

# Simulação e análise de um sistema industrial de colunas de destilação de etanol

Maria Fatima Marquini<sup>1\*</sup>, Douglas Castilho Mariani<sup>1</sup>, Antonio José de Almeida Meirelles<sup>2</sup>, Onélia Aparecida Andreo dos Santos<sup>1</sup> e Luiz Mario de Matos Jorge<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Programa de Pós-graduação em Engenharia Química, Universidade Estadual de Maringá, Av. Colombo, 5790, 87020-900, Maringá, Brasil. <sup>2</sup>Departamento de Engenharia de Alimentos, Faculdade de Engenharia de Alimentos, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, São Paulo, Brasil. \*Autor para correspondência. E-mail: fatima.uem@terra.com.br

**RESUMO.** Um sistema industrial de colunas de destilação típico é composto por três colunas distintas e voltado à produção de álcool etílico hidratado. Com o intuito de alcançar uma melhor compreensão sobre o comportamento desse sistema, foram instalados diversos pontos de amostragem de temperatura, concentração alcoólica, pressão e vazão ao longo da instalação. Essas medidas viabilizaram a avaliação da qualidade das previsões de um simulador de processos usual. A partir das simulações foi possível constatar que, dentre as equações disponíveis no simulador para estimar os coeficientes de atividade, a equação NRTL foi a que conduziu aos melhores resultados com os dados experimentais, com desvios em torno de 2 e 2,5% em relação às temperaturas e concentrações alcoólicas, respectivamente, as quais foram medidas em várias bandejas das colunas de destilação que compõe o sistema.

**Palavras-chave:** destilação, álcool etílico hidratado, simulador de processos.

**ABSTRACT. Simulation and analysis of an industrial system of columns for ethanol distillation.** A typical industrial system of distillation columns involves three columns for hydrated ethyl alcohol production. In order to obtain a better understanding of the behavior of this system, several sample points were installed along the distillation unit for measuring temperature, pressure and flow values, and also for collecting liquid phase samples in order to determine the corresponding alcoholic concentrations. The distillation unit involves three rectification and stripping columns. The experimental measurements made possible the evaluation of the quality of the process simulation results. The simulation results indicate that, among the equations available in process simulation for calculating the activity coefficients, the NRTL model was the one that leads to the best agreement with the experimental data, with deviations around 2 and 2.5% in relation to temperatures and alcohol concentrations respectively, whose values were measured in several trays of the distillation unit.

**Key words:** distillation, hydrated ethylic alcohol, process simulation.

## Introdução

Devido à necessidade crescente de otimizar as condições operacionais e os equipamentos de plantas químicas visando à redução dos custos tanto da energia necessária para o funcionamento, quanto do custo de capital de implantação, a simulação de processos tornou-se uma ferramenta de fundamental importância na atualidade.

No caso do desenvolvimento de novos processos, a análise de uma planta via simulação pode muitas vezes indicar de antemão se a mesma é ou não técnica e economicamente viável. No caso de plantas já em operação, a simulação do processo pode auxiliar na otimização das condições

operacionais com vistas à obtenção de produtos de melhor qualidade e à redução do consumo de energia e de outras perdas de processo.

Em particular no caso dos processos de destilação, em função de sua grande importância industrial e de colocar em contato fases líquida e vapor, o consumo de energia é um aspecto de muita relevância (Camargo, 1990). A simulação de processos pode nesse caso ser uma poderosa ferramenta de otimização.

A velocidade com que uma espécie química é transferida de uma fase para outra depende do grau de afastamento do sistema em relação ao equilíbrio. Por isto, o tratamento quantitativo desses processos de transferência exige o conhecimento dos estados

de equilíbrio do sistema. As condições termodinâmicas de equilíbrio líquido-vapor podem ser representadas por uma abordagem tipo  $\gamma$ - $\phi$ , empregando o coeficiente de fugacidade  $\phi_i$  no caso da fase vapor e o coeficiente de atividade  $\gamma_i$  para a fase líquida, ou então com uma abordagem tipo  $\phi$ - $\phi$ , na qual se emprega equações de estado para ambas as fases. A termodinâmica do equilíbrio de fases fornece equações que relacionam aquelas propriedades físico-químicas às composições das fases, à temperatura e à pressão, como os modelos NRTL, UNIQUAC e VAN LAAR para o cálculo de coeficientes de atividade Reid *et al.* (1987).

