

REVISÃO SOBRE A SIMULAÇÃO E OTIMIZAÇÃO DA PRODUÇÃO DE ETANOL ANIDRO

REVIEW ON THE SIMULATION AND OPTIMIZATION OF ANHYDROUS ETHANOL PRODUCTION

FERNANDO FERREIRA AOKI¹, SÍLVIO MIGUEL PARMEGIANI MARCUCCI^{2*}

¹ Acadêmico do curso de graduação do curso de Engenharia Química do Centro Universitário UNIFEITEP; ² Professor Doutor, Disciplina de Fundamentos de Cálculos em Processos Engenharia Química do Centro Universitário UNIFEITEP. Doutor em Engenharia Química com ênfase na produção enzimática de biodiesel.

*Avenida Paranavai, 1164 - Zona 06, Maringá, Paraná, Brasil. CEP: 87070-130. prof.silviomiguel@feitep.edu.br

Recebido em 30/08/2024. Aceito para publicação em 06/09/2024

RESUMO

A produção de etanol anidro assume uma relevância notável em múltiplos domínios, especialmente como um aditivo essencial à gasolina. Após procedimentos específicos de desidratação, esse composto alcoólico emerge praticamente isento de água em sua formulação. Apesar da demanda contínua por este insumo, a pesquisa contemporânea direciona seus esforços para o desenvolvimento de práticas inovadoras visando aprimorar a produção de etanol anidro, buscando eficiência operacional e viabilidade econômica, com vistas a obter um produto praticamente purificado. Este estudo tem por objetivo primordial a análise metódica dos diversos métodos empregados na obtenção deste componente, valendo-se de estudos e simulações pormenorizadas.

PALAVRAS-CHAVE: Etanol anidro; produção; simulação.

ABSTRACT

The production of anhydrous ethanol is of notable relevance in multiple areas, especially as an essential additive to gasoline. After specific dehydration procedures, this alcoholic compound emerges practically free of water in its formulation. Despite the continuous demand for this input, contemporary research directs its efforts towards the development of innovative practices aimed at improving the production of anhydrous ethanol, seeking operational efficiency and economic viability, with a view to obtaining a practically purified product. This study's primary objective is to meticulously analyze the various methods used to extract this component, using detailed studies and simulations.

KEYWORDS: Anhydrous ethanol; production; simulation.

1. INTRODUÇÃO

O etanol, com a fórmula molecular C^2H^6O , tornou-se um componente de destaque na produção nacional a partir de 1975, impulsionado pela implementação do Programa Nacional do Álcool¹, e apresenta-se hoje como o segundo maior produtor mundial. Reconhecido como um aditivo de alto valor na gasolina, o etanol

desempenha um papel crucial na redução do consumo de combustíveis fósseis, minimizando as emissões de gases poluentes e demonstrando excelente eficiência quando empregado. A busca pela forma desidratada e purificada do etanol, conhecida como etanol anidro, tem sido objeto de estudos há décadas, visando aprimorar e otimizar sua produção, com impacto significativo em sua utilização e viabilidade econômica. As principais técnicas empregadas para a obtenção do etanol anidro incluem a destilação azeotrópica, destilação extrativa e o uso de peneiras moleculares².

As preocupações com o uso dos combustíveis fósseis foram os principais gatilhos para uma análise mais dedicada e detalhada da produção do etanol anidro no Brasil. A inserção dos biocombustíveis líquidos na matriz energética brasileira é uma consequência direta da crescente preocupação ambiental e da implementação de políticas públicas em resposta às crises no fornecimento de petróleo. Atualmente, aproximadamente 45% da energia e 18% dos combustíveis consumidos no Brasil são provenientes de fontes renováveis. Entre os principais biocombustíveis líquidos utilizados destacam-se o etanol, obtido a partir da cana-de-açúcar, e o biodiesel, produzido a partir de óleos vegetais ou gorduras animais, os quais são adicionados ao diesel de petróleo em proporções variáveis³.

