

# MODELAGEM, SIMULAÇÃO E OTIMIZAÇÃO DO PROCESSO DE DESTILAÇÃO DO ETANOL DE SEGUNDA GERAÇÃO

M. E. L. SILVA<sup>1</sup>, R. J. ALBINO<sup>1</sup>, E. B. L. FREITAS<sup>1</sup>, S. F. VASCONCELOS<sup>1</sup> e K. D. BRITO<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidade Federal de Campina Grande, Departamento de Engenharia Química.  
E-mail para contato: eduarda.lira@eq.ufcg.edu.br

**RESUMO** – O presente trabalho tem por objetivo modelar, simular e otimizar o processo de destilação do etanol oriundo do bagaço da cana-de-açúcar, sendo este denominado etanol de segunda geração (E2G). Os resultados obtidos permitiram detectar a formação do ponto azeotrópico, e diante disto, realizou-se um estudo para aumentar a produção de etanol empregando ao processo as peneiras moleculares que viabilizam a separação dos componentes da mistura binária etanol/água. Além disso, realizou-se a otimização do processo com a integração térmica para possibilitar a redução do consumo energético.

## 1. INTRODUÇÃO

O etanol de segunda geração (E2G), também chamado de etanol lignocelulósicos é produzido em cinco fases principais: pré-tratamento da biomassa, hidrólise da celulose, fermentação, destilação do etanol e tratamento de efluentes (CARDONA; SÁNCHEZ, 2007). A destilação trata-se de uma operação unitária peculiar à engenharia química e sua fundamentação teórica é embasada em princípios termodinâmicos de equilíbrio líquido – vapor (ELV). Em caso de formação do ponto azeotrópico, onde as composições das fases líquidas e vapor se igualam comportando-se como substância pura, a destilação simples impossibilita a separação da mistura binária, nesse sentido a destilação extrativa ou o uso de peneiras moleculares são técnicas aplicadas para contornar o problema.

As peneiras moleculares são um método alternativo de separação utilizados para produzir etanol anidro usualmente empregado nas indústrias. O processo é realizado através de um leito de zeólitas, que possui uma estrutura tridimensional de alumínio e silício capazes de aprisionar as moléculas de água na malha. As especificações de temperatura e pressão caracterizam o sistema para adsorver apenas as moléculas citadas da mistura hidroalcoólica (HUANG, H. J. et al., 2008). Em termos físicos, os poros das zeólitas são pequenos diante das moléculas de etanol, todavia são grandes para as moléculas de água, sendo este um benefício para a utilização na separação dos componentes envolvidos. Perante este fenômeno, tem-se que este método de seleção por tamanho é similar ao das peneiras, por isso intitulou-se a técnica de peneira molecular. Este trabalho tem como objetivo analisar as condições adequadas para modelar, simular e otimizar o processo de destilação do etanol.

## 2. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

Por definição, sabe-se que uma coluna de destilação trata-se de um conjunto de unidades *flash* conectados. Dessa forma, os fenômenos que ocorrem em cada estágio da coluna são modelados a partir das equações *MESH* – balanços de massa (M), equações de equilíbrio líquido-vapor (E), somatório de frações molares igual a 1 (S) e balanços entálpicos (H). Segundo Henley e Seader (1968, p. 559), as variáveis envolvidas nas equações abaixo são dadas por: corrente de alimentação da coluna ( $F_j$ ), fluxo de saída lateral na fase líquida ( $U_j$ ) e vapor ( $W_j$ ). As correntes líquidas e vapor entrando ou saindo do estágio são representados pelas variáveis ( $L_j$ ,  $V_j$ ,  $L_{j-1}$  e  $V_{j+1}$ ) e a energia transferida para o prato ou a partir deles,  $-Q$  ou  $+Q$ , respectivamente.