Simuladores comerciais dispõem de extenso banco de dados contendo uma variedade de métodos para estimar as diversas propriedades das misturas e de ferramentas capazes de propiciar uma análise mais aprofundada do comportamento do processo devido a mudanças pontuais de projeto ou a ampliação de escala.

Alguns pesquisadores têm empregado os simuladores comerciais na otimização de processos de destilação. Lek *et al.* (2004) investigaram, a validade da taxa de refluxo ótimo, considerando dados de custo. Também concluíram que o custo do projeto da coluna pode ser reduzido substancialmente pela otimização da localização do estágio de alimentação. Melo *et al.* (2000) simularam e otimizaram energeticamente o processo de destilação extrativa para produção de etanol anidro, testando possibilidades de integração térmica.

Embora em termos dos objetivos finais de otimização do processo a linha de investigação empregada neste trabalho seja similar aos trabalhos descritos anteriormente, a estratégia utilizada foi diferente. Em uma primeira parte desta investigação, apresentada neste trabalho, checkou-se em que condições o simulador era capaz de representar adequadamente o processo de produção de álcool hidratado em escala industrial, para em trabalhos futuros realizar a otimização do processo com maior confiabilidade.

Desta forma, simulou-se o processo industrial de destilação para a produção de álcool etílico hidratado combustível (AEHC) especificando os dados termodinâmicos no simulador de processos e fornecendo as condições de operação.

## Material e métodos

Foram utilizadas três equações, diferentes para o cálculo dos coeficientes de atividades da mistura binária não ideal álcool-água, chegando-se à conclusão que a equação NRTL é a que conduz a resultados de simulação mais representativa da operação industrial. Os resultados obtidos demonstram um erro global de 2% em relação à temperatura e 2,5% em relação à

concentração alcoólica, as quais foram medidas em várias posições da coluna de destilação.

## Processo em estudo

O sistema industrial processa 200 ton por hora de cana de açúcar e produz 380 m<sup>3</sup> dia<sup>-1</sup> de álcool etílico hidratado combustível, cujo esquema simplificado do processo de destilação encontra-se detalhado na Figura 1.

A Tabela 1 indica os pontos nos quais os dados do processo foram coletados (vide Figura 1).

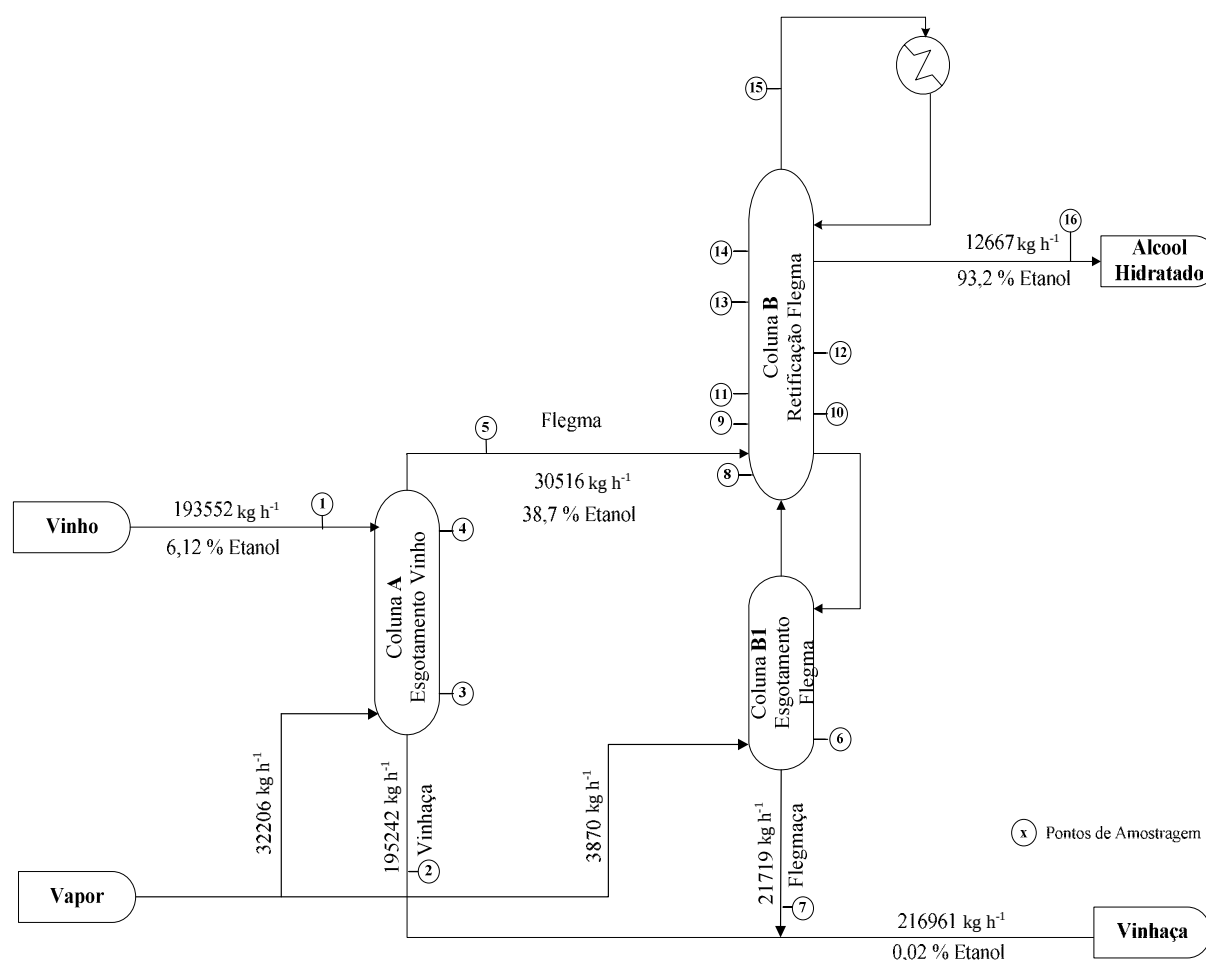
**Tabela 1.** Variáveis medidas no processo.