A principal rota para a produção do etanol é a fermentativa¹ que pode ser encontrada em fontes distintas de biomassa, como por exemplo na beterraba, mandioca, trigo, milho e principalmente na cana de açúcar (matéria prima de maior destaque na produção de etanol no Brasil). Isso se explica pois na composição da cana é encontrado alguns açúcares fermentescíveis e facilita, posteriormente, na extração e produção da substância, e após este processo se forma o etanol hidratado, comercializado como combustível e com teor alcoólico aproximado de 92,6% em massa.³ Ademais, para seu uso como aditivo na gasolina há a necessidade de sua desidratação, pois durante a destilação convencional gera-se um azeótropo que não é dissolvido em destilações convencionais. E trata-se de um processo cujo objetivo é separar duas substâncias de uma mistura,

para obter o componente líquido e sólido. Consiste em aquecer a mistura de forma que apenas o líquido seja evaporado, restando um elemento desidratado².

Um azeótropo refere-se a uma combinação de dois ou mais componentes voláteis que, quando sujeitos a um processo de destilação convencional, apresentam composições idênticas tanto na fase líquida quanto na fase vapor, e as moléculas dos componentes do sistema repelem-se e apresentam uma alta pressão parcial. Por este motivo, observa-se a formação de um azeótropo de mínimo ponto de ebulição. Os azeótropos podem ser homogêneos ou heterogêneos baseados nas fases líquidas e gasosas que formam, sendo os homogêneos os que possuem uma única fase líquida em equilíbrio com a gasosa enquanto os heterogêneos possuem múltiplas fases líquidas, ou seja, “a composição da fase vapor é igual à composição global das duas (ou mais) fases líquidas, pois há um equilíbrio entre uma fase vapor e duas fases líquidas”².

Desta forma, outras metodologias foram estudadas e aperfeiçoadas para a obtenção do etanol anidro, inicialmente a destilação extrativa foi desenvolvida e aplicada para desidratar o etanol de forma contínua, utilizando glicerol como solvente. No entanto, esse método foi interrompido por uma sequência de desvantagens da sua prática, e foram substituídos, em usinas brasileiras pelo benzeno na destilação azeotrópica (que possui um alto fator cancerígeno e se apresentava perigoso para os envolvidos na sua utilização).² Pela proibição do uso do benzeno em usinas, foi adotada a realização da destilação azeotrópica com o ciclohexano. Outros métodos foram sugeridos e analisados, mas devido ao custo elevado de produção, foram descartados ou economicamente inviáveis².

Logo, foi necessário um direcionamento do ponto de vista da segurança do trabalhador. O método mais adequado para produzir álcool anidro a partir de álcool hidratado é o processo de peneira molecular. Outras opções aceitáveis, em termos de proteção da saúde dos trabalhadores, incluem o uso de agentes azeotrópicos como ciclohexano e solventes mistos como SOLBRAX ANB e UNIVEN 670, além do processo de destilação extrativa utilizando etilenoglicol, sugerido pela Comissão Nacional Permanente do Benzeno (CNPBz), em 2001².

Ademais, o método com peneira molecular é único entre os processos industriais de desidratação, pois não se fundamenta nos princípios da destilação. Neste processo, o álcool a ser desidratado é primeiramente vaporizado e superaquecido antes de ser conduzido para colunas de desidratação contendo zeólitas, uma estrutura porosa de sólidos. As zeólitas retêm a água e permitem a passagem dos vapores de álcool, os quais são posteriormente condensados². De tempos em tempos, as zeólitas são regeneradas ao serem expostas a vapores alcoólicos sob vácuo, os quais são então destilados para recuperar o álcool². As vantagens desse método englobam a obtenção de etanol anidro com elevado grau de pureza, a eliminação da manipulação de solventes por parte dos operadores, o que resulta na redução dos riscos

de contaminação, a reciclagem da corrente hidroalcoólica visando minimizar as perdas de etanol, bem como o baixo consumo energético, requerendo apenas uma etapa de vaporização. Ademais, o processo é industrializado e conta com sistemas de controle apropriados.

