordagem enriquece e complementa as análises convencionais, analisando a dispersão dos resultados e a probabilidade de ocorrência de diferentes cenários (KISSELL, 2021; PAXTON et al., 2001; SINGH; PARMAR; KUMAR, 2024).

Neste estudo, a Simulação de Monte Carlo foi utilizada para avaliar as incertezas na viabilidade econômica do processo em cada uma das simulações propostas. Para isso, foram utilizadas planilhas eletrônicas previamente adaptadas para gerar valores aleatórios com base nas distribuições de probabilidade. Foram analisadas duas variáveis: o Valor Presente Líquido (VPL) do projeto e o Custos operacionais, considerando três dados de entrada: o custo das matérias-primas (furfural e acetona) e a capacidade de produção. O furfural e acetona foram selecionados devido ao seu alto custo e consumo no processo produtivo.

Para as análises de risco relacionadas à variação do custo das matérias-primas, foi considerada uma variação de  $\pm 20\%$  nos valores do furfural e da acetona, conforme os dados apresentados na Tabela 7. Quanto à análise de risco em função da capacidade de produção, foram considerados valores que variam  $\pm 20\%$  da capacidade estimada de acordo com cada simulação realizada. As Tabelas 7 e 8 reúnem os valores utilizados nas análises por Monte Carlo.

Tabela 7: Variação do custo da matéria-prima

	<b>Valor inferior</b>	<b>Valor provável</b>	<b>Valor superior</b>
Furfural (\$/kg)	1,12	1,4	1,68
Acetona (\$/kg)	0,78	0,97	1,16

Para calcular a variação da capacidade de produção, utilizou-se o consumo de furfural, assumindo que este insumo é o fator econômico dominante. O furfural é utilizado em maior proporção no processo, o que o torna o principal indicador para vincular a capacidade produtiva ao consumo de matéria-prima.

Além disso, por ter um custo unitário mais elevado, o furfural representa a maior parte dos custos variáveis das matérias-primas. Dessa forma, analisar a capacidade de produção com base no consumo de furfural permite avaliar o impacto econômico mais significativo.

Tabela 8: Variação na capacidade de produção

	<b>Valor inferior</b>	<b>Valor provável</b>	<b>Valor superior</b>
Consumo Furfural (kg/h)	32,77	40,97	49,16

## 6. RESULTADOS E DISCUSSÕES

### 6.1. Especificação dos componentes utilizados nas simulações

Na Tabela 9, estão apresentados os compostos incluídos no ambiente de simulação do Aspen Plus, juntamente com os respectivos nomes utilizados para o desenvolvimento da simulação.

Tabela 9: Lista dos compostos utilizados na simulação

Componente	Tipo	Banco de dados do Aspen Plus
Furfural	Convencional	FURFURAL
Acetona	Convencional	ACETONE
Água	Convencional	WATER
Metanol	Convencional	METHANOL
F-OH	Definido pelo usuário	-
FAc	Convencional	4-(2-FURYL) -3-BUTEN-2-ONE
F2Ac	Convencional	DIFURFURYLIDENEACETONE

Fonte: Autora, 2025

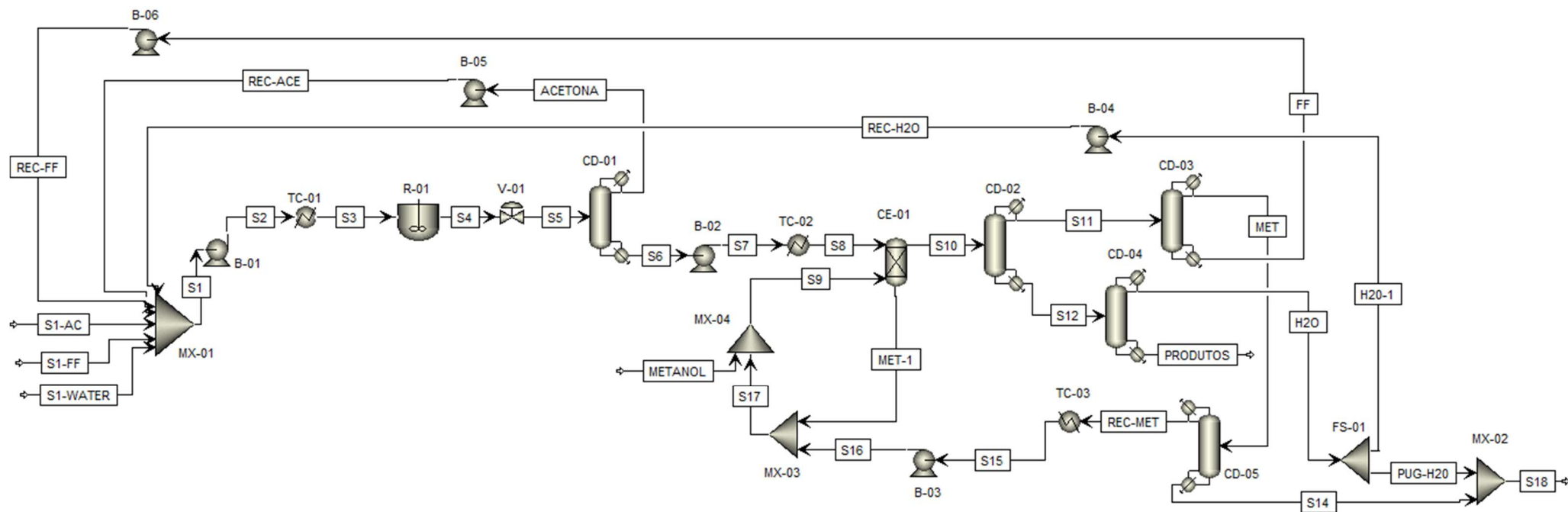
Conforme relatado por Yu et al. (2020), o Aspen Plus possui um extenso banco de dados que lista várias propriedades físicas de componentes e misturas. No entanto, se algum componente não estiver disponível – como ocorreu com o produto intermediário da reação, FOH –, ele pode ser inserido pelo usuário, sendo considerado não convencional, tendo suas propriedades estimadas pelo simulador.

### 6.2 Diagramas de fluxo de processos (PFD)

Como mencionado anteriormente, as simulações base e as modificadas utilizam dois modelos de diagramas PFD. Um que abrange os cenários 1, 2, 5 e 6 (Figura 16), e outra para os cenários 3, 4, 7 e 8 (Figura 17).

Embora os diagramas PFD sejam idênticos dentro de cada grupo de cenários (1, 2, 5, 6; 3, 4, 7 e 8), os resultados de separação dos produtos e a vazão mássica de reciclo variam. Essas diferenças são causadas pelas vazões de entrada características de cada cenário e pela configuração dos equipamentos.

Figura 16: Diagrama PFD-1 para os cenários 1, 2, 5 e 6

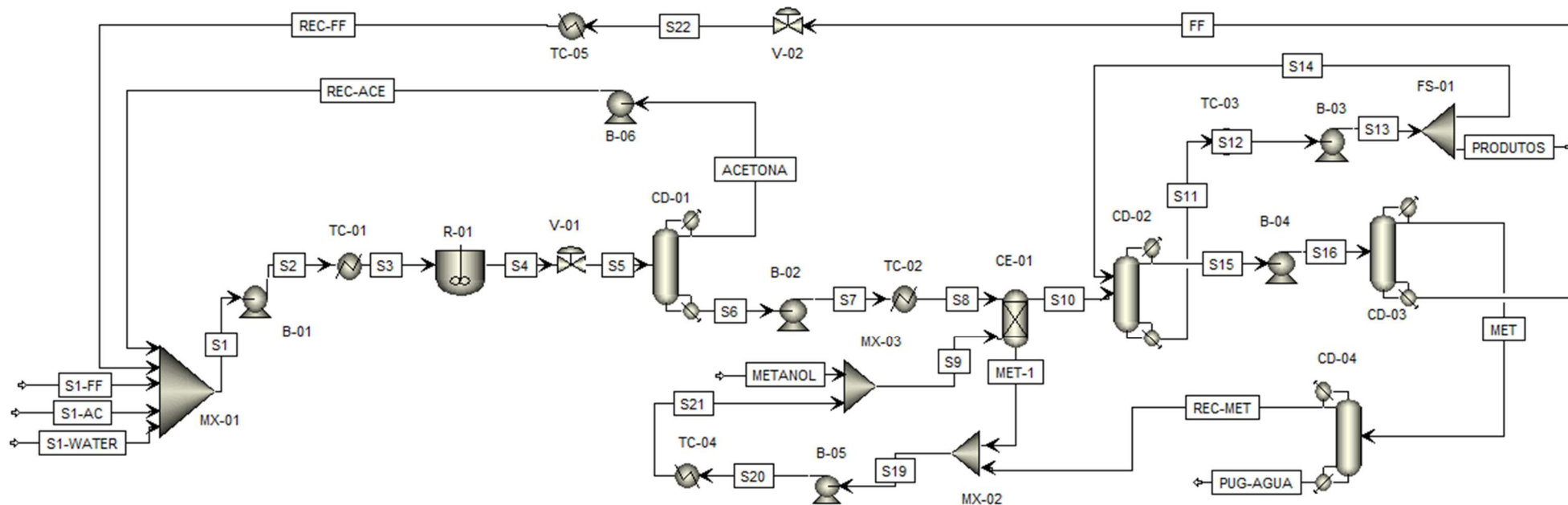


Fonte: Autora, 2025

## TAG dos equipamentos

MX-01	Misturador 1	B-05	Bomba 5	CD-02	Coluna de destilação 2
MX-02	Misturador 2	B-06	Bomba 6	CD-03	Coluna de destilação 3
MX-03	Misturador 3	TC-01	Trocador de calor 1	CD-04	Coluna de destilação 4
MX-04	Misturador 4	TC-02	Trocador de calor 2	CD-05	Coluna de destilação 5
B-01	Bomba 1	TC-03	Trocador de calor 3	CE-01	Coluna de extração 1
B-02	Bomba 2	R-01	Reator 1	FS-01	Splitter 1
B-03	Bomba 3	V-01	Válvula 1		
B-04	Bomba 4	CD-01	Coluna de destilação 1		

Figura 17: Diagrama PFD-2 para os cenários 3, 4, 7 e 8



Fonte: Autora, 2025

TAG dos equipamentos

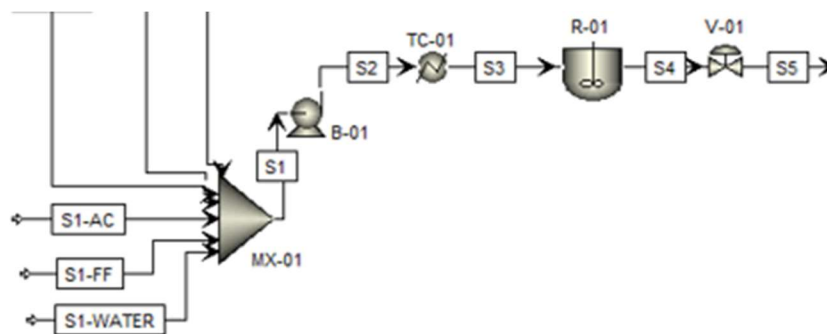
MX-01	Misturador 1	B-06	Bomba 6	V-02	Válvula 2
MX-02	Misturador 2	TC-01	Trocador de calor 1	CD-01	Coluna de destilação 1
MX-03	Misturador 3	R-01	Reator 1	CD-02	Coluna de destilação 2
B-01	Bomba 1	TC-02	Trocador de calor 2	CD-03	Coluna de destilação 3
B-02	Bomba 2	TC-03	Trocador de calor 3	CD-04	Coluna de destilação 4
B-03	Bomba 3	TC-04	Trocador de calor 4	CE-01	Coluna de extração 1
B-04	Bomba 4	TC-05	Trocador de calor 5	FS-01	Splitter 1
B-05	Bomba 5	V-01	Válvula 1		

### 6.3 Reação

Em todos os cenários simulados, as condições reacionais foram mantidas constantes (pressão, temperatura e tempo de residência) para obtenção dos produtos finais: 4-(2-Furil)-3-buten-2-ona (FAc) e 1,4-pentadien-3-ona,1,5-di-2-furanil (F2Ac). O diagrama PFD desta etapa também foi mantido igual para todos os cenários.

A etapa reacional (Figura 18) inicia-se com a mistura das matérias-primas (furfural, água e acetona) no misturador MX-01. Essa mistura é então bombeada (B-01) e aquecida no trocador de calor (TC-01) até atingir as condições operacionais, sendo em seguida enviada ao reator cinético (R-01), onde ocorre a reação de condensação aldólica. O reator opera a 80 °C, 20 bar e tempo de residência de 2 horas, conforme metodologia proposta por Fang et al. (2020). Para fins de simulação, considerou-se que o catalisador já está fixo no interior do reator. Após a reação, a mistura reacional passa por uma válvula de redução de pressão (V-01) para despressurizar a corrente até 1,01 bar.

Figura 18: Diagrama PFD da etapa de reação



Fonte: Autora, 2025

Os resultados calculados de conversão, rendimento e seletividade foram semelhantes em todos os cenários analisados, conforme detalhado na Tabela 10.

Tabela 10: Resumo dos resultados de conversão rendimento e seletividade para os cenários produzidos

	Conversão	Rendimento (%)		Seletividade (%)	
		FAC	F2Ac	FAC	F2Ac
Cenário 1	74%	19,94	71,25	21,85	78,09
Cenário 2	74%	19,93	71,26	21,84	78,09
Cenário 3	74%	19,93	71,25	21,84	78,09
Cenário 4	74%	19,93	71,26	21,84	78,09
Cenário 5	74%	19,95	71,25	21,88	78,09
Cenário 6	74%	19,95	71,28	21,86	78,10
Cenário 7	74%	19,93	71,26	21,84	78,09
Cenário 8	74%	19,93	71,27	21,83	78,10

Fonte: Autora, 2025

Os resultados apresentaram grande similaridade entre os cenários avaliados, o que pode ser explicado pelo uso dos mesmos dados cinéticos, além de parâmetros operacionais e de reação idênticos, como temperatura, pressão, tempo de residência e razão molar entre os reagentes no reator. De mesmo modo, como a vazão de entrada e o tempo de retenção foram mantidos constantes, os valores de conversão permaneceram inalterados. As pequenas diferenças observadas são atribuídas às variações nos fluxos de reciclo de cada simulação.

Fang et al. (2020) relataram uma conversão de 87,5% para a acetona, com rendimentos de 38,4 mol% para FAC e 60,2 mol% para F2Ac, ao investigar a reação de condensação aldólica em escala laboratorial para a produção de intermediários de combustíveis, avaliando diferentes condições de reação.

No presente trabalho, a conversão média da acetona foi de 74%, com rendimentos médios de 19,94 mol% para FAC e 71,26 mol% para F2Ac. A seletividade média obtida foi de 21,85% para FAC e 78,09% para F2Ac. A Tabela 11 apresenta uma comparação detalhada entre os resultados deste trabalho e os de Fang et al. (2020).

Tabela 11: Comparação dos resultados médios de conversão rendimento e seletividade

	Conversão	Rendimento (%)		Seletividade (%)	
		FAc	F2Ac	FAc	F2Ac
Fang et al. (2020)	87,5%	38,4	60,2	40,0	60,0
Autora	74%	19,94	71,26	21,84	78,09

Fonte: Autora, 2025

Observa-se que tanto o rendimento quanto a seletividade para o produto FAc foram inferiores aos relatados por Fang et al. (2020). No entanto, o rendimento e a seletividade para o principal produto de interesse, F2Ac, foram superiores aos obtidos pelo autor.

Essas diferenças estão associadas à presença do reciclo nas simulações, que contribuiu para o aumento na conversão dos reagentes, favorecendo a formação dos produtos desejados, e também ao fato dos resultados obtidos pelo autor serem providos de um reator batelada, desta forma, os resultados se mostraram diferentes, quando aplicados ao reator cinético. Destaca-se que o uso dos dados cinéticos do autor no presente trabalho tem apenas fins comparativos.

Os resultados obtidos nas correntes finais dos produtos variaram entre os cenários, refletindo as diferentes características e configurações adotadas em cada caso. Dessa forma, foi possível avaliar a influência das vazões de entrada (original ou modificada) e dos diagramas de fluxo de processos na produtividade e na viabilidade econômica do sistema.

#### 6.4 Extração e separação da acetona

Assim como na etapa reacional, o processo de separação da acetona e a extração dos produtos com o solvente é igual para todos os cenários apresentados. Deste modo, após a etapa reacional, a mistura é direcionada para a coluna de destilação (CD-01), onde ocorre a remoção da acetona residual, permitindo seu reaproveitamento. A separação da acetona antes da etapa de extração foi escolhida devido ao azeótropo formado entre a acetona e o metanol, responsável por facilitar a separação dos produtos e reagentes nas colunas de destilação, simplificando o processo.

A mistura segue para a extração líquido-líquido no extrator CE-01, onde o solvente é adicionado para a extração dos produtos de interesse. Em seguida, passa pelas colunas de destilação para a separação dos componentes.

## 6.5 Apresentação dos cenários

Os cenários base (1 a 4) deram origem aos cenários modificados (5 a 8). Durante a análise, verificou-se que o custo elevado do refrigerante Freon-12, utilizado nos processos, poderia ser eliminado. Essa mudança viabilizou ajustes na configuração dos equipamentos, permitindo uma comparação entre os processos tanto em termos de produção quanto em aspectos econômicos.

As diferenças entre os cenários avaliados estão relacionadas principalmente às vazões de entrada no processo. As vazões originais, de 10.957,7 kg/h, foram ampliadas em 25%, o que resultou em variações nas produções de FAc e F2Ac. Além disso, uma distinção relevante, já detalhada nos diagramas PFD, é a associação dos cenários aos respectivos diagramas. Os cenários 1, 2, 5 e 6 estão associados ao PFD-1 (Figura 16), enquanto os cenários 3, 4, 7 e 8 estão vinculados ao PFD-2 (Figura 17). A seguir, são descritos os detalhes de cada cenário, juntamente com as respectivas produções de FAc e F2Ac.

### 6.5.1 Cenários com Líquido Refrigerante (1 a 4)

- **Cenário 1:**

Vazão padrão de 10.958,7 kg/h. Produção final de 1.355,79 kg/h de FAc e 4.695,39 kg/h de F2Ac. O PFD utilizado é apresentado na Figura 16. A vazão ligeiramente maior se deve ao reciclo de FAC que volta na corrente de FF com aproximadamente 1 kg/h.

- **Cenário 2**

Vazão ampliada para 13.697,1 kg/h (+25%). Produção aumentada proporcionalmente para 1.695,12 kg/h de FAc e 5.869,48 kg/h de F2Ac. O mesmo PFD do cenário 1 foi mantido.

- **Cenário 3:**

Vazão ampliada para 13.697,1 kg/h. Alterações no PFD (Figura 17) reduzindo a necessidade de equipamentos, mantendo a produção de 1.695,52 kg/h de FAc e 5.869,23 kg/h de F2Ac. Fração mássica Split (FS-01): 0,005.

- **Cenário 4:**

Vazão padrão de 10.957,7 kg/h. PFD modificado semelhante ao do cenário 3.

Produção final de 1.356,34 kg/h de FAc e 4.695,49 kg/h de F2Ac. Fração mássica

Split (FS-01): 0,002.

#### 6.5.2 Cenários sem Líquido Refrigerante (5 a 8)

- **Cenário 5**

Vazão de 10.961,1 kg/h. Retirada do Freon-12, mantendo o PFD do cenário 1.

Produção final de 1.353,77 kg/h de FAc e 4.695,39 kg/h de F2Ac. A vazão

ligeiramente maior do padrão, se deve ao reciclo de FAc que retorna pela corrente FF.

- **Cenário 6:**

Vazão ampliada para 13.700,9 kg/h. PFD-1, semelhante ao cenário 2, porém sem

líquido refrigerante. Produção final de 1.689,90 kg/h de FAc e 5.871,01 kg/h de F2Ac.

Semelhante ao cenário 5, a vazão maior se deve ao reciclo da corrente FF contendo resíduos de FAc.

- **Cenário 7:**

Vazão ampliada para 13.697,1 kg/h. PFD-2 sem Freon-12. Produção final semelhante

ao cenário 3, com 1.695,42 kg/h de FAc e 5.869,37 kg/h de F2Ac.

- **Cenário 8:**

Vazão padrão de 10.957,4 kg/h. PFD do cenário 4, sem líquido refrigerante. Produção

final de 1.355,78 kg/h de FAc e 4.695,92 kg/h de F2Ac. Fração mássica Split (FS-01):

0,002.

A corrente final do processo, contendo os produtos da reação, inclui uma pequena fração do intermediário da reação (FOH) e água residual ainda presente no fluxo final. Esse fluxo, medido em galões, representa a totalidade da corrente final do processo. Todos os cenários analisados apresentaram uma pureza superior a 98%, sendo calculados através da Equação 22.

$$\text{Pureza (\%)} = (\sum \text{Frações mássicas dos produtos FAc e F2Ac}) * 100 \quad (\text{Eq.22})$$

Pode-se observar que o aumento da vazão em 25% elevou a produção de FAc e F2Ac em todos os cenários propostos. De forma semelhante, a modificação no diagrama PFD para os cenários 3, 4, 7 e 8 mostrou uma redução no número de equipamentos, sem impacto negativo significativo na eficiência de produção.

Nos cenários modificados, a retirada do líquido refrigerante (cenários 5 a 8) demonstrou que a ausência do Freon-12 não comprometeu o rendimento, reduzindo custos operacionais. Uma exceção foi o cenário 6, que apresentou uma diferença ligeiramente menor na produção de F2Ac.

O balanço de massa e energia do reator para todos os cenários está apresentado no Apêndice C. Nos cenários analisados, as correntes S3 e S4 possuem parâmetros de pressão e temperatura constantes, sendo 80°C e 20 bar, respectivamente. Os parâmetros operacionais utilizados para a configuração das colunas de destilação e do extrator para cada cenário proposto, estão descritos no Apêndice D.

## **6.6 Análise econômica**

Após a obtenção dos resultados das simulações computacionais para os diferentes cenários propostos, torna-se essencial avaliar a viabilidade econômica do processo. A análise econômica permite identificar os custos envolvidos e auxiliar na seleção do cenário mais eficiente, considerando tanto a produtividade quanto os aspectos financeiros do projeto.

A análise econômica é essencial para determinar a condição mais vantajosa e comparar os diferentes cenários avaliados. A influência da variação da vazão de entrada e das configurações das etapas de separação, estabelecidas pelos diagramas de fluxo de processos (PFD), reflete diretamente nos custos finais e na receita do projeto.

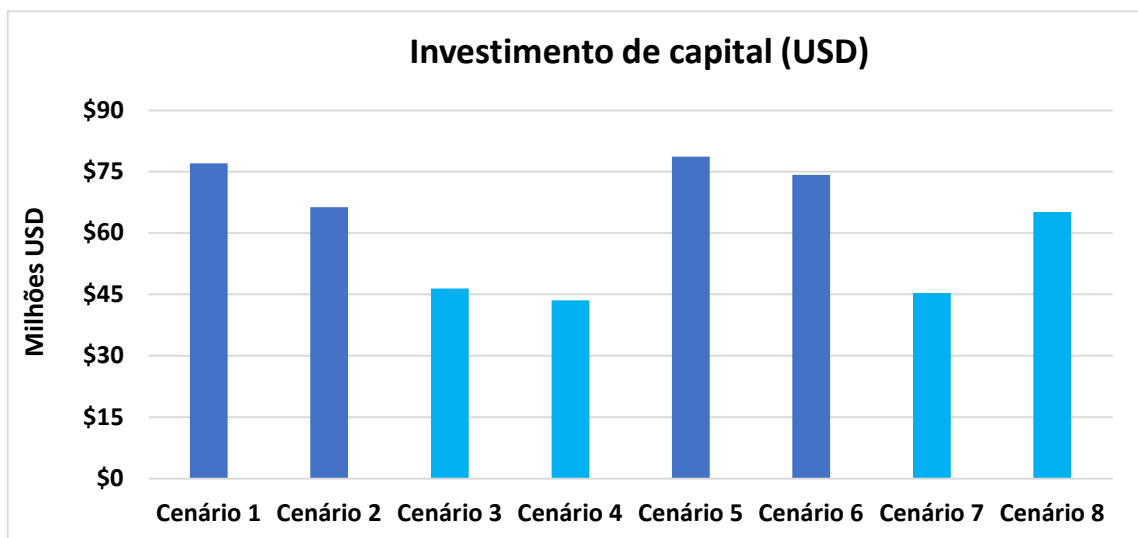
### 6.6.1 Custo fixo de capital

Antes de iniciar a operação de uma planta industrial, é necessário um investimento significativo para aquisição de equipamentos, terrenos, instalações de serviço e conclusão da construção, incluindo tubulações, controles e sistemas de suporte. O investimento de capital total (TCI) é composto pelo capital de giro (WC), destinado às operações, e pelo investimento de capital fixo (FCI), necessário para instalações e infraestrutura. O FCI é dividido em custos diretos, que englobam aquisição de equipamentos, instalação, instrumentação e controle, tubulação, sistemas elétricos, construção e melhorias no terreno; e custos indiretos, que incluem despesas com engenharia, construção, taxas legais, contratação, contingências, não diretamente ligados à produção (Peters et al., 2003).

No Apêndice E (Tabelas de 1E-8E), são apresentadas as tabelas de custo fixo de capital aplicadas aos cenários avaliados. Os custos dos equipamentos estimados pelo Aspen Plus foram utilizados para calcular os percentuais dos custos diretos e indiretos associados ao processamento de fluidos.

A Figura 19 apresenta um resumo dos resultados de investimento de capital para todos os cenários avaliados. Observa-se que os cenários associados ao diagrama PFD 2 (cenários 3, 4, 7 e 8) apresentam um investimento de capital inferior em comparação aos demais. Podendo constatar que as modificações auxiliaram no investimento final do projeto.

Figura 19: Investimento de capital total



Fonte: Autora, 2025

### 6.6.2 Matéria-prima

O custo anual das matérias-primas foi calculado com base no consumo total e nos valores unitários correspondentes. No Apêndice F, são detalhados os consumos e custos anuais de cada matéria-prima, solvente e catalisador para os diferentes cenários avaliados. Os principais componentes responsáveis pelos maiores gastos anuais são furfural e acetona, como descrito na Tabela 12.

Tabela 12: Comparativo do custo anual com matéria-prima e solvente (MM \$/ano)

	<b>Custo anual com matérias-primas (MM \$/ano)</b>					$\Sigma$ (MM \$)
	Furfural	Acetona	Água	Metanol	Catalisador	
Cenário 1	57,35	14,24	0,0002	0,0016	0,0270	71,62
Cenário 2	71,69	17,80	0,0001	0,0007	0,0338	89,53
Cenário 3	71,69	17,80	0,0004	0,0010	0,0338	89,53
Cenário 4	57,35	14,24	0,0001	0,0005	0,0337	71,63
Cenário 5	57,35	14,24	0,0002	0,0016	0,0270	71,62
Cenário 6	71,69	17,80	0,0001	0,0010	0,0338	89,52
Cenário 7	71,69	17,80	0,0004	0,0008	0,0338	89,53
Cenário 8	57,35	14,24	0,0001	0,0005	0,0270	71,62

Fonte: Autora, 2025

Os custos com furfural, água e acetona permanecem constantes nos cenários com vazões de entrada semelhantes, tanto nas vazões originais (1, 4, 5 e 8) quanto nas aumentadas em 25% (2, 3, 6 e 7). Por outro lado, o custo do solvente metanol varia entre os cenários. Essa variação pode ser atribuída às diferenças nas configurações de cada cenário, incluindo a corrente de entrada, configuração de equipamento ou o diagrama PFD adotado, o que resulta em demandas distintas de solvente. Os cenários 4 e 8 apresentam os menores custos associados ao metanol.

### 6.6.3 Produtos

Após as simulações, as quantidades dos produtos obtidas na corrente final do processo foram inseridas na planilha, na aba "Produtos". O valor de venda dos produtos dessa corrente foi calculado considerando um payback descontado fixo de 3,6 anos.

Essa abordagem foi adotada devido à ausência de separação individual dos produtos na corrente final. Assim, o valor de venda reflete o total da corrente final para cada cenário com payback fixo, levando em conta os resultados obtidos na planilha, incluindo custos com utilidades, matérias-primas, investimento fixo de capital e fluxo de caixa. Na Tabela 13 é exibido o preço unitário de venda dos produtos, bem como a produção e receita obtida em cada cenário apresentado.

Tabela 13: Resultados produtos FAc e F2Ac em cada cenário

	FAc/F2Ac		
	\$/gal	Produção MM gal/ano	Receita (MM \$/ano)
Cenário 1	16,82	9,39	157,88
Cenário 2	14,90	11,78	175,52
Cenário 3	13,89	11,77	163,47
Cenário 4	14,56	9,27	134,99
Cenário 5	16,80	9,41	158,02
Cenário 6	15,34	11,76	180,37
Cenário 7	13,59	11,79	160,26
Cenário 8	15,96	9,27	147,96

Fonte: Autora, 2025

Os cenários com vazões de entrada maiores apresentam, como esperado, uma produção e receita anual mais elevadas. O cenário 6 destacou-se como o de maior receita anual entre as simulações com vazões aumentadas em 25%. No entanto, ele também apresentou o preço unitário mais alto, o que pode reduzir sua competitividade. Por outro lado, os cenários 2 e 3, embora tenham uma produtividade próxima à do cenário 6, ofereceram preços unitários menores e uma receita anual intermediária, tornando-se opções interessantes em termos de equilíbrio entre produção e custo.

Entre os cenários com as vazões de entrada originais (1, 4, 5 e 8), o cenário 4 mostrou-se o menos vantajoso, apresentando menor receita total (\$134,99 MM/ano), reflexo de sua baixa produção. Em um panorama geral entre todos os cenários analisados, o 7, 2 e 3 se destacaram por combinarem boa produção, receita significativa e preços unitários competitivos, despontando como os mais promissores. Vale destacar que cada cenário possui configurações específicas, o que influencia diretamente seus resultados.

#### 6.6.3.1 Preço mínimo de venda

O indicador mais apropriado para avaliar a competitividade econômica de um biocombustível e permitir comparações diretas com outros produtos e rotas de produção é o Preço Mínimo de Venda de Combustível de Aviação (MJSP). Esse parâmetro é calculado ajustando iterativamente o custo do combustível de aviação até que o valor presente líquido (VPL) seja igual a zero, considerando uma taxa de desconto previamente definida (DETSIOS et al., 2024a). Desta forma, o preço mínimo de venda (MSP) foi calculada para todos os cenários propostos, considerando um payback descontado pré-estabelecido de 3,6 anos. A Tabela 14, exhibe os resultados alcançados.

Tabela 14: Preço mínimo de venda (MSP)

	<b>MSP (USD/gal)</b>
Cenário 1	14,43
Cenário 2	13,26
Cenário 3	12,74
Cenário 4	13,19
Cenário 5	14,36
Cenário 6	13,50
Cenário 7	12,47
Cenário 8	13,91

Fonte: Autora, 2025

Podemos observar que o cenário 7 apresenta o menor MSP com um valor de 12,47 USD/gal, seguido pelo cenário 3. Ambos possuem a mesma vazão inicial e compartilham o mesmo diagrama de fluxo de processos (PFD). A única diferença significativa está na configuração dos equipamentos na fase de separação, sendo que o cenário 7 não utiliza líquido refrigerante em suas utilidades. Apesar da pequena diferença no MSP entre os cenários, essa variação resulta em um impacto financeiro significativo, estimado em 3,18 milhões de dólares anuais, considerando a produção total do cenário 7. No entanto, outras análises econômicas e de riscos devem ser levadas em consideração, para compreender o impacto dessas diferenças, e revelar o melhor cenário.

Outros autores investigaram a reação de condensação aldólica entre furfural e acetona para produzir intermediários destinados a biocombustíveis. Bond et al. (2014) calcularam o preço mínimo de venda de hidrocarbonetos de combustíveis de aviação em 4,75 USD/gal, utilizando intermediários obtidos por condensação aldólica de furfural e acetona a partir de biomassa. Os autores analisaram a integração de diferentes tecnologias de processamento de biomassa para maximizar seu aproveitamento.

Estudos mais recentes, como o de Olcay et al. (2018), relataram uma faixa de preço entre 1,00 e 6,75 USD/gal. Nesse estudo, os autores simularam modelos de biorrefinarias que convertem madeira de bordo vermelho utilizando um conjunto de tecnologias em fase aquosa (APP) para produzir produtos químicos, como furfural, e combustíveis líquidos, como combustível de aviação e diesel.

Apesar de apresentarem MSPs bem menores do que o encontrado no presente trabalho, esses estudos consideram processos integrados, ou seja, contemplam desde a produção das matérias-primas a partir da biomassa bruta até os intermediários propostos. Isso ressalta a importância do aproveitamento da biomassa para a produção de produtos de plataforma, como o furfural, resultando em uma maior economia de processo, tornando-o mais competitivo e ampliando sua aplicabilidade.

#### 6.6.4 Mão de obra

Para estimar o custo da mão de obra envolvida na operação da planta, foi assumido um regime de trabalho com três turnos diários, cada um contando com três funcionários, totalizando uma jornada de oito horas por turno. Essa configuração foi considerada para um período operacional de 330 dias por ano, com uma média salarial de 33,67\$ (Peters et al, 2003). A Tabela 15 apresenta o custo anual associado à mão de obra, com valores idênticos aplicáveis a todos os cenários avaliados, uma vez que as condições de operação foram padronizadas.

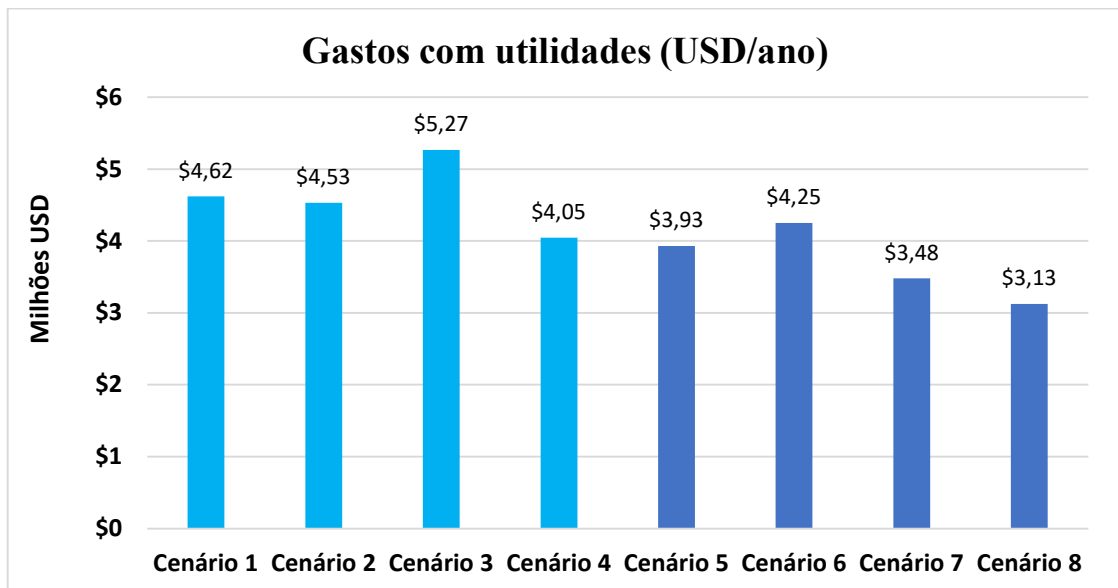
Tabela 15: Custo de mão de obra necessária para operação

<b>Turnos por dia</b>	<b>Média salarial \$/Hora</b>	<b>Número de funcionários</b>	<b>Custo anual (MM \$/Ano)</b>
3	\$ 33,67	3	<b>0,80</b>

#### 6.6.5 Utilidades

O Aspen Economic Analyzer permitiu determinar o consumo de utilidades para cada equipamento das simulações. Foram consideradas eletricidade, líquido refrigerante, vapor saturado e água de resfriamento. No Apêndice G, estão detalhados os consumos anuais e os custos correspondentes a cada utilidade requerida nos cenários avaliados. A Figura 20 apresenta um resumo dos custos com utilidades em cada cenário.

Figura 20: Custo anual com utilidades (MM USD) de acordo com cada cenário



Fonte: Autora, 2025

Observa-se que, no primeiro grupo de simulações base (cenários 1 a 4), que utilizam o refrigerante Freon-12, os custos anuais com utilidades são mais elevados, devido ao impacto significativo dessa utilidade no projeto. Em contrapartida, no segundo grupo de simulações modificadas (cenários 5 a 8), as alterações nas configurações dos equipamentos permitiram eliminar o uso do refrigerante, reduzindo os custos. A única exceção foi o cenário 6, que apresentou um custo ligeiramente superior.

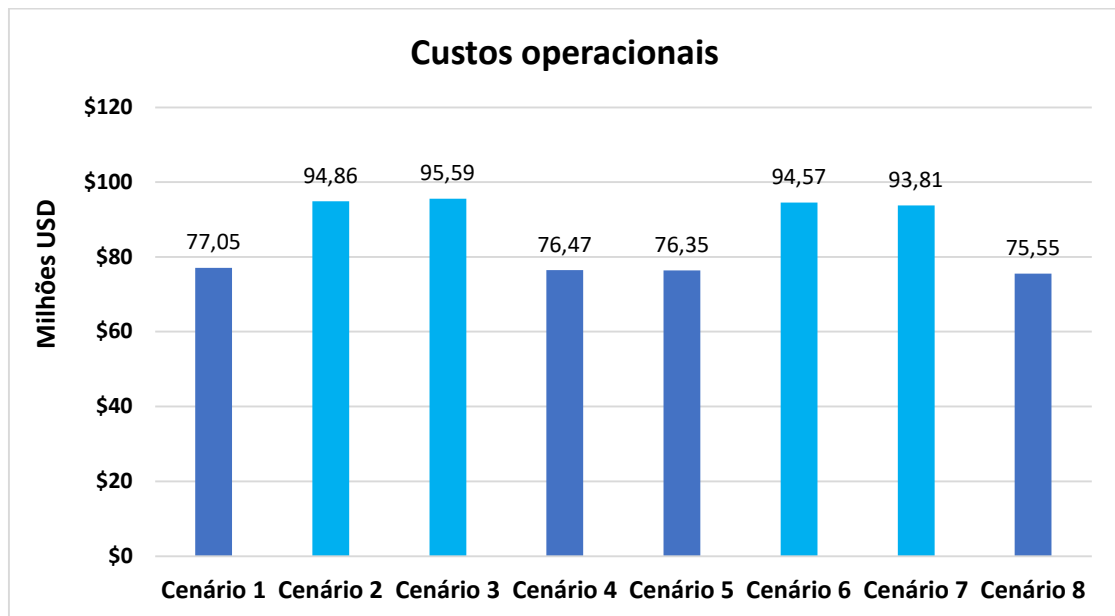
#### 6.6.6 Lucro anual e fluxo de caixa

Para determinar de forma definitiva o cenário mais vantajoso, é essencial realizar um estudo de viabilidade econômica que inclua a análise de parâmetros como Taxa Interna de Retorno (TIR) e Valor Presente Líquido (VPL). Para estimar o lucro anual gerado pela implantação das plantas industriais simuladas, foram considerados 28% de taxas e impostos sobre a receita anual, além de uma depreciação de 10% aplicada ao custo fixo de capital. No Apêndice H é apresentado a receita anual de cada cenário proposto, através dos resultados dos custos operacionais e fluxo de caixa líquido.

### 6.6.6.1 Custos operacionais

Os custos operacionais representam as despesas recorrentes necessárias para manter a planta em funcionamento, na qual estão incluídos o consumo de matéria-prima, custo com mão de obra e utilidades. Esses custos são diretamente influenciados pelo volume de produção e pelos equipamentos utilizados no processo. Na análise comparativa entre os cenários estudados (Figura 21), o comportamento dos custos operacionais fornece insights importantes sobre a viabilidade econômica e a eficiência econômica dos diferentes modelos de operação (TURTON et al., 2009).

Figura 21: Custos operacionais dos cenários propostos

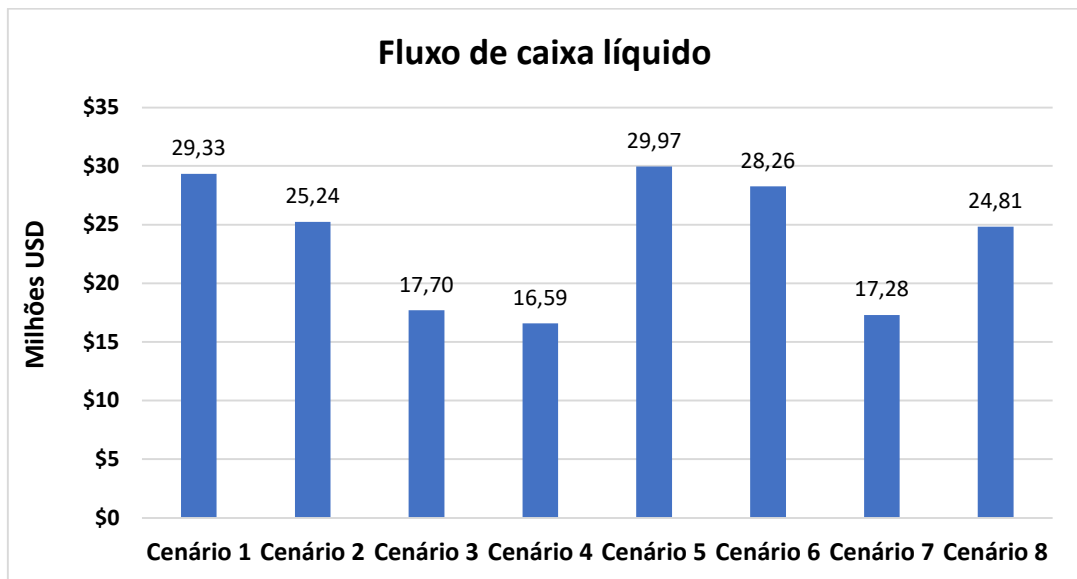


Como pode ser observado, os cenários com vazão aumentada em 25% apresentam custos operacionais mais elevados, especialmente em relação às matérias-primas, devido ao maior consumo necessário para atender à nova capacidade de processamento. Além disso, o aumento da vazão também pode impactar outros custos variáveis, como energia e utilidades. Entre os cenários com vazão de entrada originais, o cenário 1 possui o maior gasto com utilidades. Para avaliar o impacto das utilidades e dos custos com matérias-primas, é fundamental analisar o fluxo de caixa líquido, permitindo uma visão mais completa da viabilidade econômica do processo.

### 6.6.6.2 Fluxo de caixa líquido

O fluxo de caixa líquido representa o montante de recursos financeiros disponíveis após contabilizar todas as entradas e saídas de dinheiro de uma empresa. Na Figura 22 é exibido um comparativo do valor de fluxo de caixa líquido em cada cenário.

Figura 22: Fluxo de caixa líquido anual



Fonte: Autora, 2025

A partir dos valores obtidos, podem ser feitas observações importantes

#### 1. Cenários com vazão aumentada:

- No cenário 7, apesar de apresentar maior produção e custos reduzidos com utilidades operacionais, o fluxo de caixa líquido é menor. Isso se deve à sua receita anual ser a mais baixa entre os cenários deste grupo, o que pode ser explicado pelos altos custos com matérias-primas e pelo preço de venda inferior em comparação aos outros cenários.
- O cenário 3, por sua vez, apresentou um fluxo de caixa baixo devido aos maiores gastos com utilidades, operação e matérias-primas.

- Por outro lado, os cenários 2 e 6, embora também apresentem altos custos operacionais, mantiveram um fluxo de caixa elevado. Esse desempenho se deve ao menor consumo de matérias-primas em comparação aos cenários 3 e 7.

## 2. Cenários com vazão original:

- De modo geral, esses cenários apresentaram um fluxo de caixa líquido elevado, com exceção do cenário 4. Este, devido aos altos custos operacionais e com utilidades, foi ainda mais impactado pelo elevado consumo de metanol e pela baixa receita anual, resultado de uma produção reduzida e altos custos com matérias-primas.

## 3. Cenários base e modificados:

- Observa-se que os cenários base (1 a 4) apresentam gastos com utilidades mais elevados em comparação aos cenários modificados (5 a 8), devido à retirada do líquido refrigerante do processo. A produção nos cenários modificados foi levemente inferior, exceto nos cenários 6 e 8, que superaram os cenários 2 e 4, respectivamente.
- O fluxo de caixa líquido foi mais alto nos cenários modificados em relação aos bases, provavelmente devido à produção quase equivalente e aos menores custos com utilidades, o que beneficiou o projeto. A única exceção foi o cenário 7, que apresentou um fluxo de caixa reduzido, apesar de alcançar uma boa produção.

### 6.6.6.3 Fluxo de caixa

Os fluxos de caixa dos cenários propostos estão apresentados no Apêndice I, juntamente com o cálculo do Valor Presente (VP) e do Valor Presente Acumulado (VPA) dos projetos. O Valor Presente (VP) representa o valor atual de fluxos de caixa futuros, trazidos ao presente utilizando uma taxa de desconto apropriada, ou seja, dinheiro futuro é "descontado" para o presente (KUMAR, 2016).

O Valor Presente Acumulado (VPA) corresponde à soma dos valores presentes de todos os fluxos de caixa gerados ao longo da vida útil do projeto, utilizando uma mesma taxa de desconto. No apêndice J, são exibidos os gráficos de referente ao Valor Presente em função do tempo para todos os cenários.

#### 6.6.6.4 VPL, TIR e Taxa de lucratividade

A partir do valor de fluxo de caixa líquido, é possível estimar o Valor Presente Líquido (VPL) dos projetos ao longo de um período de 15 anos, pelo seu fluxo de caixa, considerando uma Taxa de Desconto (ou Taxa Mínima de Atratividade) de 15% ao ano. O VPL corresponde à diferença entre o valor presente dos fluxos de entrada e saída de caixa ao longo da vida útil da planta. Um VPL positivo indica que o projeto é economicamente viável e tem potencial como investimento, enquanto um VPL negativo sugere o contrário. Entre os projetos analisados, aquele que apresentar o maior VPL será considerado o mais vantajoso (DETSIOS et al., 2024b).

Outro parâmetro relevante na análise econômica é a Taxa Interna de Retorno (TIR), que representa a taxa de retorno sobre um investimento. A TIR é a taxa de juros que resulta em um VPL igual a zero, ou seja, quando a soma dos fluxos de caixa descontados é equivalente ao investimento inicial (GESSINGER, 2009).

Além do VPL e da TIR, a análise econômica também incluiu a Taxa de Lucratividade, que relaciona a soma dos valores presentes das entradas de caixa com o investimento inicial. Na Figura 23, é apresentado a avaliação dos resultados do investimento para as simulações propostas.

Figura 23: Resultados de investimento para todos os cenários

**Cenário 1:**

Soma VPs (15 anos)	\$171,52
VPL do Projeto	\$94,48
Taxa Interna de Retorno (TIR)	37,8%
Taxa de Lucratividade	2,23
Tempo de Payback	3,60

**Cenário 5:**

Soma VPs (15 anos)	\$175,23
VPL do Projeto	\$96,53
Taxa Interna de Retorno (TIR)	37,8%
Taxa de Lucratividade	2,23
Tempo de Payback	3,60

**Cenário 2:**

Soma VPs (15 anos)	\$147,59
VPL do Projeto	\$81,30
Taxa Interna de Retorno (TIR)	37,8%
Taxa de Lucratividade	2,23
Tempo de Payback	3,60

**Cenário 6:**

Soma VPs (15 anos)	\$165,25
VPL do Projeto	\$91,03
Taxa Interna de Retorno (TIR)	37,8%
Taxa de Lucratividade	2,23
Tempo de Payback	3,60

**Cenário 3:**

Soma VPs (15 anos)	\$103,51
VPL do Projeto	\$57,02
Taxa Interna de Retorno (TIR)	37,8%
Taxa de Lucratividade	2,23
Tempo de Payback	3,60

**Cenário 7:**

Soma VPs (15 anos)	\$101,05
VPL do Projeto	\$55,67
Taxa Interna de Retorno (TIR)	37,8%
Taxa de Lucratividade	2,23
Tempo de Payback	3,60

**Cenário 4:**

Soma VPs (15 anos)	\$97,01
VPL do Projeto	\$53,44
Taxa Interna de Retorno (TIR)	37,8%
Taxa de Lucratividade	2,23
Tempo de Payback	3,60

**Cenário 8:**

Soma VPs (15 anos)	\$145,09
VPL do Projeto	\$79,93
Taxa Interna de Retorno (TIR)	37,8%
Taxa de Lucratividade	2,23
Tempo de Payback	3,60

Fonte: Autora, 2025

Os cenários 1 e 5 obtiveram os maiores valores de Valor Presente Líquido (VPL) e soma do valor presente acumulado, destacando-se como os mais viáveis economicamente. O cenário 5, embora tenha a mesma configuração de corrente e diagrama de fluxo de processos (PFD) do cenário 1, faz parte das simulações vazãos, o que evidencia os benefícios da alteração realizada no projeto com a retirada do líquido refrigerante. Por outro lado, os cenários 4 e 7 exibiram os menores valores para esses parâmetros, sendo considerados os menos atrativos sob o ponto de vista econômico.

A taxa de lucratividade permaneceu constante em todos os cenários, refletindo a uniformidade na relação temporal para a recuperação do investimento (payback). Da mesma forma, a TIR foi semelhante entre os cenários, indicando retornos percentuais equivalentes.

Embora esses resultados ofereçam uma visão inicial sobre os cenários mais promissores, é importante ressaltar que os preços de mercado das matérias-primas são voláteis, influenciados por condições econômicas e de oferta. Dessa forma, o potencial econômico de um cenário não pode ser avaliado de forma definitiva com base em preços fixos.

Para considerar essas incertezas, foi aplicada a simulação de Monte Carlo, que avalia as distribuições do VPL e do preço mínimo de venda (MSP) dos produtos, permitindo uma análise mais robusta. Essa abordagem, conforme destacado por Hu et al. (2016), permite identificar a influência das variações nos preços das matérias-primas e na capacidade de produção sobre o desempenho econômico dos cenários.

A análise de risco e incertezas, conduzida com a simulação de Monte Carlo, oferece uma compreensão detalhada das flutuações do VPL e MSP, proporcionando maior confiabilidade na comparação dos investimentos (DETSIOS et al., 2024b).

## **6.7 Análise de riscos e incertezas**

Após avaliar a viabilidade econômica do processo produtivo, foi realizada a análise de riscos e incertezas associadas à implantação industrial do projeto, considerando a variação nos dados de entrada. Os resultados dessa análise foram obtidos por meio da técnica de Monte Carlo, utilizando planilhas eletrônicas. Foram avaliados quatro critérios importantes para o projeto:

- Valor Presente Líquido (VPL) e os custos operacionais, em função da variação dos custos das matérias-primas principais (furfural e acetona);
- Valor Presente Líquido (VPL) e os custos operacionais, em função da variação da capacidade de produção.

Para cada parâmetro de risco analisado, foram geradas distribuições de probabilidade, proporcionando uma visão detalhada sobre os possíveis cenários para a implantação do projeto.

As Figuras 1 a 24, apresentadas no Apêndice K, mostram os gráficos de distribuição cumulativa do VPL do projeto considerando a variação nos custos de furfural e acetona, bem como na capacidade de produção, nos oito cenários propostos. Esses resultados indicam o valor acumulado do VPL correspondente a uma probabilidade de 100% de retorno do investimento.

Na Tabela 16, é apresentado um resumo dos resultados obtidos na distribuição cumulativa para o VPL, referente a variação nos custos das matérias-primas e na capacidade de produção.

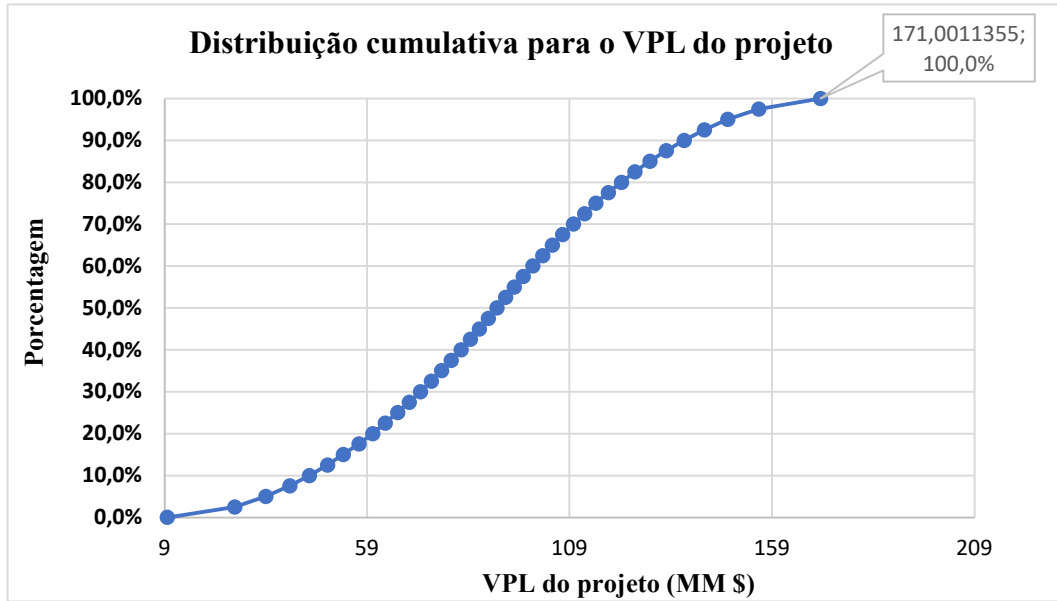
Tabela 16: Resultados de distribuição cumulativa para o VPL

<b>VPL (MM \$)</b>			
<b>Variações:</b>			
<b>Cenários</b>	<b>Furfural</b>	<b>Acetona</b>	<b>Capacidade de produção</b>
1	158,33	110,36	158,46
2	161,27	101,15	161,27
3	136,99	76,87	136,99
4	117,41	69,32	117,41
5	160,50	69,32	117,41
6	171	110,88	171
7	135,64	75,52	135,64
8	143,90	95,81	143,90

Fonte: Autora, 2025

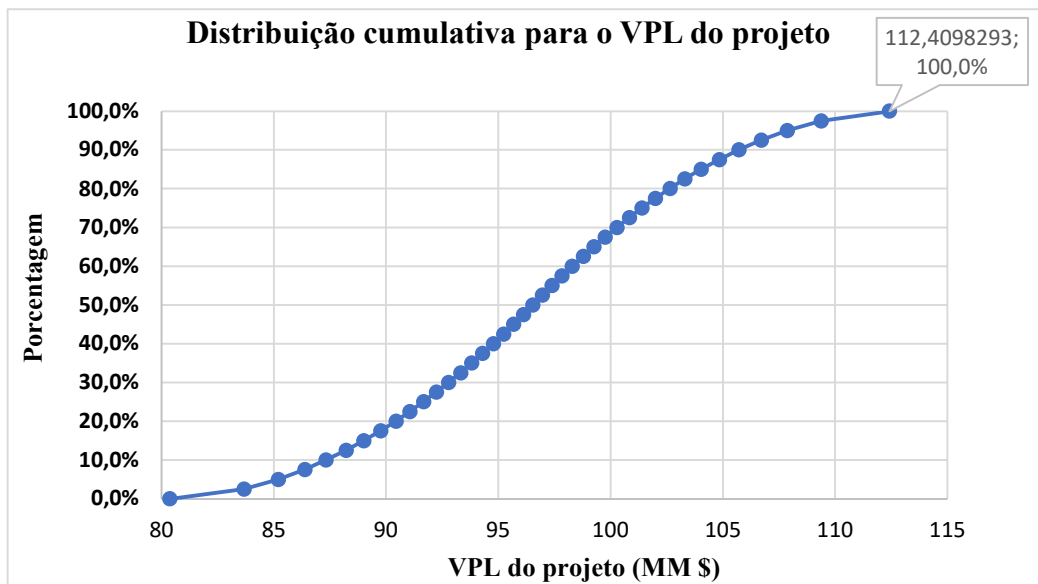
Os valores da simulação de Monte Carlo foram superiores aos da análise econômica inicial em todos os cenários, indicando maior resiliência do projeto às variações nos custos das matérias-primas e na capacidade produtiva. O cenário 6 obteve o maior VPL cumulativo, de 171 milhões de dólares devido à variação do custo de furfural e da capacidade de produção (Figura 24), enquanto o cenário 5 (Figura 25) se destacou com 112,41 milhões de dólares em função do custo da acetona.