|                                  | Pontos Amostragens |   |   |   |   |    |    |    |    |  |  |  |  |  |  |  |
|----------------------------------|--------------------|---|---|---|---|----|----|----|----|--|--|--|--|--|--|--|
| Temperatura °C                   | 1                  | 3 | 4 | 6 | 9 | 10 | 11 |    |    |  |  |  |  |  |  |  |
| Pressão Pa                       |                    |   | 3 | 6 | 8 | 15 |    |    |    |  |  |  |  |  |  |  |
| Concentração de etanol (% massa) | 1                  | 2 | 5 | 7 | 9 | 12 | 13 | 14 | 16 |  |  |  |  |  |  |  |
| Vazão (kg h <sup>-1</sup> )      |                    |   |   |   | 1 | 16 |    |    |    |  |  |  |  |  |  |  |

O vinho resulta da fermentação do mosto açucarado e tem como principal componente o álcool etílico numa proporção de 4 a 8% em massa, de acordo com a natureza e a composição do caldo que lhe deu origem (Payne, 1976). A concentração alcoólica do vinho no processo em estudo é de 6% em massa, alimentado à coluna de esgotamento de vinho (coluna A) a 96°C.

A coluna de esgotamento de vinho é composta por 22 bandejas valvuladas e tem diâmetro interno de 2800 mm. O produto de fundo dessa coluna, denominado vinhaça, sai pela base contendo aproximadamente 0,02% em massa de etanol. O vinho é alimentado no topo da coluna A e na base desta coluna é alimentado o vapor saturado de 166713 Pa em pressão absoluta, de forma direta, mantendo pressão manométrica de 57369 Pa e temperatura em torno de 112°C e garantindo o adequado esgotamento da fase líquida, com transferência de praticamente todo o etanol para a fase vapor. A corrente de vapor, denominada flegma, consiste em uma mistura hidroalcoólica com concentração entre 35 e 45% em massa de etanol e tem sua extração realizada no topo da coluna A. Ela irá alimentar a coluna B, denominada coluna de retificação de flegma.

A coluna B é composta por 45 bandejas valvuladas e tem diâmetro interno de 3300 mm. A flegma é alimentada em fase vapor na base dessa coluna, com pressão manométrica de 38932 Pa a 91°C. Todo o vapor que sai no topo dessa coluna é condensado e retorna à coluna, sendo a extração do álcool hidratado efetuado na antepenúltima bandeja, bandeja B-43, com uma concentração próxima de 93% em massa de etanol e a seguir resfriado em um trocador de calor para posterior estocagem.