A. Balanço de massa para cada componente  $i$  em cada estágio  $j$  (M):

$$M_{i,j} = L_{j-i}x_{i,j-1} + V_{j+1}y_{i,j+1} + F_jz_{i,j} - (L_j + U_j)x_{i,j} - (V_j + W_j)y_{i,j} = 0 \quad (1)$$

B. Relação de equilíbrio para cada componente  $i$  em cada estágio  $j$  (E):

$$E_{i,j} = y_{i,j} - K_{i,j}x_{i,j} = 0 \quad (2)$$

C. Somatório das frações molares em cada estágio  $j$  (S):

$$(S_x)_j = \sum_{i=1}^c x_{i,j} - 1 = 0 \quad (3)$$

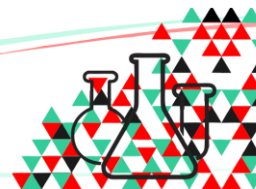
$$(S_y)_j = \sum_{i=1}^c y_{i,j} - 1 = 0 \quad (4)$$

D. Balanço de energia em cada estágio  $j$  (H):

$$H_{i,j} = L_{j-i}h_{L,j-1} + V_{j+1}h_{v,j+1} + F_jh_{F,j} - (L_j + U_j)h_{L,j} - (V_j + W_j)h_{v,j} - /+ Q_j = 0 \quad (5)$$

## 3. METODOLOGIA

Os fluxogramas das Figuras 1 e 2 apresentam os processos construídos na plataforma *Aspen Plus*<sup>®</sup>. O modelo termodinâmico empregado na simulação foi o NRTL (*Non-random two-liquid*) para representar o sistema em estudo. Para as colunas de destilação D501 e D502 utilizou-se o módulo *RadFrac*<sup>®</sup>, sendo este um modelo rigoroso que soluciona as equações *MESH*. As respectivas colunas são compostas por 16 e 36 estágios teóricos e enumerados em ordem crescente de cima para baixo. Como citado, em relação às etapas da produção do etanol, o licor que provém da etapa da fermentação alimenta a coluna D501 no segundo estágio e a corrente lateral segue a jusante para a coluna D502, na qual é alimentada no 26º estágio. A segunda alimentação da D502 é realizada no 12º estágio e trata-se de uma corrente de reciclo, proveniente das peneiras moleculares. O conjunto de trocadores de calor e o bloco T507-8 (separador) deram sequência a representação para o estudo de caso. A corrente de alimentação 501 conforme figura 1, possui vazão de 425969 kg/hr, com temperatura de 95°C e pressão de 4 atm. Esta é composta, em termos de composição, por: GLUCOSE (0,0192%), XYLOSE



(0,21%), SOLSLDS (0,283%), LGNSOL (0,227%), HMF (0,0343%), ARABINOSE (0,05%), GALACTOSE (0,033%), MANOSE (0,027%), GLUCOLIG (0,412%), CELLOB (0,084%), XYLOLIG (0,133%), MANOLIG (0,0098%), GALAOLIG (0,012%), ARABOLIG (0,02%), XYLITOL (0,25%), EXTRACT (1,18%), PROTEIN (0,78%), ETHANOL (5,845%), H<sub>2</sub>O (87,82%), FURFURAL (0,15%), H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> (0,036%), CO<sub>2</sub> (0,1%), O<sub>2</sub> (0,000042%), LACID (0,49%), AACID (1,24%), GLYCEROL (0,059%), SUCCACID (0,17%), DAP (0,035%) e CSL (0,3%). Tais especificações das composições, assim como os dados apresentados nas tabelas 1 e 2, estão de acordo com dados da *National Renewable Energy Laboratory* e o banco de dados do próprio simulador utilizado (ROBERT, J. W.; PUTSCHE, V., 1996).

Tabela 1 – Dados de entrada para as colunas de destilação.