Figura 24: Cenário 6 - Distribuição cumulativa para o VPL referente a variação do custo de furfural e capacidade de produção



Fonte: Autora, 2025

Figura 25: Cenário 5 - Distribuição cumulativa para o VPL referente a variação do custo de acetona



Fonte: Autora, 2025

Analisando os resultados relacionados à variação do custo do furfural no VPL, observa-se que, devido ao maior volume utilizado e ao custo unitário mais elevado em comparação à acetona, as flutuações no preço do furfural têm um impacto mais significativo no VPL.

Da mesma forma, ao analisar os resultados relacionados à acetona, observa-se que os valores do VPL cumulativo associados a essa matéria-prima são inferiores aos relacionados ao furfural. Isso indica que o projeto é menos sensível às flutuações no preço da acetona, possivelmente devido à sua menor proporção no processo ou ao seu menor custo unitário. Esse comportamento sugere que o projeto apresenta maior robustez frente às variações no preço da acetona, o que contribui para a redução do risco econômico associado a essa matéria-prima.

A capacidade de produção foi considerada constante em ambos os cenários. Isso reflete a metodologia utilizada na simulação de Monte Carlo, que levou em conta o consumo de furfural para calcular a variação da capacidade produtiva. Dessa forma, o furfural foi tratado como o principal fator econômico, não como um limitante técnico-químico. Essa abordagem permite identificar cenários de maior risco financeiro, dado o peso significativo do custo do furfural, alinhando-se à lógica de considerar o insumo mais caro como principal fator de risco.

As Figuras 1 a 24, apresentadas no Apêndice L representam os gráficos de distribuição cumulativa para os Custos Operacionais referente a variação do custo das matérias primas (Furfural e Acetona) e a variação da capacidade de produção para todos os cenários propostos. Os resultados dos gráficos mostram qual será o valor do Custo Operacional acumulado para quando houver uma probabilidade de 100% do retorno do investimento.

Na Tabela 17, é exibido um resumo dos resultados obtidos na distribuição cumulativa para os custos operacionais, referente a variação nos custos das matérias-primas e na capacidade de produção.

Tabela 17: Resultados de distribuição cumulativa para os custos operacionais

<b>Custos Operacionais (MM \$)</b>			
Cenários	<b>Variações:</b>		
	Furfural	Acetona	Capacidade de produção
1	88,19	79,81	88,19
2	108,78	98,32	108,78
3	109,52	99,05	109,52
4	87,62	79,24	87,62
5	87,49	79,12	87,49
6	108,50	98,03	108,50
7	107,73	97,26	107,73
8	86,69	78,31	86,69

Fonte: Autora, 2025

Em todos os cenários, os custos operacionais simulados pela técnica de Monte Carlo são superiores aos calculados na análise econômica inicial. Isso reflete o caráter conservador da simulação, que incorpora flutuações e incertezas relacionadas às matérias-primas e à capacidade de produção.

Considerando a variação no custo do Furfural e da Acetona, os cenários 2 e 3 (108,78 MM \$, 109,52 MM \$, respectivamente), apresentaram os maiores custos operacionais acumulados. Esses resultados sugerem que as flutuações nos custos das matérias-primas exercem um impacto direto sobre os custos totais. Particularmente no cenário 3, a diferença entre a análise econômica (95,6 MM \$) e a simulação Monte Carlo (109,52 MM \$) é a mais expressiva, indicando uma situação mais desafiadora. Esse comportamento pode ser atribuído aos custos elevados das matérias-primas e à maior variação da capacidade de produção nesse cenário.

Por outro lado, os cenários 4, 5 e 8 apresentaram os menores custos operacionais na análise cumulativa referente a variação no custo do Furfural (87,62 MM \$, 87,49 MM \$, 86,69 MM \$, respectivamente, conforme observado nas Figuras 26 a 28, bem como os menores custos na análise econômica. O cenário 8 se destaca por ter o menor custo operacional e a menor diferença entre a análise econômica (75,5 MM \$) e a simulação Monte Carlo (86,69 MM \$ para furfural e 78,31 MM \$ para a acetona). Isso indica que o cenário 8 está associado a menores incertezas e menor impacto de flutuações nos custos operacionais, em função da variação nos custos com furfural.

Figura 26: Gráfico da distribuição cumulativa para os Custos Operacionais referente a variação no custo do Furfural no Cenário 4

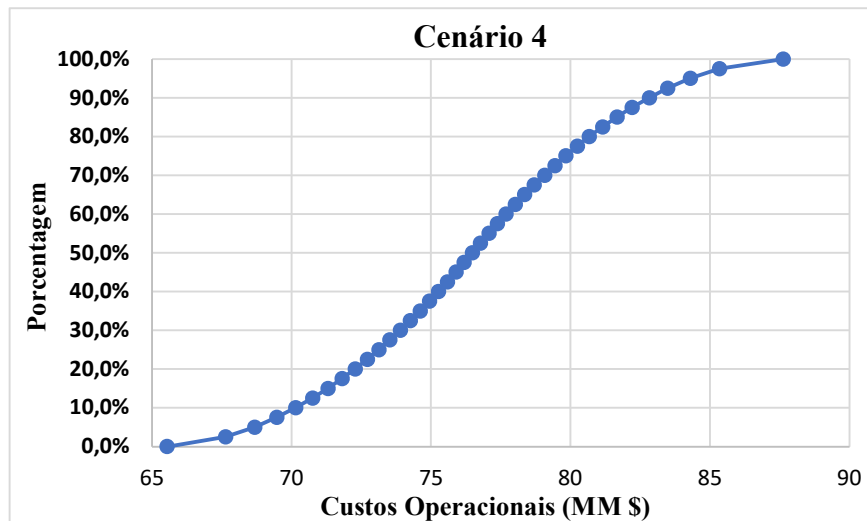


Figura 27: Gráfico da distribuição cumulativa para os Custos Operacionais referente a variação no custo do Furfural no Cenário 5

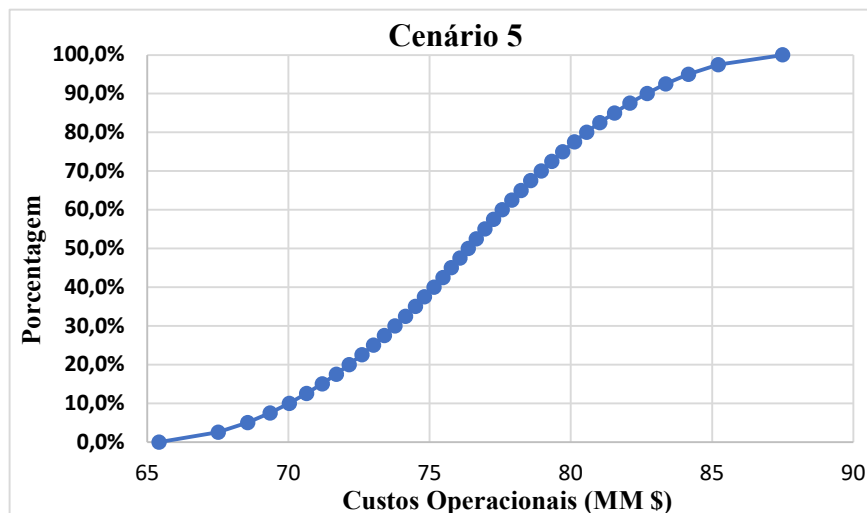
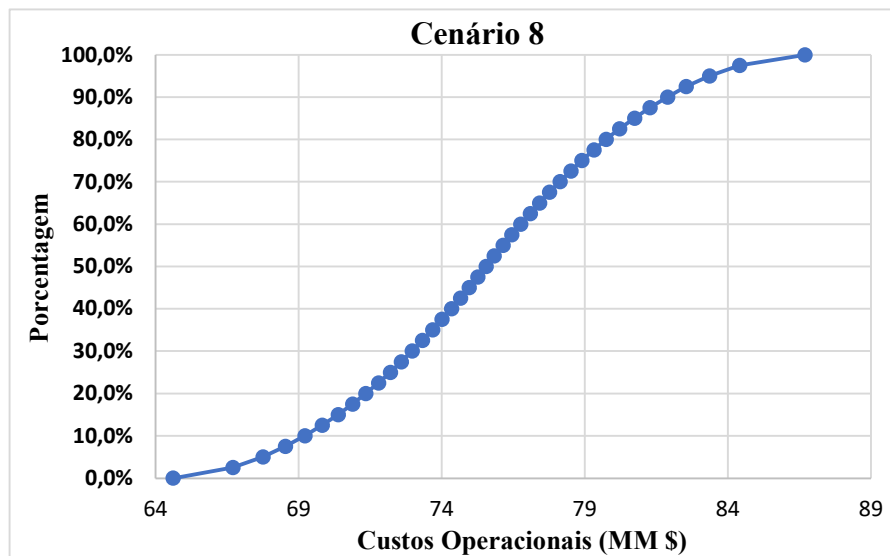


Figura 28: Gráfico da distribuição cumulativa para os Custos Operacionais referente a variação no custo do Furfural no Cenário 8



Fonte: Autora (2025)

Em relação à capacidade de produção, os valores permanecem constantes entre os cenários, uma vez que seguem a metodologia baseada no consumo de furfural. Isso reforça a escolha do furfural como referência, dado seu papel dominante no aspecto econômico do projeto.

Para complementar a análise de risco dos projetos, foram apresentadas as distribuições de probabilidade para os mesmos quatro critérios mencionados anteriormente. Essas distribuições indicam os valores mais prováveis para o VPL e os custos operacionais, ou seja, a faixa de valores mais adequada para considerar, dadas as variações nos custos do furfural, da acetona e na capacidade de produção.

As Figuras 1 a 24M, apresentadas no Apêndice M, exibem os histogramas de probabilidade para o VPL do projeto, considerando a variação do custo do furfural e da acetona, além da capacidade de produção. A Tabela 18 sintetiza esses resultados, destacando as maiores probabilidades (%) de os valores estarem concentrados na faixa central da simulação

Tabela 18: Resumo dos resultados dos histogramas de probabilidade para o VPL para todos os cenários

VPL						
Cenários	Furfural		Acetona		Capacidade de produção	
1	85%	89,01 - 101,1	87%	93,31 - 96,31	85%	89,01 - 101,1
2	85%	74,87 - 89,87	86%	80,08 - 83,88	85%	74,87 - 89,87
3	85%	50,58 - 65,58	86%	55,80 - 59,60	85%	50,58 - 65,58
4	85%	48,29 - 60,29	86%	52,6 - 55,26	85%	48,29 - 60,29
5	85%	91,38 - 103,38	86%	95,35 - 98,35	85%	91,38 - 103,38
6	85%	84,60 - 99,60	86%	89,82 - 93,62	85%	84,60 - 99,60
7	85%	49,23 - 64,23	86%	54,45 - 58,25	85%	49,23 - 64,23
8	85%	74,78 - 86,78	86%	78,75 - 81,75	85%	74,78 - 86,78

Fonte: Autora (2025)

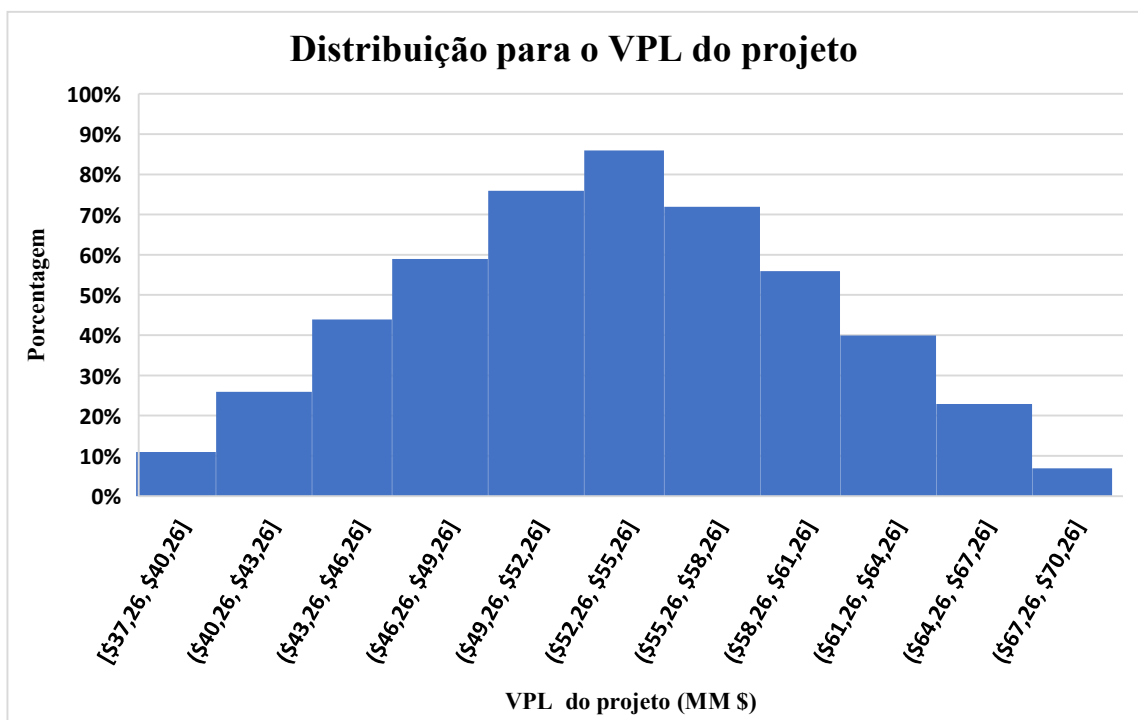
Com base nos resultados, os cenários 2, 3, 6 e 7 apresentam intervalos de distribuição mais amplos (maior diferença entre o VPL máximo e mínimo na faixa de maior probabilidade). Por exemplo, o cenário 2 tem um intervalo de 89,97 a 75,87 nessa faixa, ou seja, uma amplitude de 15. Essa maior amplitude sugere uma maior incerteza nos custos das matérias-primas, resultando em maior volatilidade no VPL. Em todos esses cenários, há uma probabilidade de 85% de os resultados estarem concentrados na faixa central da simulação de Monte Carlo.

Os cenários mencionados têm como característica comum o aumento de 25% na vazão de entrada, o que resulta em um maior consumo de furfural e acetona. Esse aumento amplifica o impacto de flutuações nos preços dessas matérias-primas, traduzindo-se em diferenças financeiras mais expressivas e maior incerteza no custo operacional e no VPL. Por outro lado, os cenários 1, 4, 5 e 8, que apresentam menor consumo de matérias-primas, registraram as menores flutuações, indicando maior estabilidade.

Ao comparar os resultados obtidos com o Investimento de capital total (TCI) calculado para cada cenário, observa-se que, em todos os casos, o menor valor da faixa de VPL com maior probabilidade (como no cenário 1, com 89,01) excede o TCI estimado na análise econômica. O cenário 5 se destaca por apresentar o maior ganho, com uma diferença de 12,68 milhões de dólares entre o VPL mínimo e o TCI.

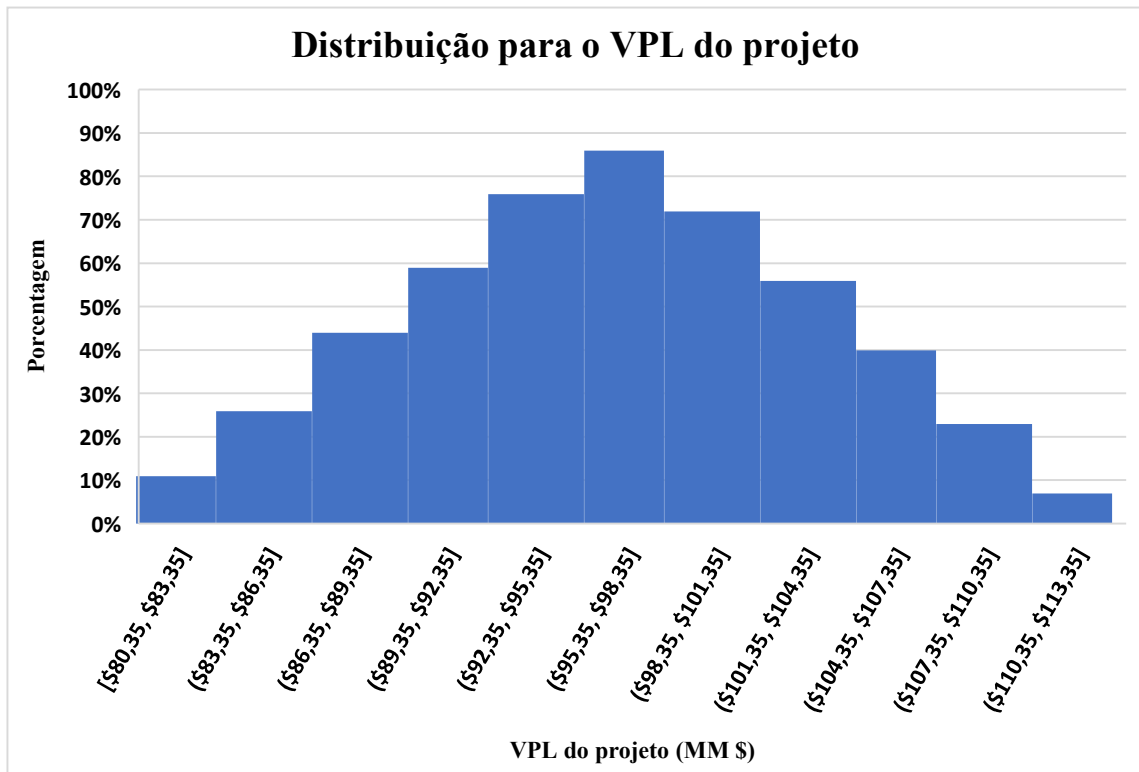
A acetona apresenta intervalos de incerteza menores em comparação ao furfural, especialmente no cenário 4 (Figura 29), que é o de menor consumo tanto de furfural quanto de acetona. Contudo, esse cenário também possui o menor VPL na análise econômica. Por outro lado, o cenário 5 (Figura 30) se destaca por apresentar uma incerteza reduzida, evidenciada pelo menor intervalo de probabilidade, mas com VPL elevado na análise econômica (96,53 MM \$).

Figura 29: Cenário 4 - distribuição de probabilidade para o VPL do Projeto referente a variação do custo da Acetona



Fonte: Autora, 2025

Figura 30: Cenário 5 - distribuição de probabilidade para o VPL do Projeto referente a variação do custo da Acetona



Fonte: Autora, 2025

A capacidade de produção segue o comportamento do furfural em todos os cenários, confirmando que foi vinculada ao consumo dessa matéria-prima. Assim, a maior incerteza observada nos cenários relacionados ao furfural também impacta a capacidade de produção.

Todos os cenários apresentaram um VPL superior ao TCI calculado na análise econômica. O cenário 5 destacou-se por apresentar o maior ganho, com uma diferença de 16,65 MM \$ entre o VPL mínimo do intervalo com maior probabilidade e o TCI.

As Figuras 1 a 24N, no Apêndice N, mostram os histogramas de probabilidade para os custos operacionais, considerando as variações no custo do furfural, acetona e na capacidade de produção nos diferentes cenários. A Tabela 19 reúne esses dados, evidenciando as faixas com maior concentração de probabilidade.

Tabela 19: Resumo dos resultados dos histogramas de probabilidade para os custos operacionais em todos os cenários

<b>Custos Operacionais</b>						
Cenários	Furfural		Acetona		Capacidade de produção	
1	86%	76,60 - 78,70	85%	76,88 - 77,39	86%	76,60 - 78,70
2	85%	94,18 - 96,78	84%	94,66 - 95,30	85%	94,18 - 96,78
3	85%	94,92 - 97,52	85%	94,40 - 96,04	85%	94,92 - 97,52
4	86%	76,03 - 78,13	86%	76,31 - 76,82	86%	76,03 - 78,13
5	85%	75,91 - 78,01	85%	76,19 - 76,70	85%	75,91 - 78,01
6	85%	93,90 - 96,50	84%	94,38 - 95,02	85%	93,90 - 96,50
7	85%	93,13 - 95,73	85%	93,61 - 94,25	85%	93,13 - 95,73
8	86%	75,10 - 77,20	85%	73,38 - 75,89	86%	75,10 - 77,20

Fonte: Autora, 2025

Com base nos resultados, observa-se que, em todos os cenários, os custos operacionais associados ao furfural e capacidade de produção apresentam uma probabilidade de 85% a 86% de estarem dentro da faixa central da simulação de Monte Carlo. Os cenários com maiores amplitudes nos intervalos foram os cenários 2, 3, 6 e 7, o que está alinhado com os resultados obtidos nos histogramas de probabilidade para o VPL. Esses cenários possuem maior vazão de entrada, o que resulta em maior consumo de matérias-primas e, conseqüentemente, maiores gastos operacionais.

As variações nos custos da acetona apresentaram uma probabilidade de 86% a 87% de estarem dentro da faixa central da simulação. As amplitudes foram menores, refletindo sua menor utilização e custo unitário, o que reduz as incertezas associadas ao processo. No entanto, os cenários 3 e 8 mostraram as maiores variações nos custos dessa matéria-prima.

Por outro lado, os cenários 1, 4 e 5 exibiram as menores amplitudes, tanto para as variações de acetona quanto para as de furfural e capacidade de produção. Por fim, como observado em análises anteriores, a capacidade de produção acompanhou diretamente as variações no custo do furfural, confirmando sua dependência das quantidades consumidas dessa matéria-prima.

## 7. CONCLUSÃO

Ao longo deste trabalho, foram desenvolvidos e simulados oito cenários distintos, variando-se as vazões de entrada e os diagramas de fluxo de processos, com o objetivo de avaliar o desempenho técnico e econômico da rota proposta. A partir dessas simulações, foi realizada uma análise econômica detalhada, na qual se determinou o preço mínimo de venda dos produtos de interesse, FAc e F2Ac, além do cálculo do valor presente líquido (VPL) e dos custos operacionais de cada cenário, possibilitando a identificação da alternativa mais economicamente viável. Complementarmente, conduziu-se uma análise de riscos e incertezas associadas ao investimento, permitindo apontar o cenário com menor risco.

O processo produtivo simulado revelou-se fundamental para compreender o potencial de matérias-primas chave, como o furfural, oriundo de fontes de biomassa, e a acetona, um subproduto amplamente utilizado, porém de difícil manipulação industrial. A ampliação das aplicações da acetona, ultrapassando os limites impostos por regulamentações militares, representa uma oportunidade estratégica para potencializar seu valor agregado, promover a inovação no setor de biocombustíveis e contribuir para uma indústria mais sustentável. Ao propor uma nova aplicação para essas matérias-primas o estudo contribui para o avanço de rotas sustentáveis, tecnicamente viáveis e economicamente atrativas.

Ao analisar a viabilidade econômica dos oito cenários, observou-se que o cenário 5 foi o mais atrativo em termos de Valor Presente Líquido (VPL), apresentando o maior valor (96,53 milhões de dólares). Em relação aos riscos e incertezas — considerando a variação dos custos do furfural, acetona e a capacidade de produção, tendo como saída o VPL —, o cenário 5 também se destacou como o de menor risco de investimento. A fixação do payback em 3,6 anos resultou em valores constantes para a Taxa Interna de Retorno (TIR) e a taxa de lucratividade em todos os cenários, o que dificultou comparações entre eles com base nesses indicadores.

Um aspecto importante a ser destacado é que os preços mínimos de venda dos produtos FAc e F2Ac foram substancialmente superiores aos alcançados por outros autores. Essa diferença pode ser explicada pelo fato de os estudos anteriores considerarem sistemas integrados, abrangendo desde a produção das matérias-primas até os intermediários de biocombustíveis, o que torna o processo mais vantajoso economicamente e resulta em preços de venda mais atrativos. Os resultados reforçam a importância de processos integrados, como

os adotados em biorrefinarias, que viabilizam alternativas mais eficientes e sustentáveis para a produção de precursores de biocombustíveis de aviação.

Na análise de riscos e incertezas — considerando a variação dos custos do furfural, da acetona e da capacidade de produção, tendo como saída os custos operacionais —, observou-se que, nos gráficos cumulativos, o cenário 8 obteve os melhores resultados em termos de custo dessas variáveis. No entanto, nos gráficos de probabilidade, apresentou maiores amplitudes — especialmente nos custos da acetona —, indicando maior risco. Em contrapartida, o cenário 5 apresentou resultados cumulativos semelhantes, porém com menor variação nos gráficos de probabilidade, evidenciando um perfil de risco mais baixo. Por essas razões, o cenário 5 foi escolhido como o mais adequado para a simulação de custos operacionais, por combinar bom desempenho econômico com menor risco associado.

Vale destacar que o cenário 5 faz parte das simulações modificadas, nas quais o líquido refrigerante foi removido do processo. A metodologia adotada para essa alteração impactou diretamente os resultados da análise econômica e de riscos, evidenciando-se como a alternativa mais viável, com menores riscos associados. A redução de custos promovida por essa modificação contribuiu para tornar o sistema produtivo mais atrativo economicamente.

Além disso, o cenário 5 também integra o diagrama de fluxo de processos original (PFD-1), combinando as vantagens da modificação proposta com a retirada do líquido refrigerante, com uma configuração de processo já consolidada. Essa associação resultou no melhor equilíbrio entre desempenho econômico e risco de investimento, reforçando o PFD-1 como a alternativa mais vantajosa entre os cenários avaliados.

Dessa forma, este trabalho oferece uma contribuição relevante ao demonstrar, por meio de simulações, análises econômicas e de risco, uma rota promissora para a produção de intermediários de biocombustíveis. A proposta valoriza matérias-primas estratégicas e destaca novas oportunidades para aplicação industrial de compostos como a acetona e o furfural. Além disso, os resultados obtidos oferecem insights importantes para possíveis melhorias no processo produtivo, redução de riscos e ao fortalecimento da viabilidade econômica. Destacando a importância de estratégias integradas para o avanço da cadeia de produção de biocombustíveis de aviação.

## 8. SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

- **Exploração de Solventes Alternativos:** Avaliar a reação de condensação aldólica entre furfural e acetona utilizando solventes alternativos ao metanol, considerando suas limitações, como toxicidade, inflamabilidade e baixa sustentabilidade. Examinar o impacto de outros solventes na eficiência de extração dos produtos, bem como na facilidade de separação e recuperação no sistema proposto.
- **Avaliação Econômica Integrada:** Analisar a viabilidade econômica do processo considerando o custo do furfural obtido por processos integrados descritos na literatura e seu impacto na análise econômica.
- **Análise Econômica Avançada:** Realizar uma análise econômica detalhada sem payback fixo, explorando o tempo de retorno, a taxa interna de retorno (TIR) e a taxa de lucratividade. Identificar fatores que influenciam a rentabilidade e sustentabilidade do processo.
- **Avaliação de Riscos e Incertezas:** Expandir a análise de riscos e incertezas com payback dinâmico, priorizando os melhores cenários (como 5 e 1). Considerar variáveis como custos de matérias-primas e operacionais para uma avaliação mais robusta.
- **Impacto Ambiental do Processo:** Conduzir uma análise do ciclo de vida (ACV) para mensurar impactos ambientais em diferentes cenários, com foco em emissões de gases de efeito estufa e consumo energético.
- **Otimizar a proporção furfural:acetona:** Visando reduzir os custos operacionais e aprimorar a viabilidade do processo.

## 9. REFERÊNCIAS

- AGÊNCIA NACIONAL DO PETRÓLEO, GÁS NATURAL E BIOCMBUSTÍVEIS (ANP). *Resolução n° 856, de 22 de outubro de 2021*. Diário Oficial da União, Brasília, DF, 25 out. 2021. Disponível em: <https://atosoficiais.com.br/anp/resolucao-n-856-2021>. Acesso em: 9 dez. 2024.
- AGUADO-DEBLAS, L. et al. Acetone Prospect as an Additive to Allow the Use of Castor and Sunflower Oils as Drop-In Biofuels in Diesel/Acetone/Vegetable Oil Triple Blends for Application in Diesel Engines. **Molecules**, v. 25, n. 12, p. 2935, 25 jun. 2020.
- ALONSO, D. M.; BOND, J. Q.; DUMESIC, J. A. Catalytic conversion of biomass to biofuels. **Green Chemistry**, v. 12, n. 9, p. 1493, 2010.
- ANBARASAN, P. et al. Integration of chemical catalysis with extractive fermentation to produce fuels. **Nature**, v. 491, n. 7423, p. 235–239, 8 nov. 2012.
- ANEKWE, I. M. S. et al. Techno-economic and life-cycle analysis of single-step catalytic conversion of bioethanol to fuel blendstocks over Ni-doped HZSM-5 zeolite catalyst. **Energy Conversion and Management: X**, v. 22, p. 100529, abr. 2024.
- ARHZAF, S. et al. Solvent-free aldol condensation of furfural and acetone on calcined Mg-Al hydrotalcites. **Moroccan Journal of Chemistry**, v. 9, p. 614–627, 7 ago. 2021.
- ARHZAF, S. et al. Effect of interlayer anions on the catalytic activity of Mg-Al layered double hydroxides for furfural and acetone aldol condensation reaction. **Arabian Journal of Chemistry**, v. 17, n. 1, p. 105412, jan. 2024.
- ASPEN TECHNOLOGY. *Process simulation for chemicals*. 2023. Disponível em: <https://www.aspentech.com/en/resources/brochure/aspentech-plus-brochure>. Acesso em: 9 dez. 2024.
- AWUDU, I.; ZHANG, J. Uncertainties and sustainability concepts in biofuel supply chain management: A review. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, v. 16, n. 2, p. 1359–1368, fev. 2012.
- BARRETT, C. J. et al. Single-reactor process for sequential aldol-condensation and hydrogenation of biomass-derived compounds in water. **Applied Catalysis B: Environmental**, v. 66, n. 1–2, p. 111–118, jun. 2006.
- BERNARDO, P.; DRIOLI, E.; GOLEMME, G. Membrane Gas Separation: A Review/State of the Art. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 48, n. 10, p. 4638–4663, 20 maio 2009.
- BOND, J. Q. et al. Production of renewable jet fuel range alkanes and commodity chemicals from integrated catalytic processing of biomass. **Energy Environ. Sci.**, v. 7, n. 4, p. 1500–1523, 2014.
- CABRERA, E.; DE SOUSA, J. M. M. Use of Sustainable Fuels in Aviation—A Review. **Energies**, v. 15, n. 7, p. 2440, 26 mar. 2022.
- CHHEDA, J. N.; HUBER, G. W.; DUMESIC, J. A. Liquid-Phase Catalytic Processing of Biomass-Derived Oxygenated Hydrocarbons to Fuels and Chemicals. **Angewandte Chemie International Edition**, v. 46, n. 38, p. 7164–7183, 24 set. 2007.

- CHHEDA, J. N.; ROMÁN-LESHKOV, Y.; DUMESIC, J. A. Production of 5-hydroxymethylfurfural and furfural by dehydration of biomass-derived mono- and polysaccharides. **Green Chem.**, v. 9, n. 4, p. 342–350, 2007.
- CHO, H. J. et al. Zeolite-Encapsulated Pt Nanoparticles for Tandem Catalysis. **Journal of the American Chemical Society**, v. 140, n. 41, p. 13514–13520, 17 out. 2018.
- COBELLI, C.; CARSON, E. Models and the modeling process. Em: **Introduction to Modeling in Physiology and Medicine**. [s.l.] Elsevier, 2019. p. 31–43.
- COUSIN, E. et al. Towards efficient and greener processes for furfural production from biomass: A review of the recent trends. **Science of The Total Environment**, v. 847, p. 157599, nov. 2022.
- DE PAZ CARMONA, H. et al. Effectiveness of Mo, NiMo, and CoMo catalysts for co-hydroprocessing furfural-acetone aldol condensation adducts with atmospheric gas oil to produce biofuels. **Fuel**, v. 355, p. 129489, jan. 2024.
- DE, S.; SAHA, B.; LUQUE, R. Hydrodeoxygenation processes: Advances on catalytic transformations of biomass-derived platform chemicals into hydrocarbon fuels. **Bioresource Technology**, v. 178, p. 108–118, fev. 2015.
- DETSIOS, N. et al. Techno-Economic Evaluation of Jet Fuel Production via an Alternative Gasification-Driven Biomass-to-Liquid Pathway and Benchmarking with the State-of-the-Art Fischer–Tropsch and Alcohol-to-Jet Concepts. **Energies**, v. 17, n. 7, p. 1685, 1 abr. 2024.
- DIMIAN, A. C.; BILDEA, C. S.; KISS, A. A. Steady-state flowsheeting. **Computer Aided Chemical Engineering**, v. 35, p. 73–125, 2014. ISSN 1570-7946. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1016/B978-0-444-62700-1.00003-6>. Acesso em: 9 dez. 2024.
- ELFASAKHANY, A. Performance and emissions analysis on using acetone–gasoline fuel blends in spark-ignition engine. **Engineering Science and Technology, an International Journal**, v. 19, n. 3, p. 1224–1232, set. 2016.
- FABA, L.; DÍAZ, E.; ORDÓÑEZ, S. Aqueous-phase furfural-acetone aldol condensation over basic mixed oxides. **Applied Catalysis B: Environmental**, v. 113–114, p. 201–211, fev. 2012.
- FANG, X. et al. Aldol condensation of furfural with acetone over Ca/ZSM-5 catalyst with lower dosages of water and acetone. **Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers**, v. 108, p. 16–22, mar. 2020.
- FARIA, V. W.; ALMEIDA, G. C.; MOTA, C. J. A. Aldol condensation of furfural with acetone catalyzed by nitrogenated organic bases: A preliminary study of the catalytic performance toward the production of biojet fuel. **Química Nova**, v. 41, n. 6, p. 601–606, 1 jun. 2018.
- FOLETTI, E. L.; KUHNEN, N. C.; JOSÉ, H. J. Síntese da zeólita ZSM-5 e suas propriedades estruturais após troca iônica com cobre. **Cerâmica**, v. 46, n. 300, p. 210–213, dez. 2000.
- GARUD, Sushant S.; MARIAPPAN, Nivethitha; KARIMI, Iftekhar A. **Two stage surrogate assisted framework for box-constrained global optimisation**. In: INTERNATIONAL CONFERENCE ON FOUNDATIONS OF COMPUTER-AIDED PROCESS DESIGN, 9., 2019, Copper Mountain. Proceedings. *Elsevier B.V.*, 2019. DOI: <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-818597-1.50016-3>.
- GESSINGER, G. H. Financial Management of a Company. Em: **Materials and Innovative Product Development**. [s.l.] Elsevier, 2009. p. 139–180.

- GOLDEMBERG, J.; COELHO, S. T.; GUARDABASSI, P. The sustainability of ethanol production from sugarcane. **Energy Policy**, v. 36, n. 6, p. 2086–2097, jun. 2008.
- HAAS, M. J. et al. A process model to estimate biodiesel production costs. **Bioresource Technology**, v. 97, n. 4, p. 671–678, mar. 2006.
- HAYNES, W. M. (ed.). CRC Handbook of Chemistry and Physics. 95. ed. Boca Raton, FL: **CRC Press**, 2014-2015. p. 3-4.
- HE, J. et al. Upgrading of biomass-derived furanic compounds into high-quality fuels involving aldol condensation strategy. **Fuel**, v. 306, p. 121765, dez. 2021.
- HONG, J. et al. A promising technical route for converting lignocellulose to bio-jet fuels based on bioconversion of biomass and coupling of aqueous ethanol: A techno-economic assessment. **Fuel**, v. 381, p. 133670, fev. 2025.
- HORA, L. et al. Aldol condensation of furfural and acetone over MgAl layered double hydroxides and mixed oxides. **Catalysis Today**, v. 223, p. 138–147, mar. 2014.
- HORA, L. et al. Comparative study of physico-chemical properties of laboratory and industrially prepared layered double hydroxides and their behavior in aldol condensation of furfural and acetone. **Catalysis Today**, v. 241, p. 221–230, mar. 2015.
- HU, W. et al. Comparative techno-economic analysis of advanced biofuels, biochemicals, and hydrocarbon chemicals via the fast pyrolysis platform. **Biofuels**, v. 7, n. 1, p. 57–67, 2 jan. 2016.
- HUANG, J. et al. Solventless autothermic production of energy-intensive furanic biofuels expedited by photothermal effect. **Fuel**, v. 359, p. 130458, mar. 2024.
- HUBER, G. W. et al. Production of Liquid Alkanes by Aqueous-Phase Processing of Biomass-Derived Carbohydrates. **Science**, v. 308, n. 5727, p. 1446–1450, 3 jun. 2005.
- 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, 1 set. 2006.
- INTERNATIONAL AIR TRANSPORT ASSOCIATION. *Annual review 2024*. 2024. Disponível em: <https://www.iata.org/contentassets/c81222d96c9a4e0bb4ff6ced0126f0bb/iata-annual-review-2024.pdf>. Acesso em: 28 jul. 2024.
- JIRASEK, F. et al. Making thermodynamic models of mixtures predictive by machine learning: matrix completion of pair interactions. **Chemical Science**, v. 13, n. 17, p. 4854–4862, 2022.
- KEASLING, J. et al. Microbial production of advanced biofuels. **Nature Reviews Microbiology**, v. 19, n. 11, p. 701–715, 25 nov. 2021.
- KIKHTYANIN, O. et al. Reconstructed Mg-Al hydrotalcites prepared by using different rehydration and drying time: Physico-chemical properties and catalytic performance in aldol condensation. **Applied Catalysis A: General**, v. 536, p. 85–96, abr. 2017.
- KIKHTYANIN, O.; HORA, L.; KUBIČKA, D. Unprecedented selectivities in aldol condensation over Mg–Al hydrotalcite in a fixed bed reactor setup. **Catalysis Communications**, v. 58, p. 89–92, jan. 2015.
- KISSELL, R. **Algorithmic Trading Methods: Applications Using Advanced Statistics, Optimization, and Machine Learning Techniques**. 2. ed. Elsevier, 2020. ISBN 9780128156308. DOI: <https://doi.org/10.1016/C2018-0-02450-3>.

- KONG, X. et al. Production of liquid fuel intermediates from furfural via aldol condensation over La<sub>2</sub>O<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>-ZnO-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> catalyst. **Catalysis Communications**, v. 149, p. 106207, jan. 2021.
- KOROLOVA, V. et al. Kinetics of furfural aldol condensation with acetone. **Catalysis Today**, v. 423, p. 114272, nov. 2023.
- KUMAR, R. Perspectives on value and valuation. Em: **Valuation**. Elsevier, 2016. p. 3–46.
- LANGE, J. et al. Furfural—A Promising Platform for Lignocellulosic Biofuels. **ChemSusChem**, v. 5, n. 1, p. 150–166, 9 jan. 2012.
- LANGE, J.-P. Furfural manufacture and valorization – A selection of recent developments. **Catalysis Today**, v. 435, p. 114726, jun. 2024.
- LIEW, F. E. et al. Carbon-negative production of acetone and isopropanol by gas fermentation at industrial pilot scale. **Nature Biotechnology**, v. 40, n. 3, p. 335–344, 21 mar. 2022b.
- MARISCAL, R. et al. Furfural: a renewable and versatile platform molecule for the synthesis of chemicals and fuels. **Energy & Environmental Science**, v. 9, n. 4, p. 1144–1189, 2016a.
- MEEMANAH, T. et al. Bifunctional acid–base strontium–titanium mixed oxides supported on SBA-15 for selective synthesis of renewable branched bio-jet fuel precursor. **Fuel**, v. 351, p. 128895, nov. 2023.
- MELILLO, J. M. et al. Indirect Emissions from Biofuels: How Important? **Science**, v. 326, n. 5958, p. 1397–1399, 4 dez. 2009.
- MILANEZ, Artur Yabe et al. Biocombustíveis de aviação no Brasil: uma agenda de sustentabilidade. Revista do BNDES, v. 28, n. 56, p. 361-398, dez. 2021. Disponível em: <http://web.bndes.gov.br/bib/jspui/handle/1408/22048> . Acesso em: 28 jul. 2024.
- MONCADA, J.; EL-HALWAGI, M. M.; CARDONA, C. A. Techno-economic analysis for a sugarcane biorefinery: Colombian case. **Bioresource Technology**, v. 135, p. 533–543, maio 2013.
- NAKAGAWA, Y.; TAMURA, M.; TOMISHIGE, K. Recent development of production technology of diesel- and jet-fuel-range hydrocarbons from inedible biomass. **Fuel Processing Technology**, v. 193, p. 404–422, out. 2019.
- O'NEILL, R. E. et al. Aldol-condensation of furfural by activated dolomite catalyst. **Applied Catalysis B: Environmental**, v. 144, p. 46–56, jan. 2014.
- PAREJAS, A. et al. Aldol Condensation of Furfural with Acetone Over Mg/Al Mixed Oxides. Influence of Water and Synthesis Method. **Catalysts**, v. 9, n. 2, p. 203, 23 fev. 2019.
- PAXTON, P. et al. Monte Carlo Experiments: Design and Implementation. **Structural Equation Modeling: A Multidisciplinary Journal**, v. 8, n. 2, p. 287–312, abr. 2001.
- PENG, J. et al. Techno-economic analysis of bioethanol preparation process via deep eutectic solvent pretreatment. **Industrial Crops and Products**, v. 172, p. 114036, nov. 2021.
- PERRIN, C. L.; CHANG, K.-L. The Complete Mechanism of an Aldol Condensation. **The Journal of Organic Chemistry**, v. 81, n. 13, p. 5631–5635, 1 jul. 2016.
- PETERS, Max Stone et al. **Plant design and economics for chemical engineers**. New York: McGraw-Hill, 2003

- POHANISH, R. P. F. Em: **Sittig's Handbook of Toxic and Hazardous Chemicals and Carcinogens**. Elsevier, 2012. p. 1294–1373.
- RAMOS, R. et al. Towards understanding the hydrodeoxygenation pathways of furfural–acetone aldol condensation products over supported Pt catalysts. **Catalysis Science & Technology**, v. 6, n. 6, p. 1829–1841, 2016.
- RENON, H. N R T L: An empirical equation or an inspiring model for fluids mixtures properties? **Fluid Phase Equilibria**, v. 24, n. 1–2, p. 87–114, jan. 1985.
- RENON, H.; PRAUSNITZ, J. M. Local compositions in thermodynamic excess functions for liquid mixtures. **AIChE Journal**, v. 14, n. 1, p. 135–144, 17 jan. 1968.
- ROGOLINO, A. et al. Direct Synthesis of Acetone by Aerobic Propane Oxidation Promoted by Photoactive Iron(III) Chloride under Mild Conditions. **ACS Catalysis**, v. 13, n. 13, p. 8662–8669, 7 jul. 2023.
- ROMÁN-LESHKOV, Y. et al. Production of dimethylfuran for liquid fuels from biomass-derived carbohydrates. **Nature**, v. 447, n. 7147, p. 982–985, jun. 2007.
- ROMÁN-LESHKOV, Y.; CHHEDA, J. N.; DUMESIC, J. A. Phase Modifiers Promote Efficient Production of Hydroxymethylfurfural from Fructose. **Science**, v. 312, n. 5782, p. 1933–1937, 30 jun. 2006.
- SÁDABA, I. et al. Catalytic and structural properties of co-precipitated Mg–Zr mixed oxides for furfural valorization via aqueous aldol condensation with acetone. **Applied Catalysis B: Environmental**, v. 101, n. 3–4, p. 638–648, jan. 2011.
- SERRANO-RUIZ, J. C.; DUMESIC, J. A. Catalytic routes for the conversion of biomass into liquid hydrocarbon transportation fuels. **Energy Environ. Sci.**, v. 4, n. 1, p. 83–99, 2011.
- SHAO, S. et al. Synthesis of jet fuel from biomass-derived carbonyls via aldol condensation and hydrogenation in the one-pot: Effect of solvent and catalyst. **Fuel**, v. 333, p. 126238, fev. 2023.
- SHYLES, S. et al. Novel Strategies for the Production of Fuels, Lubricants, and Chemicals from Biomass. **Accounts of Chemical Research**, v. 50, n. 10, p. 2589–2597, 17 out. 2017.
- SINGH, S.; PARMAR, K. S.; KUMAR, J. Development of multi-forecasting model using Monte Carlo simulation coupled with wavelet denoising-ARIMA model. **Mathematics and Computers in Simulation**, out. 2024.
- SU, X. et al. Rapid and low-cost synthesis of ZSM-5 zeolite nanosheet assemblies for conversion of methanol to gasoline. **Microporous and Mesoporous Materials**, v. 344, p. 112215, out. 2022.
- TILLMAN, D. A.; DUONG, D. N. B.; HARDING, N. S. Modeling and Fuel Blending. Em: **Solid Fuel Blending**. Elsevier, 2012. p. 271–293.
- VELLASCO JÚNIOR, W. T. Acetone (CAS No. 67-64-1). **Revista Virtual de Química**, v. 3, n. 4, 2011.
- WILHELMSSEN, Ø. et al. Thermodynamic Modeling with Equations of State: Present Challenges with Established Methods. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 56, n. 13, p. 3503–3515, 5 abr. 2017.

XIE, S.; LI, Z.; ZHANG, W. Techno-Economic Analysis of Upgrading Corn Stover-Based Acetone, *n*-Butanol, and Ethanol to Higher Ketones and Alcohols: Fuels or Fine Chemicals? **ACS Sustainable Chemistry & Engineering**, v. 11, n. 8, p. 3474–3485, 27 fev. 2023.

XING, R. et al. Production of jet and diesel fuel range alkanes from waste hemicellulose-derived aqueous solutions. **Green Chemistry**, v. 12, n. 11, p. 1933, 2010.

YADAV, A. K. et al. Efficient preparation of hybrid biofuels from biomass-derived 5-(acetoxymethyl)furfural and petroleum-derived aromatic hydrocarbons. **RSC Advances**, v. 14, n. 5, p. 3096–3103, 2024.

YI, N. et al. Open access, thermodynamically consistent, electrolyte NRTL model for piperazine, AMP, water, CO<sub>2</sub> systems on Aspen Plus. **Separation and Purification Technology**, v. 350, p. 127924, dez. 2024.

YU, B.-Y.; TSAI, C.-C. Rigorous simulation and techno-economic analysis of a bio-jet-fuel intermediate production process with various integration strategies. **Chemical Engineering Research and Design**, v. 159, p. 47–65, jul. 2020.