**Figura 1.** Fluxograma do processo de destilação em análise.

A corrente líquida que deixa a base da coluna B é conduzida à coluna de esgotamento de flegma, coluna B1, que possui 18 bandejas calotadas e tem a função de exaurir o álcool contido na flegma. O produto de topo dessa coluna retorna para a coluna B e o produto de fundo, denominado de flegmaça, contendo um teor alcoólico em torno de 0,02% em massa de etanol. O aquecimento desta coluna também é realizado na base por vapor saturado a 166713 Pa de pressão absoluta alimentado de forma direta, mantendo a pressão manométrica da base da coluna a 46974 Pa e a temperatura desta em torno de 109°C.

Os dados operacionais do processo foram obtidos através do sistema supervisor *on line* e de análises periódicas das amostras coletadas em pontos diversos, conforme indicado na Tabela 1.

As medidas de temperatura foram efetuadas na 1ª bandeja da coluna B1 e na 4ª, 6ª e 8ª bandeja da coluna B, respectivamente B-4, B-6 e B-8, e as medidas de concentração alcoólica foram tomadas na 4ª, 15ª, 28ª e 42ª bandeja da coluna B, ou seja, B-4, B-15, B-28 e B-43 respectivamente.

Ao todo, foram efetuados durante a safra 242 amostragens completas. Estes dados foram armazenados em um banco de dados e depois de analisados foram utilizados na simulação e obtidos os gráficos de temperatura e concentração alcoólica versus as posições das bandejas.

### Simulador de processos

Utilizou-se um simulador de processos usual para reproduzir o comportamento do sistema de destilação na produção do álcool hidratado, com as equações de equilíbrio de fases líquido-vapor obtidas diretamente a partir do banco de dados do simulador. Os coeficientes de atividade da fase líquida foram calculados pelas equações NRTL, UNIQUAC e VAN LAAR em simulações independentes. Os resultados das simulações foram comparados com os dados de processo.

O simulador utiliza-se de um método rigoroso, baseado nas Equações de MESH (Kister, 1992), conduzindo a um modelo matemático das colunas de destilação representado pelos seguintes tipos de equação:

equações de balanço material total e por componente;

equações de equilíbrio, incluindo as equações de ponto de bolha e ponto de orvalho;

equações de somatória;

equações de balanço de energia.

A predição das propriedades de mistura baseou-se nos coeficientes de atividade presentes no simulador.

No que se refere ao cálculo do equilíbrio, as estimativas geradas pelo programa foram comparadas com os dados de equilíbrio líquido-vapor obtidos em Gmehling *et al.* (1977), indicando em todos os casos a obtenção de boas estimativas.

A implementação da simulação do sistema de destilação se deu inserindo a operação unitária já existente.

Na operação contínua em estado estacionário é especificada a vazão do vinho como corrente de alimentação da coluna A, a composição hidroalcoólica pressão e temperatura. Na simulação, foram utilizados 22 estágios ascendentes, da base para o topo da coluna A, sendo considerada na base a pressão real de operação, a corrente de energia, o grau alcoólico da vinhaça descrevendo a corrente de saída no fundo do equipamento, a eficiência das bandejas de 65, 60 e 50% nas colunas A, B1 e B, respectivamente, além de selecionar a correlação que descreve o equilíbrio de fases da mistura.

O sistema de colunas B e B1 foram considerados como um conjunto de 18 bandejas da coluna B1 e 45 bandejas da coluna B, da base para o topo, sendo a alimentação de flegma inserida na coluna B, em sua base. Na base da coluna B1 foi considerada a pressão de operação, a corrente de energia e como especificação da corrente de saída o grau alcoólico da flegmaça. O produto é retirado na antepenúltima bandeja da coluna B, bandeja B-43, sendo especificado o seu teor alcoólico. Os vapores alcoólicos do topo desta coluna são encaminhados ao conjunto de condensadores e depois de condensados retornam para o topo da coluna B. Os dados utilizados nas simulações do sistema em estudo foram especificados em fração mássica.