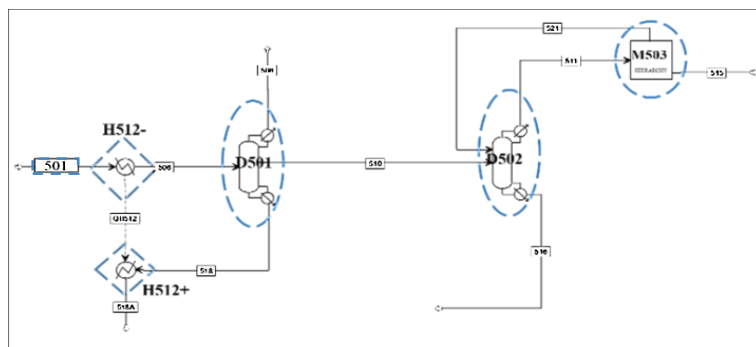
Variáveis	Especificação - D501	Especificação - D502
Razão de refluxo	3	3,2
Pressão no Topo (atm)	1,86446	1,7
Queda de Pressão (atm)	0,204138	0,3

Tabela 2 – Dados de entrada para os trocadores de calor.

Variáveis	H512-	H506-	H503	H507-	H507+	H509
Temperatura (°C)	100	116	35	69	91	38

Para fins de organização utilizou-se a hierarquia denominada M503, conforme pode ser visto na Figura 1.

Figura 1 - Fluxograma de processo utilizado na simulação da produção do Etanol Hidratado.

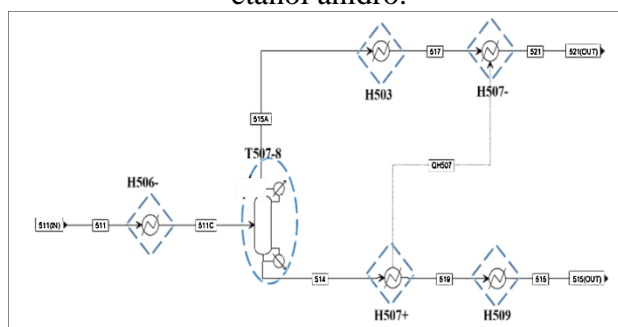


O processo desenvolvido tem o objetivo de obter um destilado com maior pureza em massa de etanol no valor de 0,05% e operar na temperatura de 60 °C no primeiro estágio da coluna D501. Em relação às especificações, o separador T507-8 tem por finalidade retirar a impureza de 0,5% de água na corrente de etanol e obter uma pureza de 70% de etanol, sendo posteriormente reciclada no equipamento D502. Para atingir essas particularidades foi utilizada a ferramenta *Design Specification* do Aspen Plus® e realizou a manipulação da temperatura e da composição do destilado. Além disso, ainda empregando o simulador citado, sucedeu-se o cálculo da altura e diâmetro de ambas as colunas, D501 e D502.

A Figura 2 apresenta as unidades que simulam as peneiras moleculares, tratando-se de um sistema de colunas empacotadas com leitos de adsorvente que requerem vapor superaquecido. A corrente de etanol misturado com água é vaporizada e seletivamente

adsorvida nos leitos. O vapor de etanol puro é resfriado pelo condensador de regeneração, que proporciona trocar calor com a corrente do processo sendo finalmente condensado.

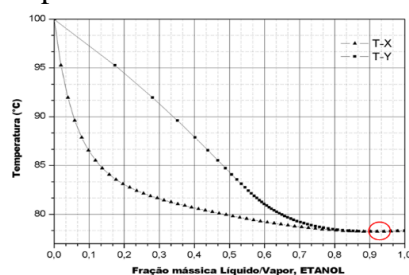
Figura 2 – Fluxograma de processo de adsorção em peneiras moleculares para produção de etanol anidro.