## APÊNDICE

Comp. i	Comp. j	Fonte	T°	AIJ	AJI	BIJ	BJI	CIJ	DIJ	EIJ	EJI	FIJ	FJI	TLOWER	TUPPER
FF	ACE	USER	F	1,3737	-0,6157	32,3214	66,961	0,5	0	0	0	0	0	331,03	373,12
ACE	MOH	USER	K	0	0	101,8860	114,135	0,3	0	0	0	0	0	55	64,65
FF	H2O	APV140	K	-5,8732	7,1079	2335,0493	-1265,8367	0,3	0	0	0	0	0	331,35	434,85
ACE	H2O	APV140 VLE-IG	K	6,3981	0,0544	-1808,991	419,9716	0,3	0	0	0	0	0	293,15	368,25
FF	FAC	USER	K	-0,0352	1,2753	5,5589	5,6071	0,3	0	0,1279	-0,3247	-0,0006	0,00067	273,15	473,15
FF	F2AC	USER	K	-5,0393	8,5251	13,1717	-3,0202	0,3	0	0,8949	-1,6053	-0,0034	0,00591	273,15	473,15
H2O	FAC	USER	K	-12,7873	-0,7344	35,6307	4,7079	0,3	0	3,5399	0,6729	-0,0111	-0,00569	273,15	473,15
H2O	F2AC	USER	K	-3,8269	2,8764	-20,4889	2,9438	0,3	0	2,5338	0,3689	-0,0125	-0,00866	273,15	473,15
ACE	FAC	USER	K	-13,2661	24,9985	15,8559	-33,4563	0,3	0	2,2748	-4,4351	-0,0043	0,00852	273,15	473,15
ACE	F2AC	USER	K	13,7539	-20,9724	-20,5732	47,6951	0,3	0	-2,4134	3,7508	0,00464	-0,0073	273,15	473,15
FAC	F2AC	USER	K	-9,1868	13,6368	7,1978	-4,0445	0,3	0	1,5904	-2,4182	-0,00306	0,00477	273,15	473,15
FAC	MOH	USER	K	15,1764	-6,3856	-31,8181	5,9427	0,3	0	-2,6555	1,2302	0,00356	-0,00247	273,15	473,15
F2AC	MOH	USER	K	38,3518	-25,1695	-59,7752	69,6245	0,3	0	-7,2829	4,9282	0,01584	-0,01222	273,15	473,15
H2O	FAC-OH	USER	K	-14,8381	-9,1741	88,5989	11,8921	0,3	0	3,8589	2,1608	-0,01113	-0,00791	273,15	473,15
FF	FAC-OH	USER	K	-6,6577	7,2976	8,8415	3,1717	0,3	0	1,5084	-1,5978	-0,00513	0,00485	273,15	473,15
ACE	FAC-OH	USER	K	-9,2063	16,6971	21,0117	-16,8405	0,3	0	1,4573	-2,7825	-0,00247	0,00492	273,15	473,15
FAC-OH	FAC	USER	K	-2,3674	3,7439	10,7501	1,6836	0,3	0	0,4296	-0,7009	-0,00091	0,00151	273,15	473,15
FAC-OH	F2AC	USER	K	-14,6732	20,929	10,5842	-20,2189	0,3	0	2,7445	-3,9472	-0,00601	0,00867	273,15	473,15
FAC-OH	MOH	USER	K	4,4759	-0,4701	-12,4972	7,0757	0,3	0	-0,8061	0,2224	0,001618	-0,00183	273,15	473,15
FF	MOH	USER	C	-2,80759	3,78784	282,515	25,874	0,1	0	0	0	0	0	25	160,69
H2O	MOH	APV140 VLE-IG	C	2,7322	-0,693	-617,2687	172,9871	0,3	0	0	0	0	0	24,99	100

## APÊNDICE A - Parâmetros binários do modelo NRTL

Fonte: Adaptada de Bor (2020)

## APÊNDICE B

Tabela 1B: Balanços de massa e energia para as principais colunas da etapa de separação e extração cenário 1

Parâmetros		CD-01			Extrator				CD-02	
Correntes		S5	Acetona	S6	S8	S9	MET-1	S10	S11	S12
Temperatura (°C)		80,00	26,51	69,89	25,00	25,00	25,00	31,36	53,34	77,19
Pressão (bar)		1,50	0,30	0,30	1,01	1,01	1,01	1,01	0,50	0,50
Entalpia (kJ.kg <sup>-1</sup> )		-6882,66	-5355,78	-7030,46	-7148,28	-7440,19	-7440,19	-7273,14	-9391,95	-4294,55
Vazão (kg.h <sup>-1</sup> )		10958,75	723,29	10235,46	10235,46	8498,37	848,37	17885,46	10122,21	7763,25
Composição: Fração Mássica (%)	Furfural	0,002	0,001	0,002	0,002	0	0	0,001	0,002	0
	Acetona	0,060	0,907	0	0	0	0	0	0	0
	Metanol	0	0	0	0	1	1	0,428	0,756	0
	FAc	0,124	0	0,133	0,133	0	0	0,076	0	0,175
	F2Ac	0,428	0	0,459	0,459	0	0	0,263	0	0,605
	FAc-OH	0,0005	0	0,0005	0,0005	0	0	0,0003	0	0,0006
	Água	0,385	0,092	0,406	0,406	0	0	0,232	0,242	0,220
Parâmetros		CD-03		CD-04		CD-05				
Correntes		MET	FF	H2O	Produtos	S14	REC-MET			
Temperatura (°C)		47,85	81,09	32,87	54,21	81,05	47,61			
Pressão (bar)		0,50	0,50	0,05	0,05	0,50	0,50			
Entalpia (kJ.kg <sup>-1</sup> )		-7448,68	-15505,07	-15826,00	-1171,92	-15544,44	-7372,31			
Vazão (kg.h <sup>-1</sup> )		7720,76	2401,45	1694,04	6069,21	70,85	7649,91			
Composição: Fração Mássica (%)	Furfural	0	0,009	0	0	0,005	0			
	Acetona	0	0	0	0	0	0			
	Metanol	0,991	0	0	0	0,001	1,000			
	FAc	0	0,0003	0,0004	0,223	0	0			
	F2Ac	0	0	0	0,774	0	0			
	FAc-OH	0	0	0	0,0008	0	0			
	Água	0,009	0,991	0,9996	0,002	0,9935	0			

Tabela 2B: Balanços de massa e energia para as principais colunas da etapa de separação e extração cenário 2

Parâmetros		CD-01			Extrator				CD-02	
Correntes		S5	Acetona	S6	S8	S9	MET-1	S10	S11	S12
Temperatura (°C)		80,00	24,63	69,87	25,00	25,00	25,00	31,41	52,36	76,37
Pressão (bar)		1,50	0,30	0,30	1,01	1,01	1,01	1,01	0,48	0,48
Entalpia (kJ.kg <sup>-1</sup> )		-6882,86	-4274,52	-7085,40	-7203,62	-7440,35	-7440,35	-7303,70	-9374,21	-4486,51
Vazão (kg.h <sup>-1</sup> )		13697,39	821,31	12876,07	12876,07	10550,20	1119,53	22306,74	12437,13	9869,62
Composição: Fração Mássica (%)	Furfural	0,002	0	0,0021	0,002	0	0	0,001	0,002	0
	Acetona	0,060	0,998	0	0	0	0	0	0	0
	Metanol	0	0	0	0	1	1	0,423	0,758	0
	FAc	0,124	0	0,132	0,132	0	0	0,076	0	0,172
	F2Ac	0,429	0	0,456	0,456	0	0	0,263	0	0,595
	FAc-OH	0,0005	0	0,0005	0,0005	0	0	0,0003	0	0,0006
	Água	0,385	0,002	0,410	0,410	0	0	0,237	0,240	0,233
Parâmetros		CD-03		CD-04		CD-05				
Correntes		MET	FF	H2O	Produtos	S14	REC-MET			
Temperatura (°C)		46,97	80,06	28,96	54,38	80,14	46,69			
Pressão (bar)		0,48	0,48	0,04	0,04	0,48	0,48			
Entalpia (kJ.kg <sup>-1</sup> )		-7465,55	-15504,44	-15845,34	-1164,29	-15614,47	-7375,40			
Vazão (kg.h <sup>-1</sup> )		9532,91	2904,22	2286,36	7583,26	102,43	9430,48			
Composição: Fração Mássica (%)	Furfural	0	0,009	0	0	0	0			
	Acetona	0	0	0	0	0	0			
	Metanol	0,989	0	0	0	0,002	1,000			
	FAc	0	0	0,0001	0,224	0	0			
	F2Ac	0	0	0	0,774	0	0			
	FAc-OH	0	0	0	0,0008	0	0			
	Água	0,011	0,991	0,9998	0,002	0,9981	0			

Tabela 3B: Balanços de massa e energia para as principais colunas da etapa de separação e extração cenário 3

Parâmetros		CD-01			Extrator			
Correntes		S5	Acetona	S6	S8	S9	MET-1	S10
Temperatura (°C)		80,00	24,63	69,87	25,00	25,00	25,00	31,11
Pressão (bar)		1,50	0,30	0,30	1,01	1,01	1,01	1,01
Entalpia (kJ.kg <sup>-1</sup> )		-6882,95	-4274,36	-7085,52	-7203,74	-7440,19	-7440,19	-7318,54
Vazão (kg.h <sup>-1</sup> )		13697,12	821,34	12875,78	12875,78	13295,00	1143,69	25027,09
Composição: Fração Mássica (%)	Furfural	0,002	0,000	0,0021	0,002	0	0	0,001
	Acetona	0,060	0,998	0	0	0	0	0
	Metanol	0	0	0	0	1	1	0,486
	FAc	0,124	0	0,132	0,132	0	0	0,068
	F2Ac	0,429	0	0,456	0,456	0	0	0,235
	FAc-OH	0,0005	0	0,0005	0,0005	0	0	0,0002
	Água	0,385	0,002	0,410	0,410	0	0	0,211

Parâmetros		CD-02				CD-03		CD-04	
Correntes		S11	S14	S15	Produtos	MET	FF	REC-MET	PUG-agua
Temperatura (°C)		47,48	35,07	21,78	35,07	74,70	108,25	28,34	60,04
Pressão (bar)		0,10	1,01	0,10	1,01	1,36	1,36	0,20	0,20
Entalpia (kJ.kg <sup>-1</sup> )		-1289,62	-1309,56	-9988,81	-1309,56	-8080,26	-15412,01	-7430,69	-15712,90
Vazão (kg.h <sup>-1</sup> )		7682,46	38,41	17383,05	7644,05	13423,85	3959,20	12151,01	1272,84
Composição: Fração Mássica (%)	Furfural	0	0	0,002	0	0	0,007	0	0,0002
	Acetona	0	0	0	0	0	0	0	0
	Metanol	0	0	0,699	0	0,905	0	1	0,0002
	FAc	0,222	0,222	0	0,222	0	0	0	0
	F2Ac	0,768	0,768	0	0,768	0	0	0	0
	FAc-OH	0,0008	0,0008	0	0,0008	0	0	0	0
	Água	0,010	0,010	0,299	0,010	0,095	0,993	0	1,000

Tabela 4B: Balanços de massa e energia para as principais colunas da etapa de separação e extração cenário 4

<b>Parâmetros</b>		<b>CD-01</b>			<b>Extrator</b>				
	Correntes	S5	Acetona	S6	S8	S9	MET-1	S10	
	Temperatura (°C)	80,00	10,88	56,02	25,00	25,00	25,00	30,96	
	Pressão (bar)	1,50	0,16	0,16	1,01	1,01	1,01	1,01	
	Entalpia (kJ.kg <sup>-1</sup> )	-6882,95	-4282,00	-7124,36	-7204,75	-7440,21	-7440,21	-7324,69	
	Vazão (kg.h <sup>-1</sup> )	10957,70	655,80	10301,90	10301,90	11605,15	908,61	20998,44	
<b>Composição: Fração Mássica (%)</b>	Furfural	0,002	0	0,002	0,002	0	0	0,001	
	Acetona	0,060	1,000	0	0	0	0	0	
	Metanol	0	0	0	0	1	1	0,509	
	FAc	0,124	0	0,132	0,132	0	0	0,065	
	F2Ac	0,429	0	0,456	0,456	0	0	0,224	
	FAc-OH	0,0005	0	0,0005	0,0005	0	0	0,0002	
	Água	0,385	0	0,410	0,410	0	0	0,201	
<b>Parâmetros</b>		<b>CD-02</b>				<b>CD-03</b>		<b>CD-04</b>	
	Correntes	S11	S14	S15	Produtos	MET	FF	REC-MET	PUG-água
	Temperatura (°C)	154,91	35,08	24,77	35,08	73,23	106,93	37,21	69,85
	Pressão (bar)	0,12	1,01	0,12	1,01	1,30	1,30	0,31	0,31
	Entalpia (kJ.kg <sup>-1</sup> )	-967,43	-1173,06	-9837,21	-1173,06	-7997,87	-15419,65	-7404,58	-15673,80
	Vazão (kg.h <sup>-1</sup> )	6069,71	12,14	14940,86	6057,57	11682,02	3258,84	10696,38	985,64
<b>Composição: Fração Mássica (%)</b>	Furfural	0	0	0,001	0	0	0,007	0	0
	Acetona	0	0	0	0	0	0	0	0
	Metanol	0	0	0,716	0	0,916	0	1,000	0
	FAc	0,224	0,224	0	0,224	0	0	0	0
	F2Ac	0,775	0,775	0	0,775	0	0	0	0
	FAc-OH	0,001	0,001	0	0,001	0	0	0	0
	Água	0,0001	0,0001	0,283	0,0001	0,084	0,993	0	1,000

Tabela 5B: Balanços de massa e energia para as principais colunas da etapa de separação e extração cenário 5

Parâmetros		CD-01			Extrator				CD-02	
Correntes		S5	Acetona	S6	S8	S9	MET-1	S10	S11	S12
Temperatura (°C)		80,00	26,50	69,89	25,00	25,00	25,00	31,36	53,34	77,19
Pressão (bar)		1,50	0,30	0,30	1,01	1,01	1,01	1,01	0,50	0,50
Entalpia (kJ.kg <sup>-1</sup> )		-6881,74	-5351,08	-7029,85	-7147,67	-7440,19	-7440,19	-7272,77	-9391,98	-4294,34
Vazão (kg.h <sup>-1</sup> )		10961,06	723,81	10237,25	10237,25	8498,37	848,40	17887,22	10122,18	7765,04
Composição: Fração Mássica (%)	Furfural	0,002	0,001	0,0020	0,002	0	0	0,001	0,002	0
	Acetona	0,060	0,908	0	0	0	0	0	0	0
	Metanol	0	0	0	0	1	1	0,428	0,756	0
	FAc	0,124	0	0,133	0,133	0	0	0,076	0	0,175
	F2Ac	0,428	0	0,459	0,459	0	0	0,262	0	0,605
	FAc-OH	0,0005	0	0,0005	0,0005	0	0	0,0003	0	0,0006
	Água	0,385	0,092	0,406	0,406	0	0	0,232	0,242	0,220
Parâmetros		CD-03		CD-04		CD-05				
Correntes		MET	FF	H2O	Produtos	S14	REC-MET			
Temperatura (°C)		47,85	81,09	36,15	57,44	81,10	47,61			
Pressão (bar)		0,50	0,50	0,06	0,06	0,50	0,50			
Entalpia (kJ.kg <sup>-1</sup> )		-7448,70	-15505,15	-15782,58	-1168,11	-15547,94	-7372,31			
Vazão (kg.h <sup>-1</sup> )		7720,74	2401,44	1697,16	6067,88	70,84	7649,91			
Composição: Fração Mássica (%)	Furfural	0	0,009	0	0	0,005	0			
	Acetona	0	0	0	0	0	0			
	Metanol	0,991	0	0	0	0,001	1,000			
	FAc	0	0,0003	0,0025	0,223	0	0			
	F2Ac	0	0	0	0,774	0	0			
	FAc-OH	0	0	0	0,0008	0	0			
	Água	0,009	0,991	0,9975	0,002	0,9939	0			

Tabela 6B: Balanços de massa e energia para as principais colunas da etapa de separação e extração cenário 6

Parâmetros		CD-01			Extrator				CD-02	
	Correntes	S5	Acetona	S6	S8	S9	MET-1	S10	S11	S12
	Temperatura (°C)	80	37,96	83,15	25	25	25	31,41	53,04	77,13
	Pressão (bar)	1,50	0,52	0,52	1,01	1,01	1,01	1,01	0,50	0,50
	Entalpia (kJ.kg <sup>-1</sup> )	-6881,56	-4241,06	-7047,20	-7202,45	-7440,34	-7440,34	-7303,12	-9363,44	-4495,75
	Vazão (kg.h <sup>-1</sup> )	13700,94	821,45	12879,49	12879,49	10550,18	1101,12	22328,55	12445,17	9883,37
Composição: Fração Mássica (%)	Furfural	0,002	0	0,0021	0,002	0	0	0,001	0,002	0
	Acetona	0,060	0,998	0	0	0	0	0	0	0
	Metanol	0	0	0	0	1	1	0,423	0,759	0
	FAc	0,124	0	0,132	0,132	0	0	0,076	0	0,172
	F2Ac	0,429	0	0,456	0,456	0	0	0,263	0	0,594
	FAc-OH	0,0005	0	0,0005	0,0005	0	0	0,0003	0	0,0006
	Água	0,385	0,002	0,410	0,410	0	0	0,236	0,239	0,234
Parâmetros		CD-03		CD-04		CD-05				
	Correntes	MET	FF	H2O	Produtos	S14	REC-MET			
	Temperatura (°C)	46,94	80,06	36,15	45,69	80,03	46,69			
	Pressão (bar)	0,48	0,48	0,06	0,06	0,48	0,48			
	Entalpia (kJ.kg <sup>-1</sup> )	-7456,36	-15504,50	-15773,61	-1219,48	-15605,94	-7375,38			
	Vazão (kg.h <sup>-1</sup> )	9540,96	2904,21	2281,78	7601,59	92,18	9448,78			
Composição: Fração Mássica (%)	Furfural	0	0,009	0	0	0	0			
	Acetona	0	0	0	0	0	0			
	Metanol	0,990	0	0	0	0,003	1,000			
	FAc	0	0	0,003	0,222	0	0			
	F2Ac	0	0	0	0,772	0	0			
	FAc-OH	0	0	0	0,001	0	0			
	Água	0,010	0,991	0,997	0,005	0,997	0			

Tabela 7B: Balanços de massa e energia para as principais colunas da etapa de separação e extração cenário 7

Parâmetros		CD-01			Extrator				
Correntes		S5	Acetona	S6	S8	S9	MET-1	S10	
Temperatura (°C)		80	38,93	84,11	25	25	25	31,10	
Pressão (bar)		1,50	0,54	0,54	1,01	1,01	1,01	1,01	
Entalpia (kJ.kg <sup>-1</sup> )		-6882,95	-4242,63	-7045,75	-7203,70	-7440,19	-7440,19	-7318,65	
Vazão (kg.h <sup>-1</sup> )		13697,13	821,30	12875,84	12875,84	13295,00	1117,24	25053,60	
Composição: Fração Mássica (%)	Furfural	0,002	0	0,0021	0,002	0	0	0,001	
	Acetona	0,060	0,998	0	0	0	0	0	
	Metanol	0	0	0	0	1	1	0,486	
	FAc	0,124	0	0,132	0,13	0	0	0,068	
	F2Ac	0,429	0	0,456	0,456	0	0	0,234	
	FAc-OH	0,0005	0	0,0005	0,0005	0	0	0,0002	
	Água	0,385	0,002	0,410	0,410	0	0	0,211	
Parâmetros		CD-02				CD-03		CD-04	
Correntes		S11	S14	S15	Produtos	MET	FF	REC-MET	PUG-água
Temperatura (°C)		52,16	35,07	26,59	35,07	74,70	108,25	64,45	99,90
Pressão (bar)		0,13	1,01	0,13	1,01	1,36	1,36	1,01	1,01
Entalpia (kJ.kg <sup>-1</sup> )		-1296,35	-1323,97	-9966,37	-1323,97	-8080,26	-15411,67	-7316,28	-15538,16
Vazão (kg.h <sup>-1</sup> )		7690,18	38,45	17401,87	7651,73	13442,59	3959,28	12177,53	1265,06
Composição: Fração Mássica (%)	Furfural	0	0	0,002	0	0	0,007	0	0,0001
	Acetona	0	0	0	0	0	0	0	0
	Metanol	0	0	0,700	0	0,906	0	1	0,0002
	FAc	0,222	0,222	0	0,222	0	0	0	0
	F2Ac	0,767	0,767	0	0,767	0	0	0	0
	FAc-OH	0,001	0,001	0	0,001	0	0	0	0
	Água	0,011	0,011	0,299	0,011	0,094	0,993	0	0,9997

Tabela 8B: Balanços de massa e energia para as principais colunas da etapa de separação e extração cenário 8

Parâmetros		CD-01				Extrator			
Correntes		S5	Acetona	S6	S8	S9	MET-1	S10	
Temperatura (°C)		80	37,94	83,15	25	25	25	30,96	
Pressão (bar)		1,50	0,52	0,52	1,01	1,01	1,01	1,01	
Entalpia (kJ.kg <sup>-1</sup> )		-6883,24	-4226,95	-7049,53	-7204,81	-7440,24	-7440,24	-7324,73	
Vazão (kg.h <sup>-1</sup> )		10957,41	655,59	10301,82	10301,82	10910,06	213,56	20998,31	
Composição: Fração Mássica (%)	Furfural	0,002	0	0,0021	0,002	0	0	0,001	
	Acetona	0,060	1,000	0	0	0	0	0	
	Metanol	0	0	0	0	1	1	0,509	
	FAc	0,124	0	0,132	0,132	0	0	0,065	
	F2Ac	0,429	0	0,456	0,456	0	0	0,224	
	FAc-OH	0,0005	0	0,0005	0,0005	0	0	0,0002	
	Água	0,385	0,0003	0,410	0,410	0	0	0,201	
Parâmetros		CD-02				CD-03		CD-04	
Correntes		S11	S14	S15	Produtos	MET	FF	REC-MET	PUG-água
Temperatura (°C)		153,89	35,08	24,77	35,08	73,23	106,93	37,22	69,85
Pressão (bar)		0,12	1,01	0,12	1,01	1,30	1,30	0,31	0,31
Entalpia (kJ.kg <sup>-1</sup> )		-969,36	-1173,08	-9837,24	-1173,08	-7997,90	-15419,67	-7404,61	-15673,80
Vazão (kg.h <sup>-1</sup> )		6069,63	12,14	14940,82	6057,49	11681,98	3258,84	10696,34	985,64
Composição: Fração Mássica (%)	Furfural	0	0	0,001	0	0	0,007	0	0
	Acetona	0	0	0	0	0	0	0	0
	Metanol	0	0	0,716	0	0,916	0	1	0,0002
	FAc	0,224	0,224	0	0,224	0	0	0	0
	F2Ac	0,775	0,775	0	0,775	0	0	0	0
	FAc-OH	0,001	0,001	0	0,001	0	0	0	0
	Água	0,0001	0,0001	0,283	0,0001	0,084	0,993	0	0,9998

**APÊNDICE C - Balanços de massa e energia do reator para os cenários simulados**

		<b>Cenário 1</b>		<b>Cenário 2</b>		<b>Cenário 3</b>		<b>Cenário 4</b>	
<b>Parâmetros</b>		S3	S4	S3	S4	S3	S4	S3	S4
Entalpia (kJ.kg-1)		-6498,871	-6882,659	-6418,701	-6882,859	-6418,787	-6882,953	-6418,781	-6882,95
Vazão (kg.h-1)		10958,75	10958,75	13697,387	13697,387	13697,122	13697,122	10957,70	10957,70
<b>Composição: Fração Mássica (%)</b>	Furfural	0,4739	0,0020	0,474	0,0020	0,4740	0,0020	0,4740	0,0020
	Acetona	0,2290	0,0599	0,229	0,0598	0,2290	0,0599	0,2290	0,0598
	Metanol	0	0	0	0	0	0	0	0
	FAc	9,257E-05	0,1238	0	0,1238	0	0,1238	0	0,1238
	F2Ac	0	0,4285	0	0,4285	0	0,4285	0	0,4285
	FAc-OH	0	0,0005	0	0,0005	0	0,0005	0	0,0005
	Água	0,297	0,3854	0,297	0,3854	0,297	0,3855	0,2970	0,3855
		<b>Cenário 5</b>		<b>Cenário 6</b>		<b>Cenário 7</b>		<b>Cenário 8</b>	
<b>Parâmetros</b>		S3	S4	S3	S4	S3	S4	S3	S4
Entalpia (kJ.kg-1)		-6498,03	-6881,74	-6417,545	-6881,561	-6418,781	-6882,95	-6419,072	-6883,235
Vazão (kg.h-1)		10961,06	10961,06	13700,94	13700,94	13697,13	13697,13	10957,41	10957,41
<b>Composição: Fração Mássica (%)</b>	Furfural	0,474	0,002	0,474	0,002	0,474	0,002	0,474	0,002
	Acetona	0,229	0,060	0,229	0,060	0,229	0,060	0,229	0,060
	Metanol	3,801E-07	3,801E-07	0	0	0	0	0	0
	FAc	0,00024	0,1240	0,00027	0,1239	0	0,1238	0	0,124
	F2Ac	0	0,4284	0	0,4285	0	0,4285	0	0,429
	FAc-OH	0	0,0005	0	0,0005	0	0,0005	0	0,0005
	Água	0,297	0,385	0,297	0,385	0,297	0,385	0,297	0,385

**APÊNDICE D** - Parâmetros operacionais nas colunas de extração e destilação para a separação dos produtos FAC/F2Ac dos reagentes e recuperação do solvente

<b>Cenário 1</b>						
<b>Parâmetro</b>	<b>CE-01</b>	<b>CD-01</b>	<b>CD-02</b>	<b>CD-03</b>	<b>CD-04</b>	<b>CD-05</b>
Pressão (bar)	1,01	0,3	0,5	0,5	0,05	0,5
Temperatura (°C)	25	-	-	-	-	-
Nº pratos	26	42	32	31	75	32
Nº alimentação		3	10	10	70	19
TD		15	375	242,66	94	238,75
RR		5	0,7	1	8,5	3

<b>Cenário 2</b>						
<b>Parâmetro</b>	<b>CE-01</b>	<b>CD-01</b>	<b>CD-02</b>	<b>CD-03</b>	<b>CD-04</b>	<b>CD-05</b>
Pressão (bar)	1,01	0,3	0,48	0,48	0,04	0,48
Temperatura (°C)	25	-	-	-	-	-
Nº pratos	20	45	44	30	47	39
Nº alimentação		20	25	10	46	25
TD		14,2	460	300	126,89	294,32
RR		4,2	0,93	1	6,8	0,71

<b>Cenário 3</b>					
<b>Parâmetro</b>	<b>CE-01</b>	<b>CD-01</b>	<b>CD-02</b>	<b>CD-03</b>	<b>CD-04</b>
Pressão (bar)	1,01	0,3	0,1	1,36	0,2
Temperatura (°C)	25	-	-	-	-
Nº pratos	9	45	50	32	39
Nº alimentação		20	(S10): 33; (S14): 48	10	30
TD		14,2	668,43	449,86	379,22
RR		4,25	0,65	0,1	1,4

Fração mássica Split (FS-01): 0,005

<b>Cenário 4</b>					
<b>Parâmetro</b>	<b>CE-01</b>	<b>CD-01</b>	<b>CD-02</b>	<b>CD-03</b>	<b>CD-04</b>
Pressão (bar)	1,01	0,16	0,12	1,3	0,31
Temperatura (°C)	25	-	-	-	-
Nº pratos	20	47	43	42	36
Nº alimentação		31	(S10): 28; (S14): 37	23	28
TD		11,29	568,46	388,53	333,82
RR		6,13	0,75	0,32	0,77

Fração mássica Split (FS-01): 0,002

TD: Taxa de destilado; RR: Razão de refluxo

<b>Cenário 5</b>						
<b>Parâmetro</b>	<b>CE-01</b>	<b>CD-01</b>	<b>CD-02</b>	<b>CD-03</b>	<b>CD-04</b>	<b>CD-05</b>
Pressão (bar)	1,01	0,3	0,5	0,5	0,06	0,5
Temperatura (°C)	25	-	-	-	-	-
Nº pratos	26	42	32	31	76	32
Nº alimentação		3	10	10	70	19
TD		15	375	242,66	94	238,75
RR		5	0,7	1	9	3

<b>Cenário 7</b>					
<b>Parâmetro</b>	<b>CE-01</b>	<b>CD-01</b>	<b>CD-02</b>	<b>CD-03</b>	<b>CD-04</b>
Pressão (bar)	1,01	0,54	0,13	1,36	1,01
Temperatura (°C)	25	-	-	-	-
Nº pratos	9	47	53	32	39
Nº alimentação		20	(S10): 36; (S14): 50	10	32
TD		14,2	668,83	450,26	380,05
RR		4,25	0,67	0,11	2

Fração mássica Split (FS-01): 0,005

<b>Cenário 6</b>						
<b>Parâmetro</b>	<b>CE-01</b>	<b>CD-01</b>	<b>CD-02</b>	<b>CD-03</b>	<b>CD-04</b>	<b>CD-05</b>
Pressão (bar)	1,01	0,52	0,5	0,48	0,06	0,48
Temperatura (°C)	25	-	-	-	-	-
Nº pratos	20	47	45	30	50	39
Nº alimentação		20	25	10	46	25
TD		14,2	460	300	126,31	294,89
RR		4,5	0,91	1	9,5	0,71

<b>Cenário 8</b>					
<b>Parâmetro</b>	<b>CE-01</b>	<b>CD-01</b>	<b>CD-02</b>	<b>CD-03</b>	<b>CD-04</b>
Pressão (bar)	1,01	0,52	0,12	1,3	0,31
Temperatura (°C)	25	-	-	-	-
Nº pratos	20	50	43	42	36
Nº alimentação		32	(S10): 28; (S14): 37	23	28
TD		11,29	568,46	388,53	333,82
RR		6,14	0,58	0,32	0,77

Fração mássica Split (FS-01): 0,002

TD: Taxa de destilado; RR: Razão de refluxo

## APÊNDICE E

Tabela 1E: Custo fixo de capital aplicado ao cenário 1

INVESTIMENTO DE CAPITAL FIXO TOTAL					
CUSTOS	ITENS	INVESTIMENTO	INVESTIMENTO (%)	INVESTIMENTO NORMALIZADO (%)	CAPEX (MM \$)
CUSTOS DIRETOS	Aquisição do Equipamento	100	27,78%	19,84%	13,29
	Instalação do Equipamento	47	13,06%	9,33%	6,25
	Instrumentação e Controle	36	10,00%	7,14%	4,78
	Tubulação	68	18,89%	13,49%	9,04
	Sistema elétrico	11	3,06%	2,18%	1,46
	Prédio	18	5,00%	3,57%	2,39
	Melhorias no terreno	10	2,78%	1,98%	1,33
	Facilidade	70	19,44%	13,89%	9,30
	<b>TOTA CUSTOS DIRETOS</b>	<b>360</b>	<b>100,00%</b>		
CUSTOS INDIRETOS	Engenharia	33	22,92%	6,55%	4,39
	Construção	41	28,47%	8,13%	5,45
	Despesas legais	4	2,78%	0,79%	0,53
	Taxa de Contratação	22	15,28%	4,37%	2,92
	Contigência	44	30,56%	8,73%	5,85
	<b>TOTAL CUSTOS INDIRETOS</b>	<b>144</b>	<b>100,00%</b>		
<b>TOTAL DE INVESTIMENTO FIXO DE CAPITAL - (MM \$)</b>		<b>504</b>		<b>100,00%</b>	<b>\$66,99</b>
<b>CAPITAL DE GIRO</b>		<b>75,6</b>		<b>0,15</b>	<b>\$10,05</b>
<b>TOTAL DE INVESTIMENTO DE CAPITAL</b>		<b>580</b>		<b>\$1,15</b>	<b>\$77,04</b>

Tabela 2E: Custo fixo de capital aplicado ao cenário 2

INVESTIMENTO DE CAPITAL FIXO TOTAL					
CUSTOS	ITENS	INVESTIMENTO	INVESTIMENTO (%)	INVESTIMENTO NORMALIZADO (%)	CAPEX (MM \$)
CUSTOS DIRETOS	Aquisição do Equipamento	100	27,78%	19,84%	11,44
	Instalação do Equipamento	47	13,06%	9,33%	5,38
	Instrumentação e Controle	36	10,00%	7,14%	4,12
	Tubulação	68	18,89%	13,49%	7,78
	Sistema elétrico	11	3,06%	2,18%	1,26
	Prédio	18	5,00%	3,57%	2,06
	Melhorias no terreno	10	2,78%	1,98%	1,14
	Facilidade	70	19,44%	13,89%	8,01
	<b>TOTA CUSTOS DIRETOS</b>	<b>360</b>	<b>100,00%</b>		
CUSTOS INDIRETOS	Engenharia	33	22,92%	6,55%	3,77
	Construção	41	28,47%	8,13%	4,69
	Despesas legais	4	2,78%	0,79%	0,46
	Taxa de Contratação	22	15,28%	4,37%	2,52
	Contigência	44	30,56%	8,73%	5,03
	<b>TOTAL CUSTOS INDIRETOS</b>	<b>144</b>	<b>100,00%</b>		
<b>TOTAL DE INVESTIMENTO FIXO DE CAPITAL - (MM \$)</b>		<b>504</b>		<b>100,00%</b>	<b>\$57,64</b>
<b>CAPITAL DE GIRO</b>		<b>75,6</b>		<b>0,15</b>	<b>\$8,65</b>
<b>TOTAL DE INVESTIMENTO DE CAPITAL</b>		<b>580</b>		<b>\$1,15</b>	<b>\$66,29</b>

Tabela 3E: Custo fixo de capital aplicado ao cenário 3

INVESTIMENTO DE CAPITAL FIXO TOTAL					
CUSTOS	ITENS	INVESTIMENTO	INVESTIMENTO (%)	INVESTIMENTO NORMALIZADO (%)	CAPEX (MM \$)
CUSTOS DIRETOS	Aquisição do Equipamento	100	27,78%	19,84%	8,02
	Instalação do Equipamento	47	13,06%	9,33%	3,77
	Instrumentação e Controle	36	10,00%	7,14%	2,89
	Tubulação	68	18,89%	13,49%	5,45
	Sistema elétrico	11	3,06%	2,18%	0,88
	Prédio	18	5,00%	3,57%	1,44
	Melhorias no terreno	10	2,78%	1,98%	0,80
	Facilidade	70	19,44%	13,89%	5,61
	<b>TOTA CUSTOS DIRETOS</b>	<b>360</b>	<b>100,00%</b>		
CUSTOS INDIRETOS	Engenharia	33	22,92%	6,55%	2,65
	Construção	41	28,47%	8,13%	3,29
	Despesas legais	4	2,78%	0,79%	0,32
	Taxa de Contratação	22	15,28%	4,37%	1,76
	Contigência	44	30,56%	8,73%	3,53
	<b>TOTAL CUSTOS INDIRETOS</b>	<b>144</b>	<b>100,00%</b>		
<b>TOTAL DE INVESTIMENTO FIXO DE CAPITAL - (MM \$)</b>		<b>504</b>		<b>100,00%</b>	<b>\$40,42</b>
<b>CAPITAL DE GIRO</b>		<b>75,6</b>		<b>0,15</b>	<b>\$6,06</b>
<b>TOTAL DE INVESTIMENTO DE CAPITAL</b>		<b>580</b>		<b>\$1,15</b>	<b>\$46,49</b>

Tabela 4E: Custo fixo de capital aplicado ao cenário 4

INVESTIMENTO DE CAPITAL FIXO TOTAL					
CUSTOS	ITENS	INVESTIMENTO	INVESTIMENTO (%)	INVESTIMENTO NORMALIZADO (%)	CAPEX (MM \$)
CUSTOS DIRETOS	Aquisição do Equipamento	100	27,78%	19,84%	7,52
	Instalação do Equipamento	47	13,06%	9,33%	3,53
	Instrumentação e Controle	36	10,00%	7,14%	2,71
	Tubulação	68	18,89%	13,49%	5,11
	Sistema elétrico	11	3,06%	2,18%	0,83
	Prédio	18	5,00%	3,57%	1,35
	Melhorias no terreno	10	2,78%	1,98%	0,75
	Facilidade	70	19,44%	13,89%	5,26
	<b>TOTA CUSTOS DIRETOS</b>		<b>360</b>	<b>100,00%</b>	
CUSTOS INDIRETOS	Engenharia	33	22,92%	6,55%	2,48
	Construção	41	28,47%	8,13%	3,08
	Despesas legais	4	2,78%	0,79%	0,30
	Taxa de Contratação	22	15,28%	4,37%	1,65
	Contigência	44	30,56%	8,73%	3,31
	<b>TOTAL CUSTOS INDIRETOS</b>		<b>144</b>	<b>100,00%</b>	
<b>TOTAL DE INVESTIMENTO FIXO DE CAPITAL - (MM \$)</b>		<b>504</b>		<b>100,00%</b>	<b>\$37,89</b>
<b>CAPITAL DE GIRO</b>		<b>75,6</b>		<b>0,15</b>	<b>\$5,68</b>
<b>TOTAL DE INVESTIMENTO DE CAPITAL</b>		<b>580</b>		<b>\$1,15</b>	<b>\$43,57</b>

Tabela 5E: Custo fixo de capital aplicado ao cenário 5

INVESTIMENTO DE CAPITAL FIXO TOTAL					
CUSTOS	ITENS	INVESTIMENTO	INVESTIMENTO (%)	INVESTIMENTO NORMALIZADO (%)	CAPEX (MM \$)
CUSTOS DIRETOS	Aquisição do Equipamento	100	27,78%	19,84%	13,58
	Instalação do Equipamento	47	13,06%	9,33%	6,38
	Instrumentação e Controle	36	10,00%	7,14%	4,89
	Tubulação	68	18,89%	13,49%	9,23
	Sistema elétrico	11	3,06%	2,18%	1,49
	Prédio	18	5,00%	3,57%	2,44
	Melhorias no terreno	10	2,78%	1,98%	1,36
	Facilidade	70	19,44%	13,89%	9,51
	<b>TOTA CUSTOS DIRETOS</b>	<b>360</b>	<b>100,00%</b>		
CUSTOS INDIRETOS	Engenharia	33	22,92%	6,55%	4,48
	Construção	41	28,47%	8,13%	5,57
	Despesas legais	4	2,78%	0,79%	0,54
	Taxa de Contratação	22	15,28%	4,37%	2,99
	Contigência	44	30,56%	8,73%	5,97
	<b>TOTAL CUSTOS INDIRETOS</b>	<b>144</b>	<b>100,00%</b>		
<b>TOTAL DE INVESTIMENTO FIXO DE CAPITAL - (MM \$)</b>		<b>504</b>		<b>100,00%</b>	<b>\$68,44</b>
<b>CAPITAL DE GIRO</b>		<b>75,6</b>		<b>0,15</b>	<b>\$10,27</b>
<b>TOTAL DE INVESTIMENTO DE CAPITAL</b>		<b>580</b>		<b>\$1,15</b>	<b>\$78,70</b>

Tabela 6E: Custo fixo de capital aplicado ao cenário 6

INVESTIMENTO DE CAPITAL FIXO TOTAL					
CUSTOS	ITENS	INVESTIMENTO	INVESTIMENTO (%)	INVESTIMENTO NORMALIZADO (%)	CAPEX (MM \$)
CUSTOS DIRETOS	Aquisição do Equipamento	100	27,78%	19,84%	12,81
	Instalação do Equipamento	47	13,06%	9,33%	6,02
	Instrumentação e Controle	36	10,00%	7,14%	4,61
	Tubulação	68	18,89%	13,49%	8,71
	Sistema elétrico	11	3,06%	2,18%	1,41
	Prédio	18	5,00%	3,57%	2,31
	Melhorias no terreno	10	2,78%	1,98%	1,28
	Facilidade	70	19,44%	13,89%	8,96
	<b>TOTA CUSTOS DIRETOS</b>	<b>360</b>	<b>100,00%</b>		
CUSTOS INDIRETOS	Engenharia	33	22,92%	6,55%	4,23
	Construção	41	28,47%	8,13%	5,25
	Despesas legais	4	2,78%	0,79%	0,51
	Taxa de Contratação	22	15,28%	4,37%	2,82
	Contigência	44	30,56%	8,73%	5,63
	<b>TOTAL CUSTOS INDIRETOS</b>	<b>144</b>	<b>100,00%</b>		
<b>TOTAL DE INVESTIMENTO FIXO DE CAPITAL - (MM \$)</b>		<b>504</b>		<b>100,00%</b>	<b>\$64,54</b>
<b>CAPITAL DE GIRO</b>		<b>75,6</b>		<b>0,15</b>	<b>\$9,68</b>
<b>TOTAL DE INVESTIMENTO DE CAPITAL</b>		<b>580</b>		<b>\$1,15</b>	<b>\$74,22</b>

Tabela 7E: Custo fixo de capital aplicado ao cenário 7

INVESTIMENTO DE CAPITAL FIXO TOTAL					
CUSTOS	ITENS	INVESTIMENTO	INVESTIMENTO (%)	INVESTIMENTO NORMALIZADO (%)	CAPEX (MM \$)
CUSTOS DIRETOS	Aquisição do Equipamento	100	27,78%	19,84%	7,83
	Instalação do Equipamento	47	13,06%	9,33%	3,68
	Instrumentação e Controle	36	10,00%	7,14%	2,82
	Tubulação	68	18,89%	13,49%	5,32
	Sistema elétrico	11	3,06%	2,18%	0,86
	Prédio	18	5,00%	3,57%	1,41
	Melhorias no terreno	10	2,78%	1,98%	0,78
	Facilidade	70	19,44%	13,89%	5,48
	<b>TOTA CUSTOS DIRETOS</b>		<b>360</b>	<b>100,00%</b>	
CUSTOS INDIRETOS	Engenharia	33	22,92%	6,55%	2,58
	Construção	41	28,47%	8,13%	3,21
	Despesas legais	4	2,78%	0,79%	0,31
	Taxa de Contratação	22	15,28%	4,37%	1,72
	Contigência	44	30,56%	8,73%	3,45
	<b>TOTAL CUSTOS INDIRETOS</b>		<b>144</b>	<b>100,00%</b>	
<b>TOTAL DE INVESTIMENTO FIXO DE CAPITAL - (MM \$)</b>		<b>504</b>		<b>100,00%</b>	<b>\$39,47</b>
<b>CAPITAL DE GIRO</b>		<b>75,6</b>		<b>0,15</b>	<b>\$5,92</b>
<b>TOTAL DE INVESTIMENTO DE CAPITAL</b>		<b>580</b>		<b>\$1,15</b>	<b>\$45,39</b>

Tabela 8E: Custo fixo de capital aplicado ao cenário 8

INVESTIMENTO DE CAPITAL FIXO TOTAL					
CUSTOS	ITENS	INVESTIMENTO	INVESTIMENTO (%)	INVESTIMENTO NORMALIZADO (%)	CAPEX (MM \$)
CUSTOS DIRETOS	Aquisição do Equipamento	100	27,78%	19,84%	11,24
	Instalação do Equipamento	47	13,06%	9,33%	5,28
	Instrumentação e Controle	36	10,00%	7,14%	4,05
	Tubulação	68	18,89%	13,49%	7,65
	Sistema elétrico	11	3,06%	2,18%	1,24
	Prédio	18	5,00%	3,57%	2,02
	Melhorias no terreno	10	2,78%	1,98%	1,12
	Facilidade	70	19,44%	13,89%	7,87
	<b>TOTA CUSTOS DIRETOS</b>		<b>360</b>	<b>100,00%</b>	
CUSTOS INDIRETOS	Engenharia	33	22,92%	6,55%	3,71
	Construção	41	28,47%	8,13%	4,61
	Despesas legais	4	2,78%	0,79%	0,45
	Taxa de Contratação	22	15,28%	4,37%	2,47
	Contigência	44	30,56%	8,73%	4,95
	<b>TOTAL CUSTOS INDIRETOS</b>		<b>144</b>	<b>100,00%</b>	
<b>TOTAL DE INVESTIMENTO FIXO DE CAPITAL - (MM \$)</b>		<b>504</b>		<b>100,00%</b>	<b>\$56,67</b>
<b>CAPITAL DE GIRO</b>		<b>75,6</b>		<b>0,15</b>	<b>\$8,50</b>
<b>TOTAL DE INVESTIMENTO DE CAPITAL</b>		<b>580</b>		<b>\$1,15</b>	<b>\$65,17</b>

**APÊNDICE F** - Consumos e custos anuais de cada matéria-prima, solvente e catalisador para os diferentes cenários avaliados

**Cenário 1:**

**MATÉRIA-PRIMA**

MATÉRIA-PRIMA	\$/kg	CONSUMO (MM kg/ano)	CUSTO (MM \$/ano)
FURFURAL	\$ 1,4000	40,968	\$ 57,355
ACETONE	\$ 0,9700	14,679	\$ 14,239
WATER	\$ 0,0004	0,530	\$ 0,000
METHANOL	\$ 0,4300	0,004	\$ 0,002
Cat	\$ 25,0000	0,001	\$ 0,027
<b>TOTAL</b>	---	<b>56,182</b>	<b>\$ 71,622</b>

**Cenário 2:**

**MATÉRIA-PRIMA**

MATÉRIA-PRIMA	\$/kg	CONSUMO (MM kg/ano)	CUSTO (MM \$/ano)
FURFURAL	\$ 1,4000	51,208	\$ 71,691
ACETONE	\$ 0,9700	18,350	\$ 17,799
WATER	\$ 0,0004	0,184	\$ 0,000
METHANOL	\$ 0,4300	0,002	\$ 0,001
Cat	\$ 25,0000	0,001	\$ 0,034
<b>TOTAL</b>	---	<b>69,745</b>	<b>\$ 89,525</b>

**Cenário 3:**

**MATÉRIA-PRIMA**

MATÉRIA-PRIMA	\$/kg	CONSUMO (MM kg/ano)	CUSTO (MM \$/ano)
FURFURAL	\$ 1,4000	51,210	\$ 71,693
ACETONE	\$ 0,9700	18,350	\$ 17,799
WATER	\$ 0,0004	1,060	\$ 0,0004
METHANOL	\$ 0,4300	0,002	\$ 0,0010
Cat	\$ 25,0000	0,001	\$ 0,0338
<b>TOTAL</b>	---	<b>70,623</b>	<b>\$ 89,528</b>

**Cenário 4:**

**MATÉRIA-PRIMA**

MATÉRIA-PRIMA	\$/kg	CONSUMO (MM kg/ano)	CUSTO (MM \$/ano)
FURFURAL	\$ 1,4000	40,966	\$ 57,353
ACETONE	\$ 0,9700	14,680	\$ 14,239
WATER	\$ 0,0004	0,135	\$ 0,00005
METHANOL	\$ 0,4300	0,001	\$ 0,0005
Cat	\$ 25,0000	0,001	\$ 0,0337
<b>TOTAL</b>	---	<b>55,784</b>	<b>\$ 71,626</b>

## Cenário 5:

## MATÉRIA-PRIMA

MATÉRIA-PRIMA	\$/kg	CONSUMO (MM kg/ano)	CUSTO (MM \$/ano)
FURFURAL	\$ 1,4000	40,968	\$ 57,355
ACETONE	\$ 0,9700	14,679	\$ 14,239
WATER	\$ 0,0004	0,534	\$ 0,00021
METHANOL	\$ 0,4300	0,004	\$ 0,00161
Cat	\$ 25,0000	0,001	\$ 0,027
<b>TOTAL</b>	---	<b>56,185</b>	<b>\$ 71,622</b>

## Cenário 6:

## MATÉRIA-PRIMA

MATÉRIA-PRIMA	\$/kg	CONSUMO (MM kg/ano)	CUSTO (MM \$/ano)
FURFURAL	\$ 1,4000	51,208	\$ 71,692
ACETONE	\$ 0,9700	18,346	\$ 17,796
WATER	\$ 0,0004	0,233	\$ 0,00009
METHANOL	\$ 0,4300	0,002	\$ 0,00098
Cat	\$ 25,0000	0,001	\$ 0,034
<b>TOTAL</b>	---	<b>69,791</b>	<b>\$ 89,523</b>

## Cenário 7:

## MATÉRIA-PRIMA

MATÉRIA-PRIMA	\$/kg	CONSUMO (MM kg/ano)	CUSTO (MM \$/ano)
FURFURAL	\$ 1,4000	51,209	\$ 71,693
ACETONE	\$ 0,9700	18,350	\$ 17,799
WATER	\$ 0,0004	1,060	\$ 0,00042
METHANOL	\$ 0,4300	0,002	\$ 0,00081
Cat	\$ 25,0000	0,001	\$ 0,034
<b>TOTAL</b>	---	<b>70,622</b>	<b>\$ 89,527</b>

## Cenário 8:

## MATÉRIA-PRIMA

MATÉRIA-PRIMA	\$/kg	CONSUMO (MM kg/ano)	CUSTO (MM \$/ano)
FURFURAL	\$ 1,4000	40,966	\$ 57,353
ACETONE	\$ 0,9700	14,680	\$ 14,239
WATER	\$ 0,0004	0,135	\$ 0,00005
METHANOL	\$ 0,4300	0,001	\$ 0,001
Cat	\$ 25,0000	0,001	\$ 0,027
<b>TOTAL</b>	---	<b>55,783</b>	<b>\$ 71,620</b>

**APÊNDICE G** - Consumos anuais e os custos correspondentes a cada utilidade requerida em cada cenário avaliado

**Cenário 1:**

UTILIDADE	CUSTO R\$	CONSUMO ANUAL	CUSTO ANUAL (MMR\$/ANO)
Eletricidade (\$/kWh)	\$ 0,045	361627,2	\$ 0,016
Refrigerante (\$/GJ)	\$ 4,000	324073,0	\$ 1,296
Vapor saturado 790 kPa (R\$/kg)	\$ 6,000	364383,9	\$ 2,186
Água de resfriamento	\$ 0,08	14056812,4	\$ 1,125
<b>TOTAL</b>	---	15106896,4	\$ 4,62

**Cenário 2:**

UTILIDADE	CUSTO R\$	CONSUMO ANUAL	CUSTO ANUAL (MMR\$/ANO)
Eletricidade (\$/kWh)	\$ 0,045	365428,8	\$ 0,016
Refrigerante (\$/GJ)	\$ 4,000	361843,7	\$ 1,447
Vapor saturado 790 kPa (R\$/kg)	\$ 6,000	336031,6	\$ 2,016
Água de resfriamento	\$ 0,080	13162555,6	\$ 1,053
<b>TOTAL</b>	---	14225859,7	\$ 4,533

**Cenário 3:**

UTILIDADE	CUSTO R\$	CONSUMO ANUAL	CUSTO ANUAL (MMR\$/ANO)
Eletricidade (\$/kWh)	\$ 0,045	446688,0	\$ 0,020
Refrigerante (\$/GJ)	\$ 4,000	650771,9	\$ 2,603
Vapor saturado 790 kPa (R\$/kg)	\$ 6,000	396130,5	\$ 2,377
Água de resfriamento	\$ 0,080	3330078,2	\$ 0,266
<b>TOTAL</b>	---	4823668,6	\$ 5,266

**Cenário 4:**

UTILIDADE	CUSTO R\$	CONSUMO ANUAL	CUSTO ANUAL (MMR\$/ANO)
Eletricidade (\$/kWh)	\$ 0,045	357033,6	\$ 0,016
Refrigerante (\$/GJ)	\$ 4,000	349294,9	\$ 1,397
Vapor saturado 790 kPa (R\$/kg)	\$ 6,000	340546,2	\$ 2,043
Água de resfriamento	\$ 0,080	7398634,7	\$ 0,592
<b>TOTAL</b>	---	8445509,5	\$ 4,048

## Cenário 5:

UTILIDADE	CUSTO RS	CONSUMO ANUAL	CUSTO ANUAL (MM RS/ANO)
Eletricidade (\$/kWh)	\$ 0,045	361627,2	\$ 0,016
Refrigerante (\$/GJ)	\$ 4,000	0,0	\$ -
Vapor saturado 790 kPa (R\$/kg)	\$ 6,000	371947,0	\$ 2,232
Água de resfriamento	\$ 0,080	21028225,7	\$ 1,682
<b>TOTAL</b>	---	21761799,9	<b>\$ 3,930</b>

## Cenário 6:

UTILIDADE	CUSTO RS	CONSUMO ANUAL	CUSTO ANUAL (MM RS/ANO)
Eletricidade (\$/kWh)	\$ 0,045	393544,8	\$ 0,018
Refrigerante (\$/GJ)	\$ 4,000	0,0	\$ -
Vapor saturado 790 kPa (R\$/kg)	\$ 6,000	392818,1	\$ 2,357
Água de resfriamento	\$ 0,080	23423753,4	\$ 1,874
<b>TOTAL</b>	---	24210116,3	<b>\$ 4,249</b>

## Cenário 7:

UTILIDADE	CUSTO RS	CONSUMO ANUAL	CUSTO ANUAL (MM RS/ANO)
Eletricidade (\$/kWh)	\$ 0,045	436312,8	\$ 0,020
Refrigerante (\$/GJ)	\$ 4,000	0,0	\$ -
Vapor saturado 790 kPa (R\$/kg)	\$ 6,000	430247,5	\$ 2,581
Água de resfriamento	\$ 0,080	10955934,7	\$ 0,876
<b>TOTAL</b>	---	11822495,0	<b>\$ 3,478</b>

## Cenário 8:

UTILIDADE	CUSTO RS	CONSUMO ANUAL	CUSTO ANUAL (MM RS/ANO)
Eletricidade (\$/kWh)	\$ 0,045	300880,8	\$ 0,014
Refrigerante (\$/GJ)	\$ 4,000	0,0	\$ -
Vapor saturado 790 kPa (R\$/kg)	\$ 6,000	327527,1	\$ 1,965
Água de resfriamento	\$ 0,080	14332722,4	\$ 1,147
<b>TOTAL</b>	---	14961130,3	<b>\$ 3,125</b>

**Apêndice H - Receita anual de cada cenário proposto, custos operacionais e fluxo de caixa líquido**

**Cenário 1:**

COMPONENTE	%	Valor (MM R\$)
<b>Receita Anual</b>		R\$ 157,88
(-) Taxas e Impostos	28%	R\$ 44,21
<b>= Receita Líquida</b>		R\$ 113,68
(-) Custos Operacionais		R\$ 77,05
(-) Depreciação	10%	R\$ 7,30
<b>= Fluxo de Caixa Líquido</b>		R\$ 29,33

**Cenário 2:**

COMPONENTE	%	Valor (MM R\$)
<b>Receita Anual</b>		R\$ 175,52
(-) Taxas e Impostos	28%	R\$ 49,15
<b>= Receita Líquida</b>		R\$ 126,38
(-) Custos Operacionais		R\$ 94,86
(-) Depreciação	10%	R\$ 6,28
<b>= Fluxo de Caixa Líquido</b>		R\$ 25,24

**Cenário 3:**

COMPONENTE	%	Valor (MM R\$)
<b>Receita Anual</b>		R\$ 163,47
(-) Taxas e Impostos	28%	R\$ 45,77
<b>= Receita Líquida</b>		R\$ 117,70
(-) Custos Operacionais		R\$ 95,59
(-) Depreciação	10%	R\$ 4,40
<b>= Fluxo de Caixa Líquido</b>		R\$ 17,70

**Cenário 4:**

COMPONENTE	%	Valor (MM R\$)
<b>Receita Anual</b>		R\$ 134,99
(-) Taxas e Impostos	28%	R\$ 37,80
<b>= Receita Líquida</b>		R\$ 97,19
(-) Custos Operacionais		R\$ 76,47
(-) Depreciação	10%	R\$ 4,13
<b>= Fluxo de Caixa Líquido</b>		R\$ 16,59

**Cenário 5:**

COMPONENTE	%	Valor (MM R\$)
<b>Receita Anual</b>		R\$ 158,02
(-) Taxas e Impostos	28%	R\$ 44,25
<b>= Receita Líquida</b>		R\$ 113,77
(-) Custos Operacionais		R\$ 76,35
(-) Depreciação	10%	R\$ 7,45
<b>= Fluxo de Caixa Líquido</b>		R\$ 29,97

**Cenário 7:**

COMPONENTE	%	Valor (MM R\$)
<b>Receita Anual</b>		R\$ 160,26
(-) Taxas e Impostos	28%	R\$ 44,87
<b>= Receita Líquida</b>		R\$ 115,39
(-) Custos Operacionais		R\$ 93,81
(-) Depreciação	10%	R\$ 4,30
<b>= Fluxo de Caixa Líquido</b>		R\$ 17,28

**Cenário 6:**

COMPONENTE	%	Valor (MM R\$)
<b>Receita Anual</b>		R\$ 180,37
(-) Taxas e Impostos	28%	R\$ 50,50
<b>= Receita Líquida</b>		R\$ 129,86
(-) Custos Operacionais		R\$ 94,57
(-) Depreciação	10%	R\$ 7,03
<b>= Fluxo de Caixa Líquido</b>		R\$ 28,26

**Cenário 8:**

COMPONENTE	%	Valor (MM R\$)
<b>Receita Anual</b>		R\$ 147,96
(-) Taxas e Impostos	28%	R\$ 41,43
<b>= Receita Líquida</b>		R\$ 106,53
(-) Custos Operacionais		R\$ 75,55
(-) Depreciação	10%	R\$ 6,17
<b>= Fluxo de Caixa Líquido</b>		R\$ 24,81

## APÊNDICE I - Fluxos de caixa dos cenários propostos

### Cenário 1:

<b>Investimento Inicial</b>	\$77,04
<b>Taxa de Desconto</b>	15,00%

Período (Anos)	Fluxo de Caixa	Valor Presente	VP Acumulado
0	-\$77,04	-\$77,04	-\$77,04
1	\$29,33	\$25,51	-\$51,53
2	\$29,33	\$22,18	-\$29,35
3	\$29,33	\$19,29	-\$10,06
4	\$29,33	\$16,77	\$6,71
5	\$29,33	\$14,58	\$21,29
6	\$29,33	\$12,68	\$33,97
7	\$29,33	\$11,03	\$45,00
8	\$29,33	\$9,59	\$54,59
9	\$29,33	\$8,34	\$62,93
10	\$29,33	\$7,25	\$70,18
11	\$29,33	\$6,30	\$76,48
12	\$29,33	\$5,48	\$81,96
13	\$29,33	\$4,77	\$86,73
14	\$29,33	\$4,15	\$90,88
15	\$29,33	\$3,60	\$94,48

### Cenário 2:

<b>Investimento Inicial</b>	\$66,29
<b>Taxa de Desconto</b>	15,00%

Período (Anos)	Fluxo de Caixa	Valor Presente	VP Acumulado
0	-\$66,29	-\$66,29	-\$66,29
1	\$25,24	\$21,95	-\$44,34
2	\$25,24	\$19,09	-\$25,25
3	\$25,24	\$16,60	-\$8,66
4	\$25,24	\$14,43	\$5,77
5	\$25,24	\$12,55	\$18,32
6	\$25,24	\$10,91	\$29,23
7	\$25,24	\$9,49	\$38,72
8	\$25,24	\$8,25	\$46,97
9	\$25,24	\$7,17	\$54,15
10	\$25,24	\$6,24	\$60,39
11	\$25,24	\$5,43	\$65,81
12	\$25,24	\$4,72	\$70,53
13	\$25,24	\$4,10	\$74,63
14	\$25,24	\$3,57	\$78,20
15	\$25,24	\$3,10	\$81,30

## Cenário 3:

<b>Investimento Inicial</b>	\$46,49
<b>Taxa de Desconto</b>	15,00%

Período (Anos)	Fluxo de Caixa	Valor Presente	VP Acumulado
0	-\$46,49	-\$46,49	-\$46,49
1	\$17,70	\$15,39	-\$31,10
2	\$17,70	\$13,38	-\$17,71
3	\$17,70	\$11,64	-\$6,07
4	\$17,70	\$10,12	\$4,05
5	\$17,70	\$8,80	\$12,85
6	\$17,70	\$7,65	\$20,50
7	\$17,70	\$6,65	\$27,16
8	\$17,70	\$5,79	\$32,94
9	\$17,70	\$5,03	\$37,97
10	\$17,70	\$4,38	\$42,35
11	\$17,70	\$3,80	\$46,16
12	\$17,70	\$3,31	\$49,46
13	\$17,70	\$2,88	\$52,34
14	\$17,70	\$2,50	\$54,84
15	\$17,70	\$2,18	\$57,02

## Cenário 4:

<b>Investimento Inicial</b>	\$43,57
<b>Taxa de Desconto</b>	15,00%

Período (Anos)	Fluxo de Caixa	Valor Presente	VP Acumulado
0	-\$43,57	-\$43,57	-\$43,57
1	\$16,59	\$14,43	-\$29,14
2	\$16,59	\$12,54	-\$16,60
3	\$16,59	\$10,91	-\$5,69
4	\$16,59	\$9,49	\$3,79
5	\$16,59	\$8,25	\$12,04
6	\$16,59	\$7,17	\$19,21
7	\$16,59	\$6,24	\$25,45
8	\$16,59	\$5,42	\$30,87
9	\$16,59	\$4,72	\$35,59
10	\$16,59	\$4,10	\$39,69
11	\$16,59	\$3,57	\$43,26
12	\$16,59	\$3,10	\$46,36
13	\$16,59	\$2,70	\$49,05
14	\$16,59	\$2,34	\$51,40
15	\$16,59	\$2,04	\$53,44

## Cenário 5:

<b>Investimento Inicial</b>	\$78,70
<b>Taxa de Desconto</b>	15,00%

Período (Anos)	Fluxo de Caixa	Valor Presente	VP Acumulado
0	-\$78,70	-\$78,70	-\$78,70
1	\$29,97	\$26,06	-\$52,65
2	\$29,97	\$22,66	-\$29,99
3	\$29,97	\$19,70	-\$10,28
4	\$29,97	\$17,13	\$6,85
5	\$29,97	\$14,90	\$21,75
6	\$29,97	\$12,96	\$34,71
7	\$29,97	\$11,27	\$45,97
8	\$29,97	\$9,80	\$55,77
9	\$29,97	\$8,52	\$64,29
10	\$29,97	\$7,41	\$71,70
11	\$29,97	\$6,44	\$78,14
12	\$29,97	\$5,60	\$83,74
13	\$29,97	\$4,87	\$88,61
14	\$29,97	\$4,24	\$92,84
15	\$29,97	\$3,68	\$96,53