## Resultados e discussão

Admitindo um grau alcoólico do vinho variável e mantendo-se constantes as pressões da base e topo das colunas, bem como o grau alcoólico das correntes de saída (vinhaça, flegmaça e produto), foram realizadas simulações as quais foram comparadas com as medidas de temperaturas e concentrações alcoólicas levantadas no processo. São apresentadas a seguir

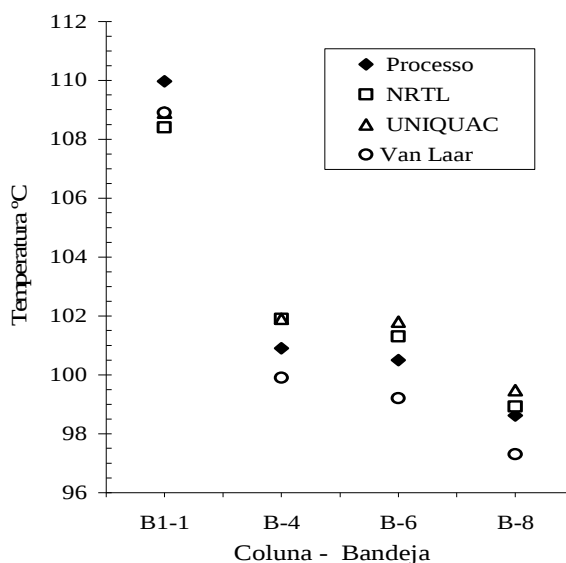
simulações e análise de quatro condições operacionais distintas, conforme a Tabela 2.

**Tabela 2.** Condições operacionais simuladas.

| Simulação | Produção Álcool (L h <sup>-1</sup> ) | Alimentação |        |                             |
|-----------|--------------------------------------|-------------|--------|-----------------------------|
|           |                                      | % etanol    | T (°C) | Vazão (kg h <sup>-1</sup> ) |
| 1         | 15158                                | 5.70        | 96.85  | 202542                      |
| 2         | 15391                                | 5.87        | 96.00  | 199807                      |
| 3         | 15470                                | 6.02        | 97.20  | 195432                      |
| 4         | 15812                                | 6.10        | 94.85  | 197397                      |

Os resultados apresentados nos gráficos das Figuras 3 e 4 referem-se aos da simulação 4.

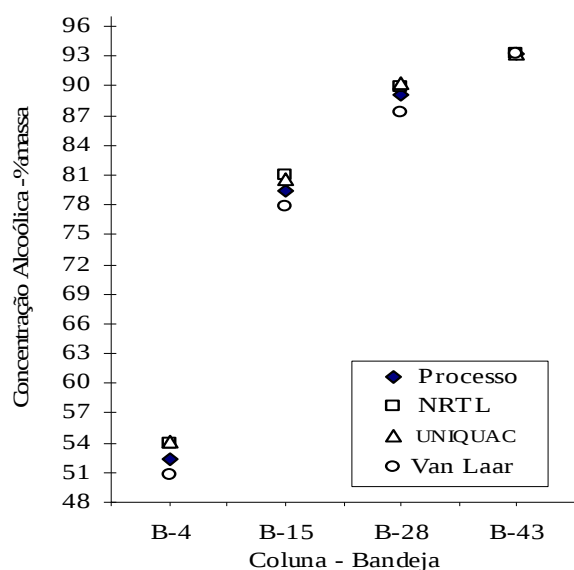
Observa-se, na Figura 3, que na bandeja B1-1, primeira bandeja da coluna B1, o valor da temperatura simulada se aproxima do valor de processo. No entanto, as previsões vão se afastando paulatinamente ao longo da coluna B, como se pode observar nas bandejas B<sub>4</sub>, B<sub>6</sub> e B<sub>8</sub>, para todas as equações utilizadas. Dentre estas, a equação de NRTL é a que conduz a resultados mais próximos das temperaturas de processo contrapondo ao modelo de Van Laar, o qual geralmente forneceu os maiores desvios.



**Figura 3.** Temperatura nas bandejas das colunas de esgotamento/retificação da flegma.

Na Figura 4, o resultado da simulação utilizando as equações propostas nos leva à estimativa de concentração alcoólica bastante próxima das concentrações medidas no processo.

Cabe salientar que o valor da bandeja B-43, de onde é extraído o álcool hidratado, é um parâmetro do processo especificado no simulador para todas as simulações.



**Figura 4.** Concentração alcoólica nas bandejas da coluna de retificação.

Uma análise mais criteriosa da qualidade das simulações efetuadas pode ser alcançada mediante o cálculo dos resíduos quadráticos de temperatura e de concentração alcoólica.