### 3.RESULTADOS E DISCUSSÃO

A figura 3 apresenta o diagrama ELV para a mistura etanol/água, que está de acordo com o ponto azeotrópico (composição mássica de 92,4%) atingido por Mcaloon *et al.* (2000) e Phillips *et al.* (2007). Este gráfico mostra que o modelo termodinâmico consegue prever a formação do azeótropo, como esperado. Para isso, as condições operacionais foram corretamente estabelecidas à coluna D502 e esse resultado é oportuno para a produção do etanol hidratado, representando um processo convencional de destilação do etanol.

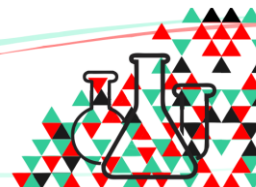
Figura 3 – Comportamento da mistura etanol/água.



Através da tabela 3 é possível constatar a quantidade de energia térmica que está sendo retirada pelo condensador e a quantidade de calor que está sendo fornecida pelo *reboiler* de ambas as colunas (D501 e D502) presentes no fluxograma da Figura 1, assim como a altura e diâmetro das colunas de destilação que foram obtidos, sendo esses valores cruciais para futuras análises de custos capitais.

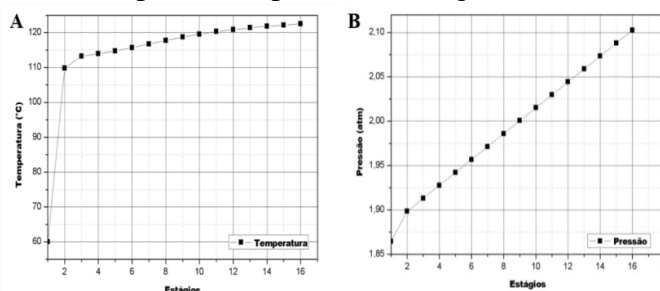
Tabela 3 – Resultados alcançados para as colunas D501 e D502.

Variáveis	D501	D502
Carga térmica do <i>reboiler</i> (MW)	39,18914	7,70328
Carga térmica do condensador (MW)	-0,44228	-27,4892
Diâmetro (m)	3,5282	3,9298
Altura (m)	8,5344	20,7264



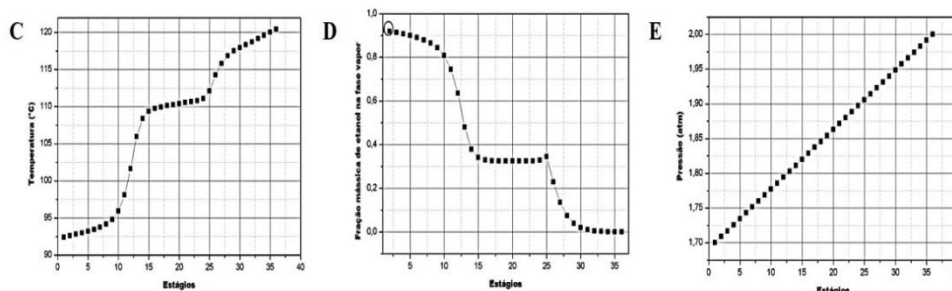
Na Figura 4 observam-se os perfis de temperatura e pressão ao longo dos estágios, conforme o gráfico (A) a temperatura mais elevada é verificada na base da coluna, em que os componentes menos voláteis são significativos. Em relação à pressão, nota-se um aumento gradativo ao longo dos estágios, esse comportamento é constatado no gráfico (B) pela ocorrência da variação suave do ELV entre os pratos. Também, constatou-se uma pequena perda de etanol de 0,7%, pela base e 0,2%, pelo topo em fração mássica por meio da Coluna D501.

Figura 4 – Perfis de temperatura e pressão ao longo da coluna D501.