## Cenário 6:

<b>Investimento Inicial</b>	\$74,22
<b>Taxa de Desconto</b>	15,00%

Período (Anos)	Fluxo de Caixa	Valor Presente	VP Acumulado
0	-\$74,22	-\$74,22	-\$74,22
1	\$28,26	\$24,58	-\$49,65
2	\$28,26	\$21,37	-\$28,28
3	\$28,26	\$18,58	-\$9,69
4	\$28,26	\$16,16	\$6,46
5	\$28,26	\$14,05	\$20,51
6	\$28,26	\$12,22	\$32,73
7	\$28,26	\$10,62	\$43,36
8	\$28,26	\$9,24	\$52,60
9	\$28,26	\$8,03	\$60,63
10	\$28,26	\$6,99	\$67,61
11	\$28,26	\$6,07	\$73,69
12	\$28,26	\$5,28	\$78,97
13	\$28,26	\$4,59	\$83,57
14	\$28,26	\$3,99	\$87,56
15	\$28,26	\$3,47	\$91,03

## Cenário 7:

<b>Investimento Inicial</b>	\$45,39
<b>Taxa de Desconto</b>	15,00%

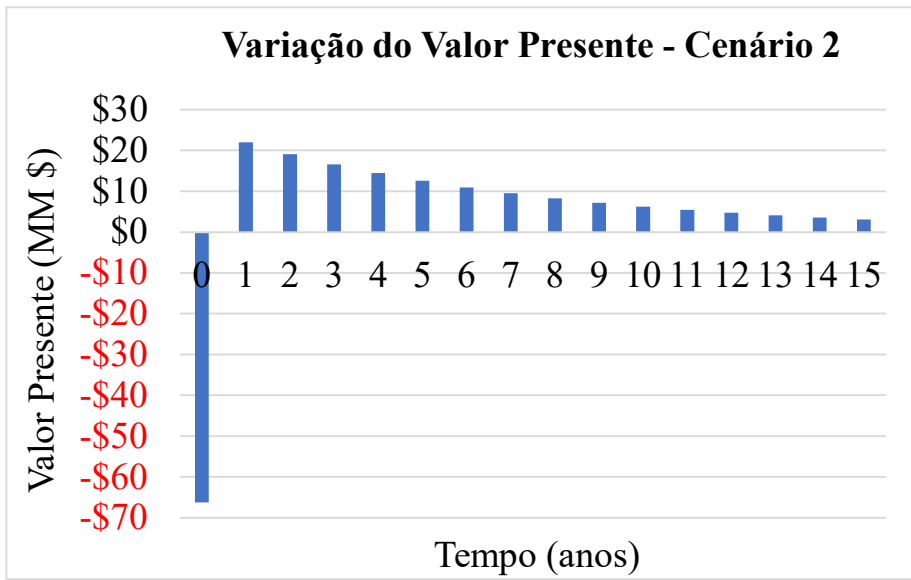
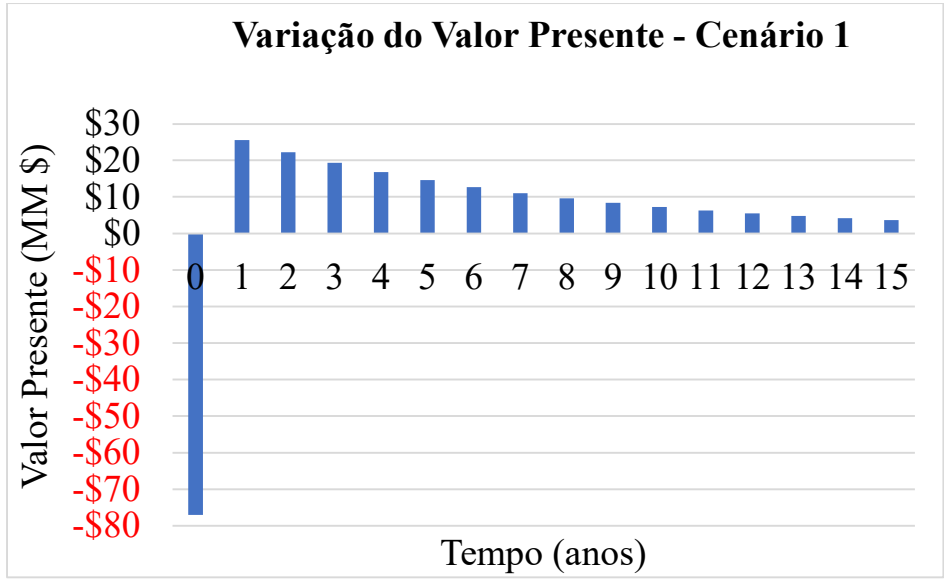
Período (Anos)	Fluxo de Caixa	Valor Presente	VP Acumulado
0	-\$45,39	-\$45,39	-\$45,39
1	\$17,28	\$15,03	-\$30,36
2	\$17,28	\$13,07	-\$17,29
3	\$17,28	\$11,36	-\$5,93
4	\$17,28	\$9,88	\$3,95
5	\$17,28	\$8,59	\$12,54
6	\$17,28	\$7,47	\$20,02
7	\$17,28	\$6,50	\$26,51
8	\$17,28	\$5,65	\$32,16
9	\$17,28	\$4,91	\$37,08
10	\$17,28	\$4,27	\$41,35
11	\$17,28	\$3,71	\$45,06
12	\$17,28	\$3,23	\$48,29
13	\$17,28	\$2,81	\$51,10
14	\$17,28	\$2,44	\$53,54
15	\$17,28	\$2,12	\$55,67

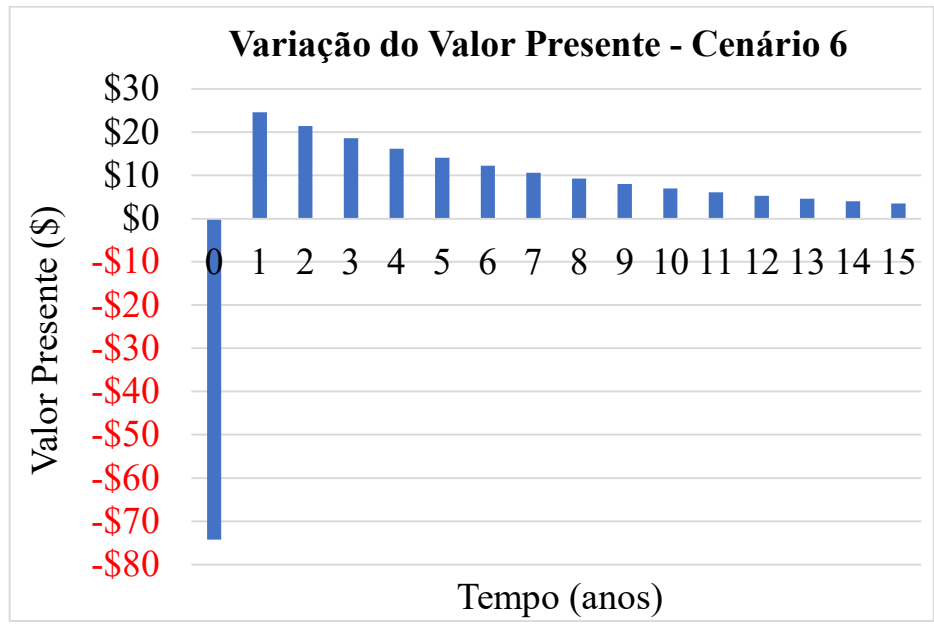
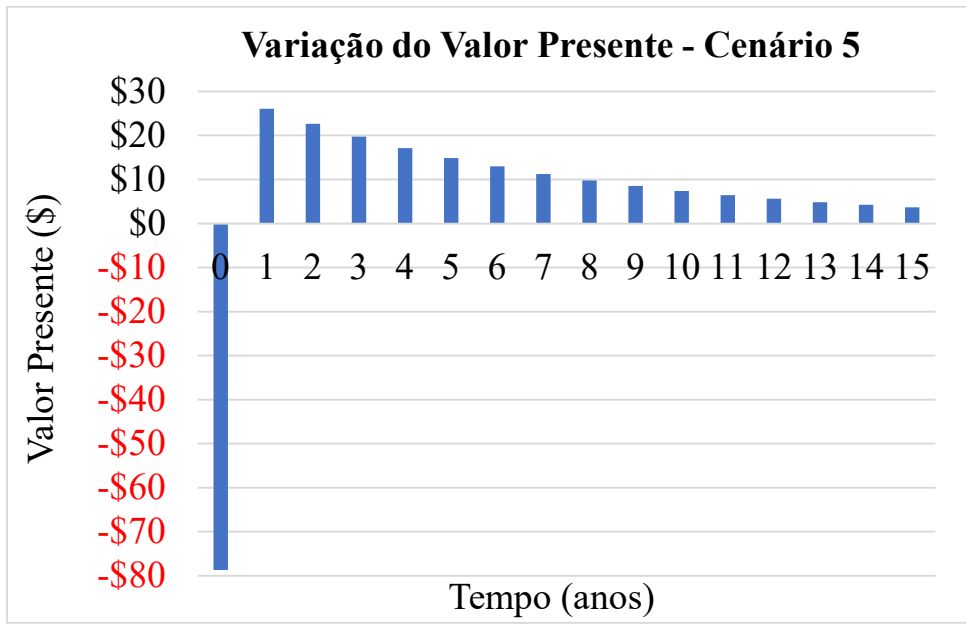
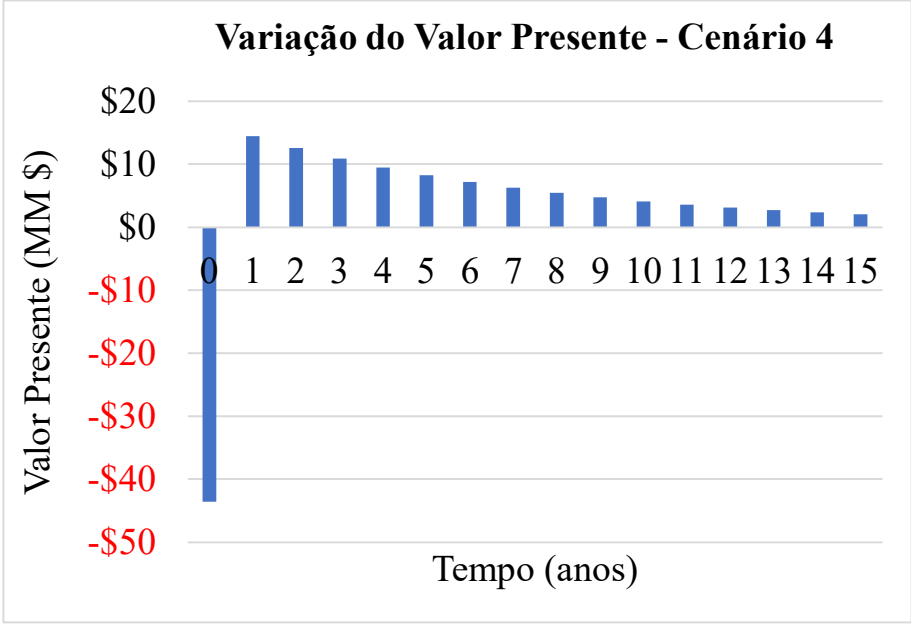
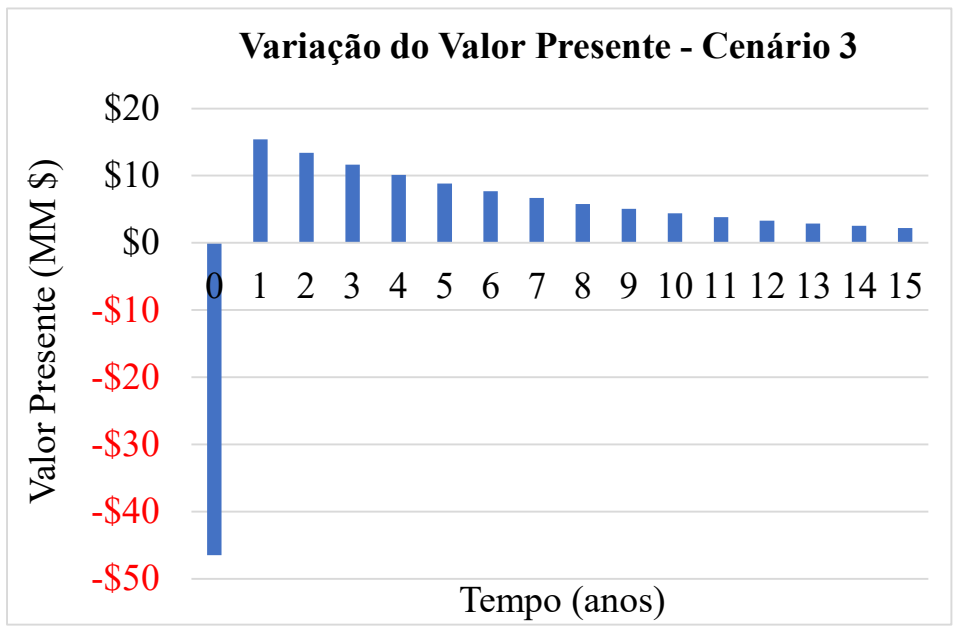
## Cenário 8:

<b>Investimento Inicial</b>	\$65,17
<b>Taxa de Desconto</b>	15,00%

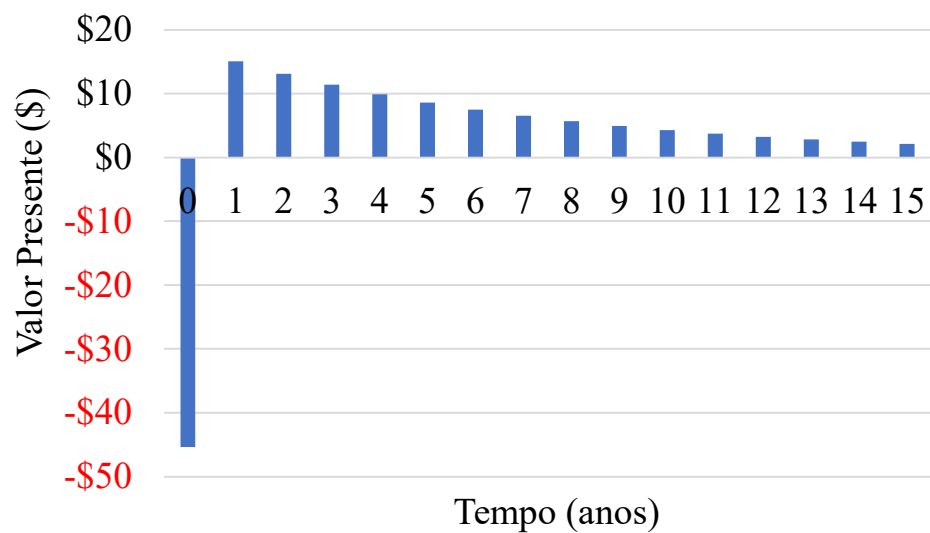
Período (Anos)	Fluxo de Caixa	Valor Presente	VP Acumulado
0	-\$65,17	-\$65,17	-\$65,17
1	\$24,81	\$21,58	-\$43,59
2	\$24,81	\$18,76	-\$24,83
3	\$24,81	\$16,32	-\$8,51
4	\$24,81	\$14,19	\$5,68
5	\$24,81	\$12,34	\$18,01
6	\$24,81	\$10,73	\$28,74
7	\$24,81	\$9,33	\$38,07
8	\$24,81	\$8,11	\$46,18
9	\$24,81	\$7,05	\$53,23
10	\$24,81	\$6,13	\$59,37
11	\$24,81	\$5,33	\$64,70
12	\$24,81	\$4,64	\$69,34
13	\$24,81	\$4,03	\$73,37
14	\$24,81	\$3,51	\$76,88
15	\$24,81	\$3,05	\$79,93

APÊNDICE J - Gráficos do Valor Presente em função do tempo para todos os cenários

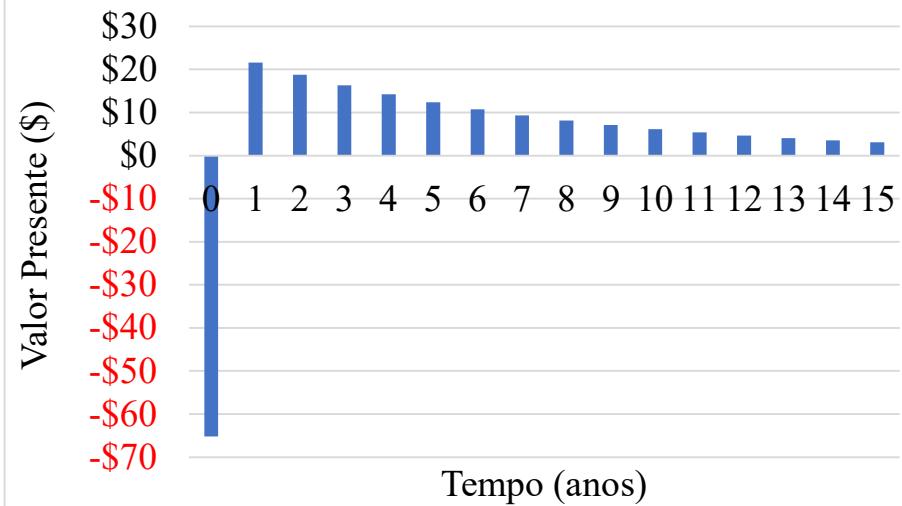




**Variação do Valor Presente - Cenário 7**



**Variação do Valor Presente - Cenário 8**



APÊNDICE K - Gráficos de distribuição cumulativa do VPL do projeto considerando a variação nos custos de furfural, acetona, capacidade de produção

Cenário 1 - VPL

Figura 1: Gráfico da distribuição cumulativa para o VPL do Projeto referente a variação do custo do Furfural

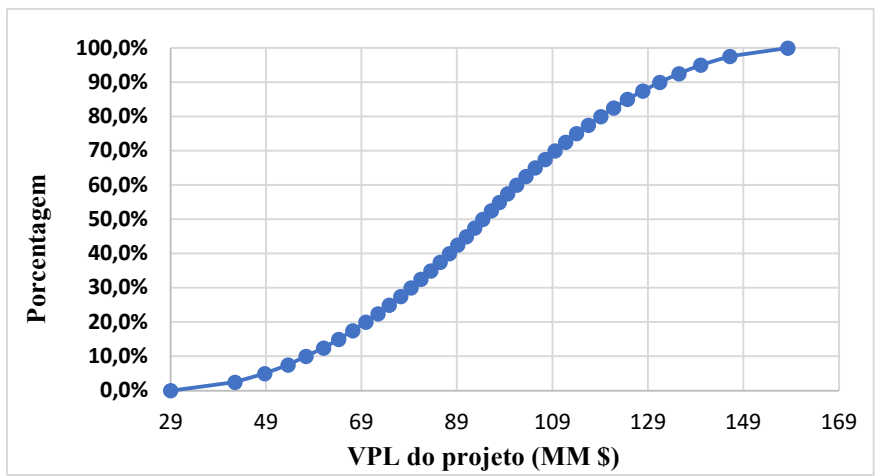


Figura 2: Gráfico da distribuição cumulativa para o VPL do Projeto referente a variação do custo da Acetona

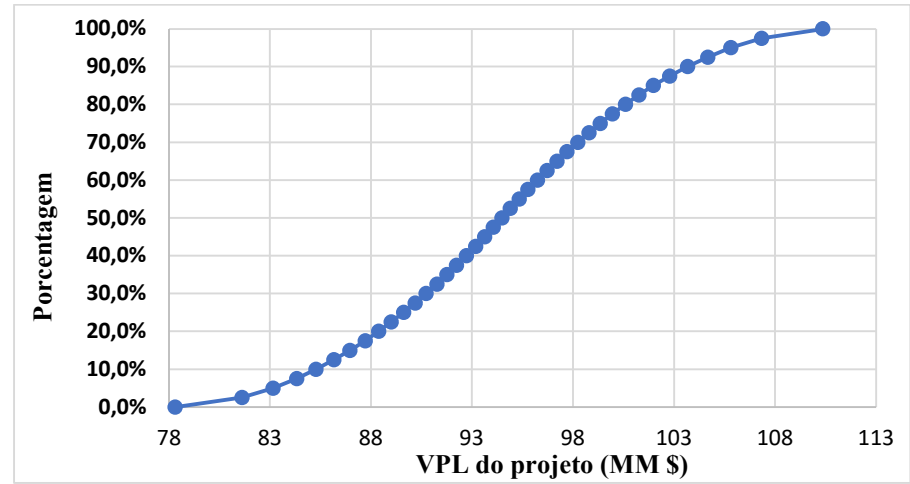
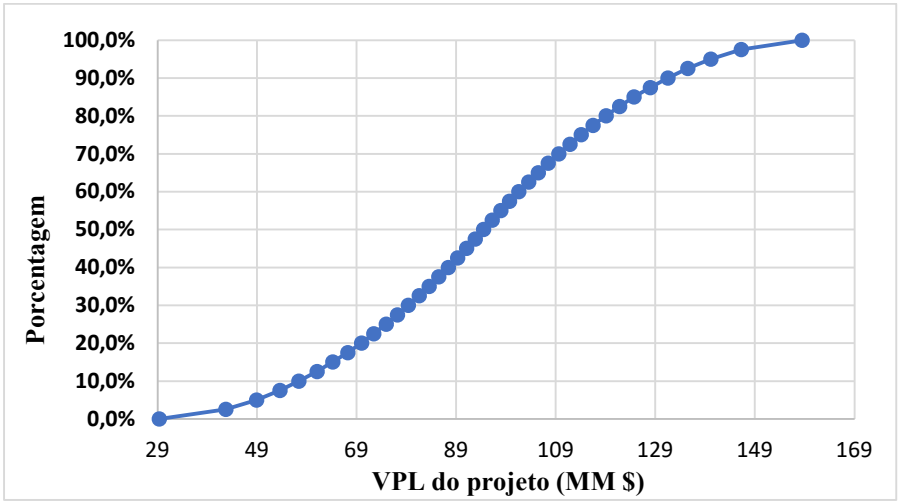


Figura 3: Gráfico da distribuição cumulativa para o VPL do Projeto referente a variação na capacidade de produção



### Cenário 2 - VPL

Figura 4: Gráfico da distribuição cumulativa para o VPL do Projeto referente a variação do custo do Furfural

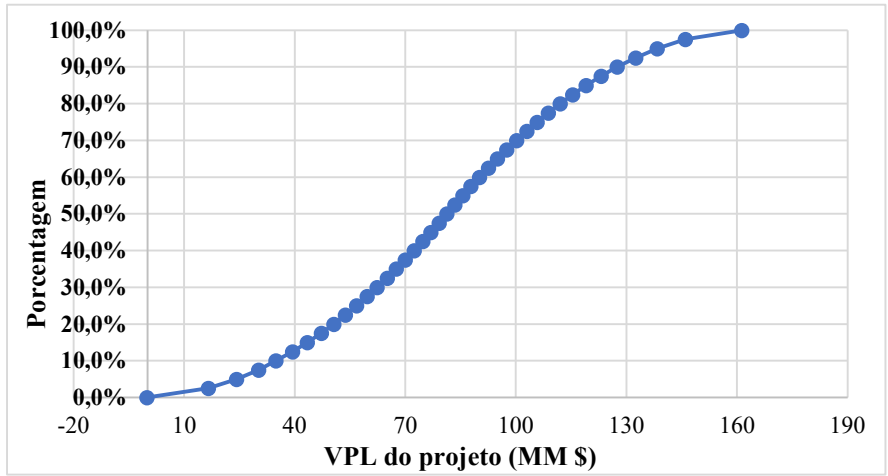


Figura 5: Gráfico da distribuição cumulativa para o VPL do Projeto referente a variação do custo Acetona

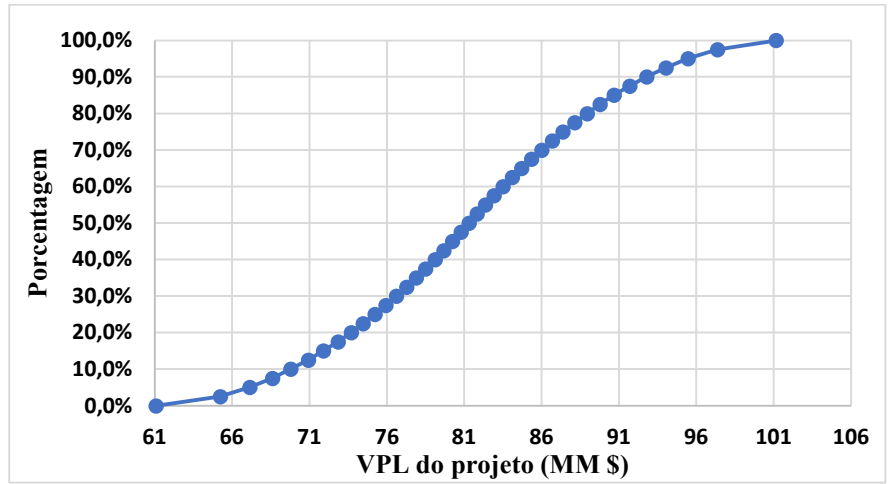
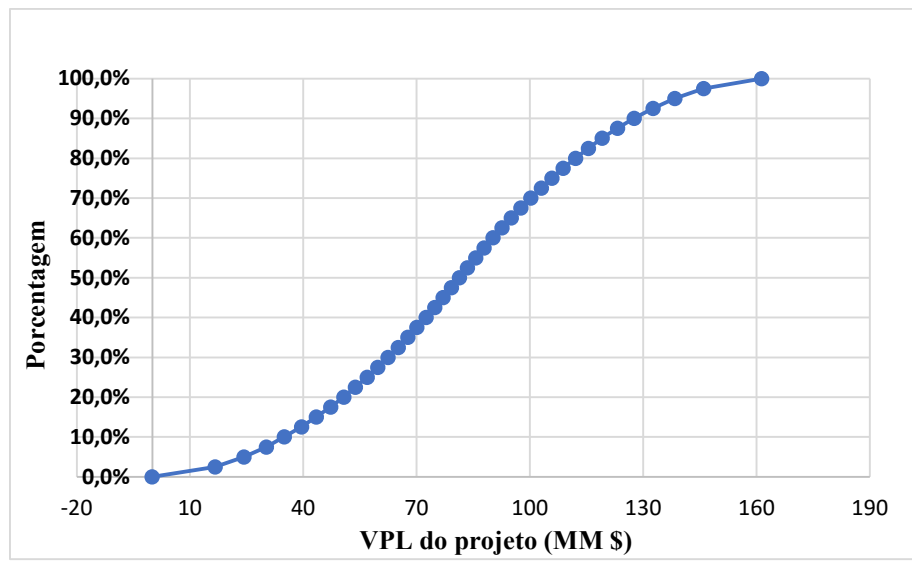


Figura 6: Gráfico da distribuição cumulativa para o VPL do Projeto referente a variação na capacidade de produção



### Cenário 3 - VPL

Figura 7: Gráfico da distribuição cumulativa para o VPL do Projeto referente a variação do custo do Furfural

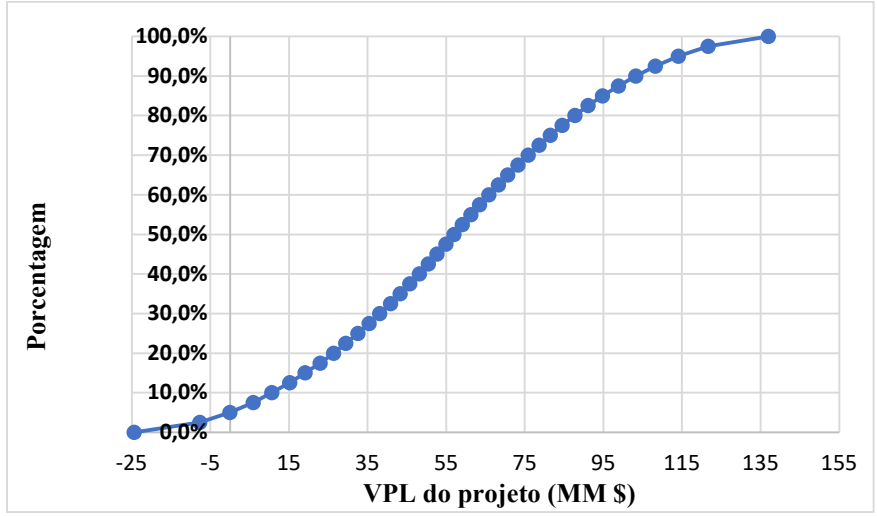


Figura 8: Gráfico da distribuição cumulativa para o VPL do Projeto referente a variação do custo da Acetona

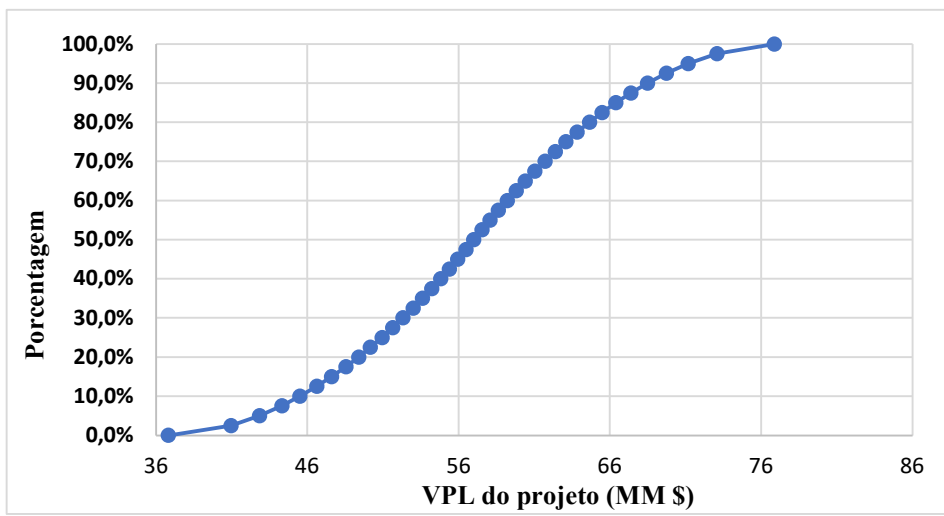
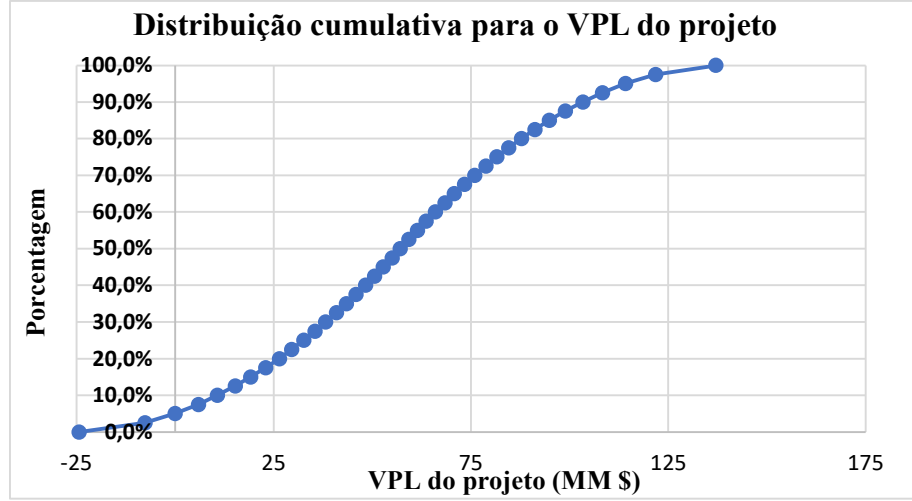


Figura 9: Gráfico da distribuição cumulativa para o VPL do Projeto referente a variação na capacidade de produção



### Cenário 4 - VPL

Figura 10: Gráfico da distribuição cumulativa para o VPL do Projeto referente a variação do custo do Furfural

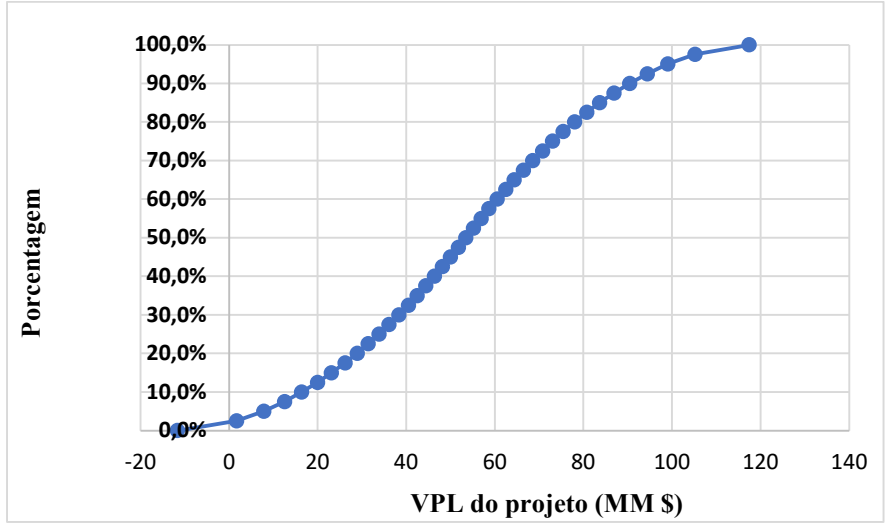


Figura 11: Gráfico da distribuição cumulativa para o VPL do Projeto referente a variação do custo da Acetona

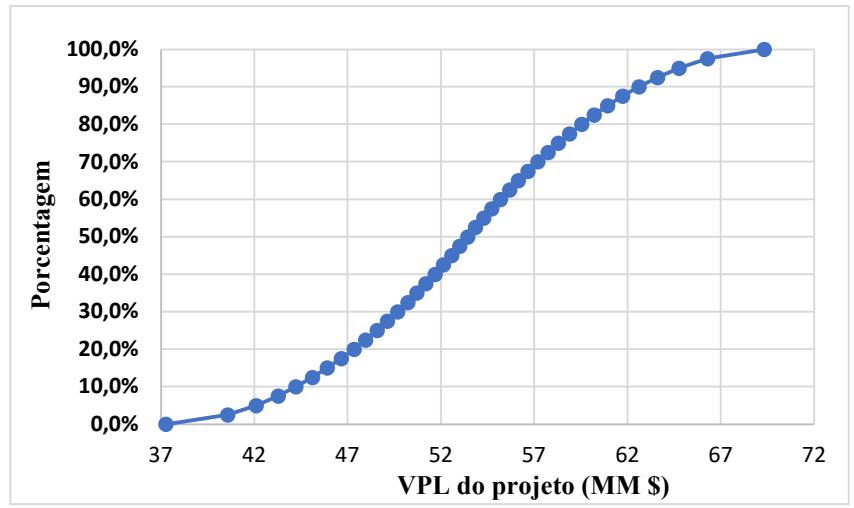
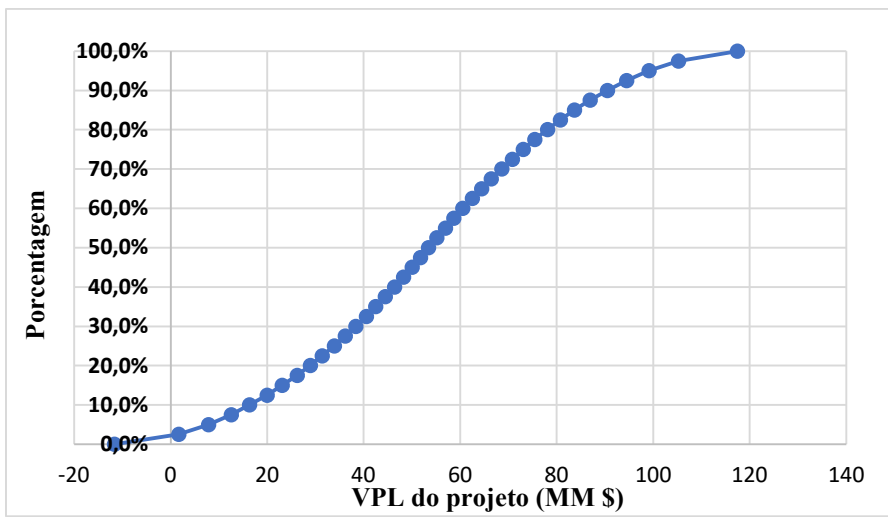


Figura 12: Gráfico da distribuição cumulativa para o VPL do Projeto referente a variação na capacidade de produção



### Cenário 5 - VPL

Figura 13: Gráfico da distribuição cumulativa para o VPL do Projeto referente

A variação do custo do Furfural

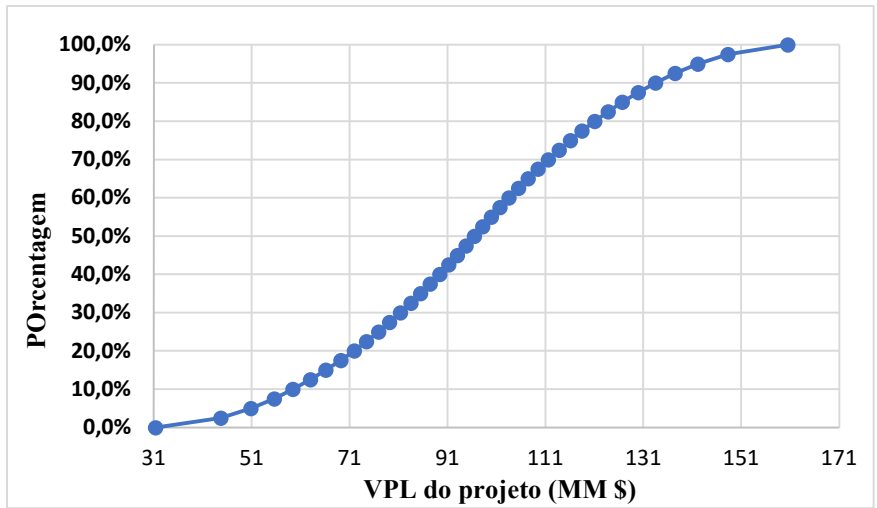


Figura 14: Gráfico da distribuição cumulativa para o VPL do Projeto referente

variação do custo da Acetona

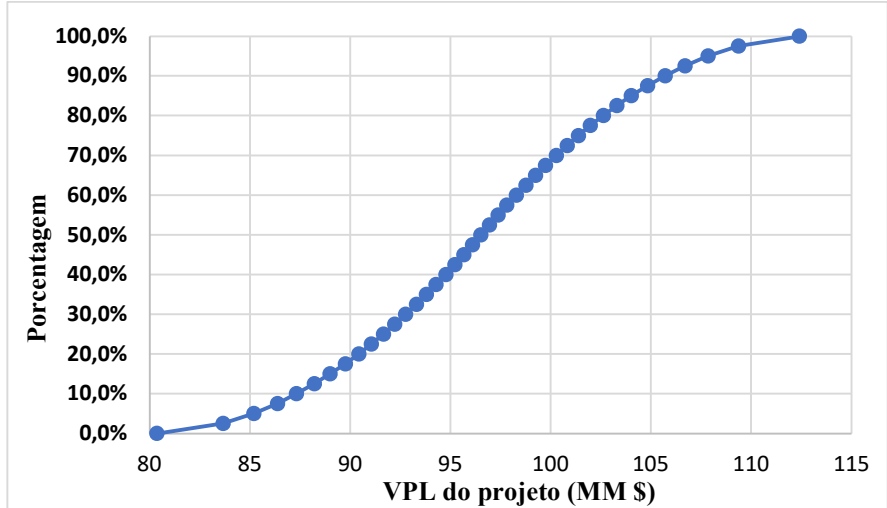
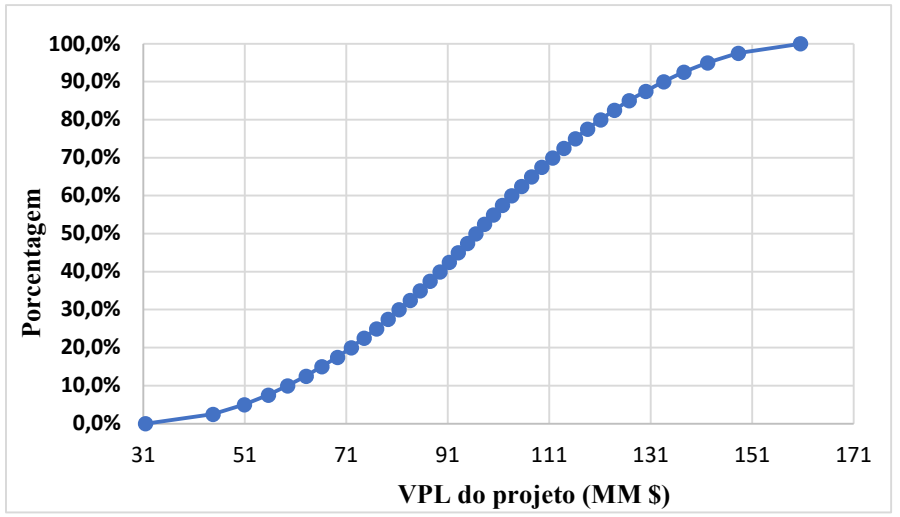


Figura 15: Gráfico da distribuição cumulativa para o VPL do Projeto referente a variação na capacidade de produção



### Cenário 6 - VPL

Figura 16: Gráfico da distribuição cumulativa para o VPL do Projeto referente

A variação do custo do Furfural

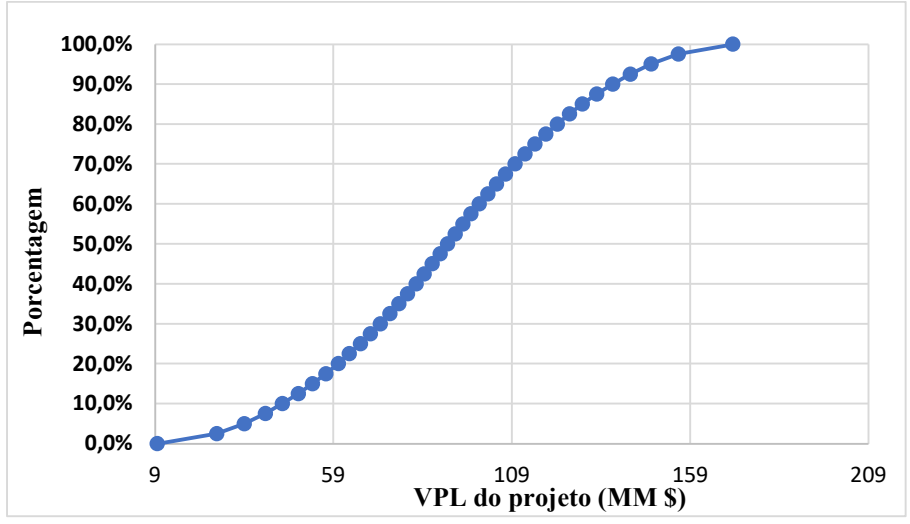


Figura 17: Gráfico da distribuição cumulativa para o VPL do Projeto referente

variação do custo da Acetona

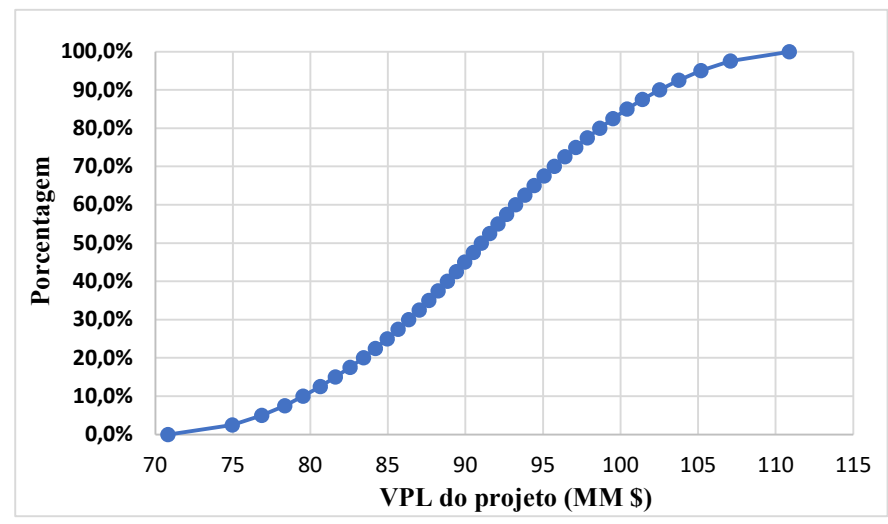
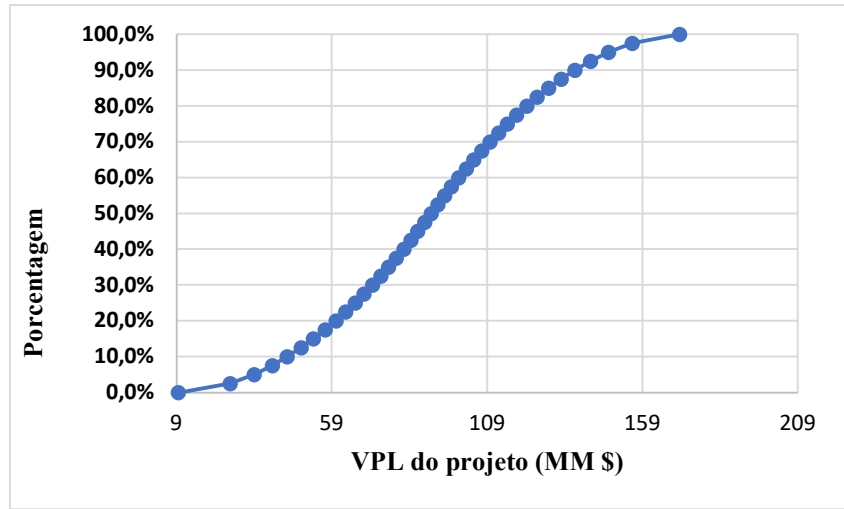


Figura 18: Gráfico da distribuição cumulativa para o VPL do Projeto referente a variação na capacidade de produção



### Cenário 7 - VPL

Figura 19: Gráfico da distribuição cumulativa para o VPL do Projeto referente

A variação do custo do Furfural

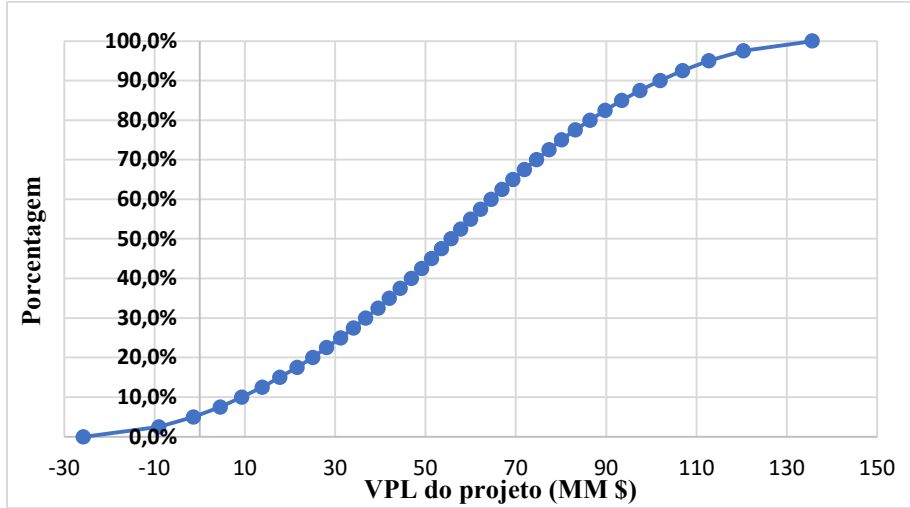


Figura 20: Gráfico da distribuição cumulativa para o VPL do Projeto referente

variação do custo da Acetona

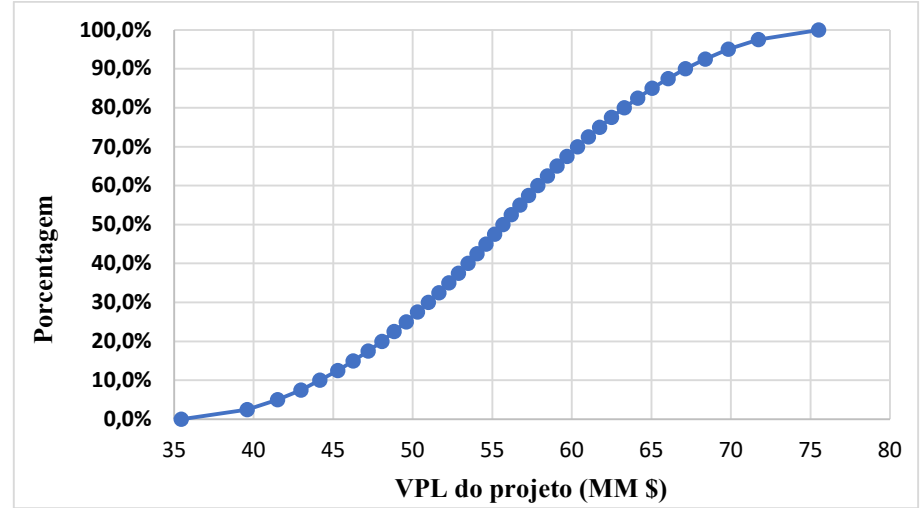
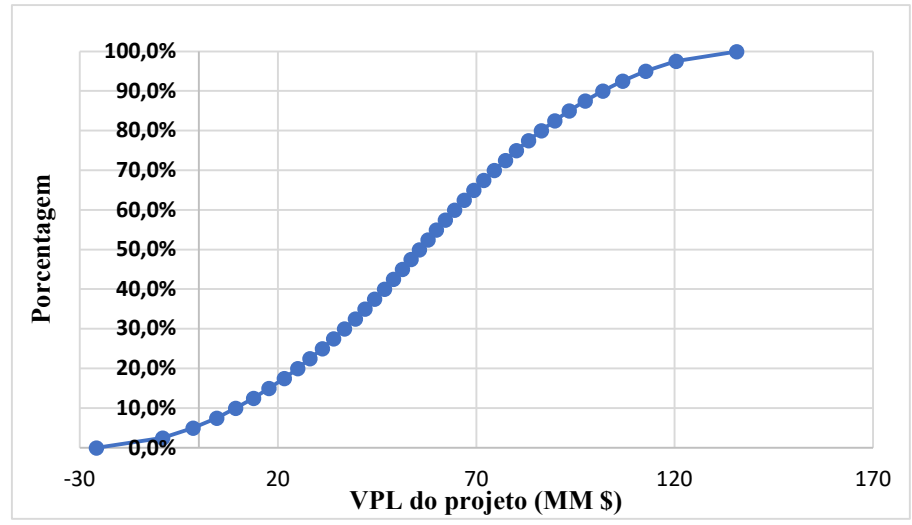


Figura 21: Gráfico da distribuição cumulativa para o VPL do Projeto referente a variação na capacidade de produção



### Cenário 8 - VPL

Figura 22: Gráfico da distribuição cumulativa para o VPL do Projeto referente A variação do custo do Furfural

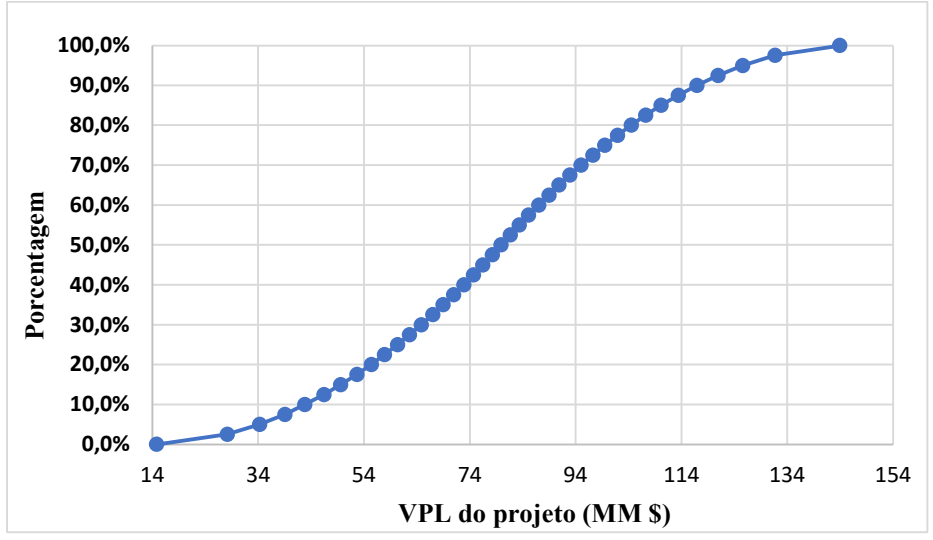


Figura 23: Gráfico da distribuição cumulativa para o VPL do Projeto referente variação do custo da Acetona

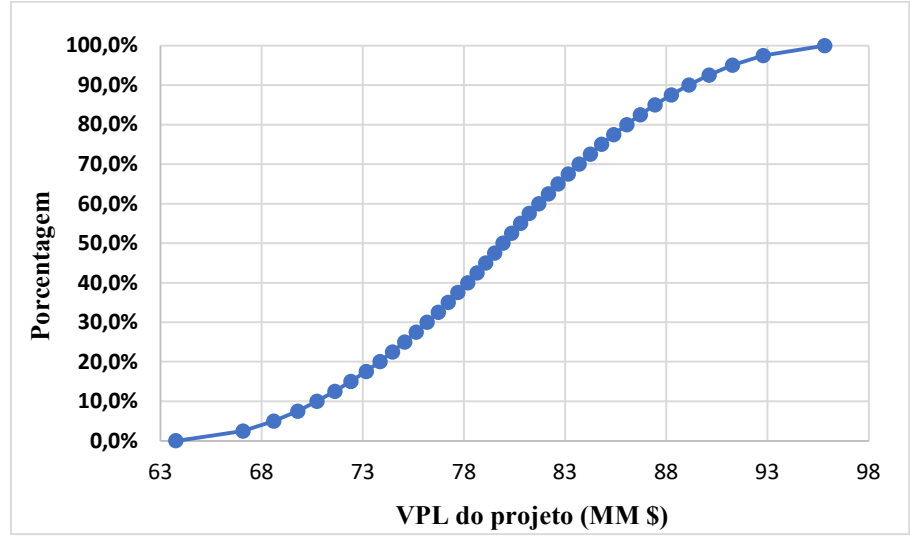
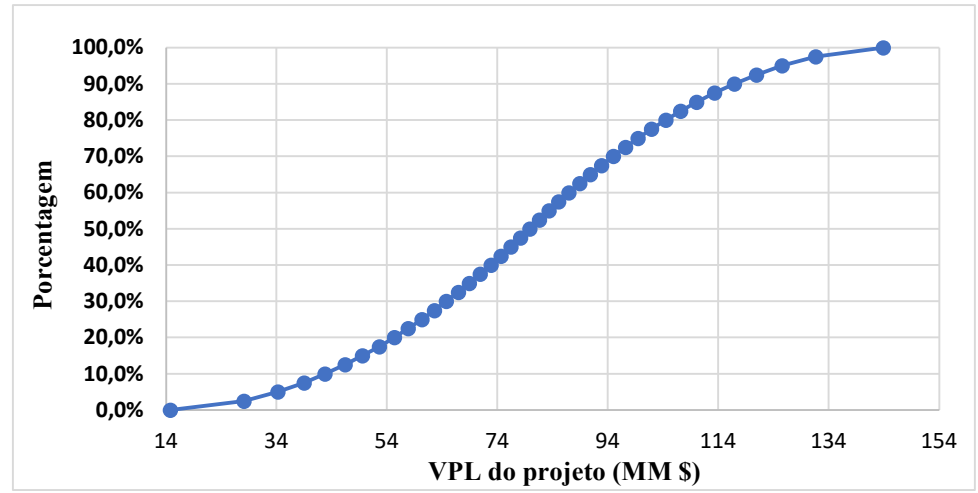