O resíduo quadrático acumulado da temperatura ( $\varnothing_T$ ) é definido como sendo igual à somatória das diferenças entre as temperaturas do processo ( $T_p$ ) e as temperaturas simuladas ( $T_s$ ) elevada ao quadrado, conforme Equação 1,

$$\varnothing_T = \sum (T_p - T_s)^2 \quad (1)$$

O resíduo quadrático da concentração alcoólica ( $\varnothing_c$ ) é definido como sendo a somatória das diferenças das concentrações de processos ( $C_p$ ) e as concentrações simuladas ( $C_s$ ) elevadas ao quadrado, de acordo com a Equação 2.

$$\varnothing_T = \sum (C_p - C_s)^2 \quad (2)$$

Ambos foram calculados e encontram-se dispostos na Tabela 3.

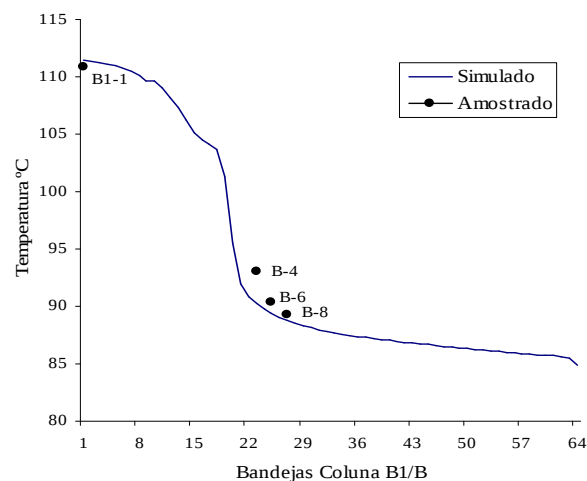
**Tabela 3.** Resíduo quadrático acumulado: temperatura e concentração alcoólica.

| Simulação | NRTL                |                     | UNIQUAC             |                     | Van Laar            |                     |
|-----------|---------------------|---------------------|---------------------|---------------------|---------------------|---------------------|
|           | ( $\varnothing_T$ ) | ( $\varnothing_c$ ) | ( $\varnothing_T$ ) | ( $\varnothing_c$ ) | ( $\varnothing_T$ ) | ( $\varnothing_c$ ) |
| 1         | 0,88                | 1,29                | 5,66                | 1,29                | 5,29                | 6,67                |
| 2         | 3,43                | 1,11                | 6,52                | 4,24                | 7,40                | 6,30                |
| 3         | 4,17                | 5,44                | 4,55                | 6,68                | 7,40                | 6,30                |
| 4         | 2,10                | 2,22                | 6,05                | 2,31                | 2,86                | 4,47                |

A análise dos resíduos quadráticos obtidos indica que a equação de NRTL é a mais adequada para as

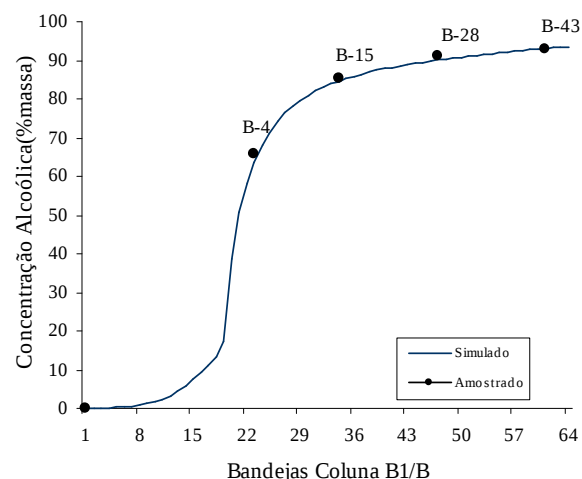
previsões de temperatura e de concentração alcoólica, por conduzir aos menores valores de resíduos quadráticos, enquanto a de Van Laar é a menos indicada por apresentar os maiores valores de resíduos quadráticos em comparação às outras equações.

Os perfis de temperatura e de concentração alcoólica obtidos utilizando-se os dados do processo industrial e a equação de NRTL estão descritos nas Figuras 5 e 6, respectivamente.



**Figura 5.** Perfil de temperatura coluna B/B1.

Também estão indicados nas Figuras 5 e 6 os dados amostrados na planta industrial. Observa-se que os valores simulados se aproximam dos amostrados.