Os resultados do equipamento D502 estão expressos em forma de gráfico conforme Figura 5. Pode-se analisar um comportamento não linear nos perfis de temperatura e composição de etanol ilustrados nos gráficos (C) e (D), esta não linearidade é consequência das duas alimentações que foram introduzidas na coluna D502. Em relação ao perfil de pressão (gráfico E), verifica-se um desempenho equivalente ao gráfico (B) da Figura 4. Em termos físicos, pode-se explicar que a queda de pressão por dois motivos: a queda de pressão no prato seco devido ao atrito existente na passagem do vapor pelos orifícios e a queda de pressão relacionada à altura de líquido que o vapor atravessa.

Figura 5 – Perfil de temperatura, composição de etanol e pressão ao longo da coluna D502.



Devido às restrições da separação física que envolvem os componentes em estudo, a peneira molecular (Figura 2) possibilitou a fisissorção da água na mistura binária, obtendo-se uma fração mássica de etanol desidratado de 99,4% pela base do separador e 72,3% pelo topo do mesmo, que retorna como reciclo para o equipamento D502.

A tabela 4 apresenta os resultados de carga térmica dos trocadores. Analisa-se que os equipamentos H512+, H503, H507+ e H509 são responsáveis pela retirada do calor no processo, enquanto os demais trocadores empregaram-se em fornecer energia térmica de acordo com as especificações preestabelecidas. Otimizou-se o processo realizando uma integração térmica entre equipamentos. A energia que anteriormente seria descartada pela base da coluna



D501, com temperatura de 122,5°C, foi utilizado para fornecer calor ao trocador H512+, tendo este a temperatura de 117°C na saída, fornecendo energia para o trocador H512-, que tem por objetivo aquecer o licor. Dessa forma, verifica-se que tal modificação viabilizou a redução de consumo energético em 0,01663 MW. Tendo vista que, a carga térmica do H512- é de 2,5392 MW sem integração térmica.

Tabela 4 – Resultados da carga térmica nos trocadores de calor.

Variável	H512-	H512+	H506-	H503	H507-	H507+	H509
Carga térmica (MW)	2,52257	-2,52257	0,372153	-3,42514	0,282584	-0,282584	-6,82436

## 4.CONCLUSÃO

Os resultados obtidos pela destilação convencional mantiveram-se em concordância com a referência utilizada como base. A partir do ponto azeótropo a peneira molecular foi empregada, dando sequência ao estudo de caso que por sua vez possibilitou atingir as expectativas no processo de desidratação da mistura binária (etanol e água). A inclusão de uma integração térmica entre as correntes de processo resultou na otimização do seguimento simulado, efetivando o aquecimento do licor que foi introduzido na coluna D501. Contudo, uma posterior avaliação econômica poderá ser realizada para garantir que a otimização proposta na integração térmica torne a planta economicamente viável.

## 5.REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- CARDONA, C.A.; SÁNCHEZ, O.J. *Fuel ethanol production: Process design trends and integration opportunities*. *Bioresource Technology*, v. 98, n. 12, p. 2415-2457, September 2007.
- HENLEY, Ernest J. e Seader J. D. *Equilibrium-Stage Separation Operations in Chemical Engineering*. , John Wiley & Sons, New York, 1981.
- HUANG, H. J. et al. *A review of separation technologies in current and future biorefineries*. *Separation and Purification Technology*, v. 62, n. 1, p. 1-21, 2008.
- MCALOON, A. et al. *Determining the Cost of Producing Ethanol from Corn Starch and Lignocellulosic Feedstocks*. National Renewable Energy Laboratory. Technical Report NREL/TP-580-28893. U.S. Outubro 2000.
- PHILLIPS, S. et al. *Thermochemical Ethanol via Indirect Gasification and Mixed Alcohol Synthesis of Lignocellulosic Biomass*. National Renewable Energy Laboratory. U.S. Technical Report NREL/TP-510-41168. Abril 2007.
- ROBERT, J. W.; PUTSCHE, V. *Development of an ASPEN PLUS Physical Property Database for Biofuels Components*. National Renewable Energy Laboratory. Department of Commerce 5285 Port Royal Road Springfield. U.S. Abril 1996.