Figura 24: Gráfico da distribuição cumulativa para o VPL do Projeto referente a variação na capacidade de produção



APÊNDICE L - Gráficos de distribuição cumulativa para os Custos Operacionais referente a variação do custo do Furfural e Acetona e a variação da capacidade de produção

**Cenário 1 – Custos Operacionais**

Figura 1: Gráfico da distribuição cumulativa para os Custos Operacionais referente a variação no custo do Furfural

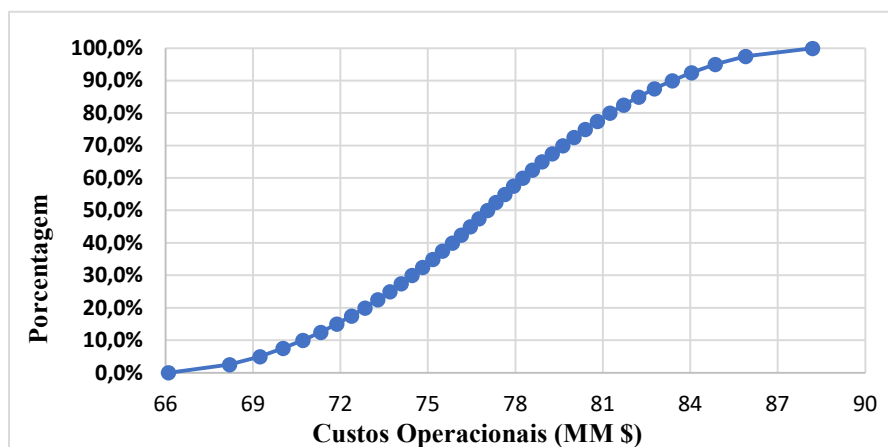


Figura 2: Gráfico da distribuição cumulativa para os Custos Operacionais referente a variação no custo da Acetona

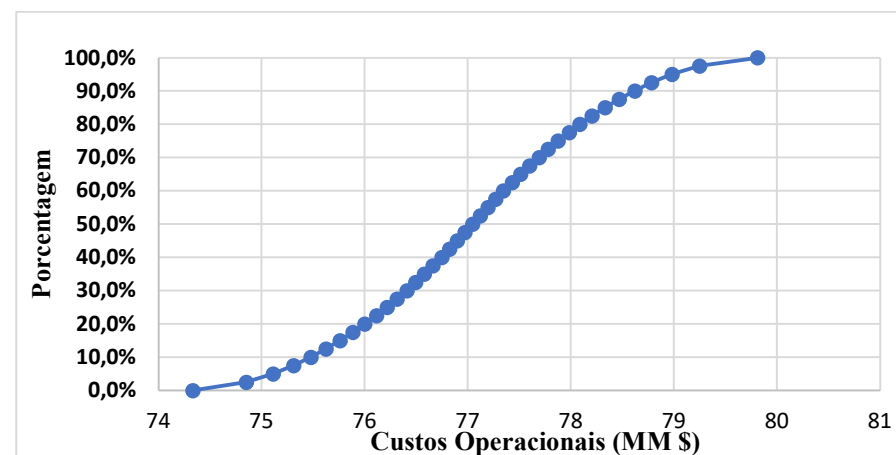
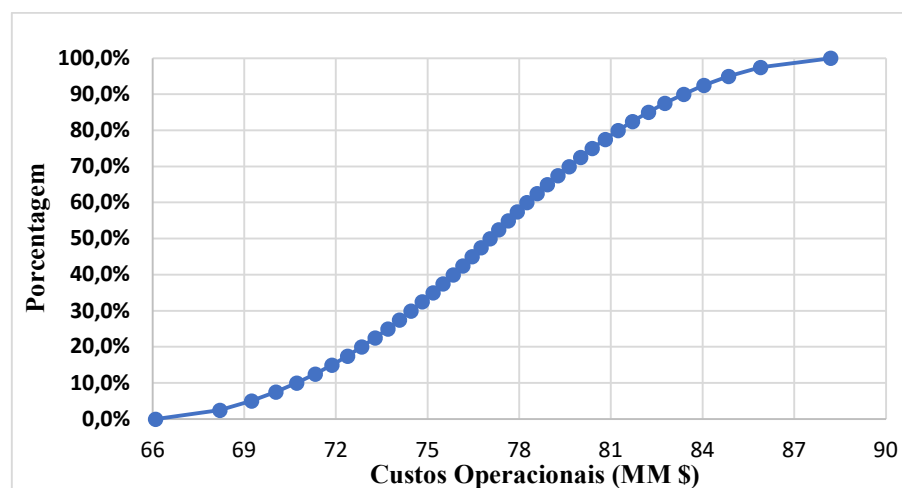


Figura 3: Gráfico da distribuição cumulativa para os Custos Operacionais referente a variação na capacidade de produção



### Cenário 2 – Custos Operacionais

Figura 4: Gráfico da distribuição cumulativa para os Custos Operacionais referente a variação no custo do Furfural

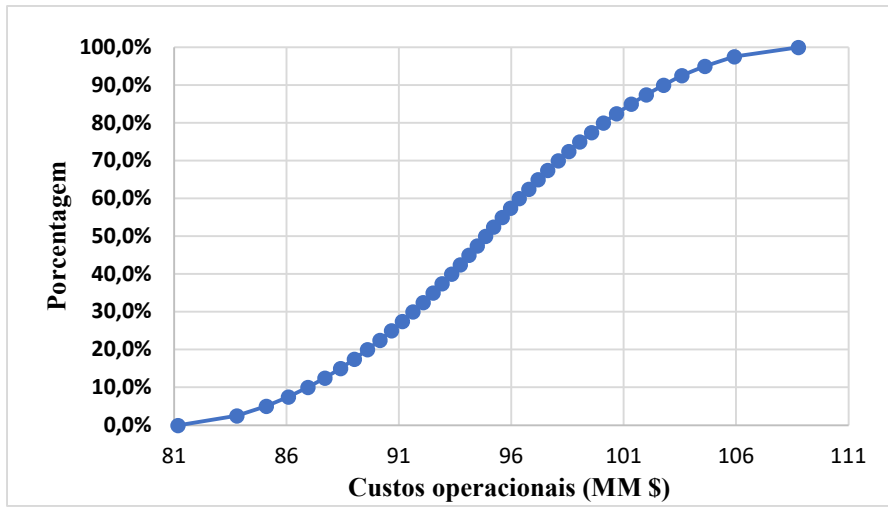


Figura 5: Gráfico da distribuição cumulativa para os Custos Operacionais referente a variação no custo da Acetona

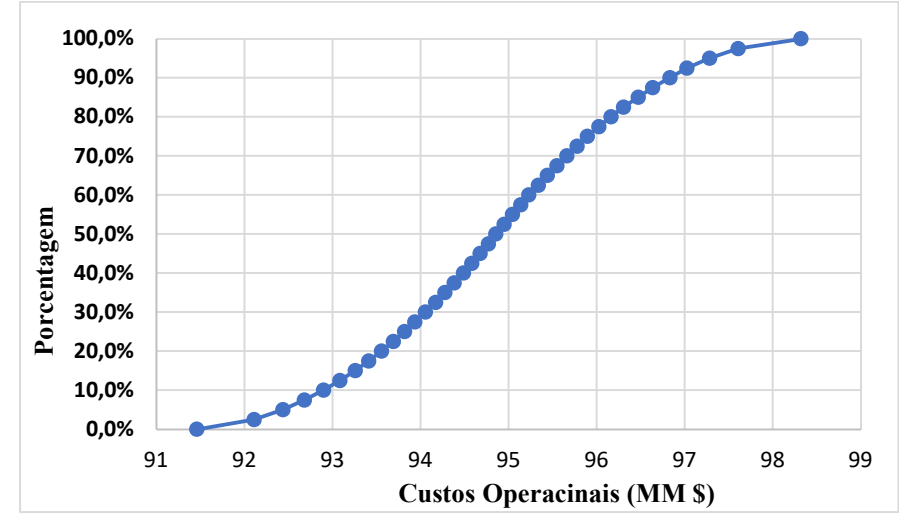
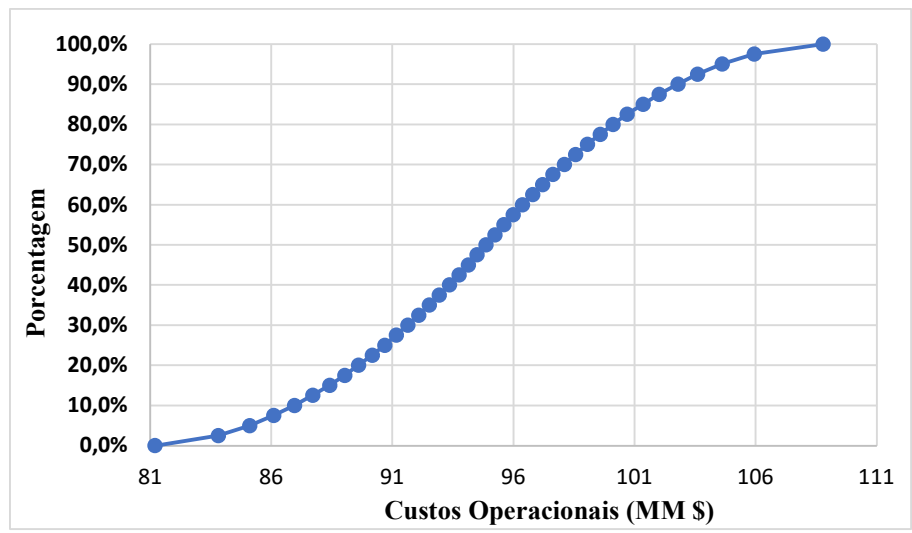


Figura 6: Gráfico da distribuição cumulativa para os Custos Operacionais referente a variação na capacidade de produção



### Cenário 3 – Custos Operacionais

Figura 7: Gráfico da distribuição cumulativa para os Custos Operacionais referente a variação no custo do Furfural

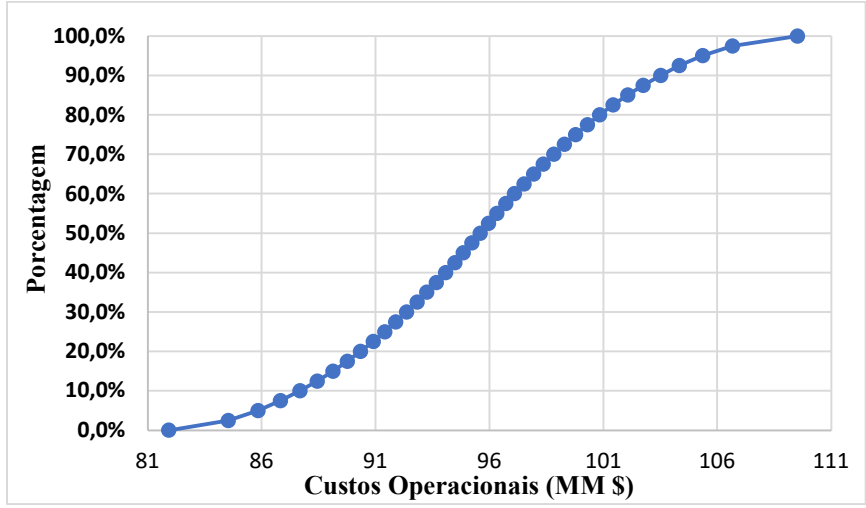


Figura 8: Gráfico da distribuição cumulativa para os Custos Operacionais referente a variação no custo da Acetona

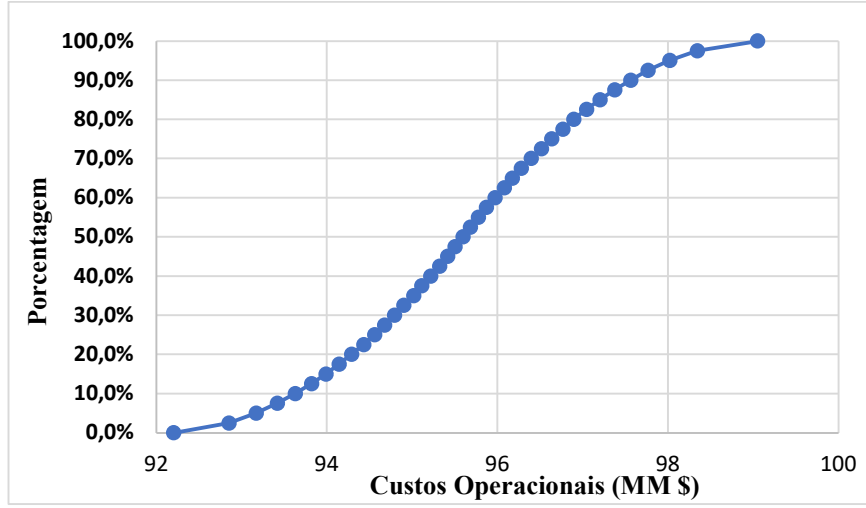
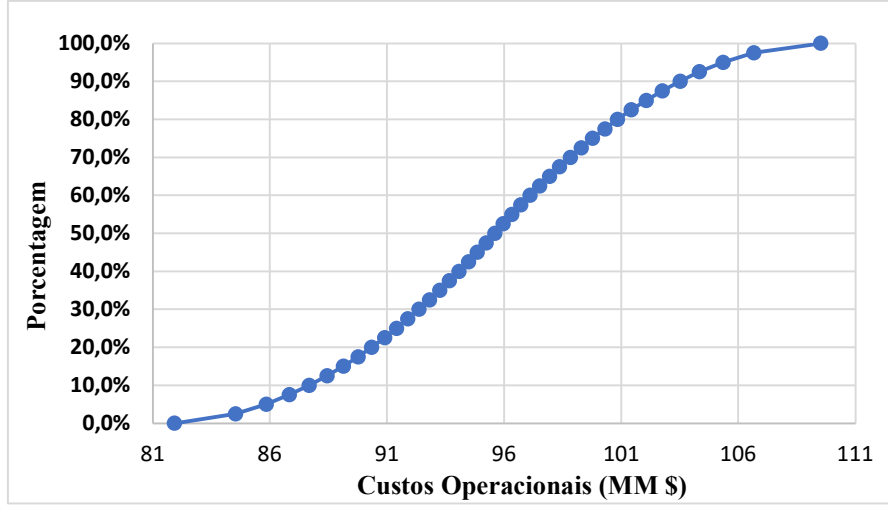


Figura 9: Gráfico da distribuição cumulativa para os Custos Operacionais referente a variação na capacidade de produção



### Cenário 4 – Custos Operacionais

Figura 10: Gráfico da distribuição cumulativa para os Custos Operacionais referente a variação no custo do Furfural

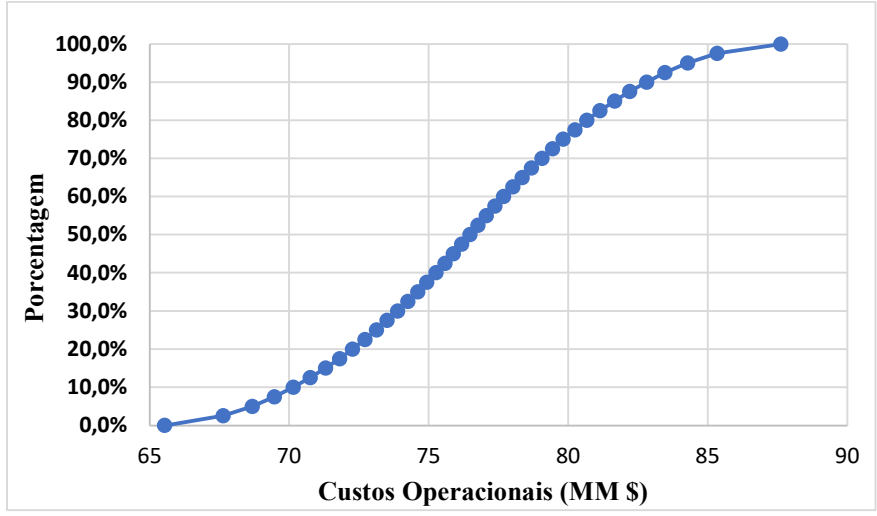


Figura 11: Gráfico da distribuição cumulativa para os Custos Operacionais referente a variação no custo da Acetona

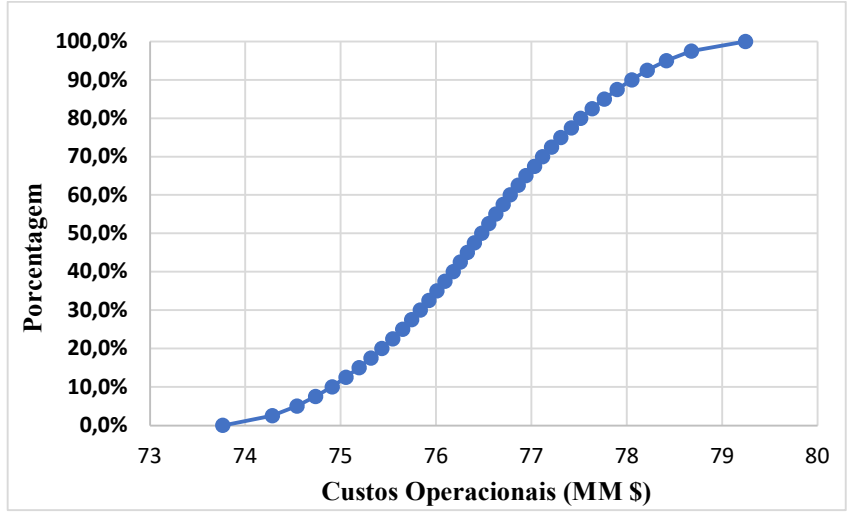
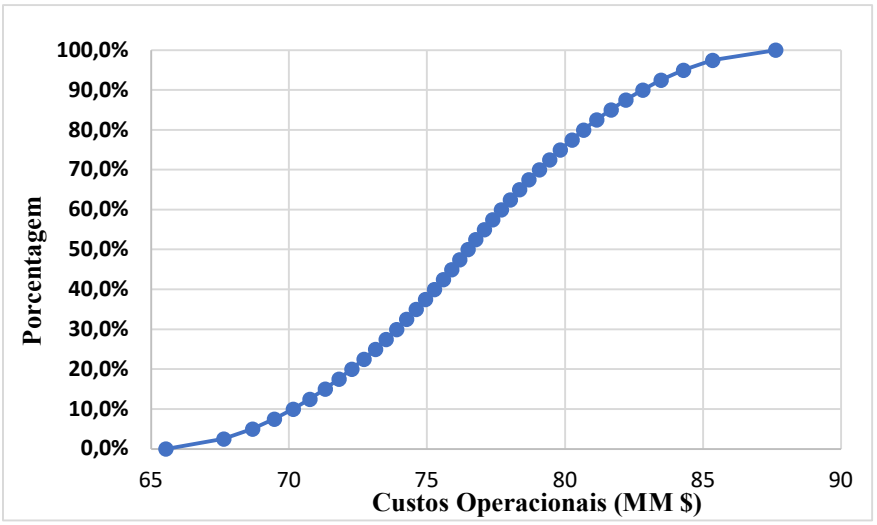


Figura 12: Gráfico da distribuição cumulativa para os Custos Operacionais referente a variação na capacidade de produção



### Cenário 5 – Custos Operacionais

Figura 13: Gráfico da distribuição cumulativa para os Custos Operacionais referente a variação no custo do Furfural

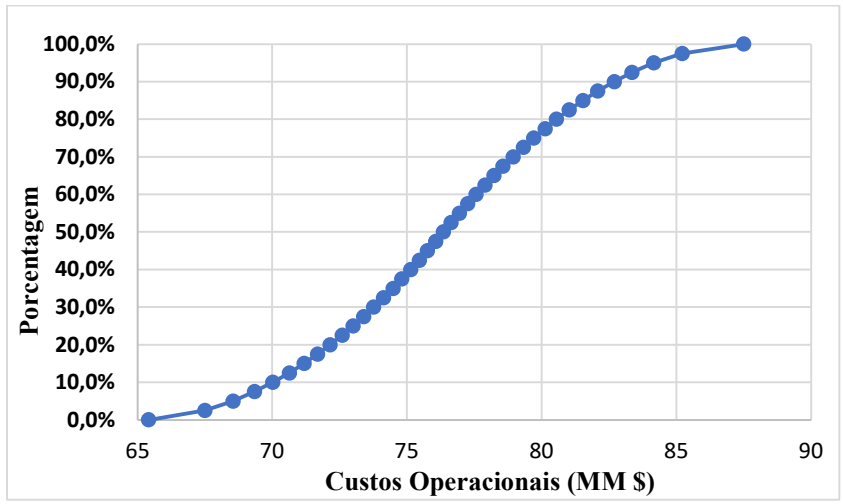


Figura 14: Gráfico da distribuição cumulativa para os Custos Operacionais referente a variação no custo da Acetona

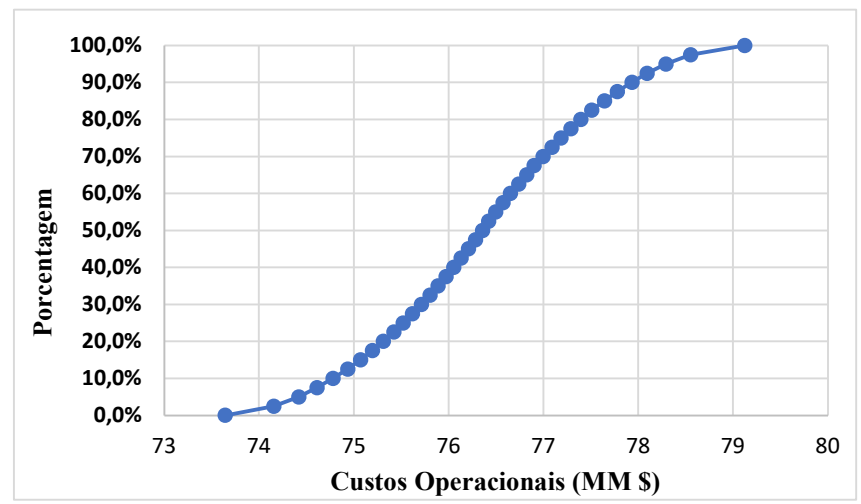
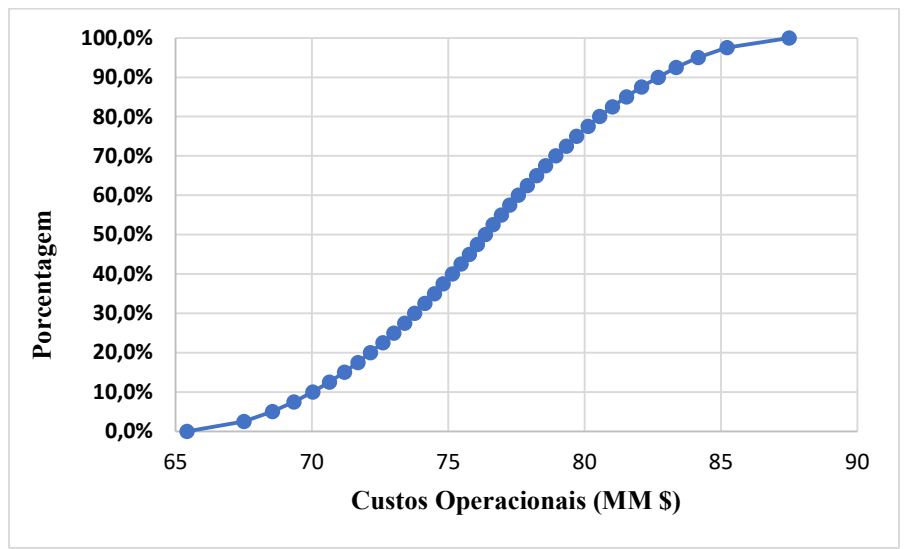


Figura 15: Gráfico da distribuição cumulativa para os Custos Operacionais referente a variação na capacidade de produção



### Cenário 6 – Custos Operacionais

Figura 16: Gráfico da distribuição cumulativa para os Custos Operacionais referente a variação no custo do Furfural

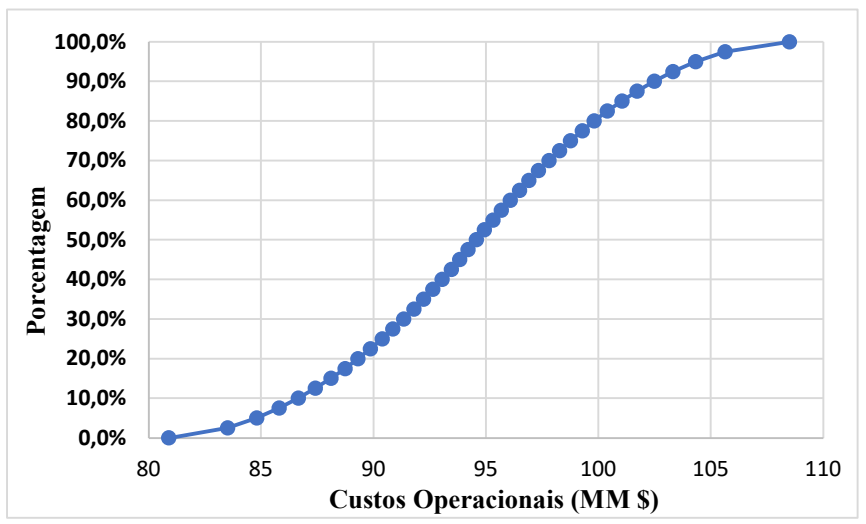


Figura 17: Gráfico da distribuição cumulativa para os Custos Operacionais referente a variação no custo da Acetona

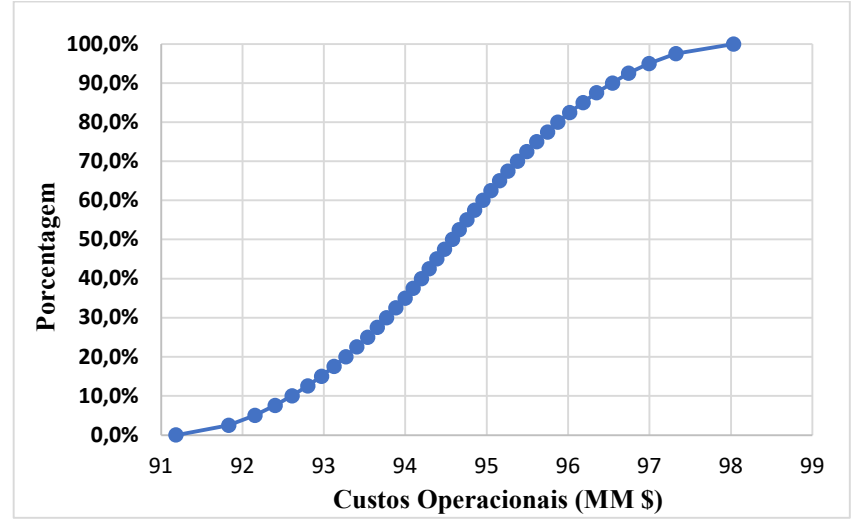
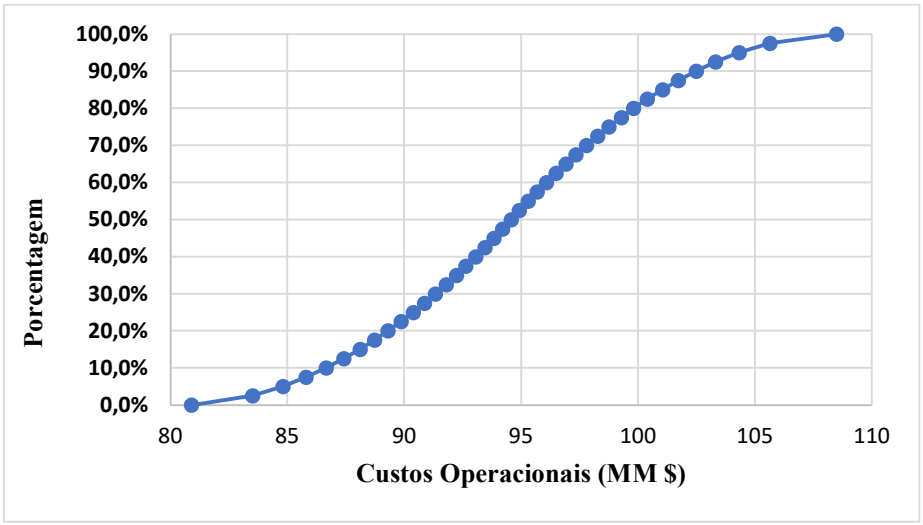


Figura 18: Gráfico da distribuição cumulativa para os Custos Operacionais referente a variação na capacidade de produção



### Cenário 7 – Custos Operacionais

Figura 19: Gráfico da distribuição cumulativa para os Custos Operacionais referente a variação no custo do Furfural

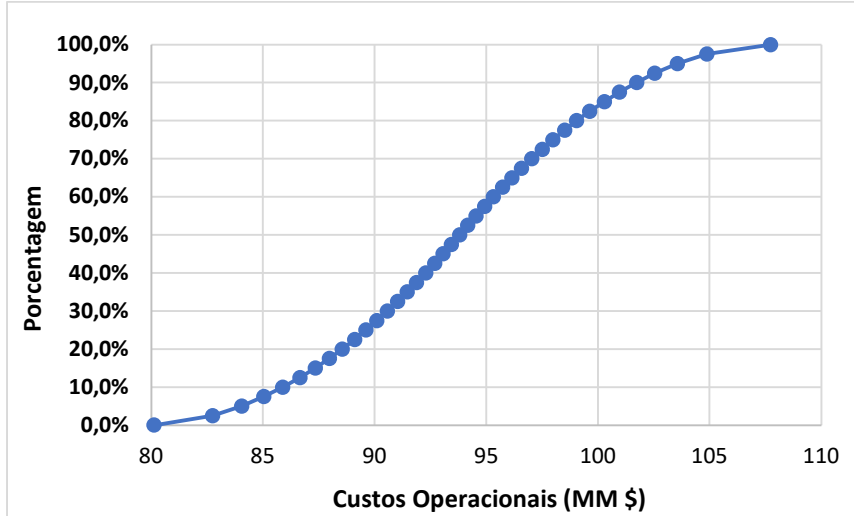


Figura 20: Gráfico da distribuição cumulativa para os Custos Operacionais referente a variação no custo da Acetona

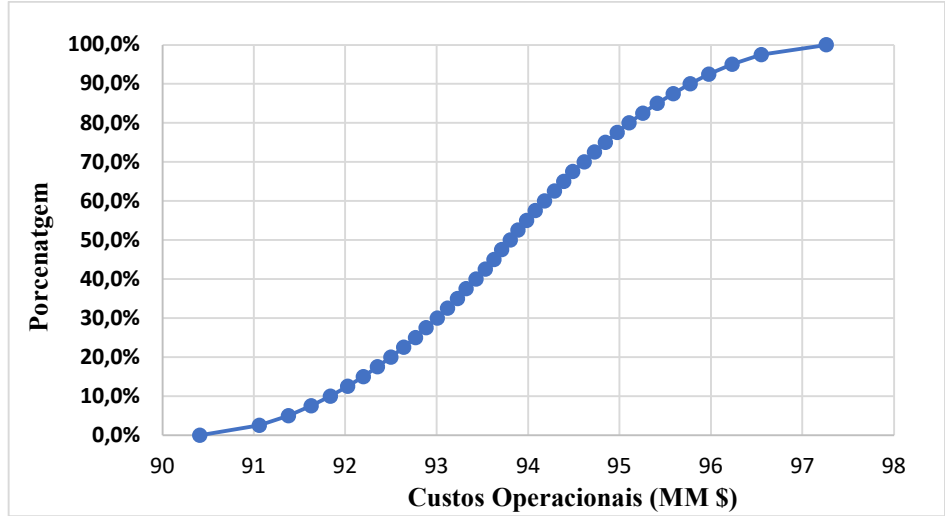
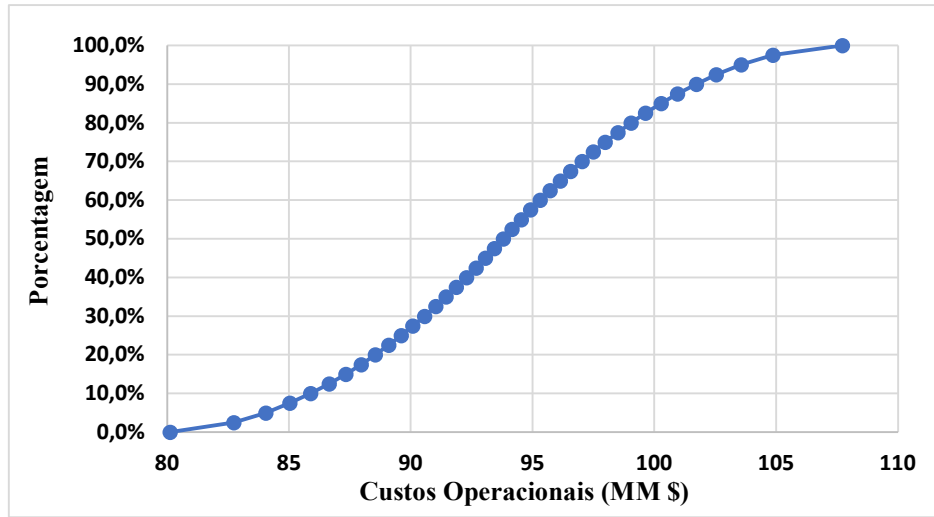


Figura 21: Gráfico da distribuição cumulativa para os Custos Operacionais referente a variação na capacidade de produção



### Cenário 8 – Custos Operacionais

Figura 22: Gráfico da distribuição cumulativa para os Custos Operacionais referente a variação no custo do Furfural

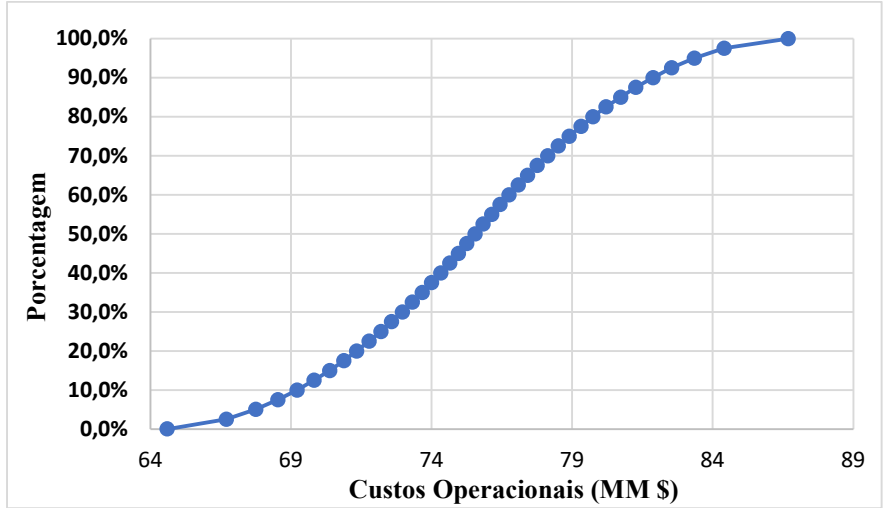


Figura 23: Gráfico da distribuição cumulativa para os Custos Operacionais referente a variação no custo da Acetona

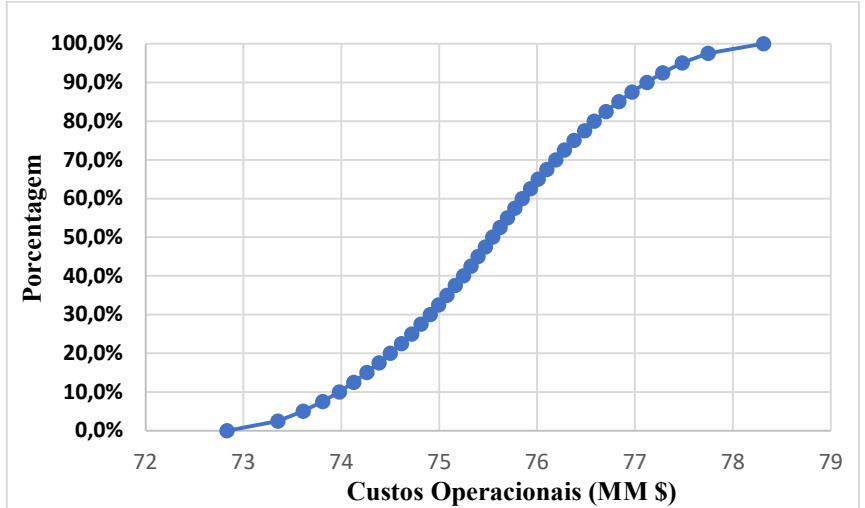
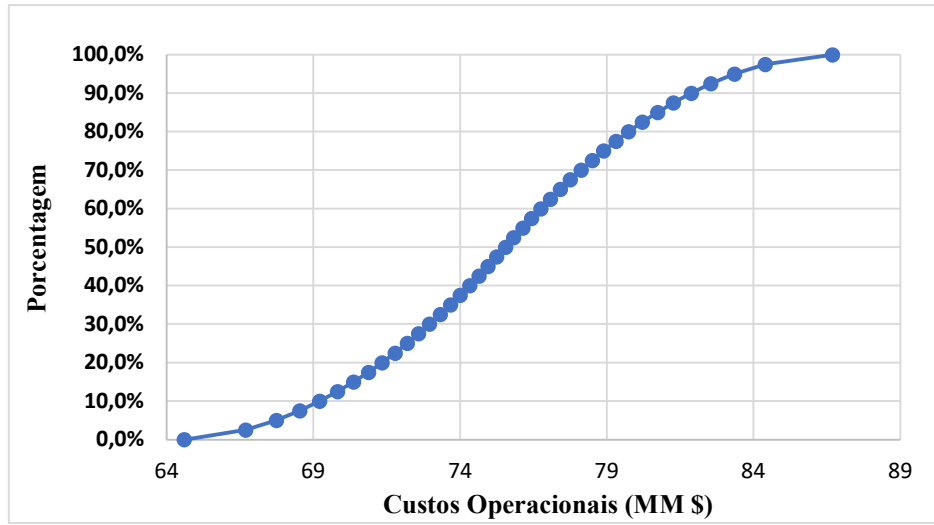


Figura 24: Gráfico da distribuição cumulativa para os Custos Operacionais referente a variação na capacidade de produção



**APÊNDICE M - Histogramas de probabilidade para o VPL do Projeto referente a variação do custo do Furfural e Acetona, e variação da capacidade de produção**

**Cenário 1**

Figura 1: Distribuição de probabilidade para o VPL do Projeto referente a variação do custo do Furfural

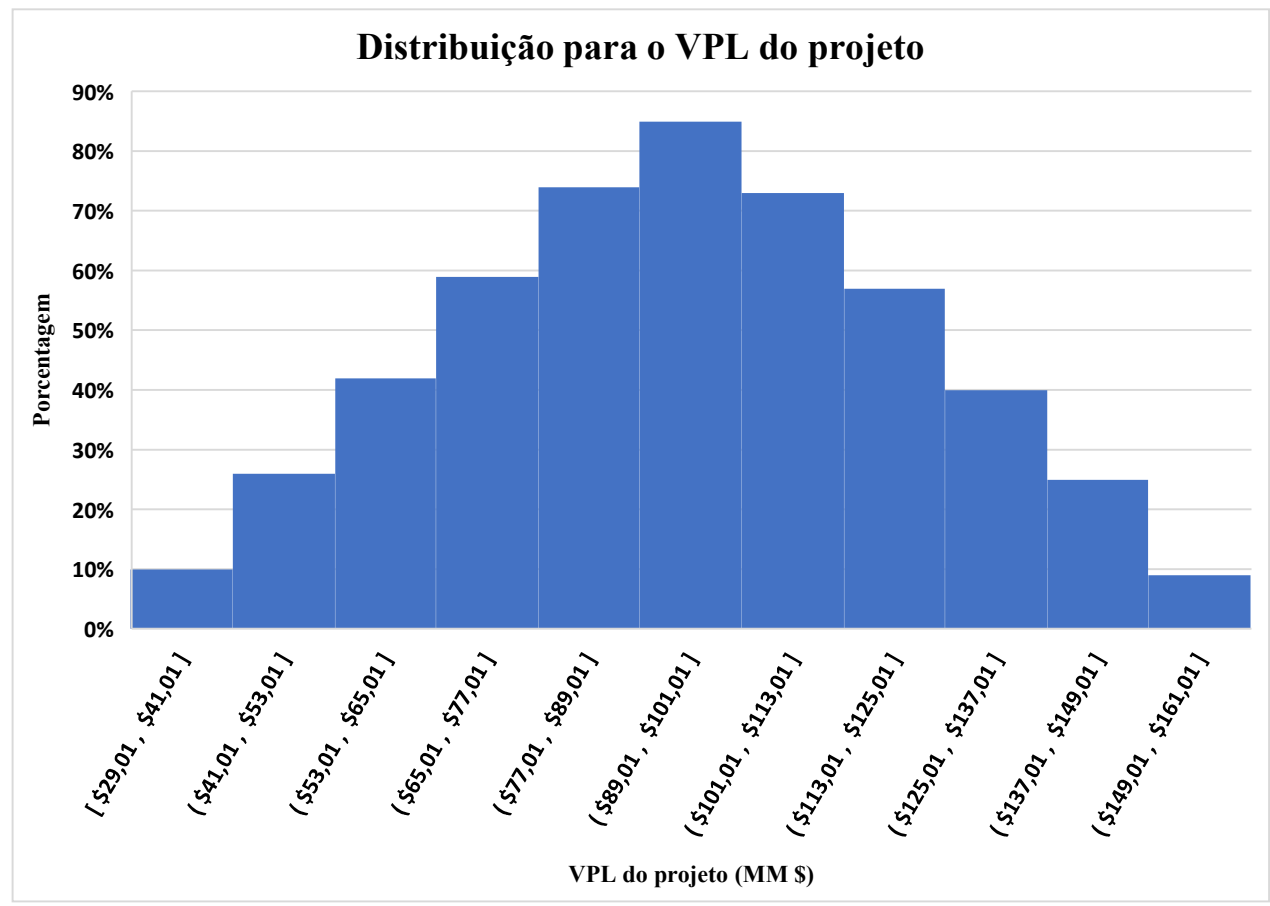


Figura 2: Distribuição de probabilidade para o VPL do Projeto referente a variação do custo da Acetona

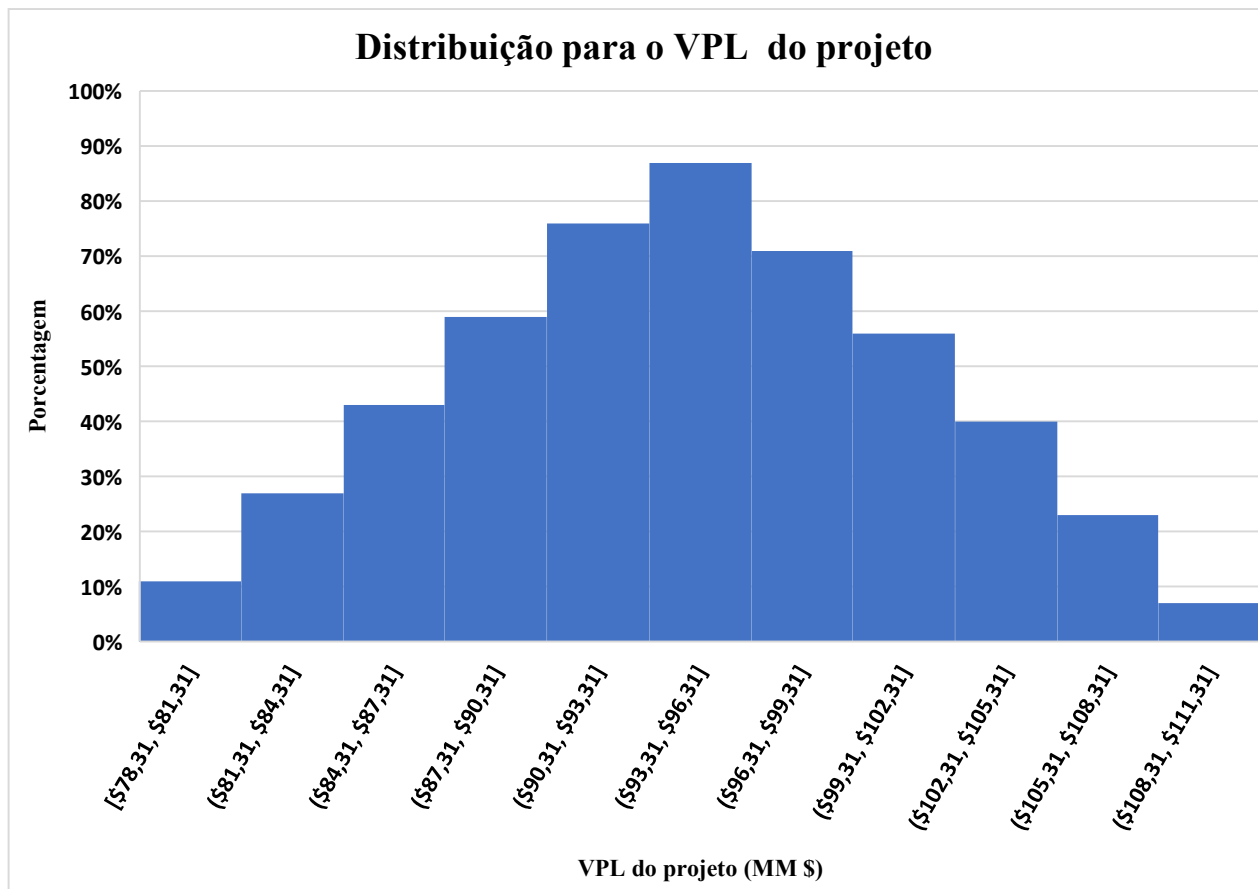
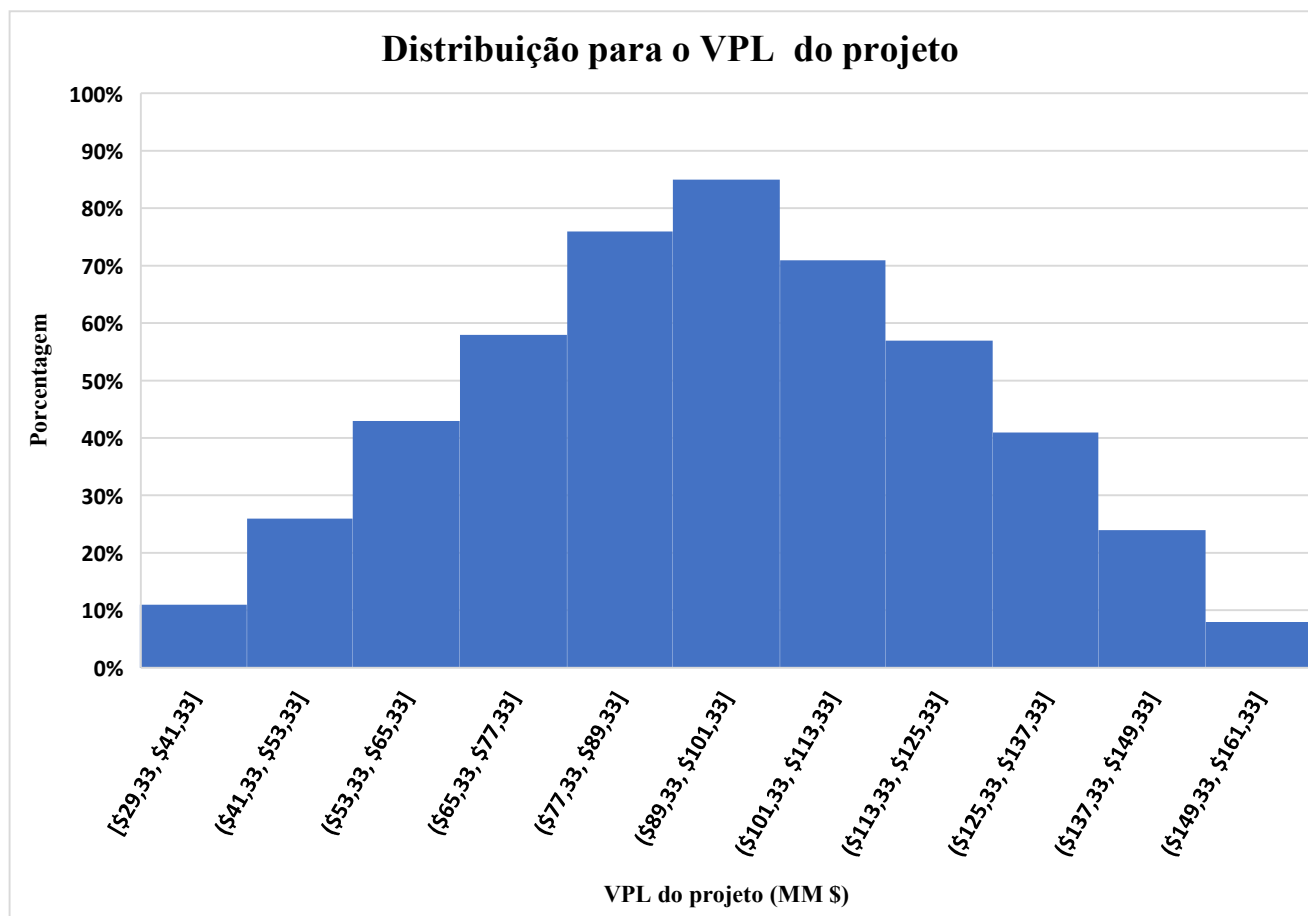


Figura 3: Distribuição de probabilidade para o VPL do Projeto referente a variação na capacidade de produção



**Cenário 2**

Figura 4: Distribuição de probabilidade para o VPL do Projeto referente a variação do custo Do Furfural

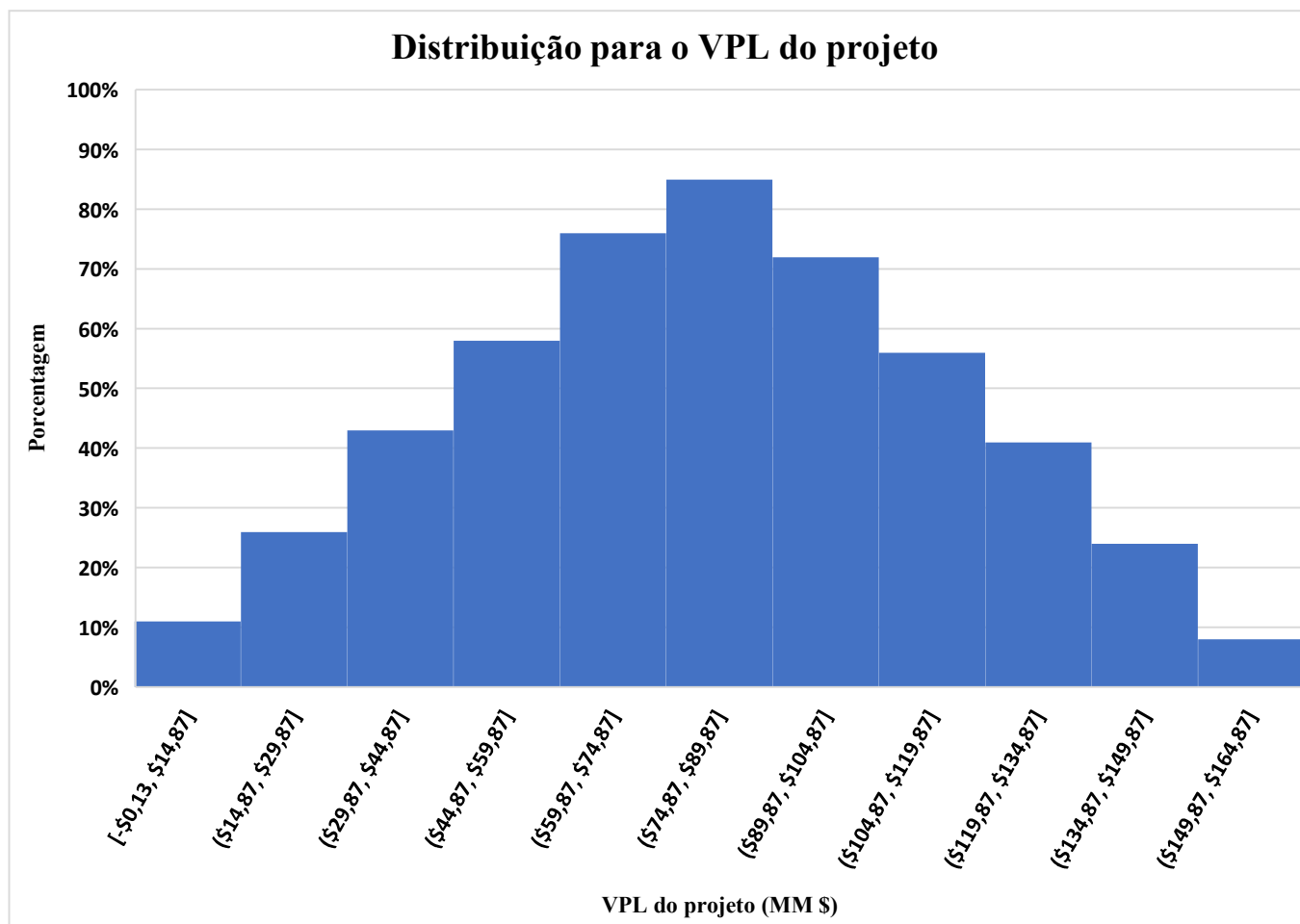


Figura 5: Distribuição de probabilidade para o VPL do Projeto referente a variação do custo  
Da Acetona