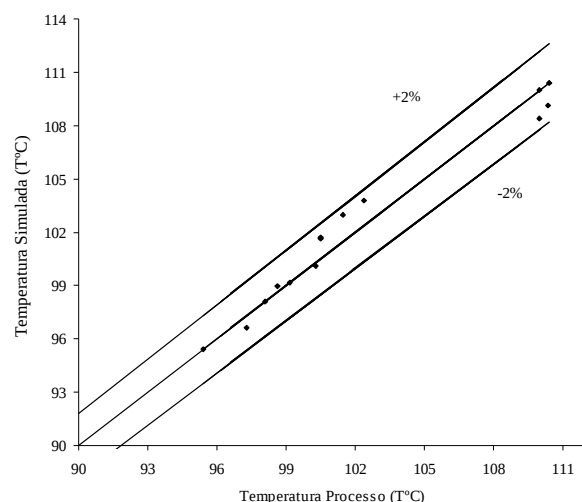


**Figura 6.** Perfil de concentração alcoólica coluna B/B1.

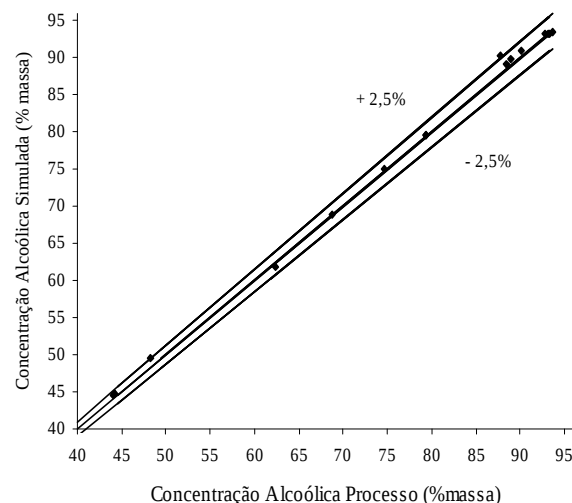
### Análise Global

Verifica-se que a equação que conduz às melhores estimativas de temperatura e de concentração alcoólica no sistema industrial de destilação é a NRTL.

Conforme se pode observar nas Figuras 7 e 8, as temperaturas e concentrações alcoólicas estimadas pelo simulador com a equação NRTL, nas quatro condições operacionais exploradas, apresentam desvios em geral menores que 2 e 2,5%, respectivamente. O resultado obtido é adequado para o sistema industrial em estudo e confirma o modelo NRTL como o mais indicado para a simulação do processo.



**Figura 7.** Desvio dos valores de temperatura nas simulações com a equação NRTL.



**Figura 8.** Desvio dos valores de concentração alcoólica nas simulações com a equação NRTL.

## Conclusão

O simulador de processos utilizado representou adequadamente o comportamento do sistema industrial de colunas de destilação de álcool etílico.

Dentre as equações utilizadas para o cálculo dos coeficientes de atividade, a equação NRTL é a mais indicada, conduzindo aos menores desvios em relação aos dados experimentais.

A sistemática comparação dos resultados de simulação com os valores de temperatura e concentração obtidas em planta de escala industrial para a obtenção de álcool hidratado representam a contribuição específica deste trabalho de pesquisa, o qual também permitiu selecionar o modelo de excesso de energia livre de Gibbs mais adequado para representar o processo investigado.

## Referências

- CAMARGO, C.A. *Conservação de energia na indústria do açúcar e do álcool*. São Paulo: IPT, 1990.
- GMEHLING, J. et al. *Vapor liquid equilibrium data collection*. Frankfurt: Dechema, 1977.
- KISTER, H.Z. *Distillation design*. California: McGraw-Hill Book Company, 1992.
- LEK, C.M. et al. Revisiting some rules of thumb. *Chem. Engin.*, New York, v. 111, p. 50-55, 2004.
- MELO, D.N.C. et al. Simulação otimização da destilação extrativa para produção de etanol anidro: integração energética como alternativa de economia de energia. In: CONGRESSO BRASILEIRO DE ENGENHARIA QUÍMICA, 13., 2000, Águas de São Pedro. *Anais... Águas de São Pedro*: FEQ-Unicamp e DEQ-UFScar, 2000. 1 CD-Rom.
- PAYNE, J.H. *Operações unitárias na produção de açúcar de cana*. São Paulo: Livraria Nobel S.A. 1976.
- REID, R.C. et al. *The properties of gases and liquids*. New York: McGraw-Hill Book Company, 1987.

Received on May 30, 2006.

Accepted on April 02, 2007.