O grande problema, porém, está no elevado orçamento para a prática da peneira molecular, pois há a necessidade de novos investimentos, em unidades novas, e isto garantiria um resultado, ou seja, o próprio etanol anidro com um preço absurdamente elevado, de modo que se tornaria pouco comercializado. Assim, sua prática cotidianamente se torna impossível, até então, e a desidratação azeotrópica com ciclohexano é, ainda, o processo empregado com mais frequência nas usinas e destilarias brasileiras, e consiste em uma coluna que é utilizada para desidratar o etanol com ciclohexano. Na destilação azeotrópica, adiciona-se um terceiro componente (solvente) para formar um novo azeótropo com um ou mais dos componentes iniciais da mistura. O novo azeótropo formado deve ser heterogêneo, resultando na formação de duas fases líquidas diferentes após a condensação da corrente de vapor. Este novo azeótropo é retirado do topo (azeótropo de mínimo) ou do fundo (azeótropo de máximo) da coluna de destilação, enquanto um dos componentes da mistura original é recuperado em sua forma pura na outra extremidade da coluna. Para recuperar o solvente, é necessário utilizar uma segunda coluna³.

Ainda, a destilação extrativa tem sido um outro meio de buscar maior eficiência e facilidade na produção do etanol anidro, de forma que ele não fique tão encarecido. Ele se baseia em um processo em que a adição do solvente impacta diretamente as volatilidades relativas dos componentes da mistura a ser separada. Neste caso, etanol anidro (desidratado) e água, e diferencialmente da aplicação da destilação azeotrópica, é importante que a inclusão desta nova substância a mistura - o solvente - não acabe gerando um novo produto azeotrópico, e que pode ser uma dificuldade marcante para o seu desenvolvimento².

Para que outro azeótropo não seja gerado, não intencionalmente, durante o processo, é necessário conhecer as solubilidades mútuas, além da necessidade de manter em limites razoáveis o calor sensível despendido no ciclo do solvente². O perfil de concentração do solvente na coluna é controlado pela manipulação das taxas de entrada e as entalpias do solvente, da alimentação virgem e das correntes de refluxo². É amplamente reconhecido que a escolha do solvente adequado desempenha um papel crucial no aspecto econômico do projeto de destilação extrativa. Uma vez estabelecido o processo de separação, a prioridade é selecionar o solvente que demonstra uma alta eficiência na separação e, ao mesmo tempo, reduza a carga líquida na coluna de destilação extrativa².

A leitura dos artigos e estudos realizados de simulações com *softwares* como *CHEMCAD*, *Aspen Plus*, *ChemSep* e *HYSYS*, que prometem sensibilidade e veracidade, além da análise dos diversos solventes

aplicados a cada um dos métodos de separação, tem como objetivo o embasamento teórico e melhor compreensão dos processos aplicados a extração de etanol anidro.

2. MATERIAL E MÉTODOS

Esta revisão bibliográfica tem por objetivo a melhor compreensão das distintas técnicas de simulação, otimização na extração e produção do etanol anidro, com base na identificação dos processos matemáticos e ferramentas envolvidas para uma análise profunda dos resultados variados obtidos pelas técnicas observadas durante a pesquisa.

Foi desenvolvido uma busca estruturada na pesquisa por termos como “etanol anidro”, “extração do etanol” e “técnicas de simulação” para um filtro mais decisivo e centrado no tema, garantindo a leitura de referências importantes para a análise dos processos realizados. A leitura foi realizada com artigos acadêmicos de projetos de pesquisa, todos de produção nacional, por pesquisadores brasileiros. Foram, em sua grande maioria, publicados nos últimos dez anos, para a análise de estudos recentes. Produções que não apresentem dados empíricos ou análises detalhadas serão excluídas.

Após este processo, inicialmente, os resumos dos artigos serão examinados para avaliar sua relevância. Os estudos que atenderem aos critérios de inclusão serão analisados na íntegra. Informações pertinentes serão extraídas e organizadas em uma planilha para facilitar a análise subsequente. Ademais, os artigos selecionados serão submetidos a uma análise qualitativa com o objetivo de identificar temas e padrões recorrentes. As técnicas de simulação e otimização serão comparadas para avaliar suas respectivas vantagens e desvantagens, assim como os programas utilizados e modelo matemático. A síntese das informações permitirá uma visão abrangente das tendências e práticas contemporâneas na produção de etanol anidro. Estudos não incluídos ou metodologias não abordadas podem influenciar a completude dos resultados.

3. DESENVOLVIMENTO

A metodologia e desenvolvimento dos processos de simulação e otimização são propostos por uma metodologia teórico-computacional, com o uso de *softwares* de simulações de processos. Estes simuladores têm como objetivo representar um processo químico ou físico através de um modelo matemático envolvendo outros parâmetros específicos. Estes modelos matemáticos podem conter equações algébricas lineares, não lineares e diferenciais, propriedades físico-químicas, conexões e operações dos equipamentos⁴.