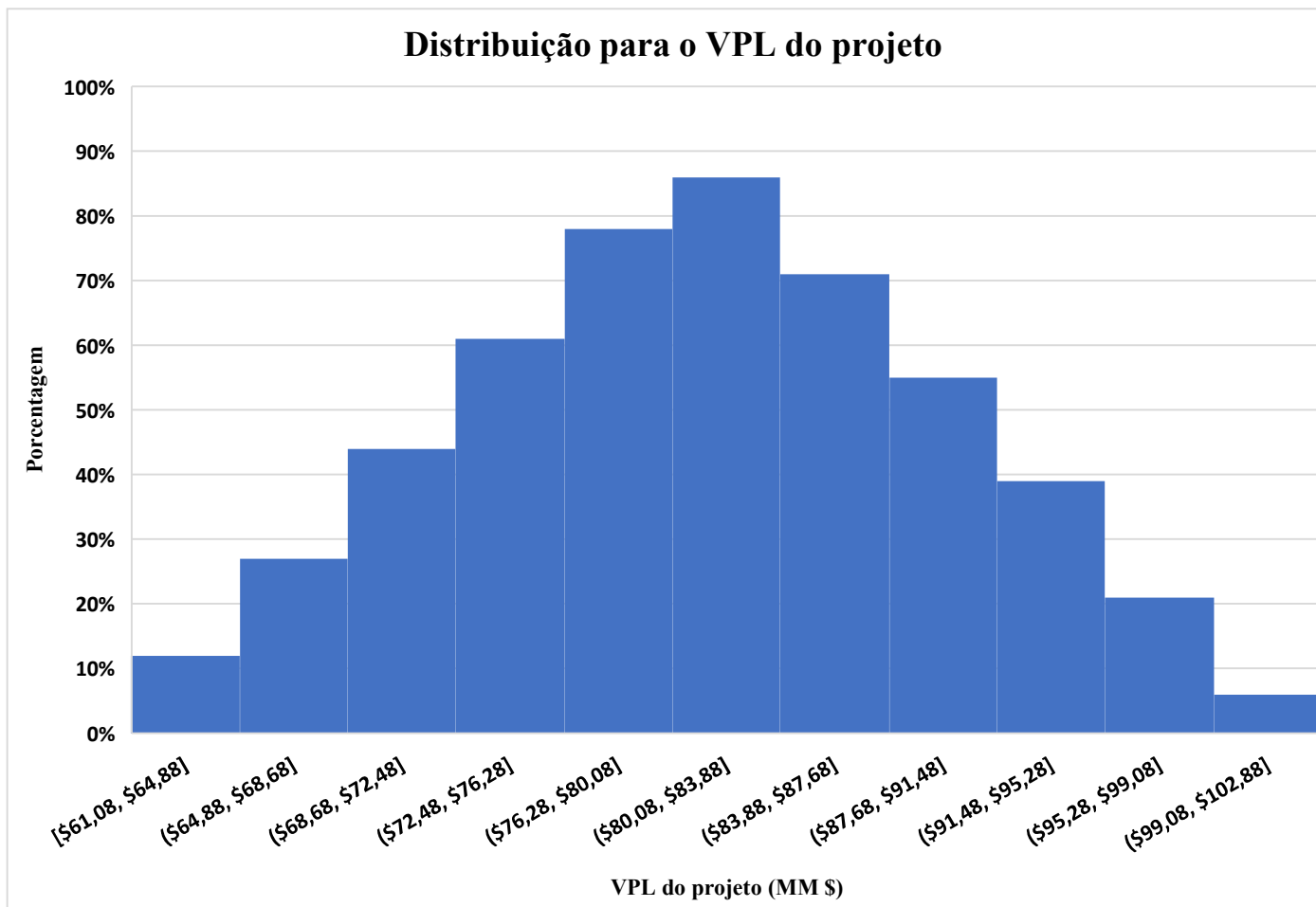
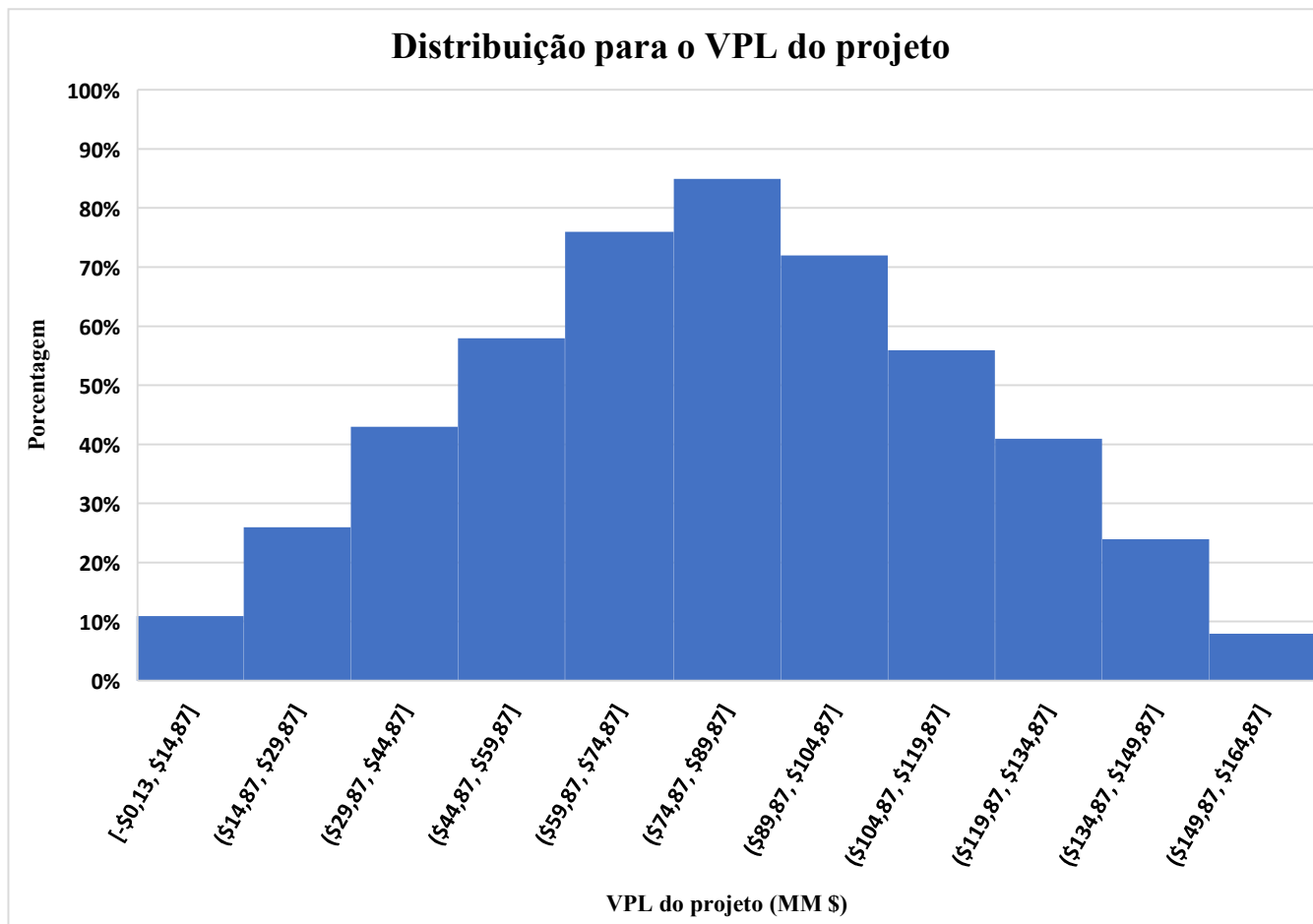


Figura 6: Distribuição de probabilidade para o VPL do Projeto referente a variação na Capacidade de produção



### Cenário 3 - VPL

Figura 7: Distribuição de probabilidade para o VPL do Projeto referente a variação do custo Do Furfural

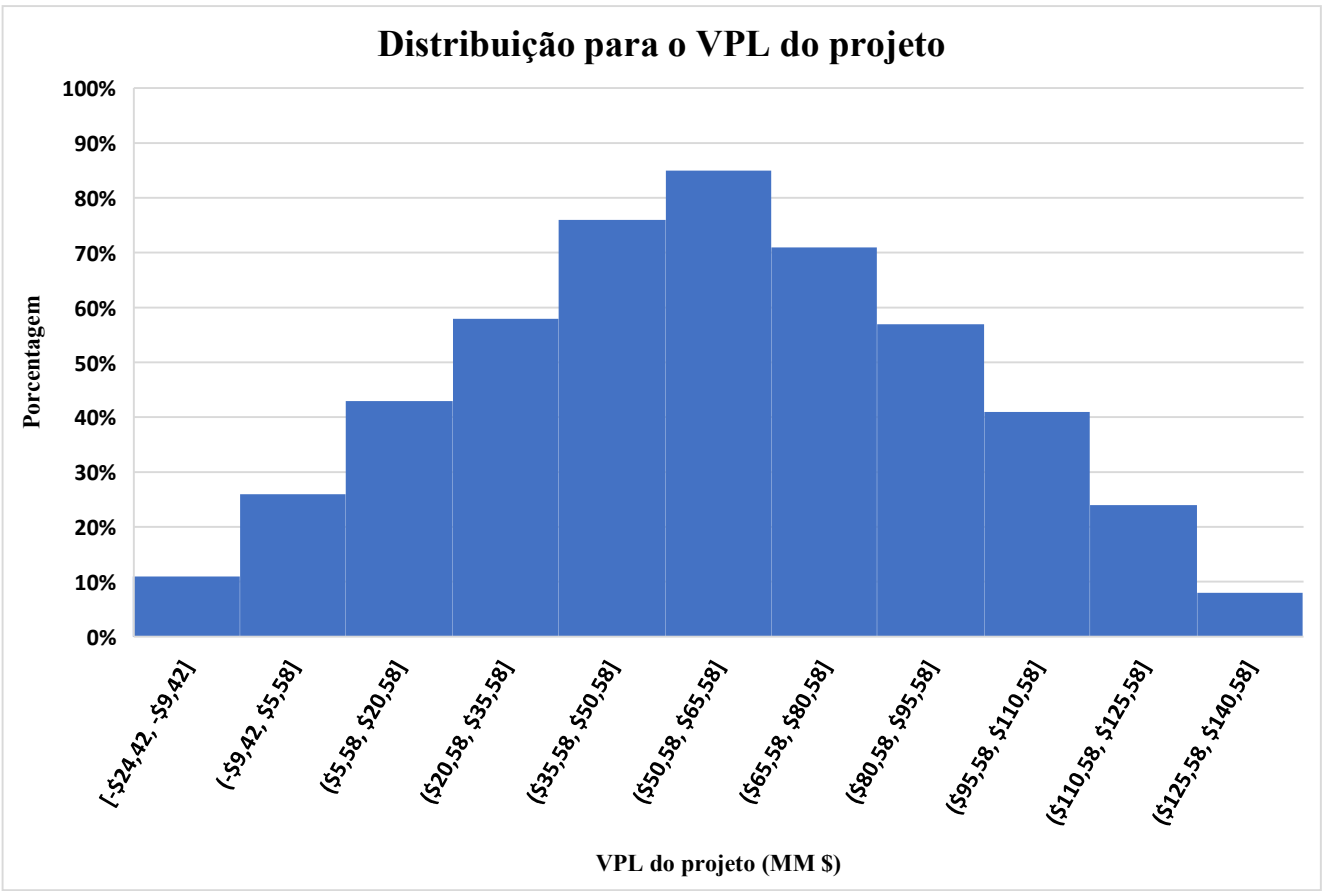


Figura 8: Distribuição de probabilidade para o VPL do Projeto referente a variação do custo Da Acetona

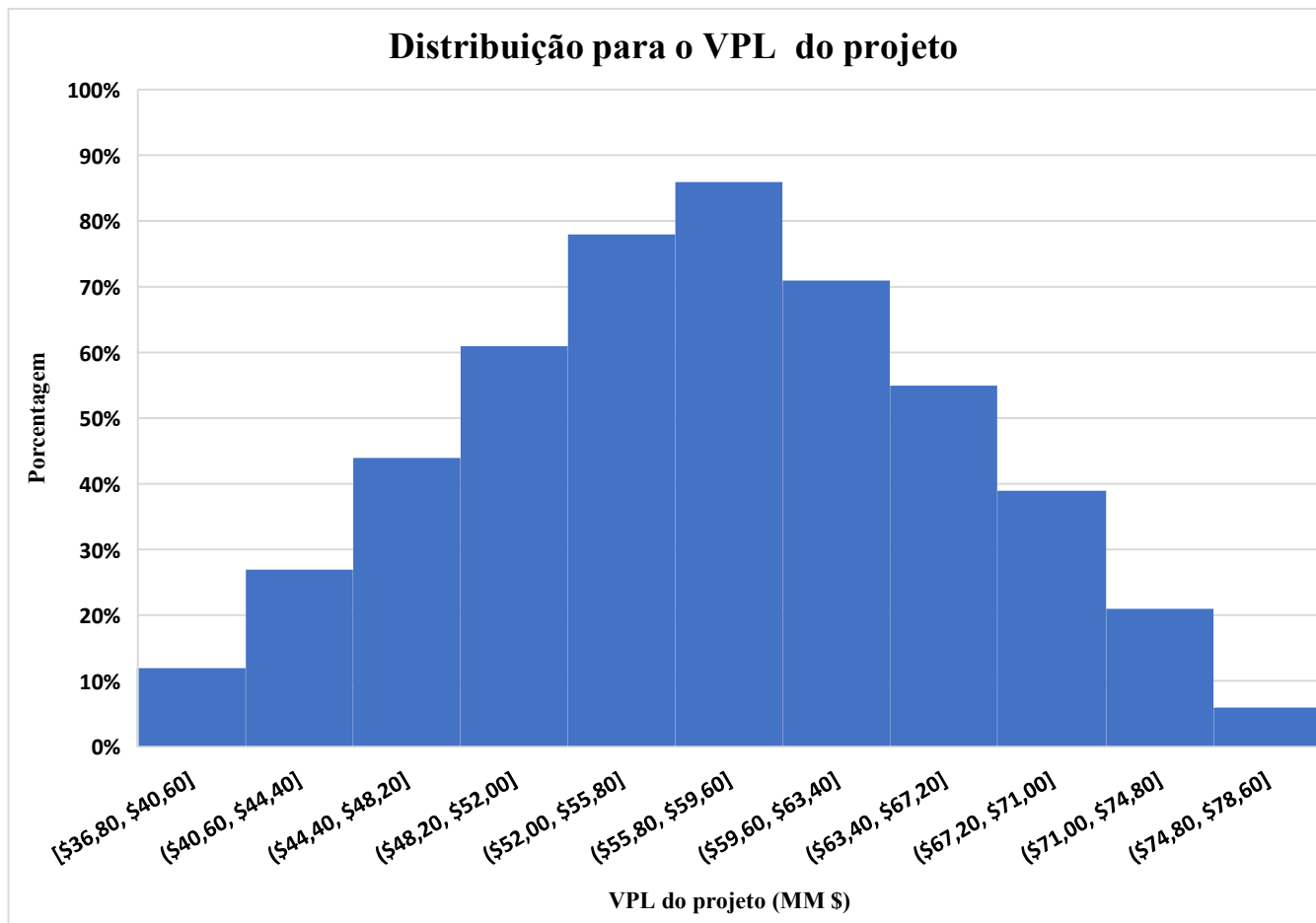
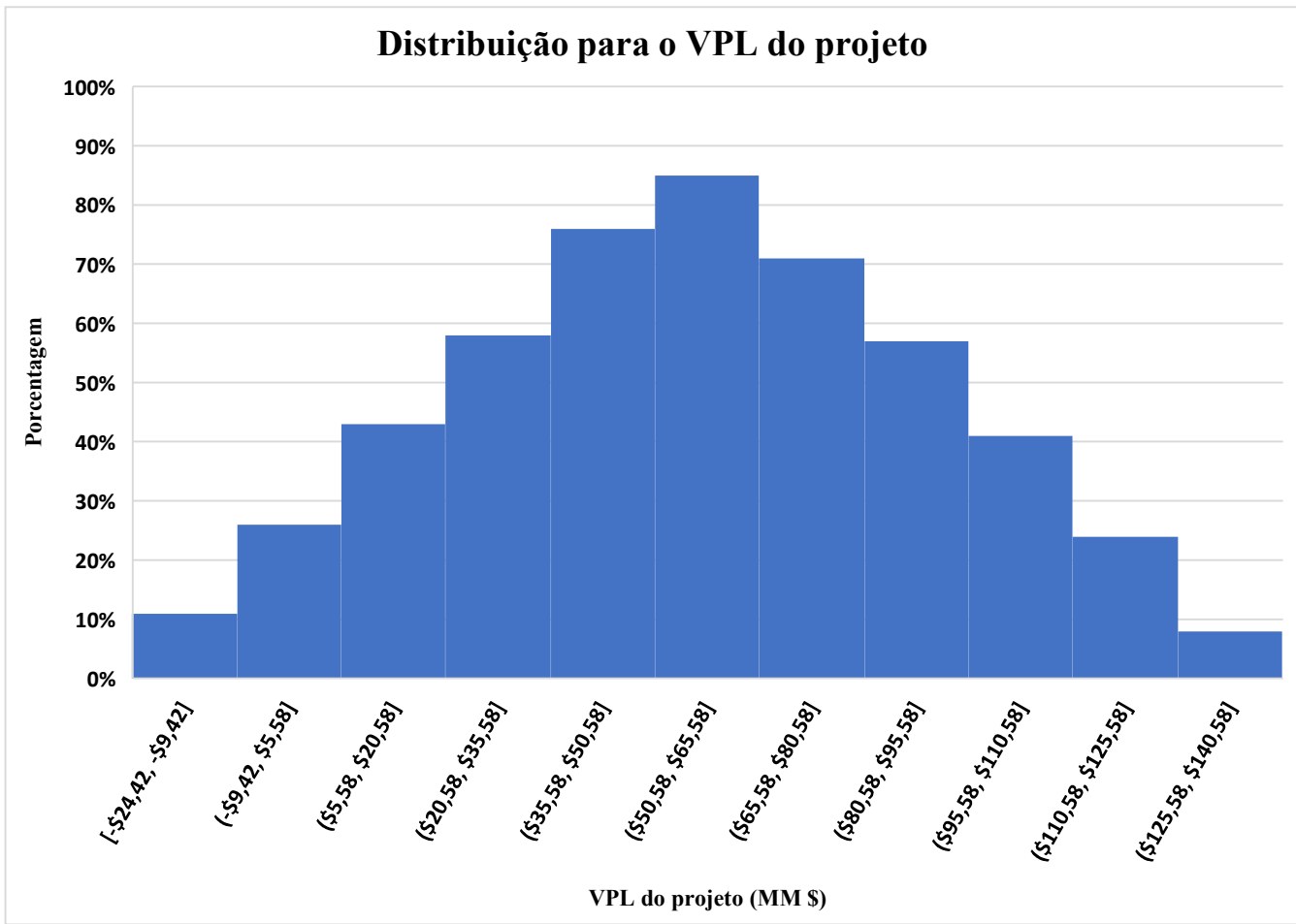


Figura 9: Distribuição de probabilidade para o VPL do Projeto referente a variação na Capacidade de produção



### Cenário 4 - VPL

Figura 10: Distribuição de probabilidade para o VPL do Projeto referente a variação do custo Do Furfural

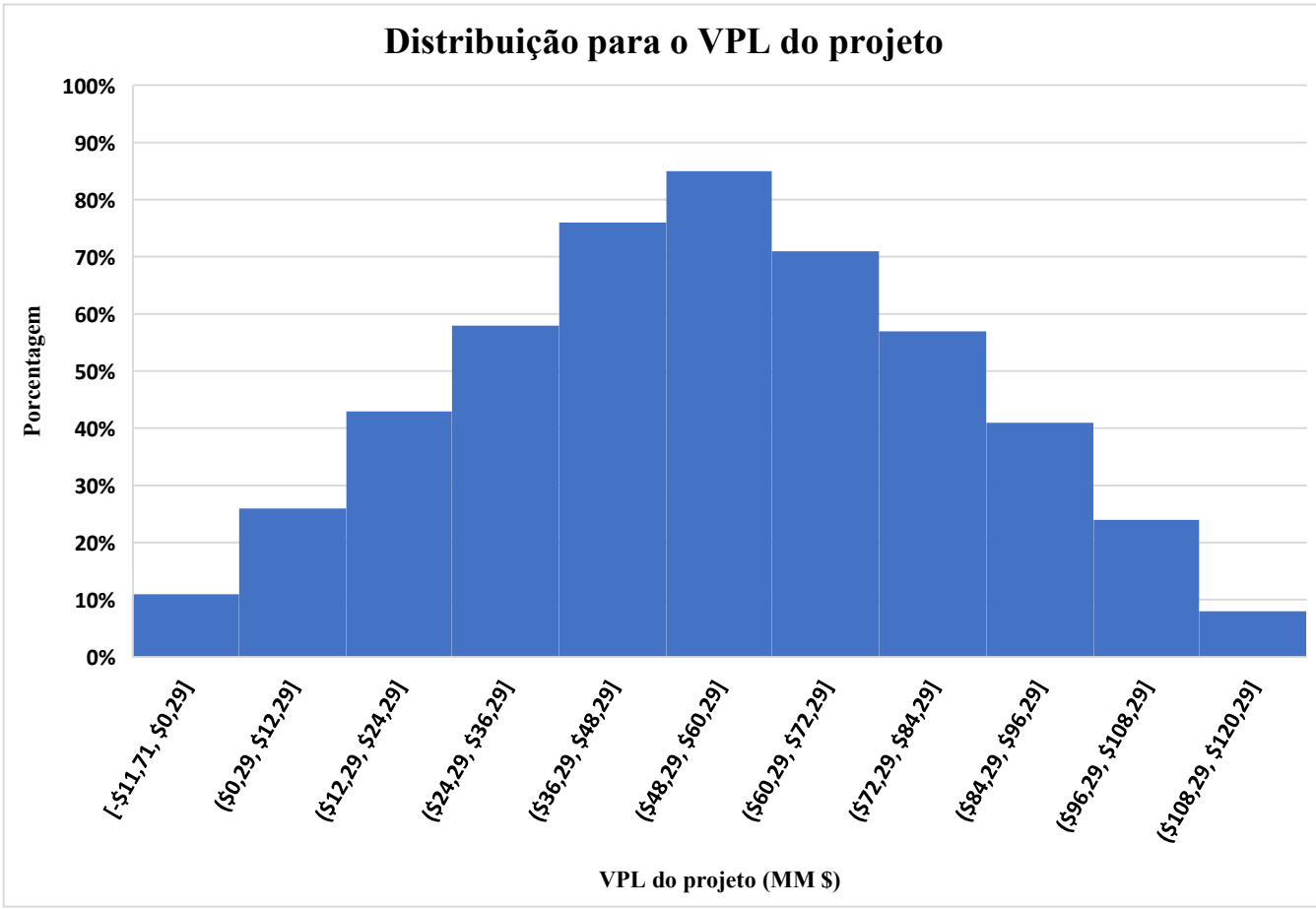


Figura 11: Distribuição de probabilidade para o VPL do Projeto referente a variação do custo

Da Acetona

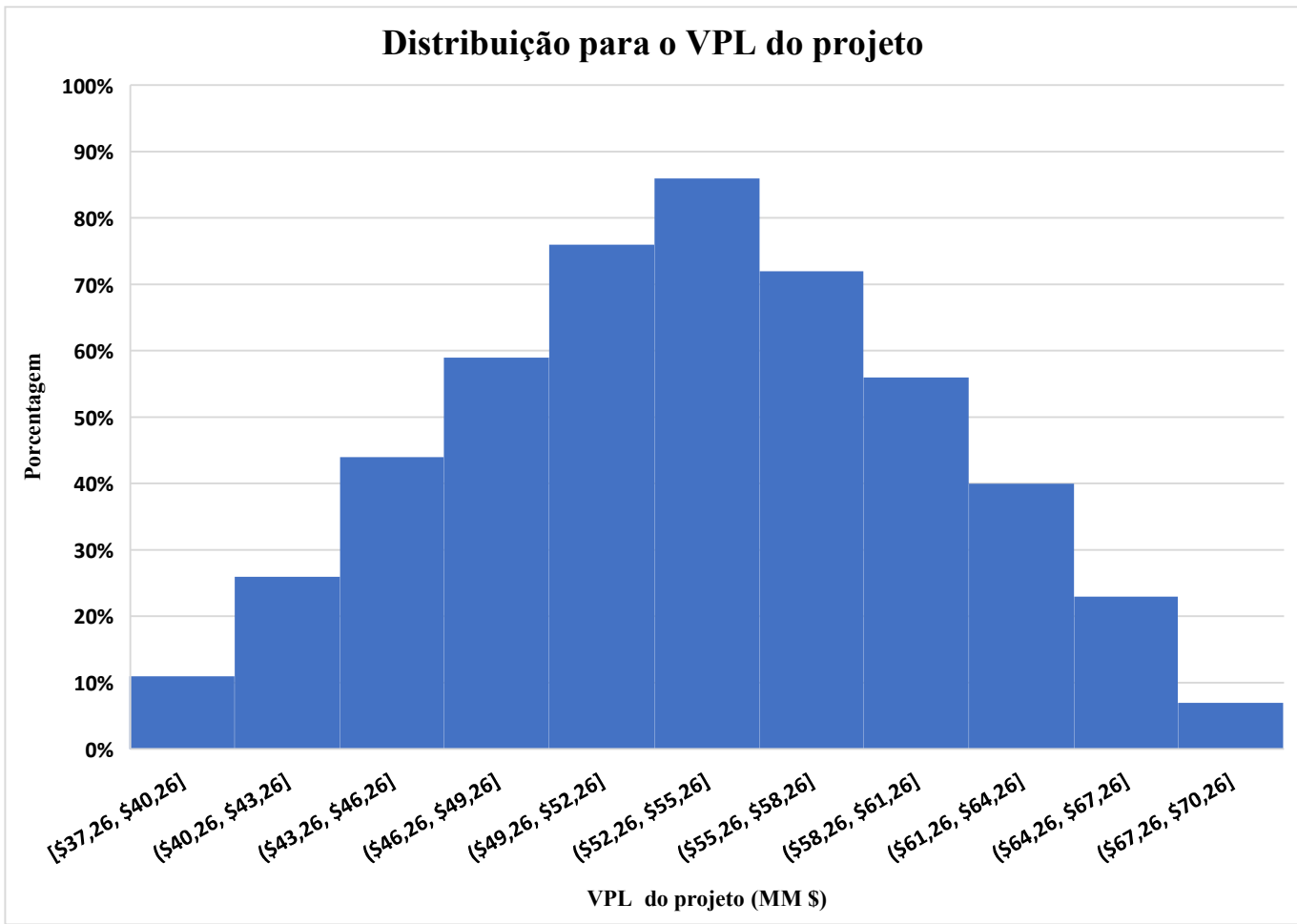
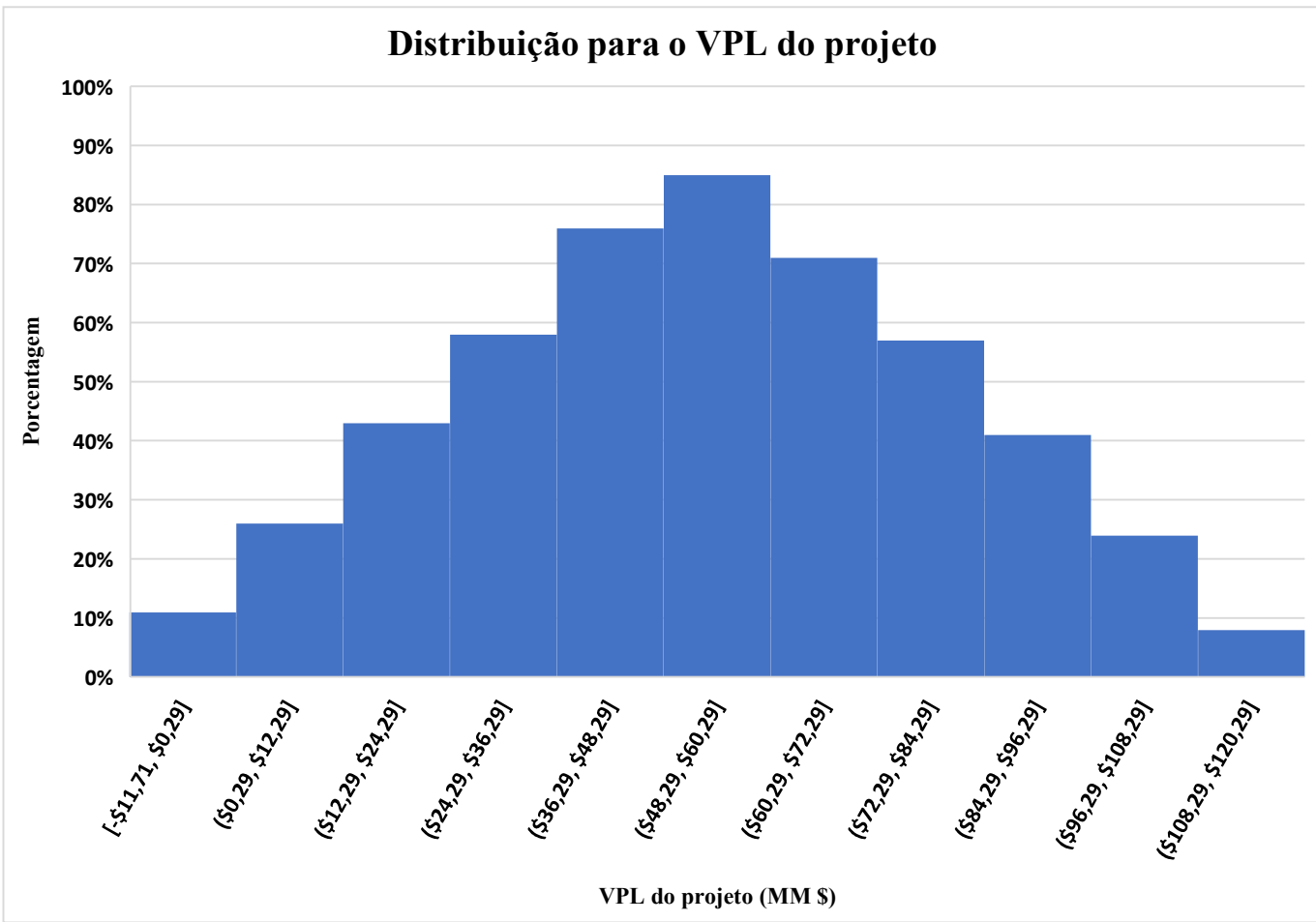


Figura 12: Distribuição de probabilidade para o VPL do Projeto referente a variação na Capacidade de produção



### Cenário 5 – VPL

Figura 13: Distribuição de probabilidade para o VPL do Projeto referente a variação do custo Do Furfural

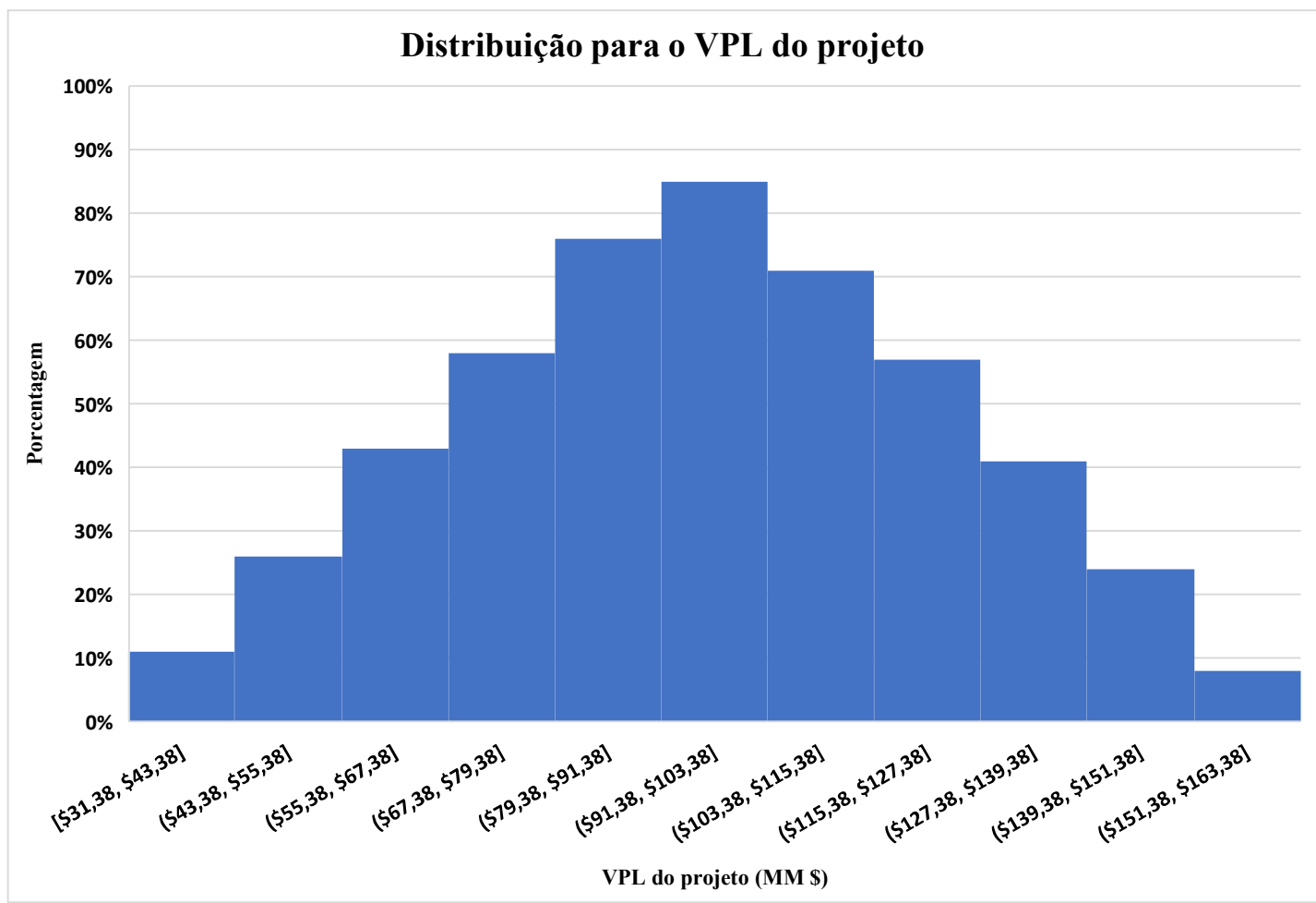


Figura 14: Distribuição de probabilidade para o VPL do Projeto referente a variação do custo  
Da Acetona

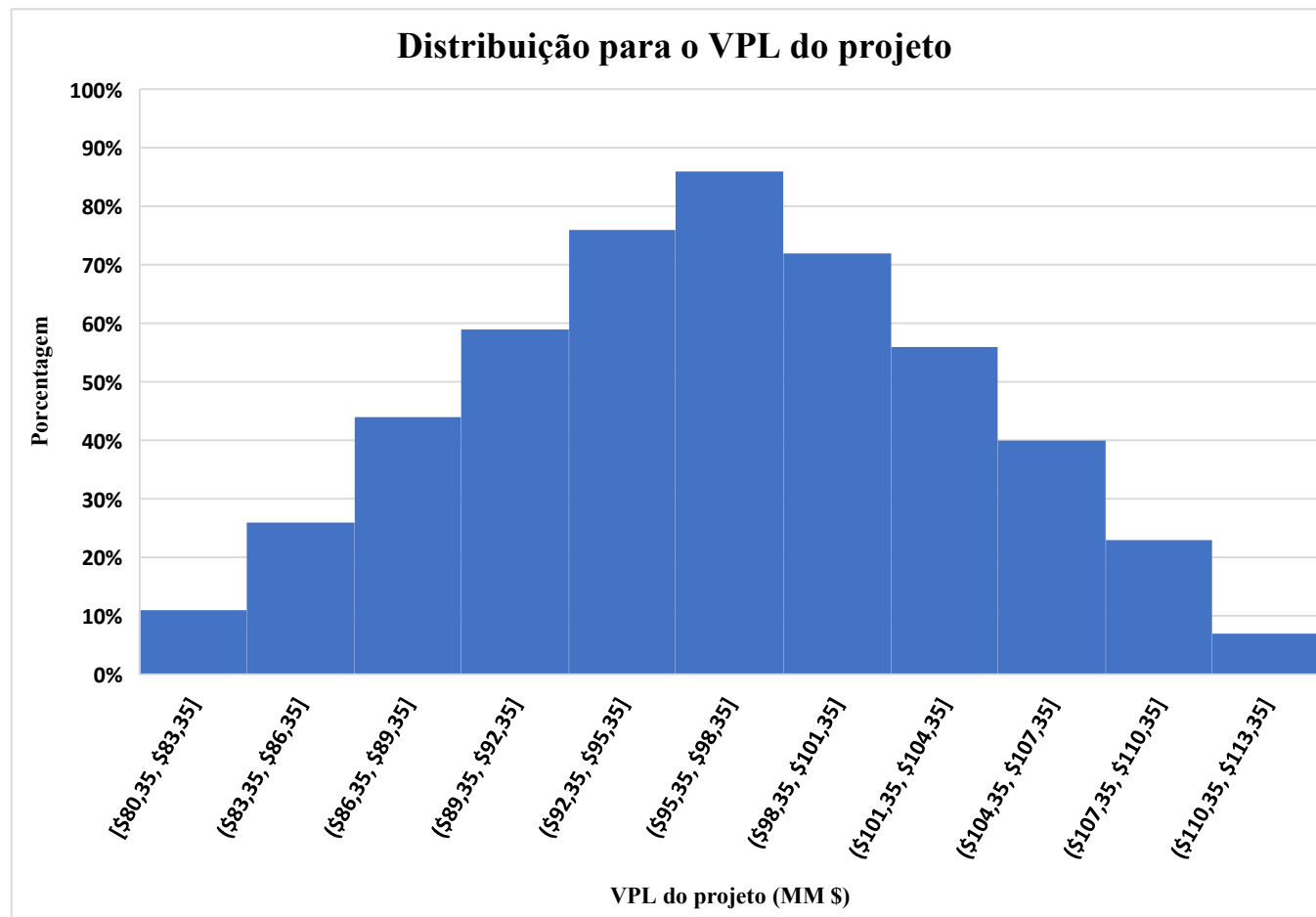
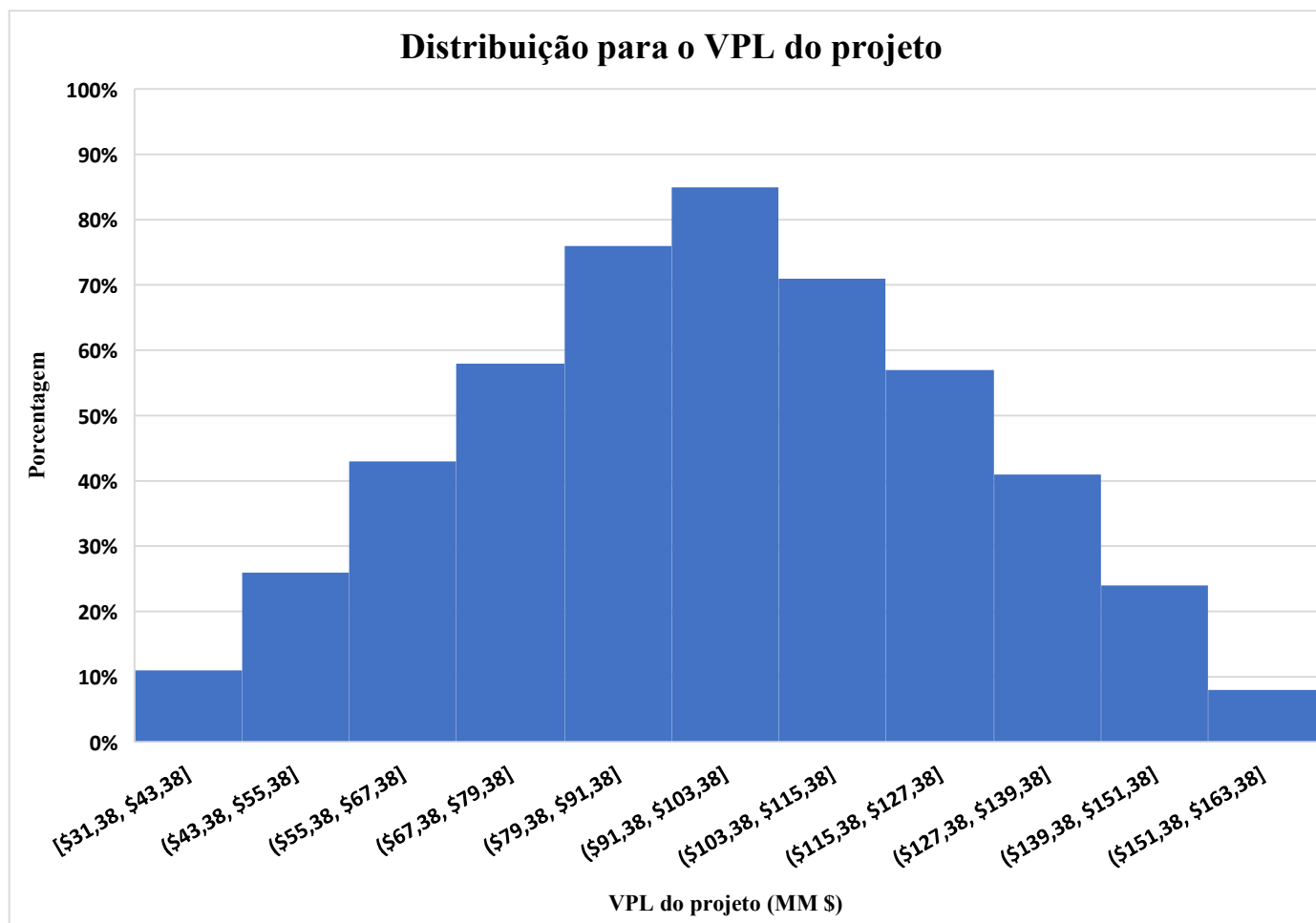


Figura 15: Distribuição de probabilidade para o VPL do Projeto referente a variação na Capacidade de produção



**Cenário 6 – VPL**

Figura 16: Distribuição de probabilidade para o VPL do Projeto referente a variação do custo  
Do Furfural

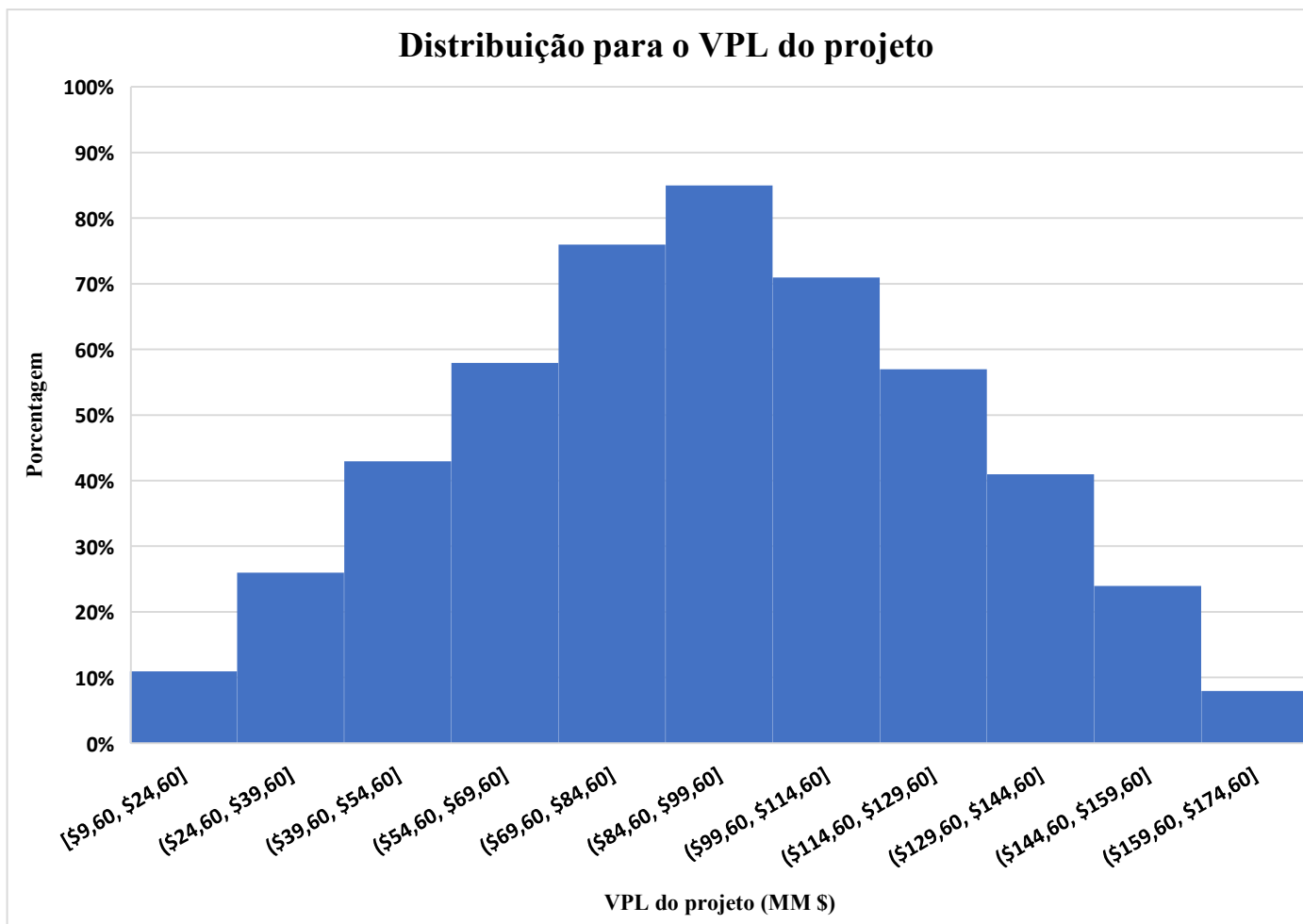


Figura 17: Distribuição de probabilidade para o VPL do Projeto referente a variação do custo Da Acetona

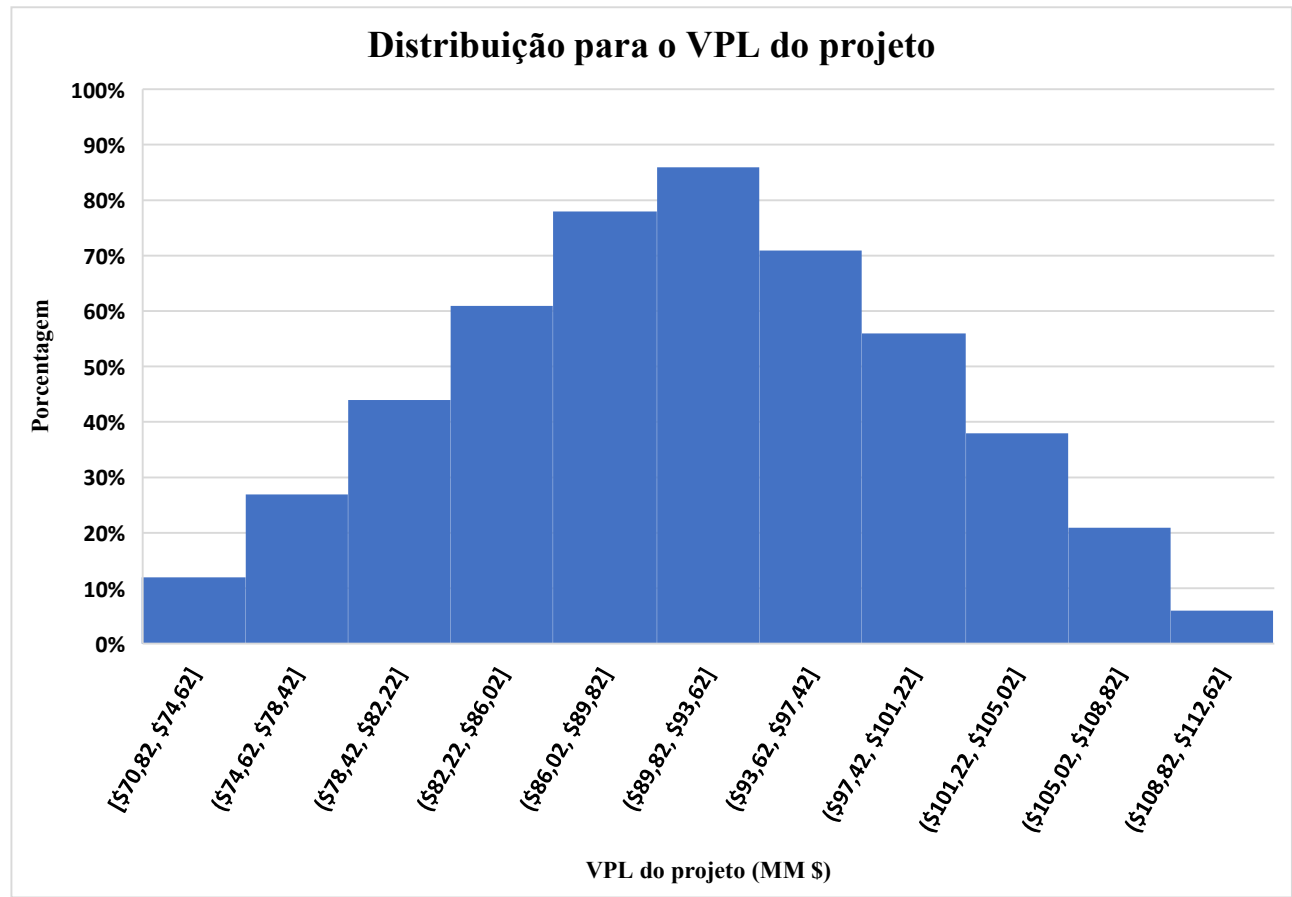
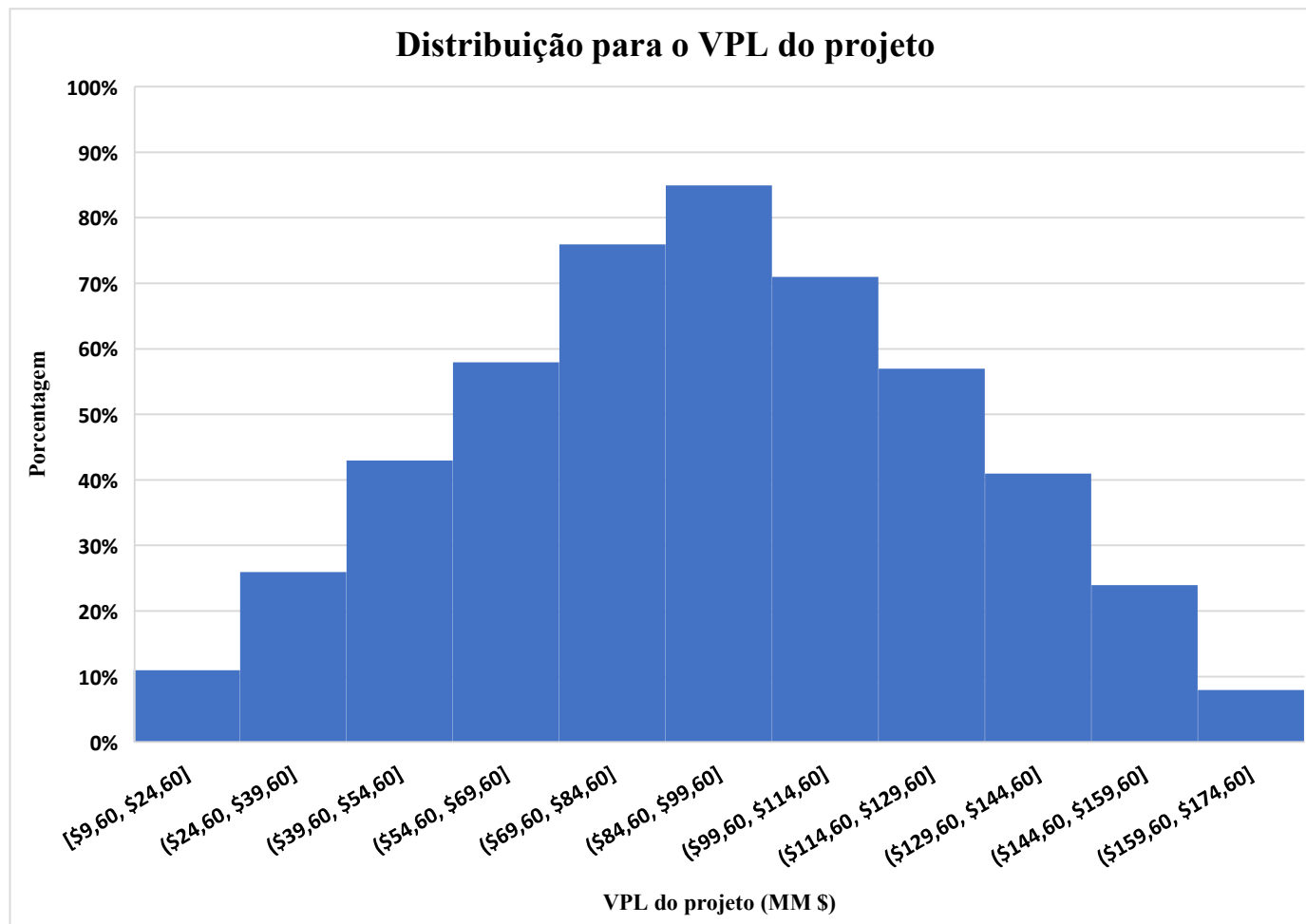


Figura 18: Distribuição de probabilidade para o VPL do Projeto referente a variação na Capacidade de produção



**Cenário 7 – VPL**

Figura 19: Distribuição de probabilidade para o VPL do Projeto referente a variação do custo  
Do Furfural

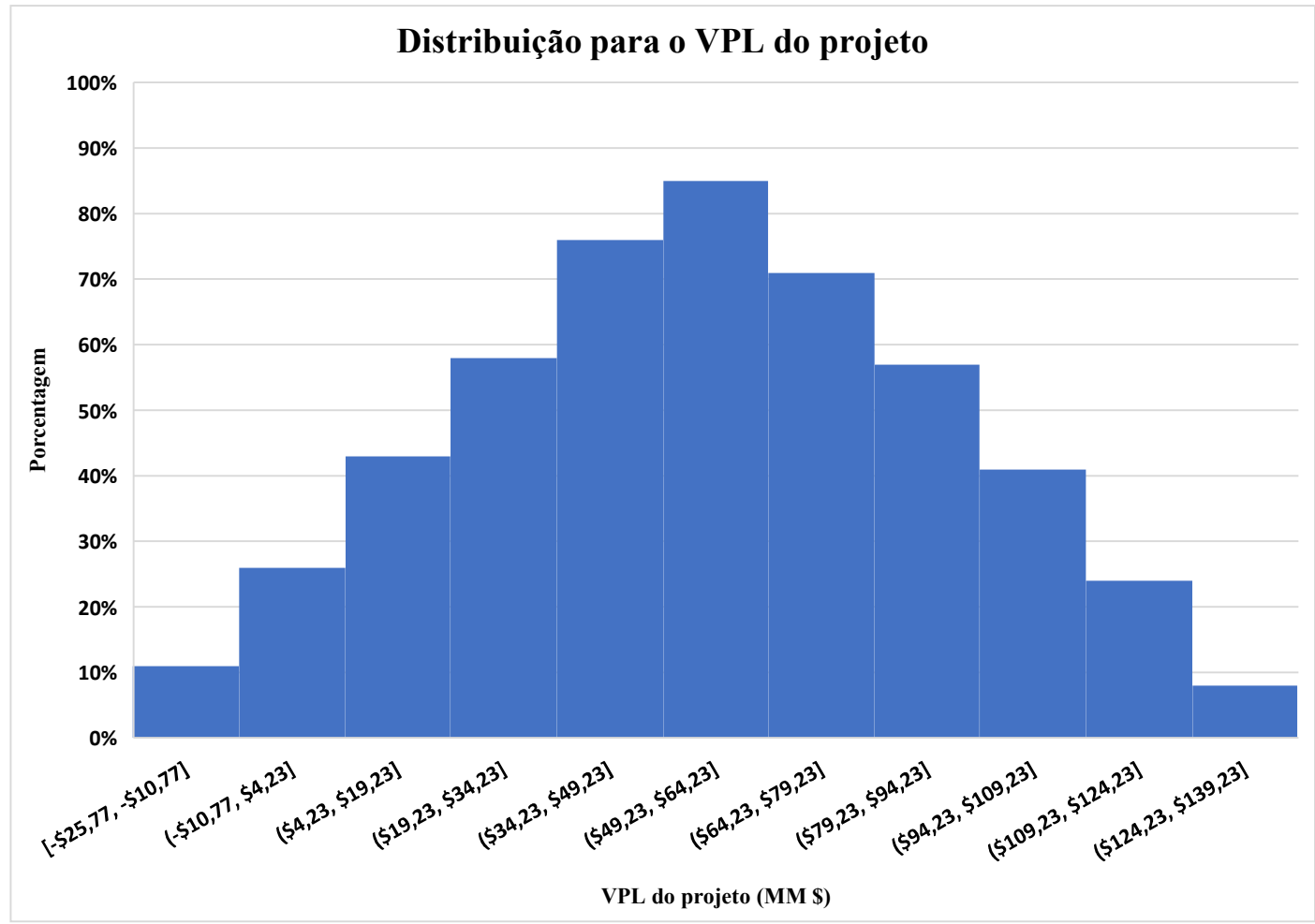


Figura 20: Distribuição de probabilidade para o VPL do Projeto referente a variação do custo  
Da Acetona