A utilização desses programas de simulação pode oferecer uma estimativa do desempenho de um processo, melhorar as condições de funcionamento de instalações já em operação ou recém-implantadas, monitorar a vida útil de uma planta química (para desenvolver estratégias de prolongamento ou aprimoramento), executar cálculos intrincados, gerar dados termodinâmicos e dimensionar colunas de

destilação de maneira mais eficiente. Entre os programas mais utilizados, há um enorme destaque no *Aspen Plus* e *Hysys*, tanto em meios acadêmicos como na indústria. Simular processos é fundamental para o engenheiro químico que deseja buscar inovações e otimizações dos processos químicos⁴.

Diversos parâmetros podem ser examinados e utilizados durante a simulação para o estudo de caso da extração de etanol anidro, tais como a taxa de refluxo, a temperatura de entrada do solvente e o número de estágios na evolução do processo. Além disso, há a imperatividade de um modelo termodinâmico na simulação, o qual constitui um conjunto de equações habilitando a estimativa das propriedades dos componentes individuais e da mistura. A seleção criteriosa do modelo termodinâmico constitui uma fase primordial para a representação precisa de processos químicos, permitindo a estimativa precisa das propriedades físico-químicas das substâncias envolvidas na interação do processo⁶.

Apesar da variação entre os elementos utilizados em cada estudo e os métodos aplicados a eles, é possível discorrer sobre a eficiência de cada método aplicado ao mesmo objetivo central: otimização da produção do etanol anidro, em contextos que sejam definitivamente viáveis e úteis².

A análise de sensibilidade, realizada no simulador *Aspen Plus*®, por exemplo, permite variar parâmetros do processo e observar seus efeitos no sistema. Foi utilizada para determinar os valores iniciais dos fatores estudados, incluindo razões de refluxo e estágios de alimentação. O objetivo foi encontrar condições que minimizem o consumo energético e maximizem a pureza do etanol anidro. Esta análise considera cada variável isoladamente, servindo como uma etapa preliminar para definir os parâmetros dos experimentos planejados¹.

Porém, além da simulação é necessário também que se use técnicas estatísticas para garantir formas mais eficientes e benéficas de se garantir uma produção economicamente viável e estável, considerado como otimização. Para se seguir a este passo, inicia-se verificando quais são os aspectos de interesse para o projeto, que podem ser revisados, e para isso precisam ser passíveis de controle. Com isso, determinam-se com certeza quais são os objetivos do projeto e o que é buscado no final do processo de otimização (o que deve ser tratado para melhor eficácia)⁵.

Assim, algumas das técnicas estatísticas e matemáticas utilizadas em grande escala nos processos de otimização das simulações de destilação, com ênfase no etanol anidro, são o planejamento fatorial fracionário que emerge como uma estratégia para conduzir uma triagem eficaz e excluir variáveis que não possuem significância estatística. Tais abordagens são altamente eficientes em termos econômicos e permitem a exploração simultânea de múltiplos fatores. Após a identificação dos fatores mais relevantes, é possível empregar um planejamento fatorial completo para uma avaliação quantitativa de suas influências na resposta de

interesse, bem como das possíveis interações entre eles. Quando o propósito primordial consiste na otimização do sistema, isto é, na maximização ou minimização de uma determinada resposta, a metodologia de superfícies de resposta, fundamentada na modelagem por mínimos quadrados, pode ser uma abordagem conveniente³.

Além disso, foram empregados gráficos de probabilidade normal para identificar os fatores significativos, considerando a impossibilidade de estimar o erro aleatório experimental. A metodologia de superfície de resposta foi utilizada para determinar a região ótima, empregando planejamentos compostos centrais para estimar os coeficientes quadráticos dos modelos. A função de desejo foi empregada para facilitar a análise da combinação dos fatores que melhor atendem aos objetivos desejados. Primeiramente, um planejamento fatorial completo é uma abordagem sistemática que permite investigar as influências de todas as variáveis experimentais de interesse, bem como os efeitos de interação entre elas, no processo de extração do etanol anidro⁵.

Ao conduzir um planejamento fatorial completo, os engenheiros químicos podem examinar uma série de fatores que podem afetar a eficiência e o rendimento da extração do etanol anidro, tais como a temperatura, a concentração de solvente, a taxa de agitação, o tempo de extração, entre outros. Além disso, essa metodologia permite identificar possíveis interações entre esses fatores, o que é crucial para compreender como diferentes variáveis podem influenciar umas às outras e, conseqüentemente, o processo de extração como um todo. Ao analisar os resultados de um planejamento fatorial completo, os engenheiros químicos podem identificar as condições ideais para maximizar o rendimento do processo de extração do etanol anidro. Isso não só ajuda a otimizar a eficiência operacional e reduzir os custos de produção, mas também contribui para o desenvolvimento de métodos mais sustentáveis e eficazes na indústria de biocombustíveis⁵.

A metodologia de superfícies de resposta é uma abordagem de otimização fundamentada em planejamentos fatoriais, concebida por G. E. P. Box na década de 1950. Desde sua introdução, essa metodologia tem sido empregada com notável eficácia na modelagem de diversos processos industriais. Ao permitir uma exploração sistemática das relações entre variáveis de entrada e saída, a metodologia de superfícies de resposta oferece uma estrutura poderosa para a compreensão e otimização de sistemas complexos. Através da análise das respostas do sistema em diferentes pontos do espaço experimental, essa técnica permite identificar as condições ideais para maximizar ou minimizar uma determinada resposta, contribuindo assim para melhorias significativas na eficiência e no desempenho dos processos industriais³.

Por fim, o método da desejabilidade é especialmente utilizado em situações nas quais múltiplas respostas precisam ser consideradas simultaneamente. Quando se trabalha com modelos que envolvem várias respostas, a função de desejabilidade oferece uma abordagem

sistemática para maximizar ou minimizar uma resposta específica, ao mesmo tempo em que mantém as outras respostas dentro de limites desejáveis. Em outras palavras, ele permite que sejam definidos critérios de importância para cada resposta, levando em consideração não apenas seus valores absolutos, mas também sua relevância relativa para o processo de destilação. Desta forma, pode garantir uma melhor decisão para uma tomada de ação dentro da produção prática.

Após uma extensa revisão e análise dos modelos matemáticos, bem como a realização de testes dentro de softwares específicos e a verificação dos parâmetros críticos, juntamente com a implementação de práticas destinadas a otimizar o processo de simulação, o desenvolvimento de metodologias e diretrizes para a preparação de estudos de caso pode contribuir significativamente para o aprimoramento dos resultados obtidos nos estudos de casos relacionados aos diversos métodos de extração do etanol anidro. A condução de testes em ambientes de simulação virtual e aplicativos computacionais é um passo essencial para a compreensão dos métodos de produção empregados na indústria, proporcionando uma base sólida para análises mais detalhadas e tomadas de decisão fundamentadas¹.

4. DISCUSSÃO

Com as leituras e análises realizadas acerca da extração e produção do etanol anidro, por meio dos demais métodos de separação de misturas azeotrópicas, e a partir do percebido com os testes de otimização e simulação virtuais dessas técnicas, pode-se concluir, assim, que as simulações são essenciais para uma melhor compreensão das metodologias que podem ser aplicadas e que aumentam sua eficiência (no entanto, as simulações realizadas em programas não podem dar uma certeza total de que as simulações serão 100% efetivas, pois existe a necessidade de adaptações quando transferidas para o ambiente laboratorial e industrial). No entanto, até a escolha do software CAPE (*Computer Aided Process Engineering*) que são os programas especializados na produção dessas simulações, é um passo importante na análise, em vista de que, muitas vezes, estes programas são oferecidos por custos elevados. O simulador COCO é capaz de modelar o processo de simulações sequenciais, operações e plantas industriais no estado estacionário. Com uma vasta gama de opções e versatilidade, o *software* é uma opção viável e certa para pesquisas e simulações dos mais variados projetos⁷.

Ademais, uma das principais dificuldades está na modelagem precisa de processos de produção de etanol anidro, que envolvem uma série de reações químicas, fenômenos de transporte e interações complexas. Muitas vezes, as simplificações adotadas nos modelos podem não capturar totalmente a realidade do processo, resultando em previsões imprecisas. Além disso, a composição e a qualidade da matéria-prima utilizada na produção de etanol anidro podem apresentar variações substanciais, as quais têm o potencial de influenciar o

desempenho do processo produtivo. A modelagem dessas variações e sua consequente repercussão na produção constituem um desafio significativo, exigindo um conhecimento aprofundado da química envolvida nesse contexto.