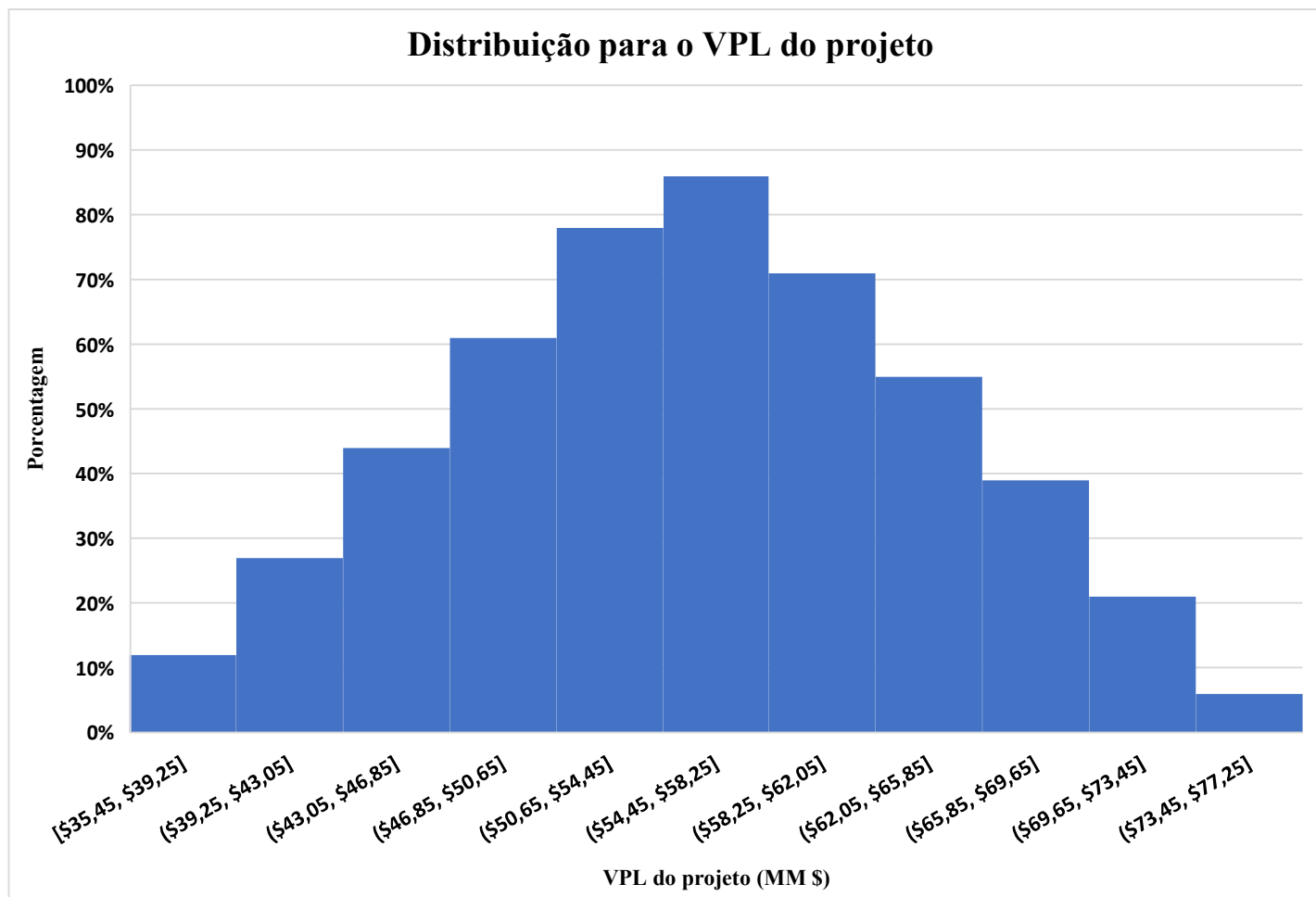
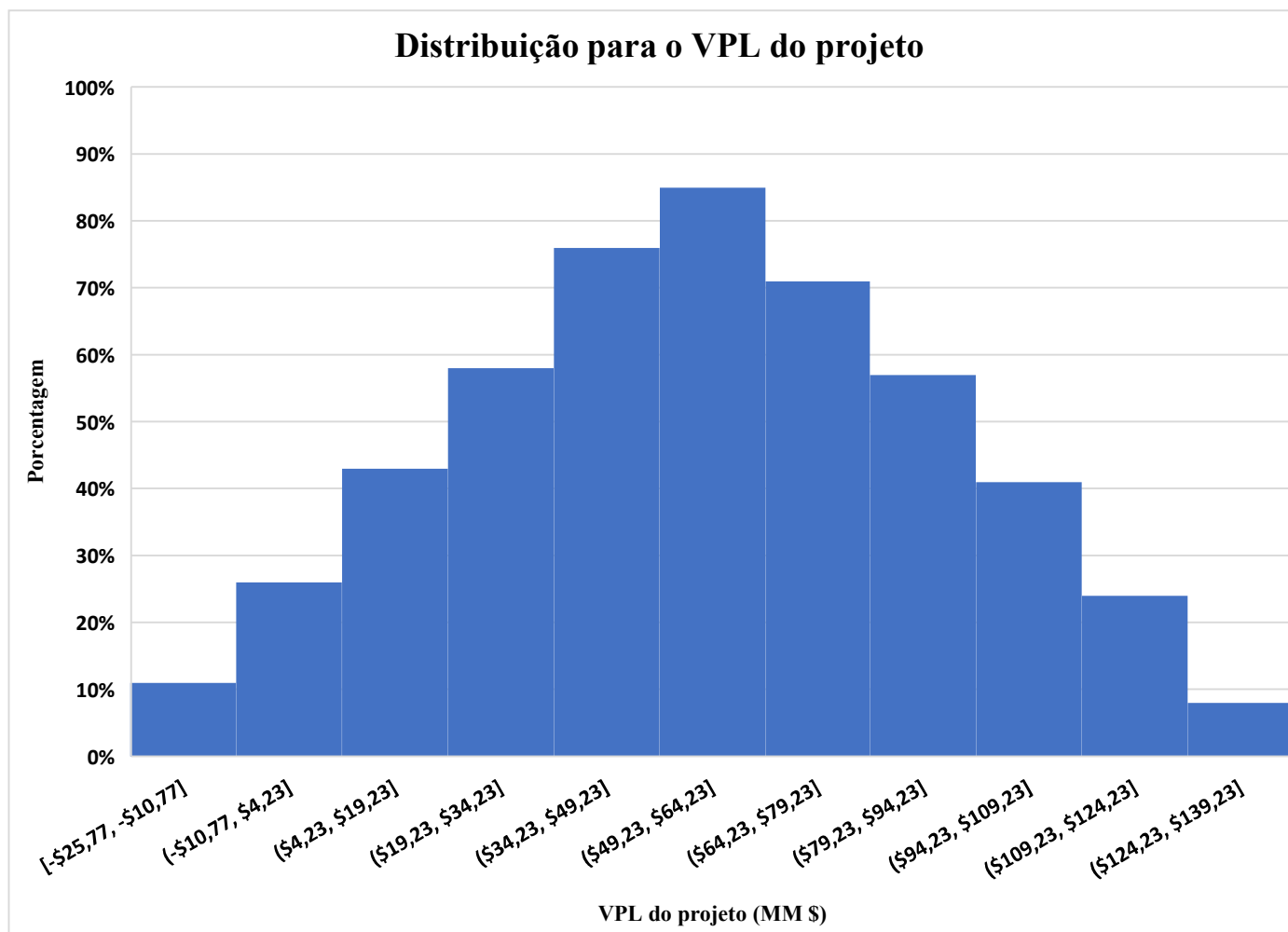


Figura 21: Distribuição de probabilidade para o VPL do Projeto referente a variação na Capacidade de produção



### Cenário 8 - VPL

Figura 22: Distribuição de probabilidade para o VPL do Projeto referente a variação do custo Do Furfural

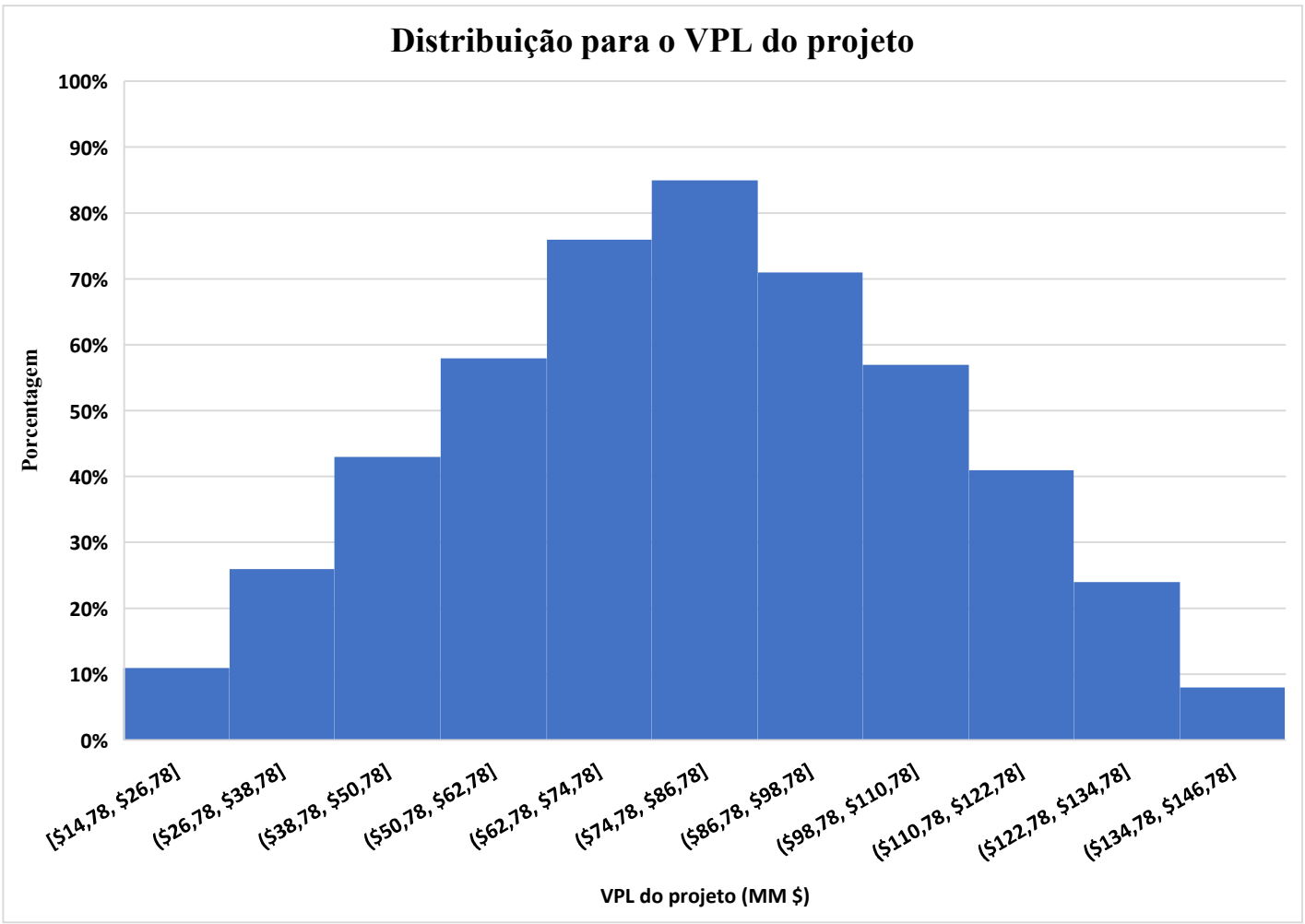


Figura 23: Distribuição de probabilidade para o VPL do Projeto referente a variação do custo

Da Acetona

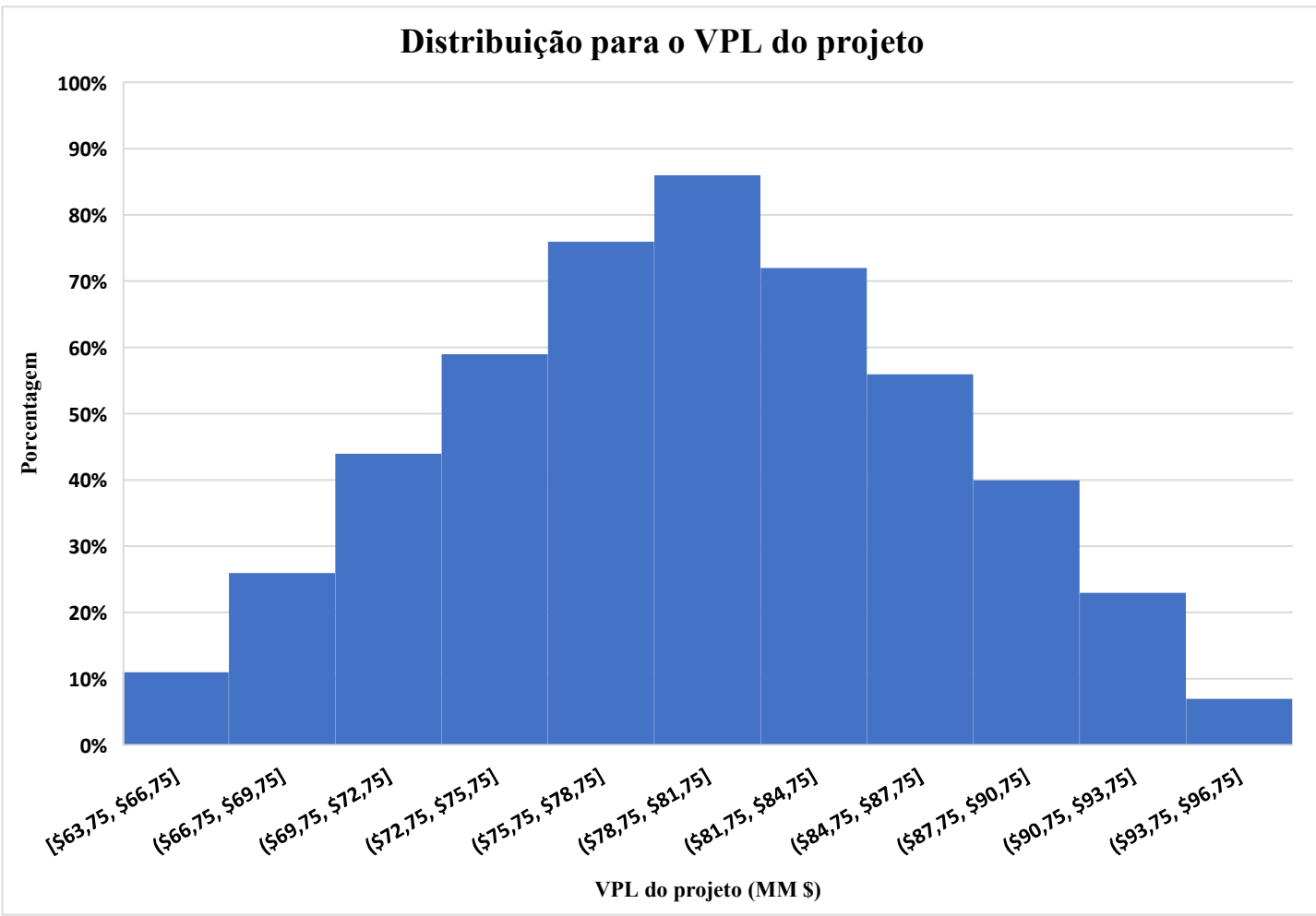
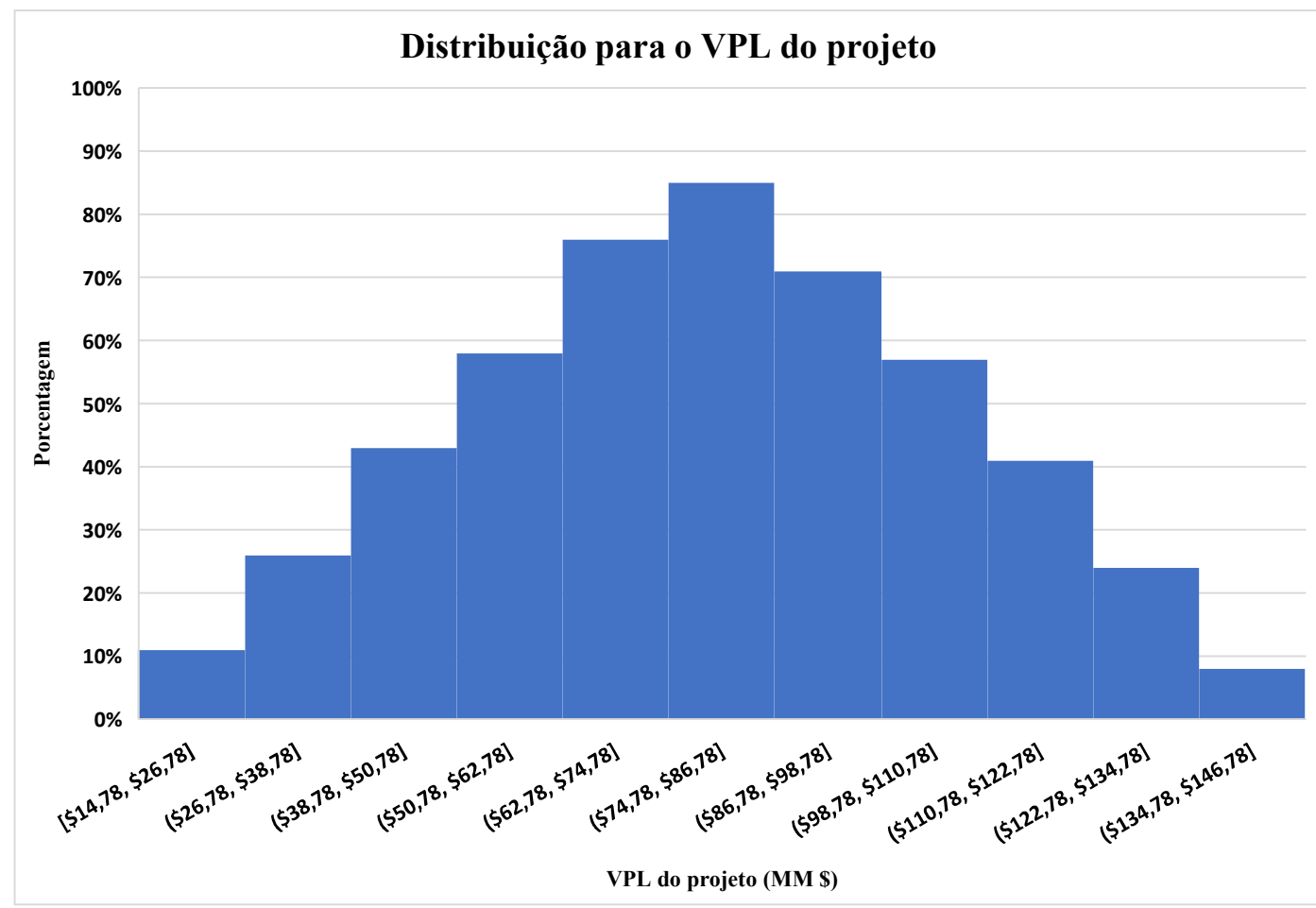


Figura 24: Distribuição de probabilidade para o VPL do Projeto referente a variação da capacidade de produção



**Apêndice N - Histogramas de distribuição da probabilidade para os custos operacionais, considerando as variações no custo do furfural, da acetona e na capacidade de produção**

**Cenário 1 – Custos Operacionais**

Figura 1: Distribuição de probabilidade para os Custos Operacionais referente a variação do custo do Furfural

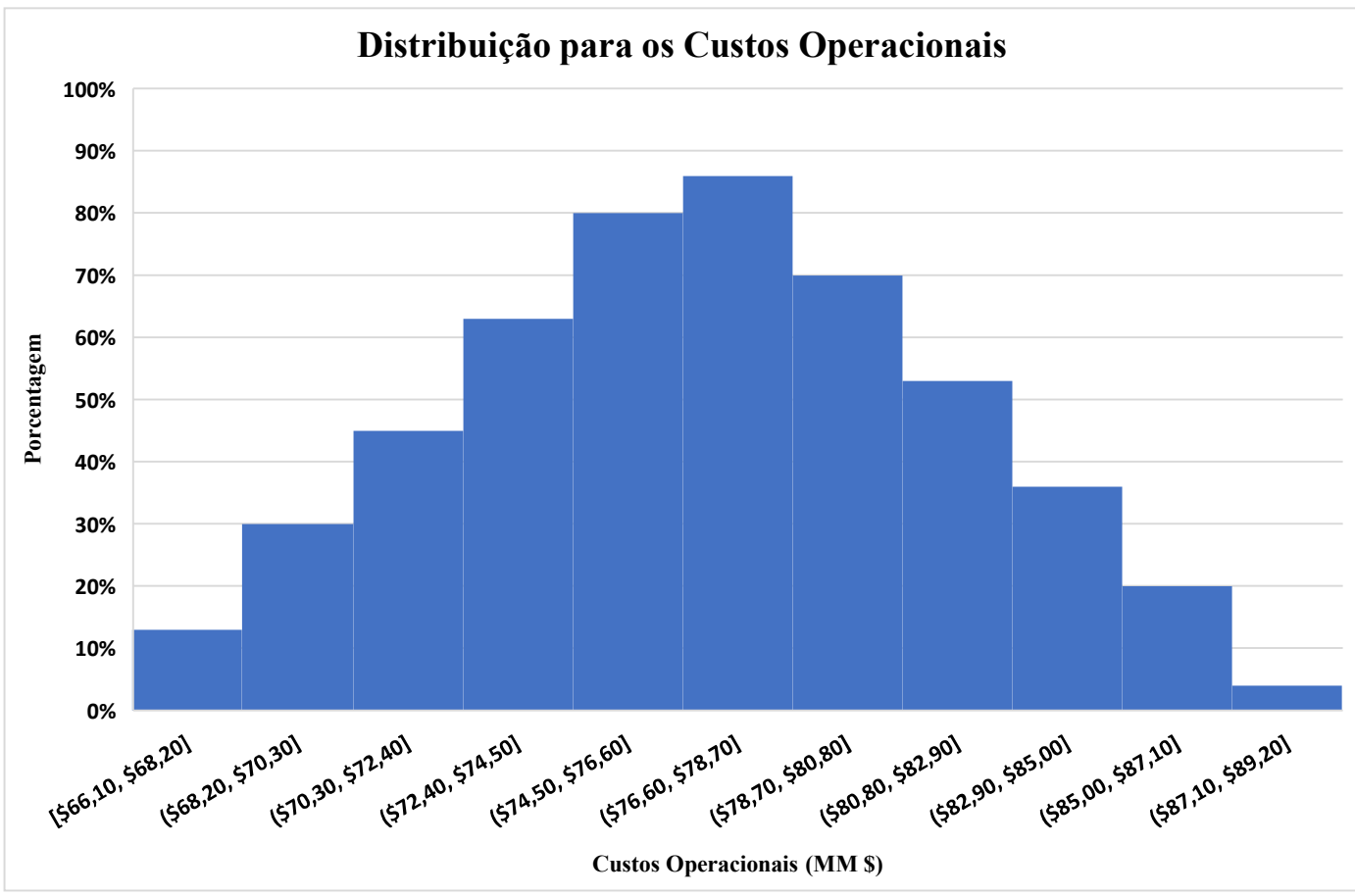


Figura 2: Distribuição de probabilidade para os Custos Operacionais referente a variação do custo da Acetona

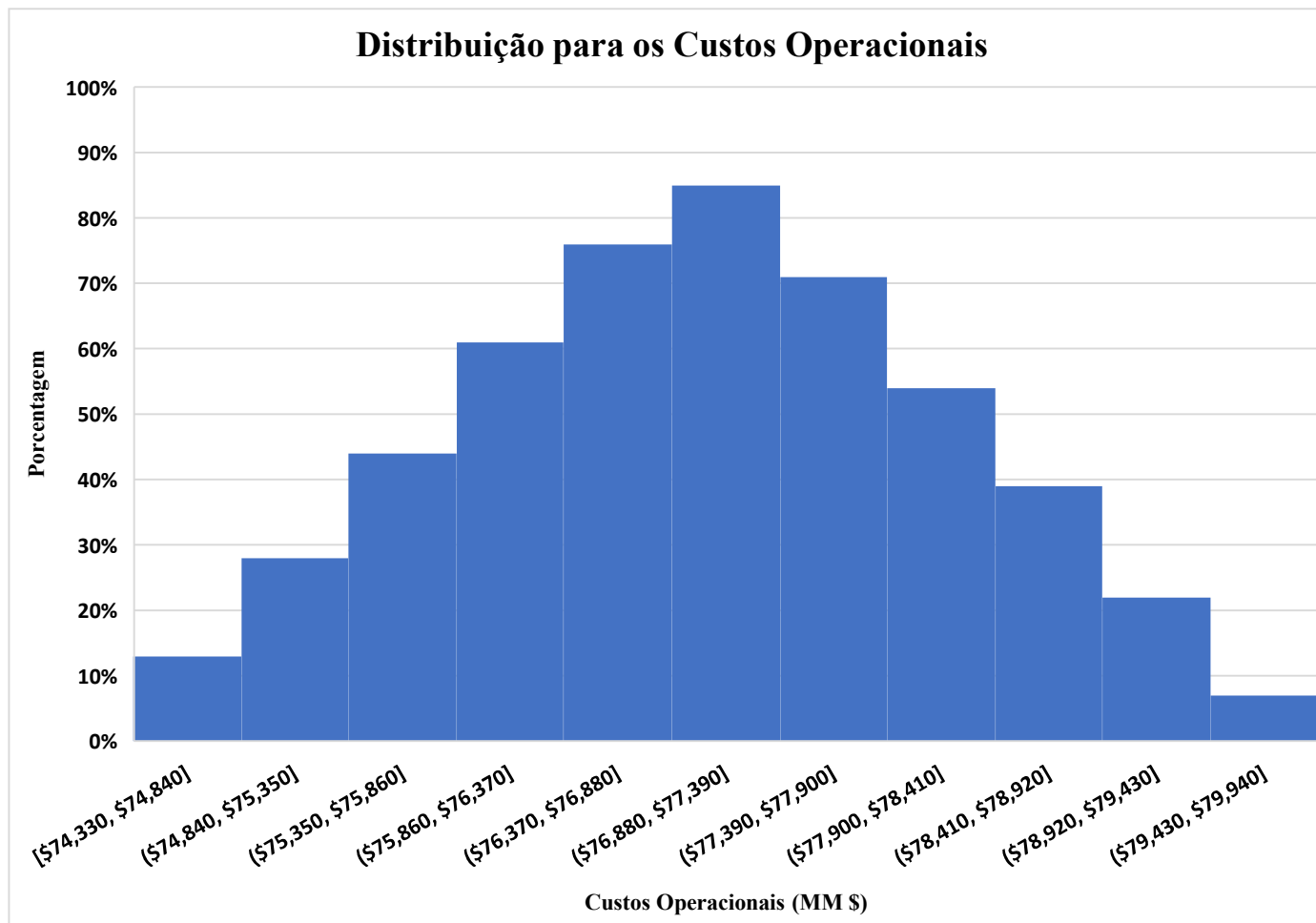
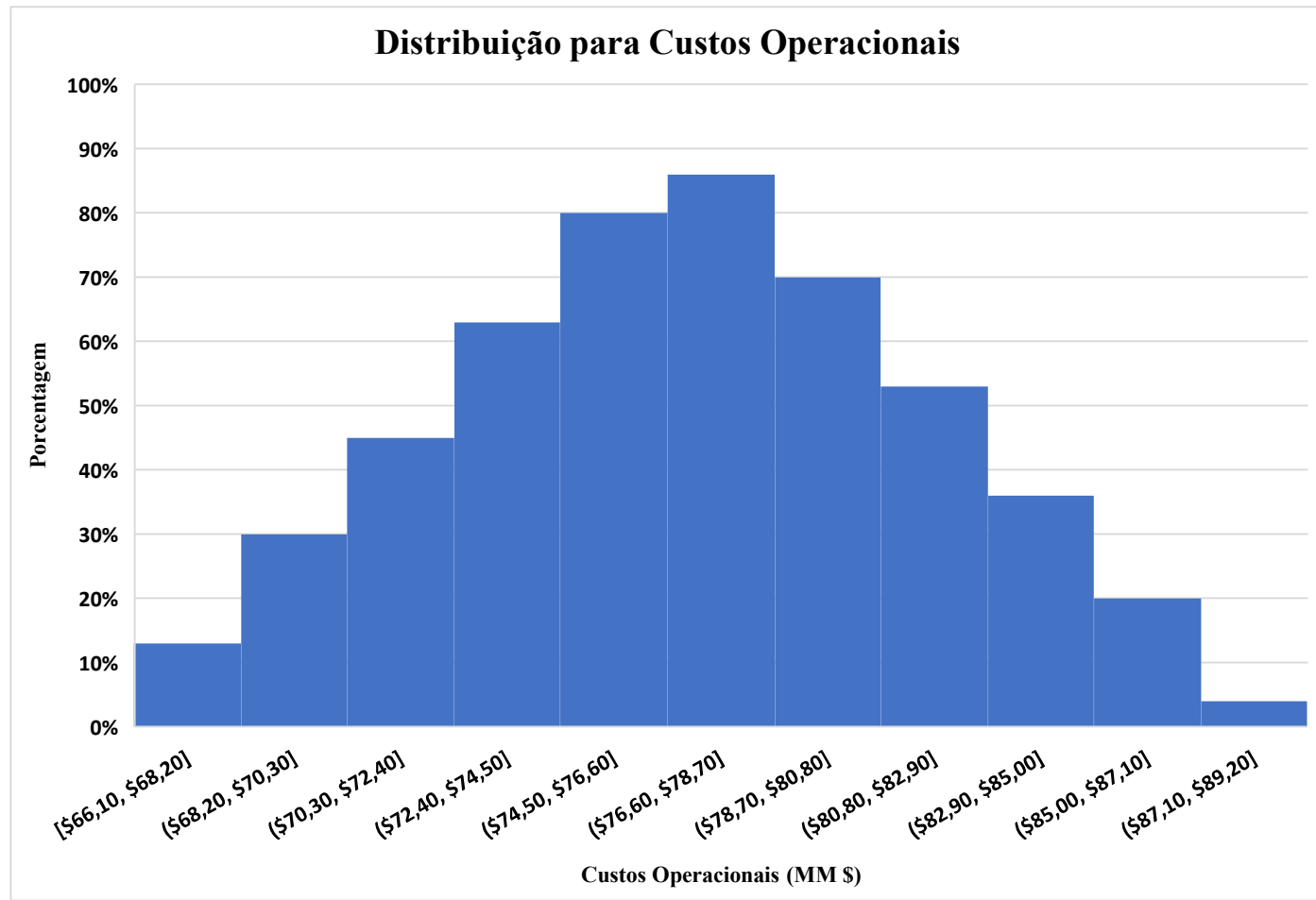


Figura 3: Distribuição de probabilidade para os Custos Operacionais referente a variação na Capacidade de produção



### Cenário 2 – Custos Operacionais

Figura 4: Distribuição de probabilidade para os Custos Operacionais referente a variação do custo de Furfural

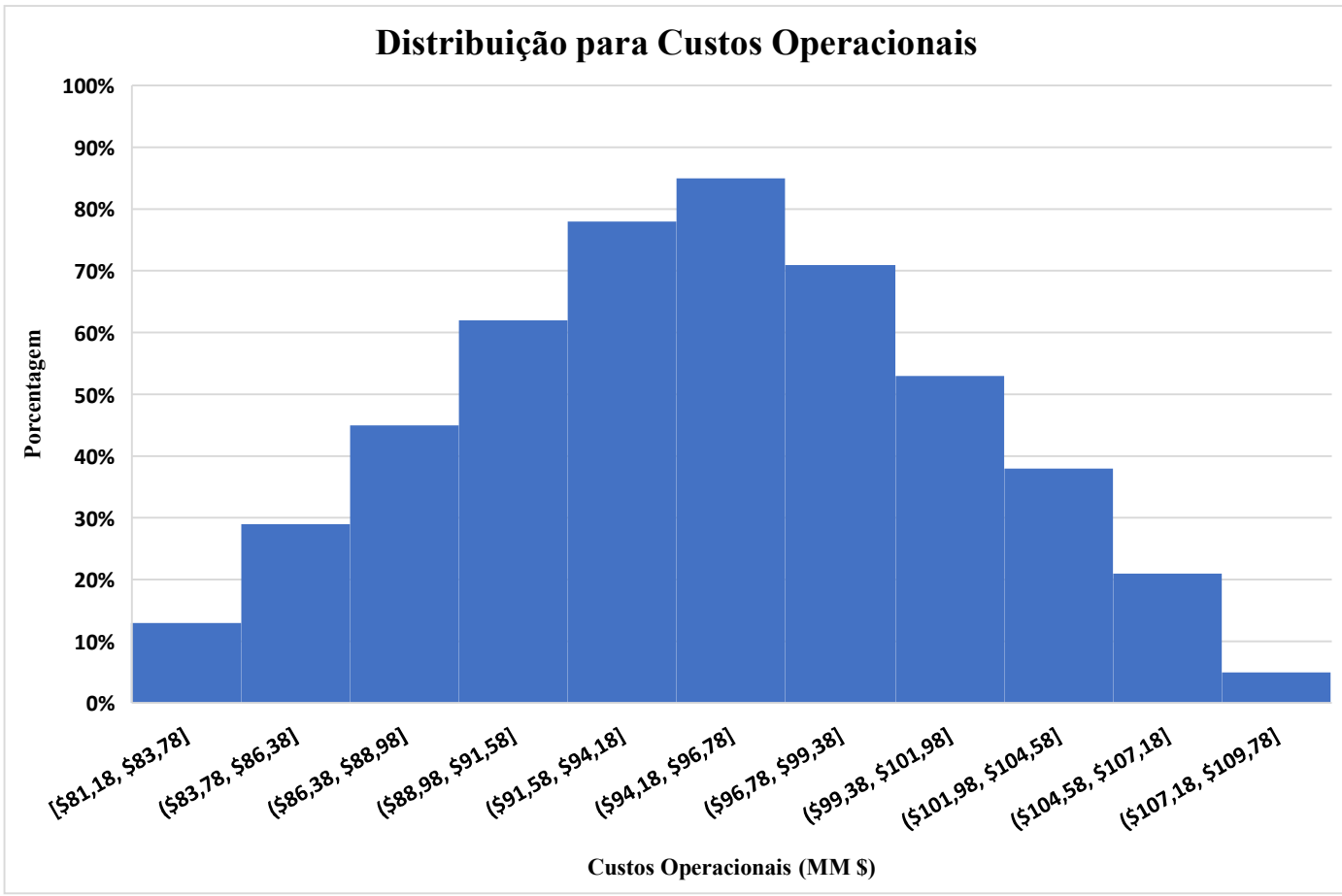


Figura 5: Distribuição de probabilidade para os Custos Operacionais referente a variação do custo de Acetona

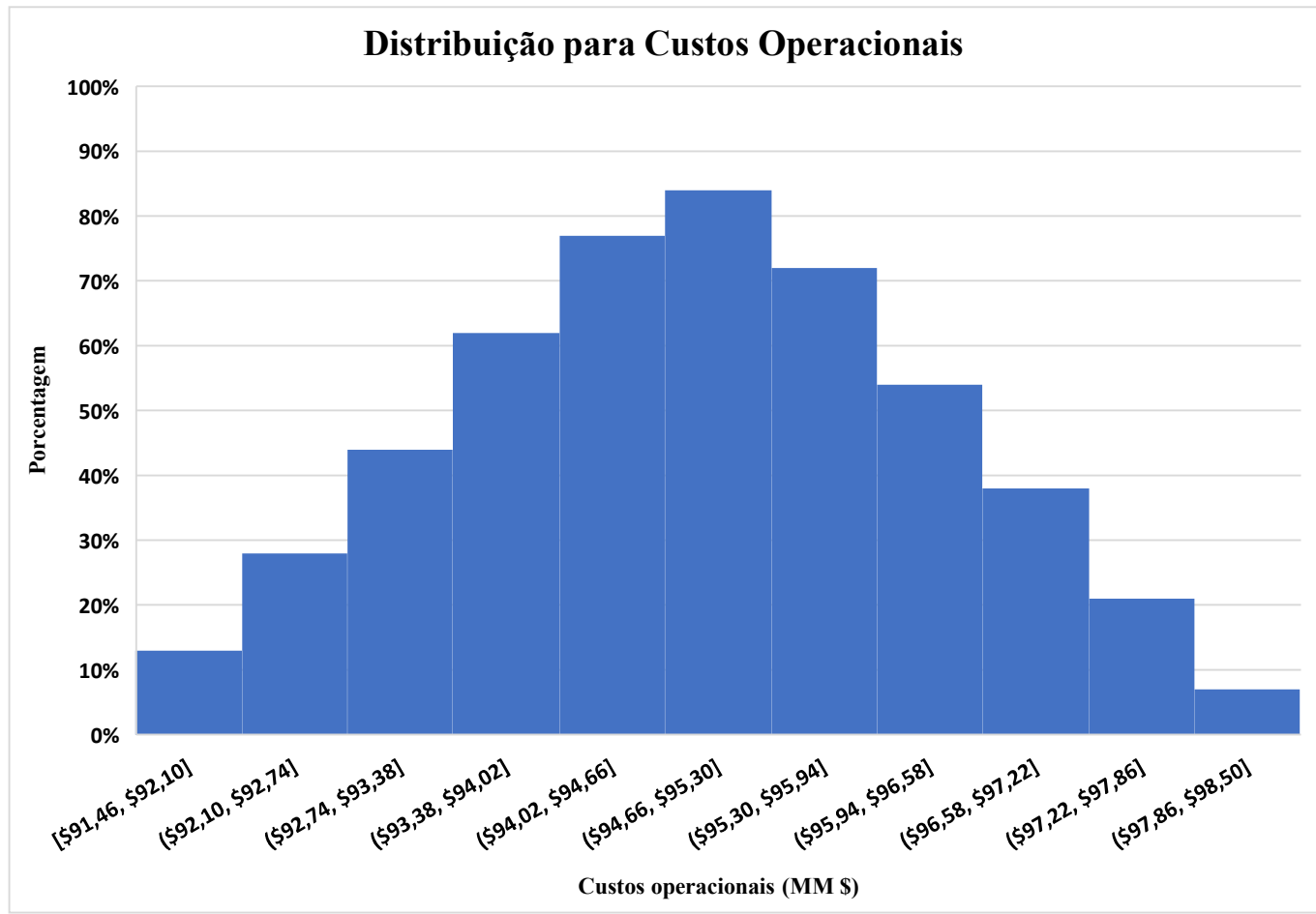
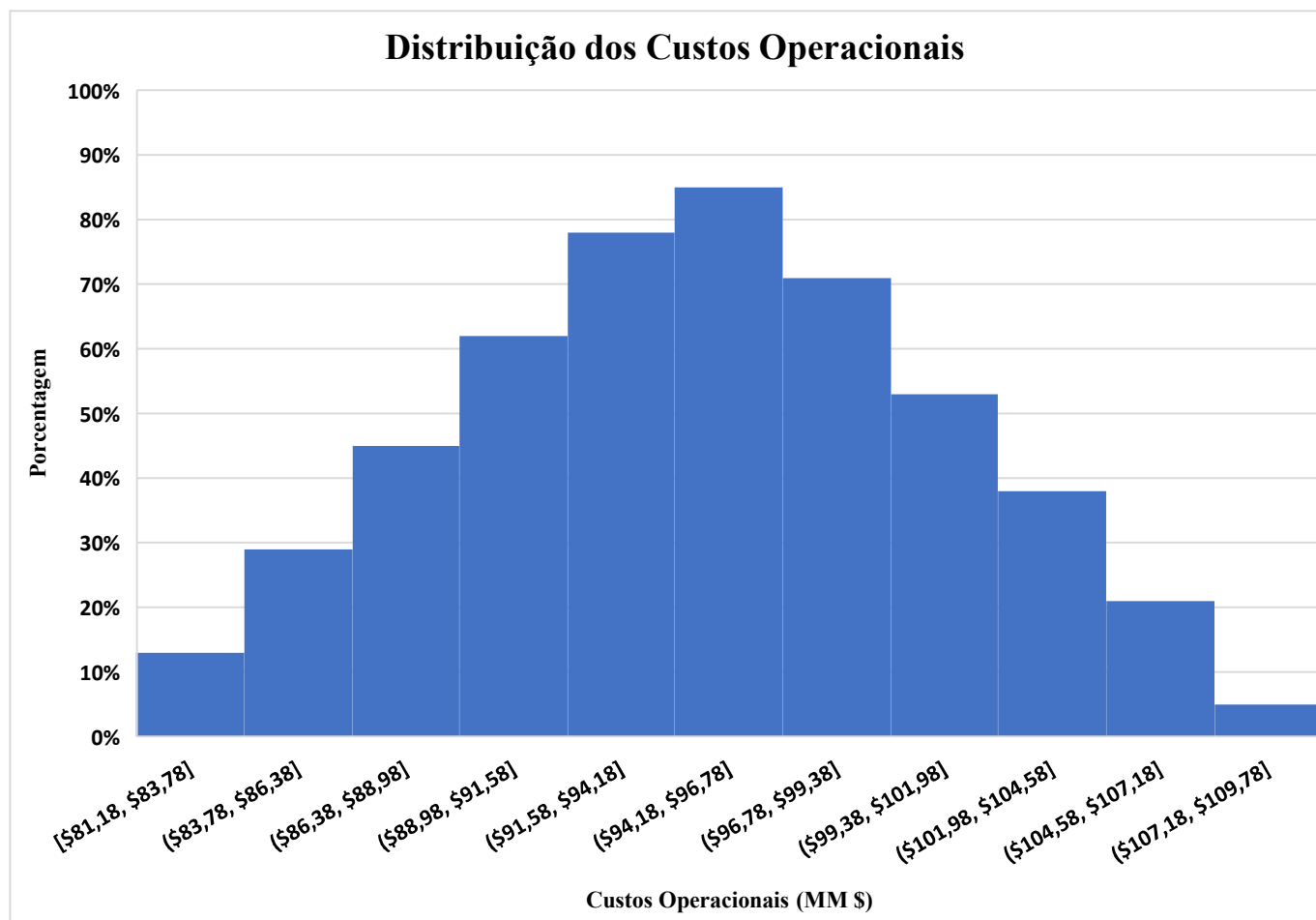


Figura 6: Distribuição de probabilidade para os Custos Operacionais referente a variação da Capacidade de produção



### Cenário 3 – Custos Operacionais

Figura 7: Distribuição de probabilidade para os Custos Operacionais referente a variação na Do custo de Furfural

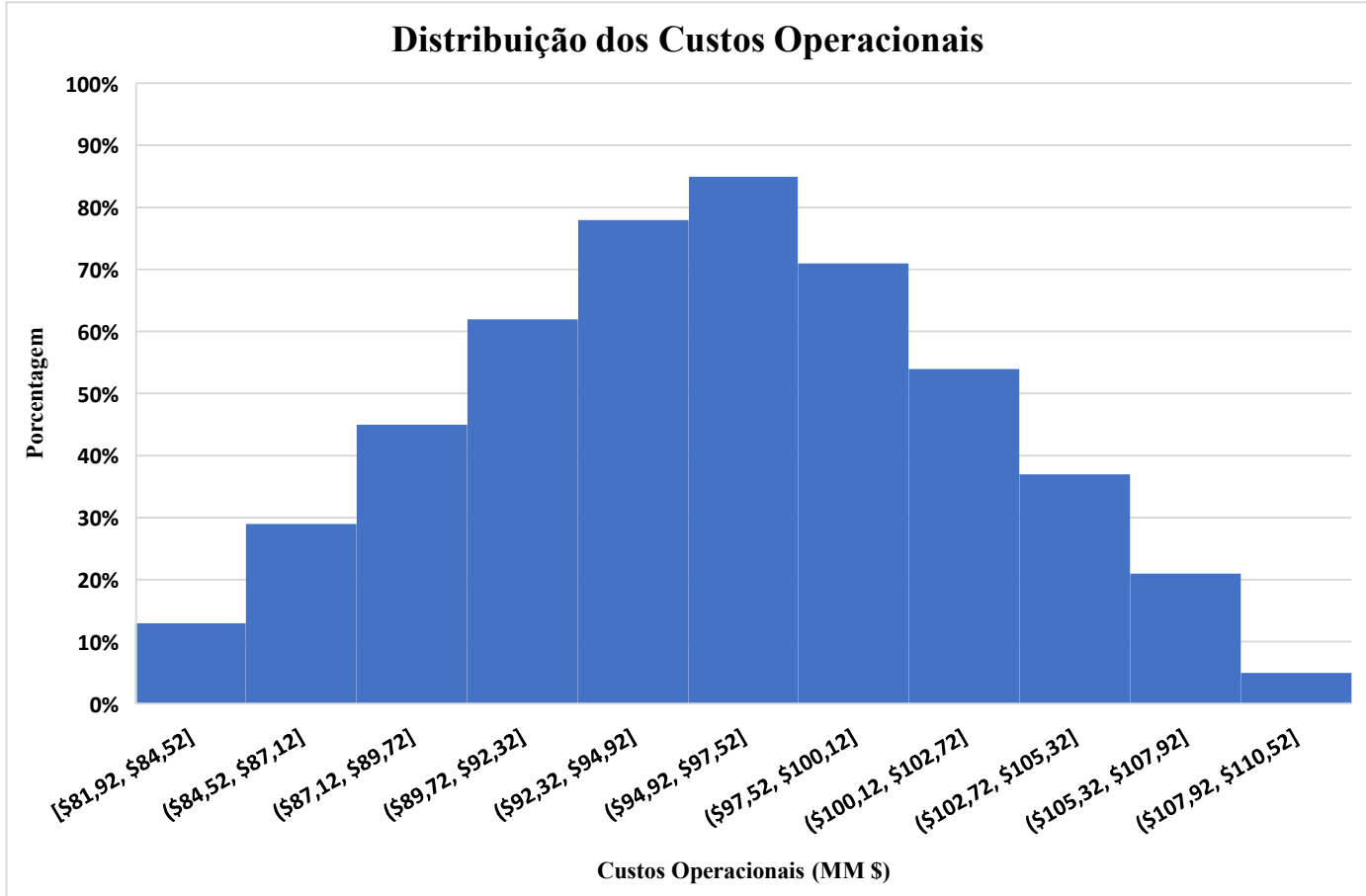


Figura 8: Distribuição de probabilidade para os Custos Operacionais referente a variação na Do custo da Acetona

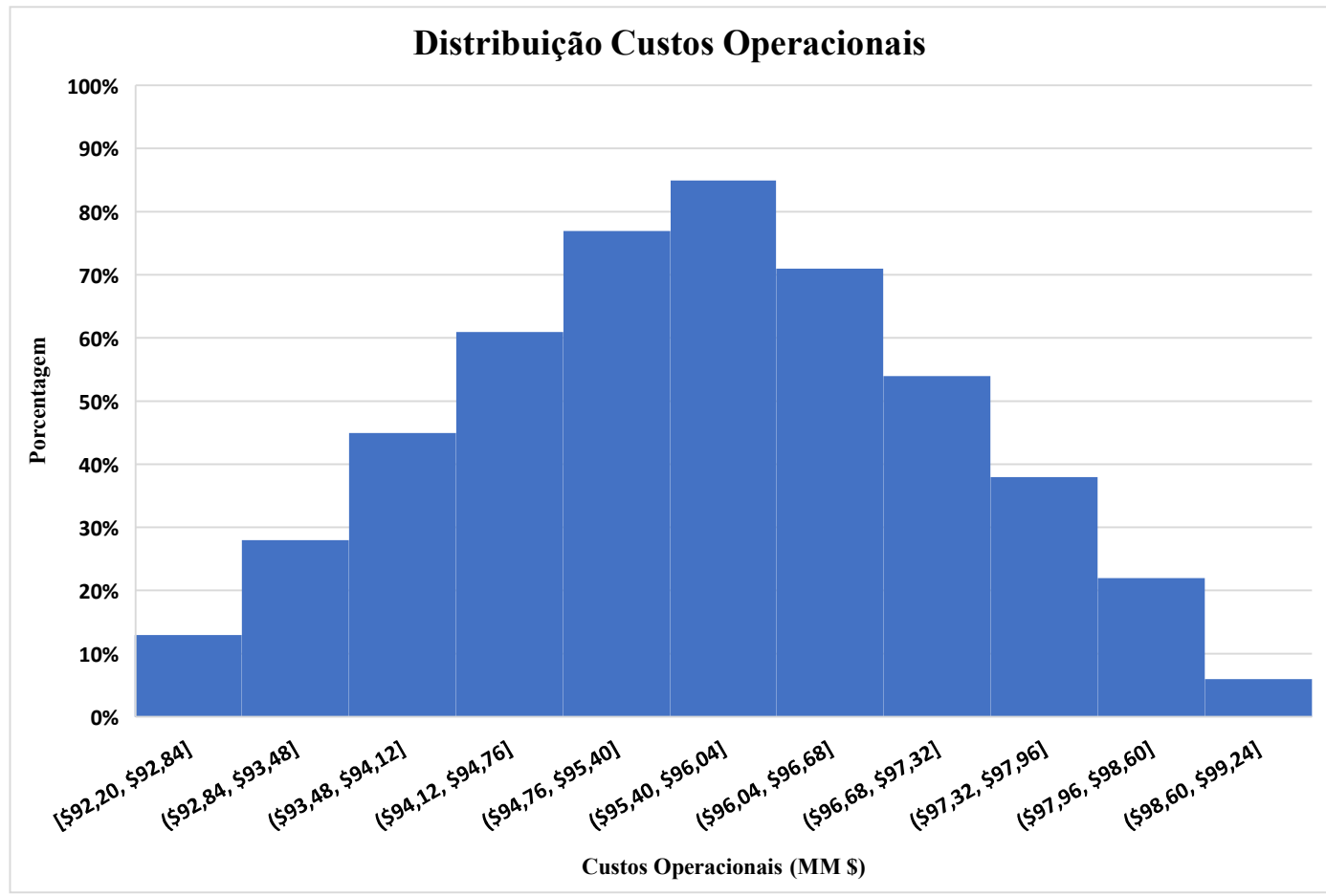
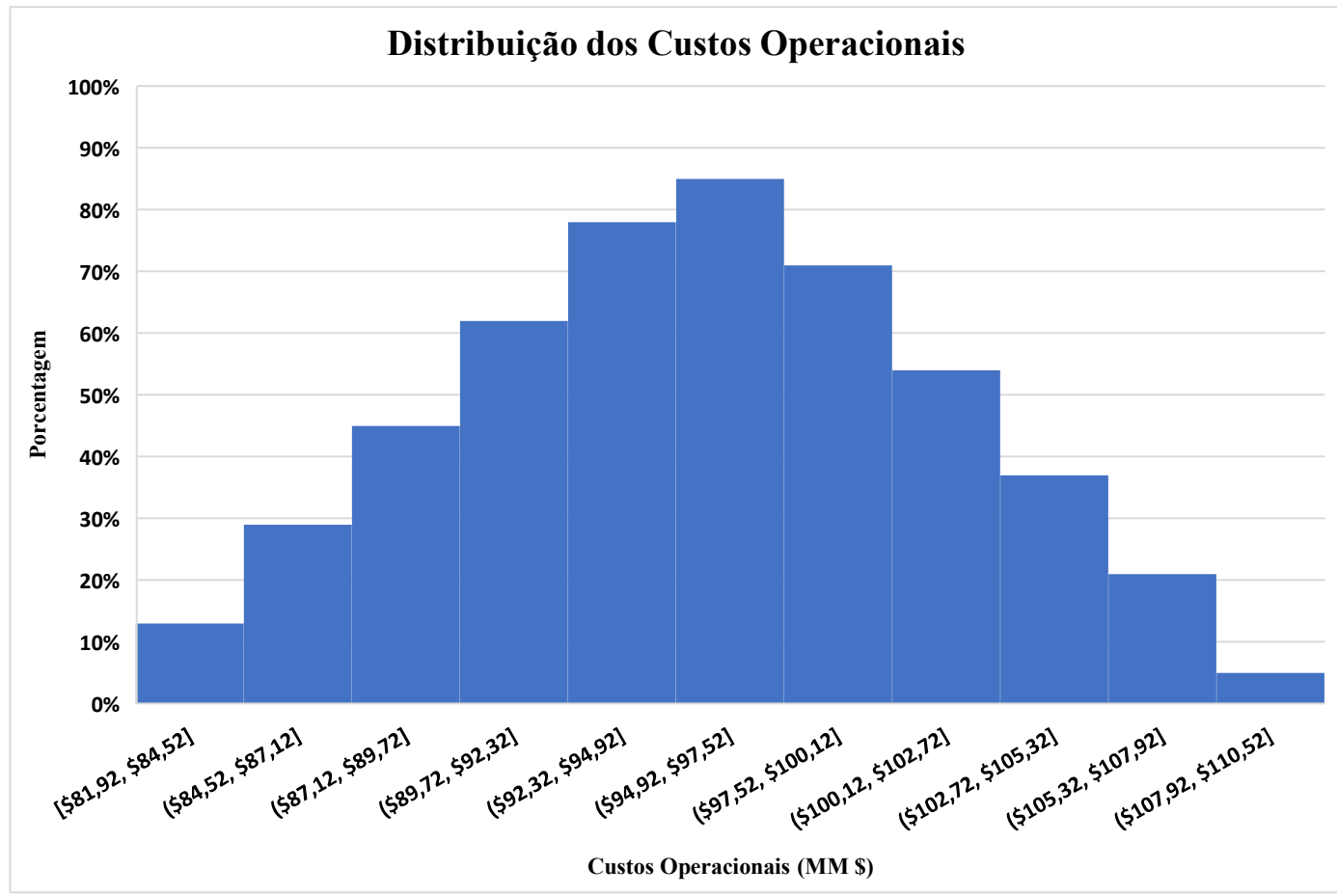