A busca por processos mais eficientes em termos energéticos e sustentáveis na indústria química do etanol anidro é motivada pela crescente preocupação com a mitigação do impacto ambiental e a utilização racional dos recursos naturais. A eficiência energética desempenha um papel crucial nesse contexto, uma vez que o consumo de energia é uma das principais fontes de emissões de gases de efeito estufa na produção industrial. Adicionalmente, a sustentabilidade é um aspecto fundamental para assegurar a viabilidade a longo prazo da indústria, dada a necessidade imperativa de conservação dos recursos naturais e a minimização dos impactos ambientais adversos (por isso são feitas simulações, que evitam o gasto desnecessário de energia).

Ainda, a realização de experimentos em escala industrial apresenta desafios significativos. Em primeiro lugar, os custos associados à condução de experimentos em grande escala podem ser substanciais, abarcando despesas com equipamentos, matéria-prima, energia, mão de obra, entre outros. Os custos e a complexidade associados a este procedimento podem tornar a produção mais cara, especialmente quando considerados os desafios adicionais relacionados à coleta e análise de dados em uma escala industrial.

5. CONCLUSÃO

Em síntese, a investigação de estudos de caso sobre a simulação e otimização do processo de extração do etanol anidro tem proporcionado uma compreensão abrangente da complexidade e dos desafios intrínsecos à indústria de biocombustíveis. Durante a condução deste estudo, foram examinados os principais métodos empregados na produção de etanol anidro, enfatizando-se o papel fundamental da simulação para promover eficiência operacional e redução de custos, em comparação com análises laboratoriais e industriais, que enfrentam limitações que comprometem a precisão dos resultados.

Embora se reconheça a importância da simulação na otimização do processo de extração do etanol anidro, há ainda áreas que demandam investigação adicional para aprimorar a eficácia e a sustentabilidade da produção. Alguns desses tópicos incluem o desenvolvimento de métodos mais econômicos e eficientes, maior quantidade de estudos comparativos que envolvam os demais métodos de extração, otimização da produção em escala industrial (que é um fator essencial na produção comercial) e a avaliação de novas tecnologias e materiais aplicados a esta análise.

Novas pesquisas direcionadas a esses tópicos podem desempenhar um papel significativo no progresso contínuo da produção de etanol anidro utilizando simulações computacionais, resultando em melhorias substanciais na eficiência, sustentabilidade e

competitividade dentro do setor de biocombustíveis.

6. AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem à UNIFEITEP - Educação Presencial e à Distância pela possibilidade da realização deste trabalho.

7. REFERÊNCIAS

- [1] Jardim AS. Projeto, construção e desenvolvimento metodológico de um aparelho de destilação. [dissertação]. São Carlos: Universidade Federal de São Carlos; 2014.
- [2] Figueirêdo MF. Obtenção de etanol anidro via destilação extrativa: simulação e otimização. [dissertação]. Paraíba: Universidade Federal de Campina Grande; 2009.
- [3] Cavalcanti CJ. Simulação e otimização da produção de etanol anidro combustível. [dissertação]. Pernambuco: Universidade Estadual de Pernambuco; 2018.
- [4] Souza AE, Cerqueira DA, Sousa NG, et al. Simulação do processo de destilação extrativa para produção de etanol anidro utilizando etilenoglicol como agente de separação. *Res Soc Dev.* 2021;10(4).
- [5] Ramos WB, Figueiredo MF, Brito RP. Optimization of extractive distillation process with a single column for anhydrous ethanol production. [dissertação]. Paraíba: Universidade Federal de Campina Grande; 2014.
- [6] Battisti R, Claumann CA, Marangoni C, et al. Optimization of pressure-swing distillation for anhydrous ethanol purification by the simulated annealing algorithm. *Braz J Chem Eng.* 2019;36(1):453-65.
- [7] Silva AK, Marcucci SMP. Simulação da produção de etanol anidro via destilação extrativa utilizando diferentes solventes. [tese]. Maringá: Faculdade de Engenharia e Inovação Técnico Profissional; 2022.