Figura 9: Distribuição de probabilidade para os Custos Operacionais referente a variação na Da capacidade de produção



### Cenário 4 – Custos Operacionais

Figura 10: Distribuição de probabilidade para os Custos Operacionais referente a variação na Do custo de Furfural

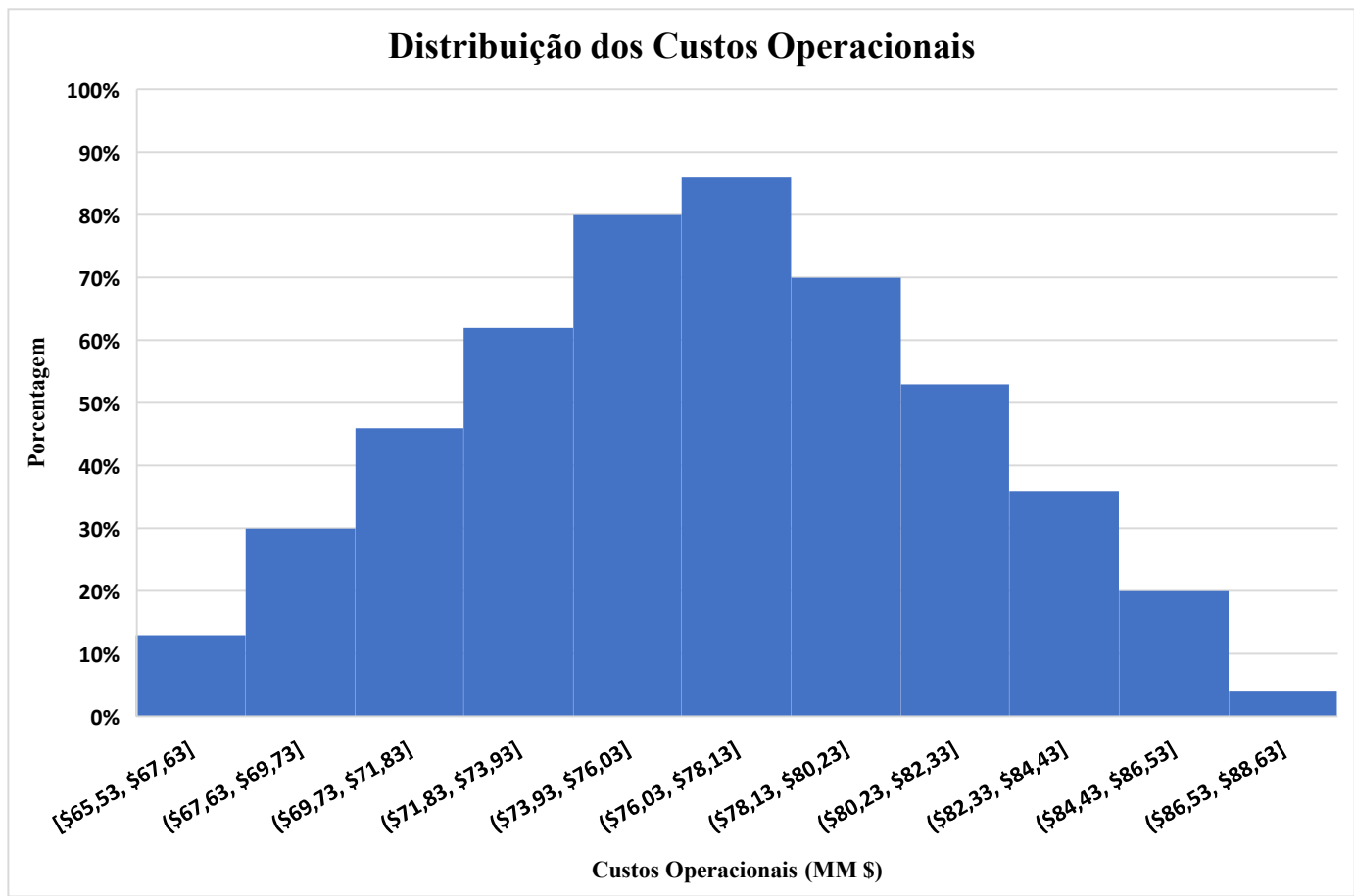


Figura 11: Distribuição de probabilidade para os Custos Operacionais referente a variação na Do custo da Acetona

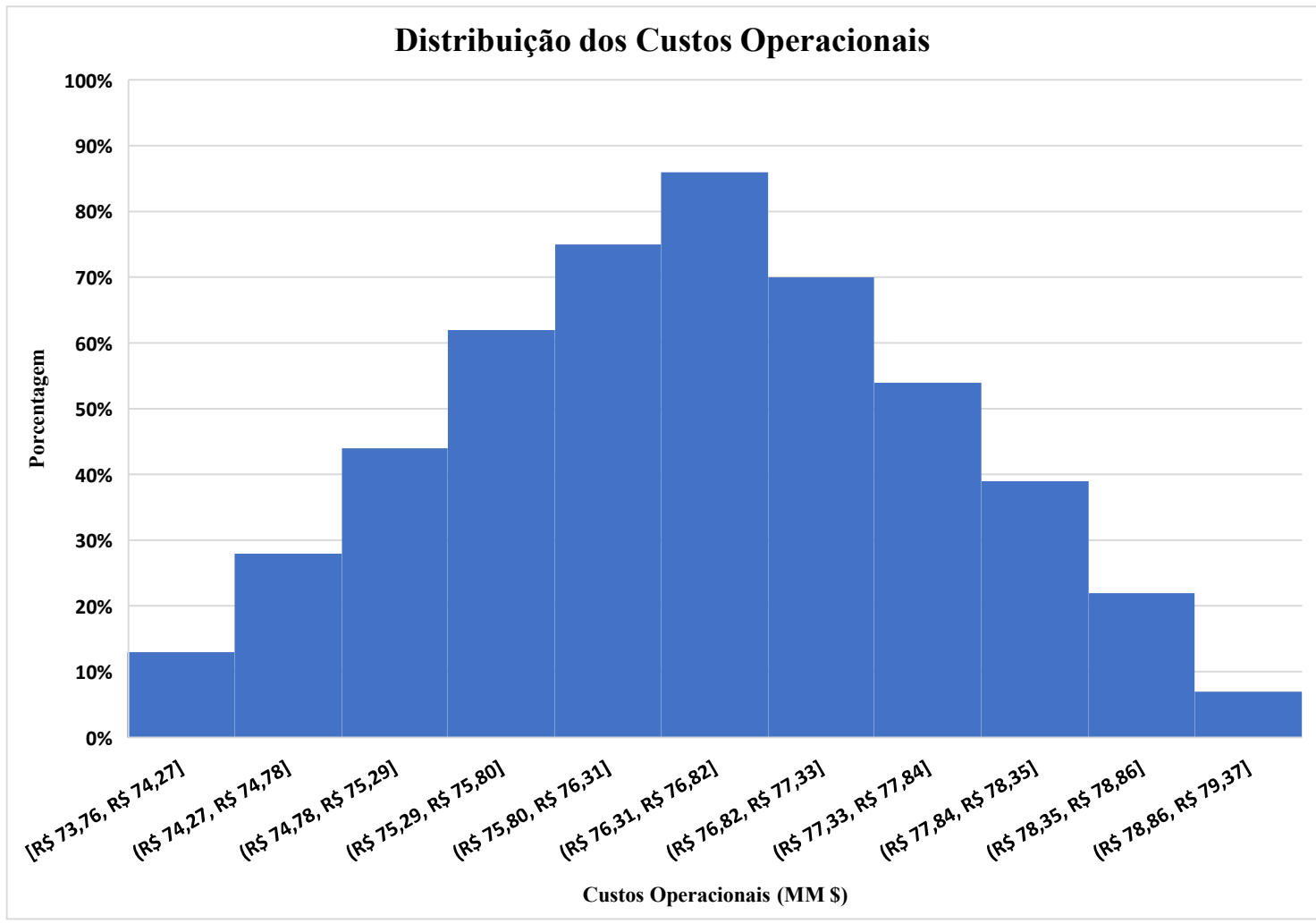
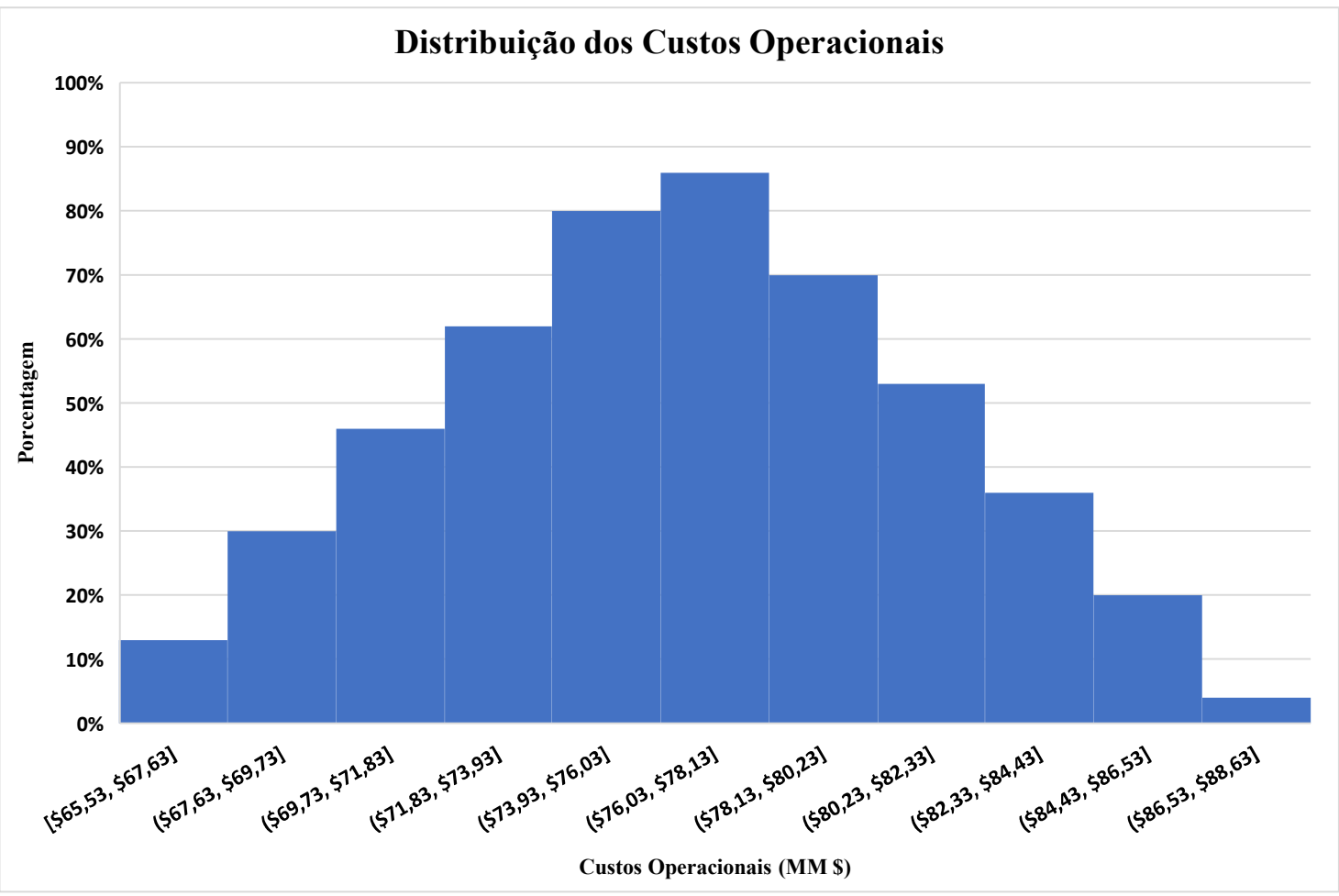


Figura 12: Distribuição de probabilidade para os Custos Operacionais referente a variação na Na capacidade de produção



### Cenário 5 – Custos Operacionais

Figura 13: Distribuição de probabilidade para os Custos Operacionais referente a variação do custo de Furfural

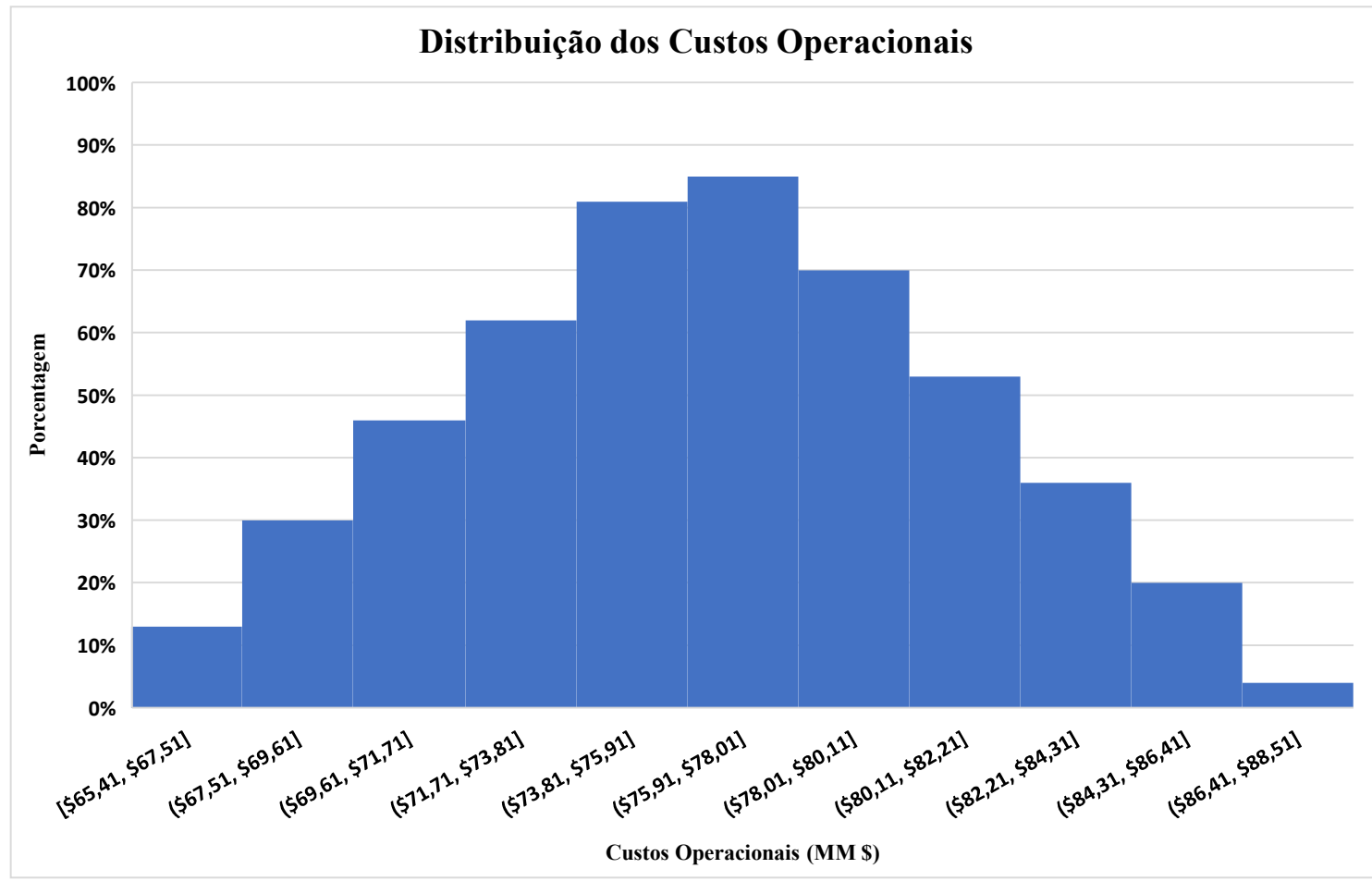


Figura 14: Distribuição de probabilidade para os Custos Operacionais referente a variação  
Do custo da Acetona

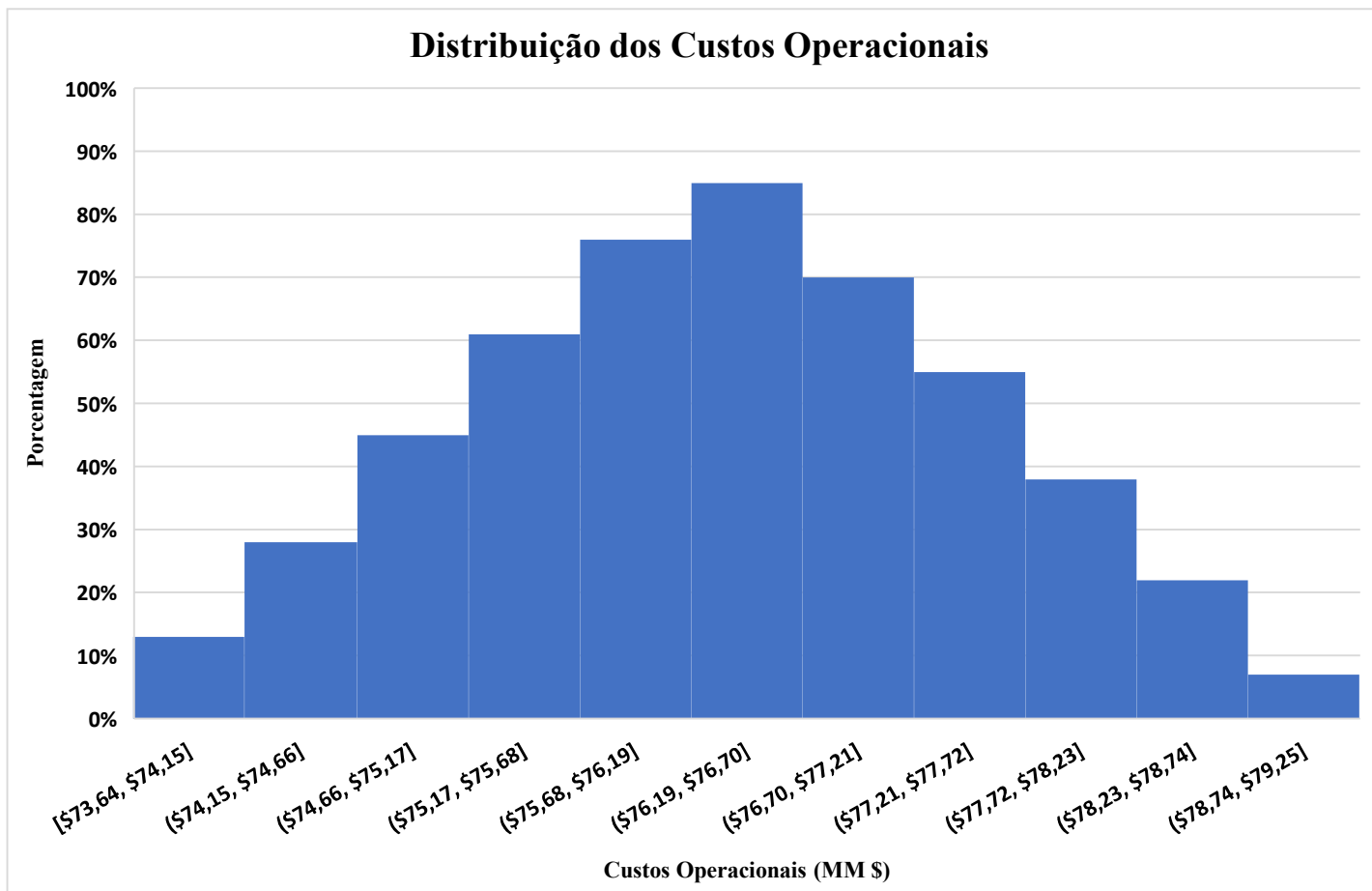
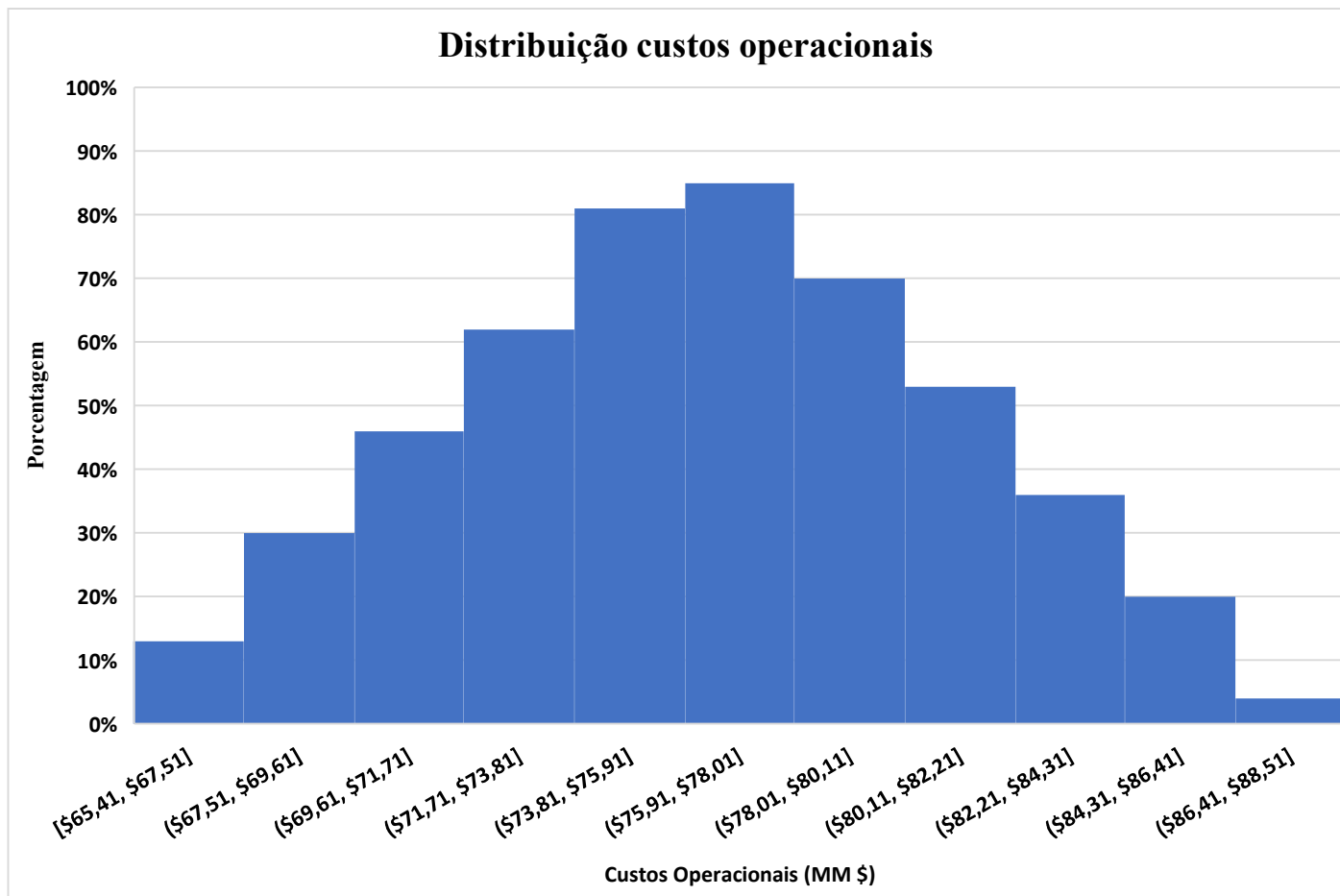


Figura 15: Distribuição de probabilidade para os Custos Operacionais referente a variação  
Na capacidade de produção



### Cenário 6 – Custos Operacionais

Figura 16: Distribuição de probabilidade para os Custos Operacionais referente a variação  
Do custo de Furfural

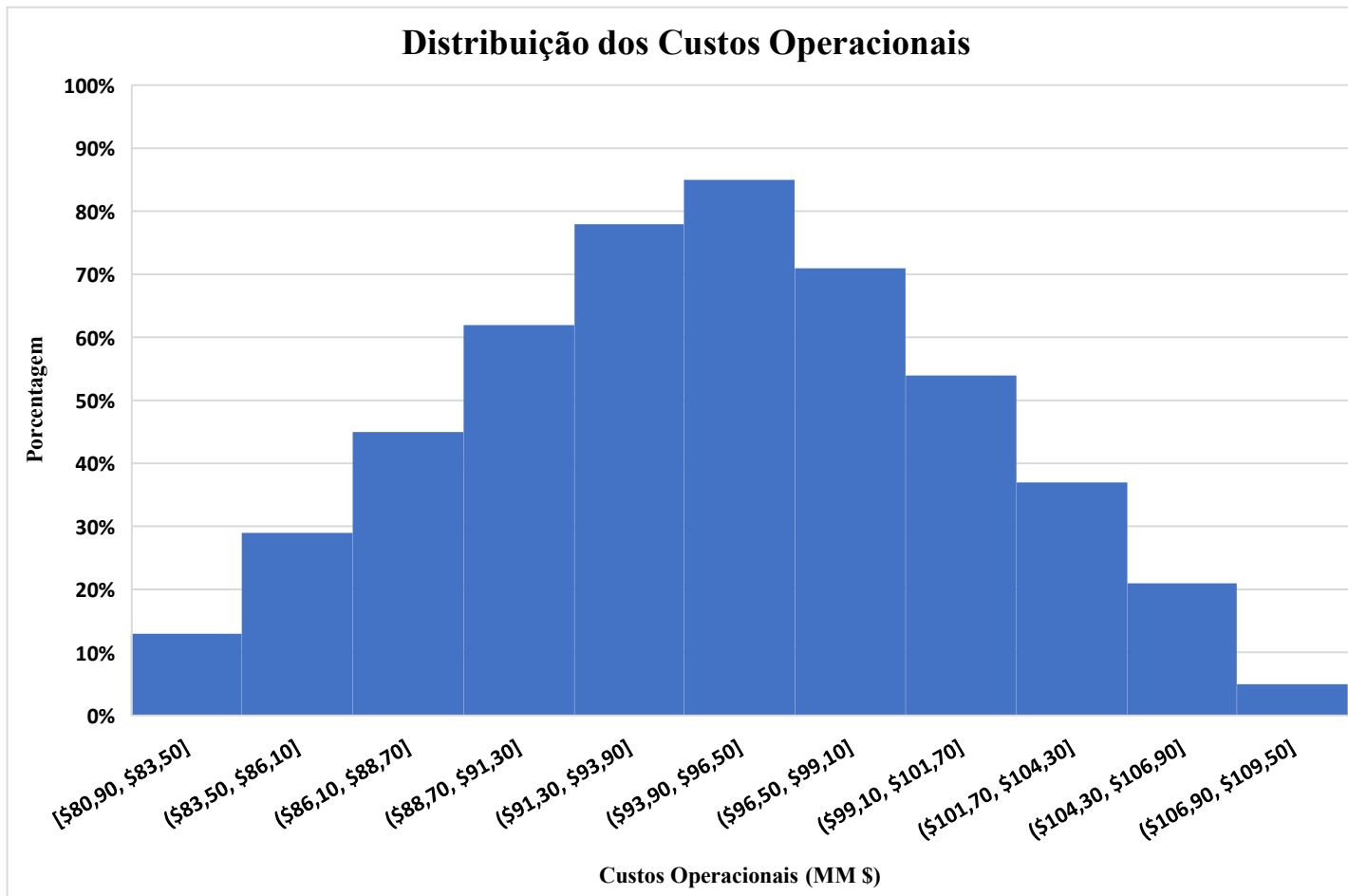


Figura 17: Distribuição de probabilidade para os Custos Operacionais referente a variação  
Do custo da Acetona

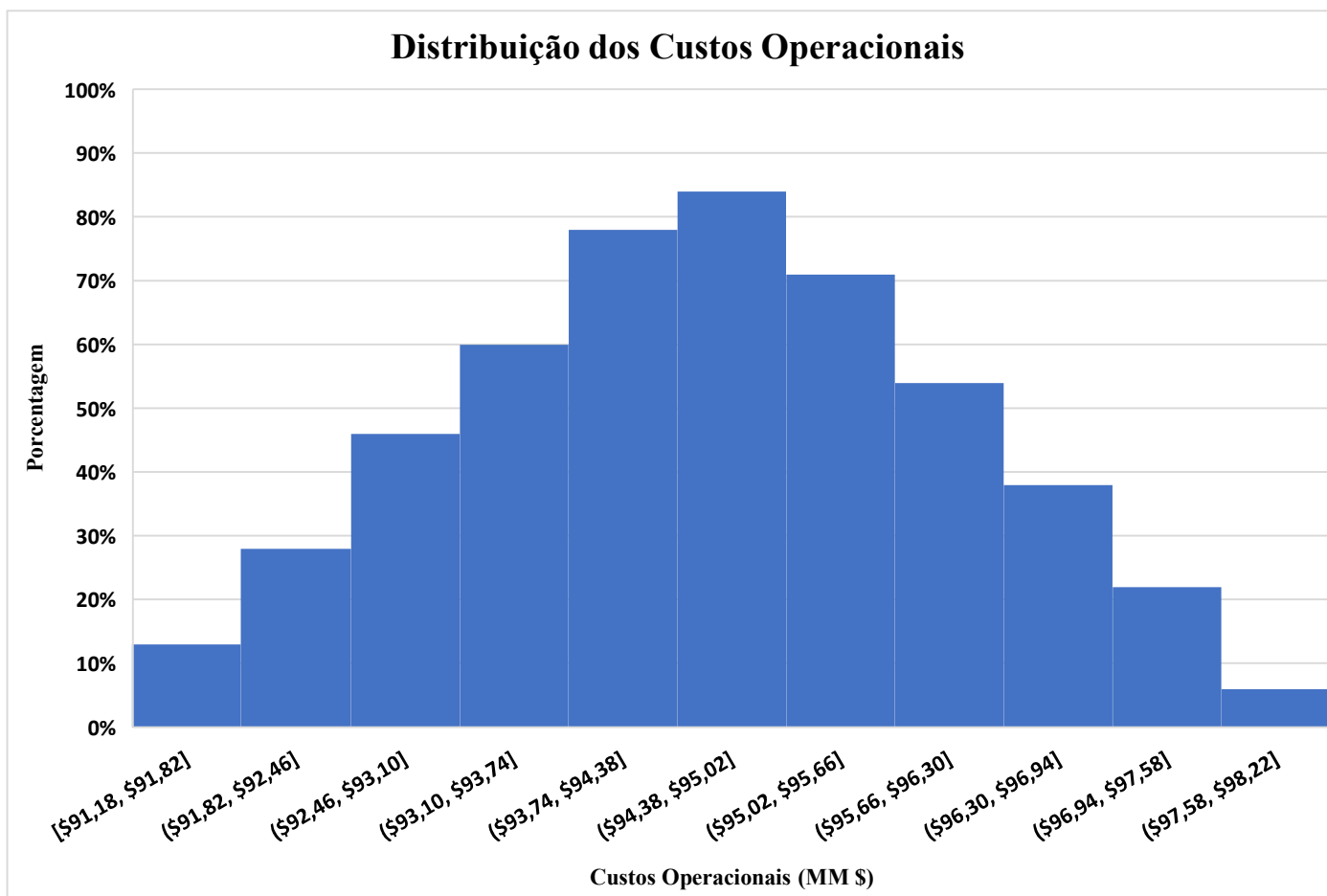
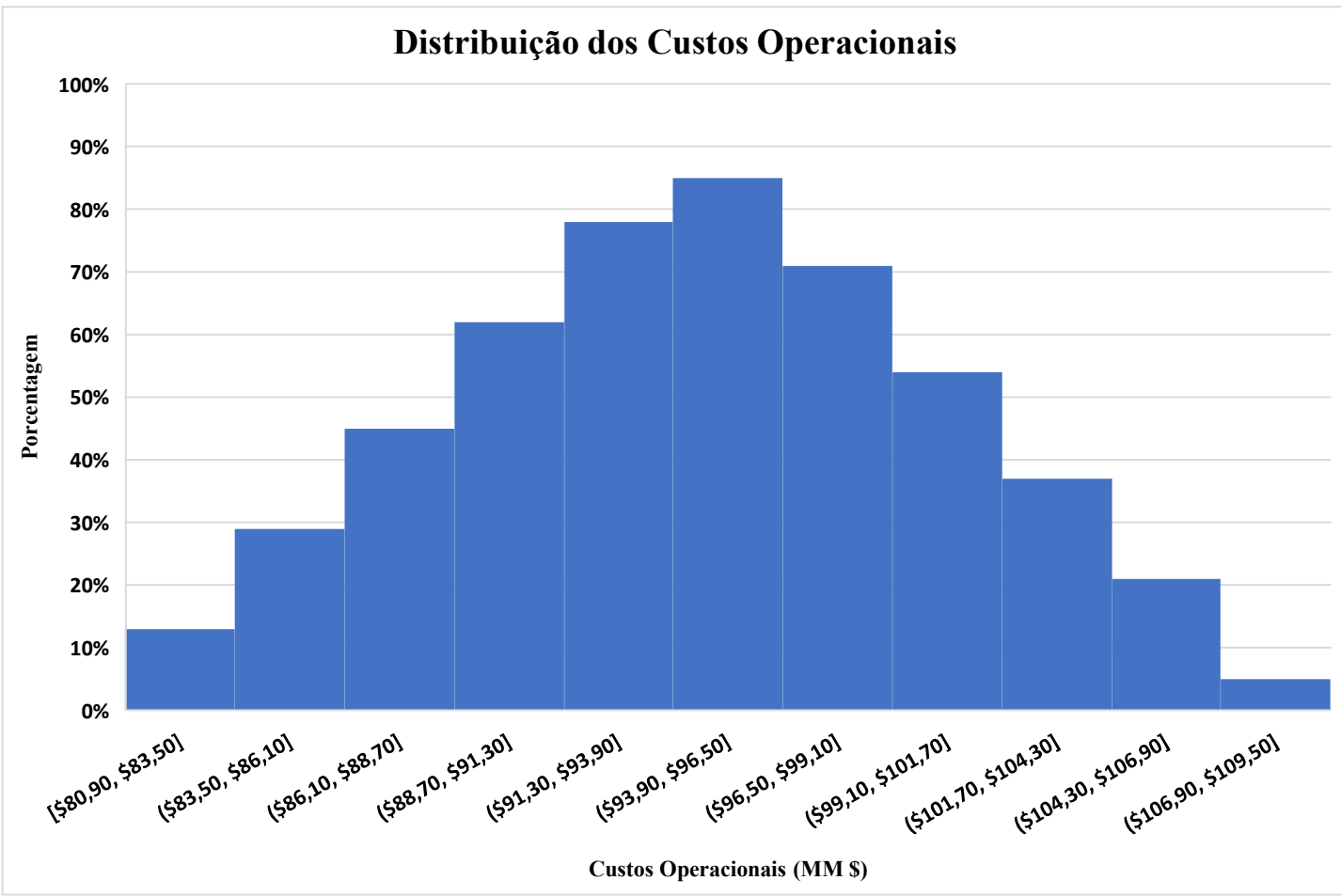


Figura 18: Distribuição de probabilidade para os Custos Operacionais referente a variação Na capacidade de produção



### Cenário 7 – Custos Operacionais

Figura 19: Distribuição de probabilidade para os Custos Operacionais referente a variação  
Do custo de Furfural

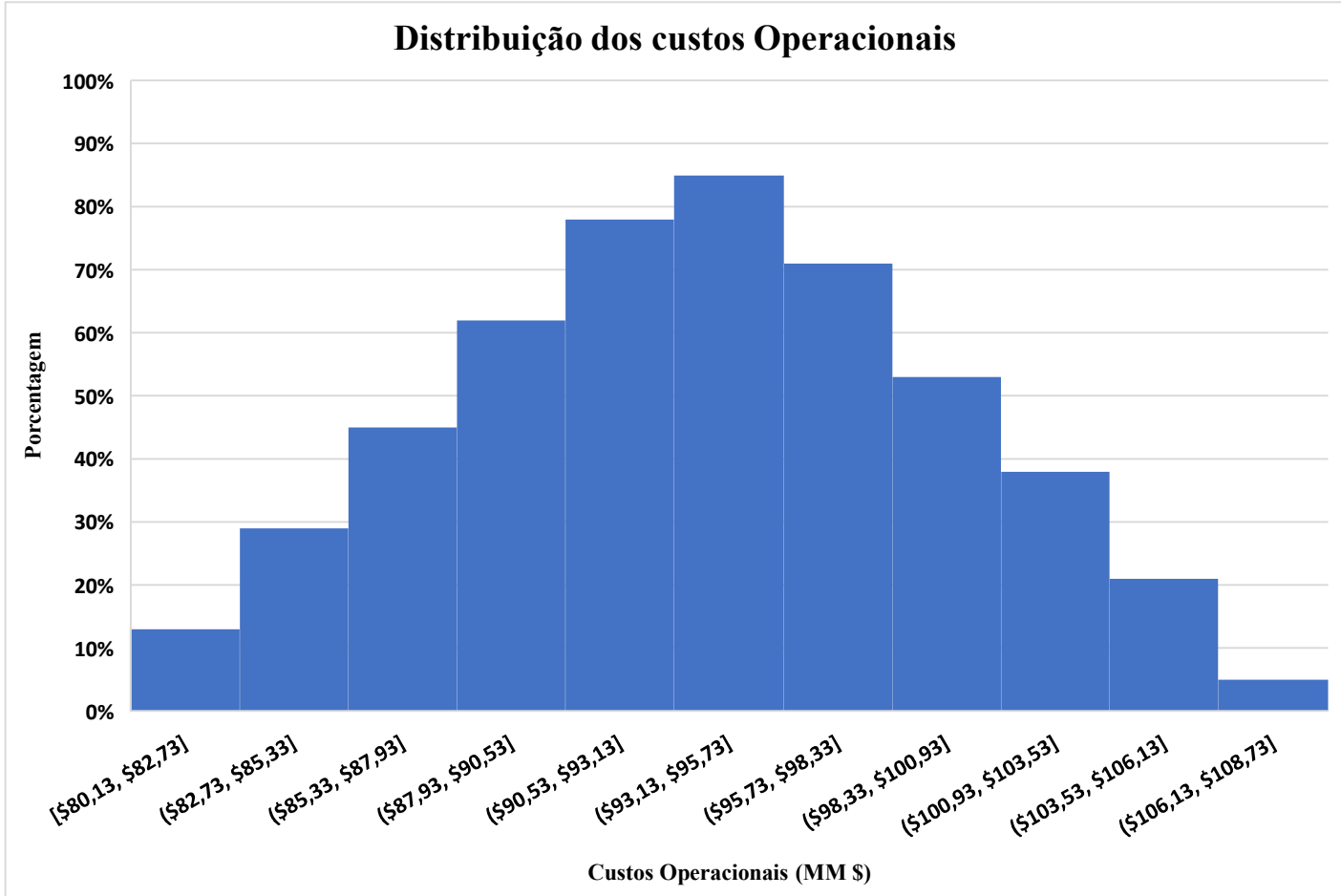


Figura 20: Distribuição de probabilidade para os Custos Operacionais referente a variação  
Do custo da Acetona

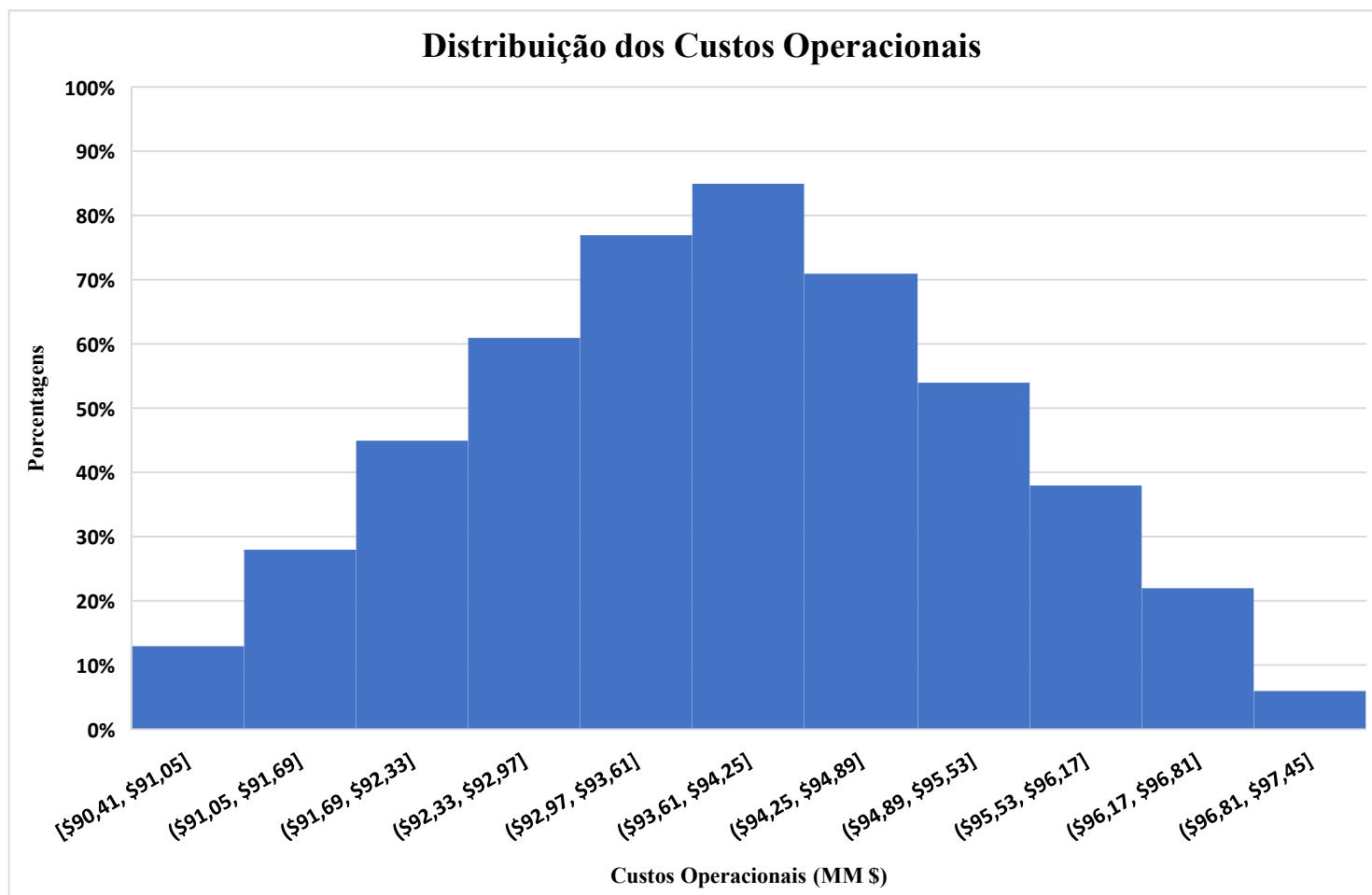
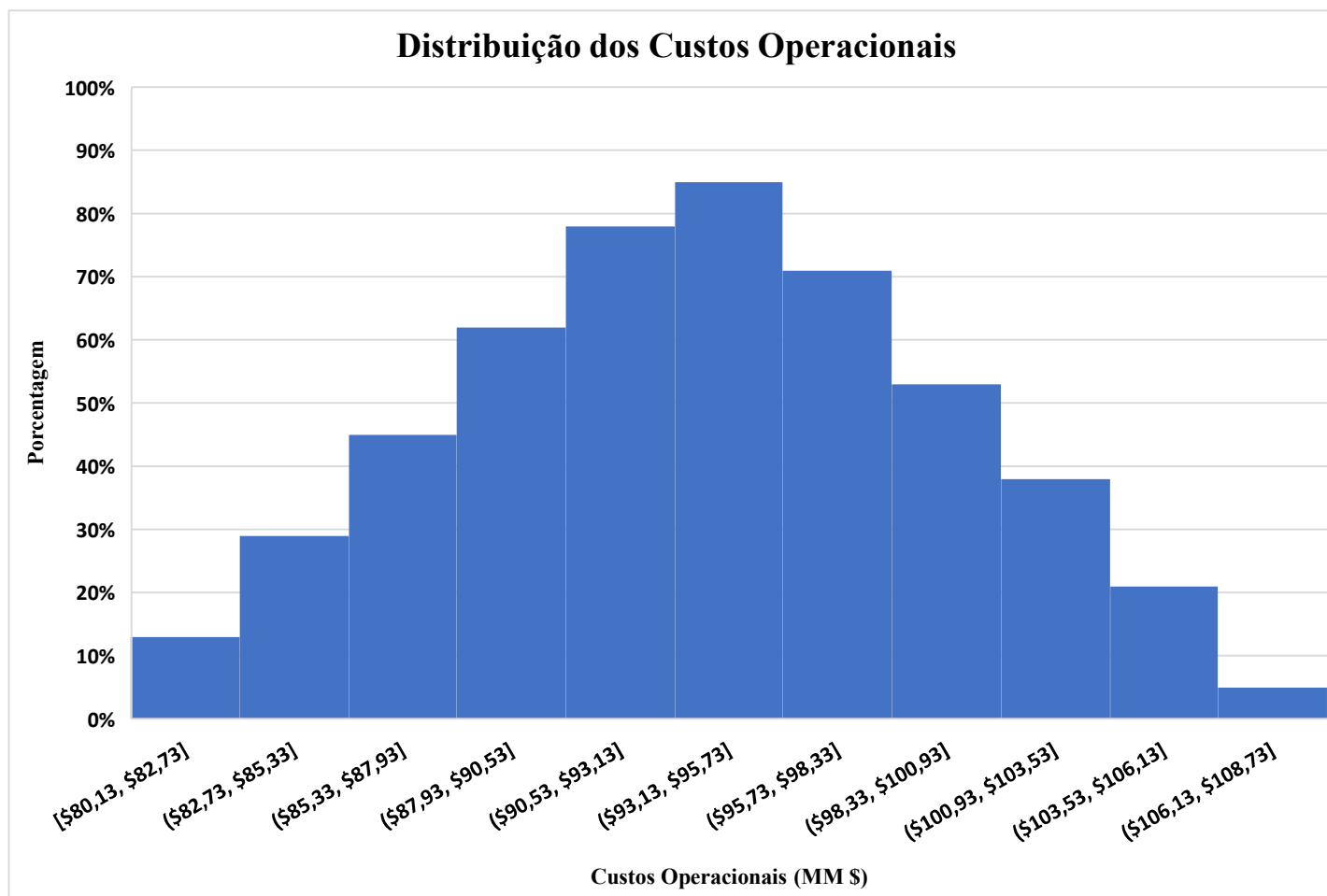


Figura 21: Distribuição de probabilidade para os Custos Operacionais referente a variação  
Na capacidade de produção



### Cenário 8 – Custos Operacionais

Figura 22: Distribuição de probabilidade para os Custos Operacionais referente a variação Do custo de Furfural

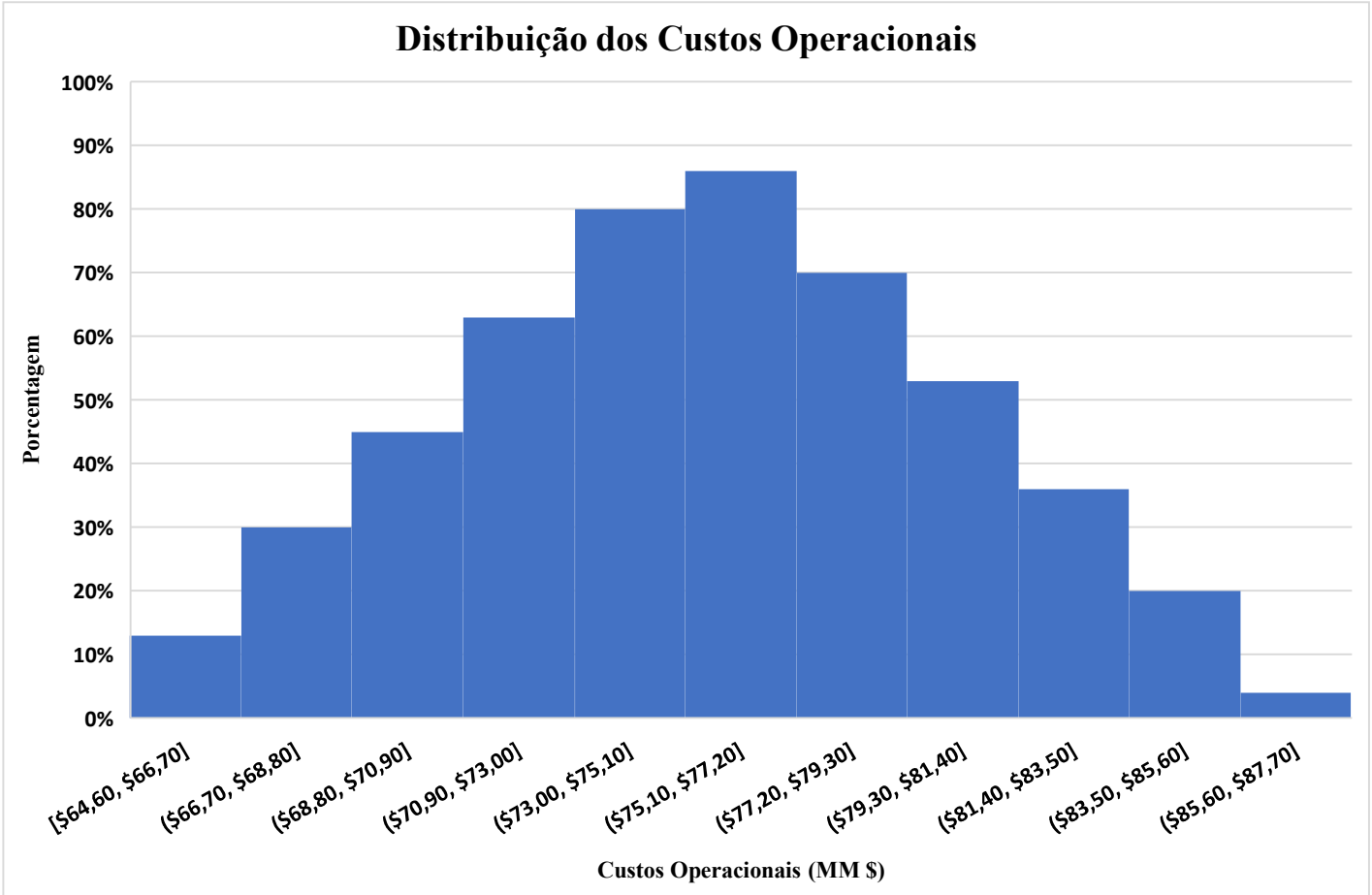


Figura 23: Distribuição de probabilidade para os Custos Operacionais referente a variação  
Do custo da Acetona

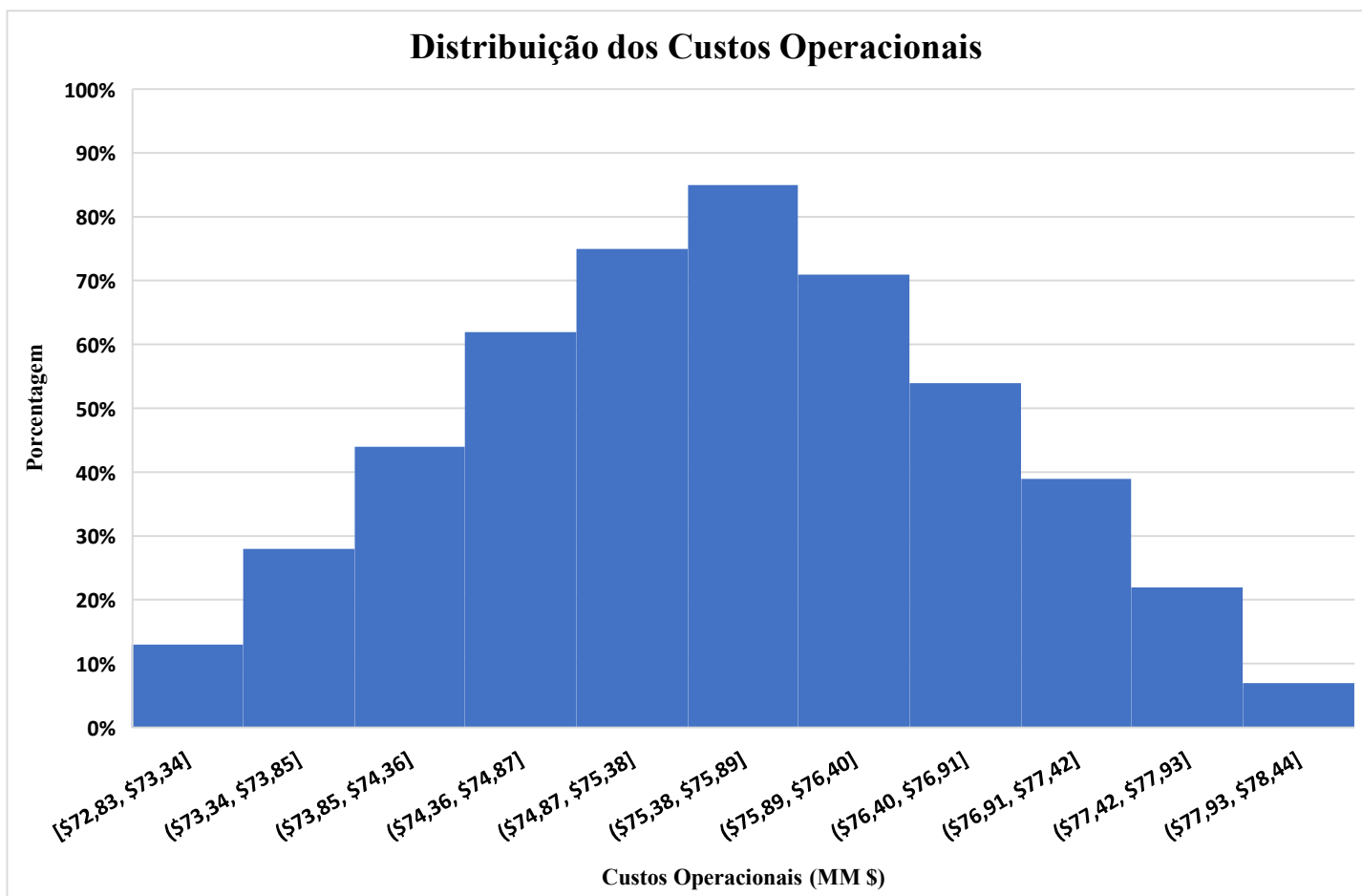


Figura 24: Distribuição de probabilidade para os Custos Operacionais referente a variação Na capacidade de produção

