

12º CONGRESSO BRASILEIRO DE PESQUISA E DESENVOLVIMENTO EM PETRÓLEO E GÁS



TÍTULO DO TRABALHO:

MODELAGEM E SIMULAÇÃO DE UMA UNIDADE DE PRODUÇÃO DE BIOETANOL HIDRATADO

AUTORES:

Matheus Augusto Paiva de Lima¹
Vitor Guilherme Cecilio de Sales¹
Marcos Gabriel Lopes da Silva¹
Mágda Correia dos Santos²
Allan de Almeida Albuquerque¹

INSTITUIÇÃO:

¹UFPE – Universidade Federal de Pernambuco
²IFAL – Instituto Federal de Alagoas

MODELAGEM E SIMULAÇÃO DE UMA UNIDADE DE PRODUÇÃO DE BIOETANOL HIDRATADO

Resumo

Neste trabalho, foi realizada uma simulação da produção de vinho em uma destilaria autônoma voltada para a produção de bioetanol hidratado a partir da cana-de-açúcar. Este bioproduto é obtido pela fermentação dos açúcares presentes nessa biomassa. As etapas realizadas incluíram a definição dos componentes, do modelo termodinâmico (NRTL), das principais reações envolvidas e da simulação do processo. O fluxograma simulado no software Aspen Plus foi organizado nas seguintes etapas: limpeza e moagem da cana-de-açúcar, tratamento do caldo de cana, reciclagem do lodo, concentração do caldo de cana, fermentação e destilação para obtenção do etanol hidratado. A partir do processo simulado, foram identificadas as principais etapas industriais envolvidas no tratamento da cana-de-açúcar e na produção de bioetanol, obtendo-se vinho em condições similares às encontradas nas destilarias brasileiras, além de etanol hidratado dentro dos parâmetros descritos na legislação.

Palavras-chave: Aspen Plus; Bioetanol; Fermentação; Modelagem; Simulação.

Abstract

In this work, a simulation of wine production was conducted in an autonomous distillery focused on hydrated bioethanol production from sugarcane. This bioproduct is obtained through the fermentation of the sugars present in this biomass. The steps taken included defining the components, the thermodynamic model (NRTL), the main reactions involved, and the process simulation. The simulated flowsheet in Aspen Plus software was organized into the following stages: cleaning and milling of sugarcane, treatment of sugarcane juice, sludge recycling, concentration of sugarcane juice, fermentation, and distillation to obtain hydrated ethanol. From the simulated process, the main industrial steps involved in the treatment of sugarcane and the bioethanol production were identified, obtaining wine under conditions similar to those found in Brazilian distilleries, as well as hydrated ethanol within the parameters described in the legislation.

Keywords: Aspen Plus; Bioethanol; Fermentation; Modeling; Simulation.

Introdução

O aumento dos preços dos combustíveis fósseis e o esgotamento das reservas de energia não-renovável destacam a necessidade urgente de fontes alternativas sustentáveis e eficientes (Cruz-Mérida, 2022). O etanol, um líquido incolor e inflamável com a fórmula molecular C_2H_5OH , é amplamente utilizado em diversas indústrias e majoritariamente produzido pela fermentação de açúcares de biomassa ou resíduos lignocelulósicos, sendo conhecido como bioetanol. Estados Unidos e Brasil são os maiores

produtores, utilizando milho e cana-de-açúcar, respectivamente. O bioetanol é um dos biocombustíveis mais importantes devido aos seus benefícios econômicos e ambientais (Baeyens, 2015).

O Brasil, com o programa Proálcool iniciado na década de 1970, tornou-se pioneiro na produção e uso de etanol como combustível, resultando na introdução de veículos flex fuel e aumentando a demanda por etanol. O país é um dos maiores produtores e consumidores de etanol anidro (misturado à gasolina tipo C) e etanol hidratado (vendido como combustível) (Santos et al., 2022).

A produção de bioetanol em larga escala no Brasil começou há cerca de 50 anos, e melhorias no processo são necessárias para manter a competitividade e reduzir custos (Baeyens, 2015). Portanto, a modelagem e a simulação em softwares especializados, como o Aspen Plus, são recursos valiosos para integrar a produção de bioetanol e bioprodutos, prever resultados, otimizar processos existentes e sugerir melhorias (Albuquerque et al., 2022).

Neste contexto, o objetivo deste trabalho foi simular uma unidade de produção de bioetanol hidratado a partir da cana-de-açúcar, utilizando o simulador Aspen Plus. As principais etapas do processo foram simuladas, incluindo limpeza e moagem da cana-de-açúcar, tratamento e concentração do caldo, fermentação e destilação. As condições do vinho e bioetanol hidratado produzidos foram comparadas com as encontradas em destilarias brasileiras e legislação vigente, respectivamente.

Metodologia

A simulação do processo convencional de produção de bioetanol hidratado a partir da cana-de-açúcar foi realizada no simulador Aspen Plus, selecionando os principais componentes representativos do processo. Foram adotados critérios como a adição dos principais componentes, a inclusão de parâmetros de interação binária para o modelo termodinâmico, e a priorização de componentes do banco de dados do simulador. Os componentes definidos incluíram água, ácido fosfórico, hidróxido de cálcio, glicose, sacarose, celulose, dióxido de silício, óxido de potássio, cloreto de potássio, hemicelulose, fosfato de cálcio, lignina, ácido aconítico, óxido de cálcio, d-xilose, ácido acético, amônia, glicerol, hidrogênio, ácido sulfúrico, levedura, dióxido de carbono e etanol (Dias, 2008; Oliveira, 2022).

Para uma representação adequada das propriedades dos componentes puros, foi realizada uma verificação utilizando artigos e bases de dados reconhecidas (NREL, Reaxys, PubChem e NIST Chemistry WebBook). O modelo termodinâmico escolhido foi o Non-Random Two-Liquid (NRTL), adequado para modelar misturas não ideais de componentes altamente polares e sistemas parcialmente miscíveis, proporcionando uma representação adequada dos dados experimentais de equilíbrio de fases (Carlson, 1996; Albuquerque et al., 2020).

As reações nas etapas de calagem e fermentação foram definidas conforme Dias (2008). O fluxograma do processo simulado no Aspen Plus é mostrado na Figura 1. Enquanto a Figura 2 apresenta o processo convencional de purificação do vinho delevurado a bioetanol hidratado, composto por duas colunas de destilação, onde o calor necessário é fornecido por um reator de caldeira na base e os

condensadores no topo purificam os produtos. Antes da destilação, o vinho passa por um processo de remoção de contaminantes, restando apenas etanol e água (Santos et al., 2022).

A etapa inicial envolve uma coluna dividida em seções A (COLUNA-A) e A1 (COLUNA-A1). A seção A remove o vinho, produzindo flegma vaporosa com concentração de etanol entre 30% e 60%. A vinhaça, com teor de etanol de até 0,03%, é obtida como subproduto. A seção A1 aquece o vinho, separando os componentes mais voláteis e obtendo bioetanol de segunda e flegma na base. Os fluxos de flegma são enviados para a coluna de retificação (COLUNA-B), onde se obtém bioetanol hidratado e flegmaça (Santos et al., 2022).

Devido à diferença na vazão de alimentação em relação ao estudo de Santos (2022), as vazões de vapor foram ajustadas por análises de sensibilidade para obter bioetanol hidratado. As configurações do fluxograma da Figura 2 seguem aquelas propostas por Santos et al. (2022).

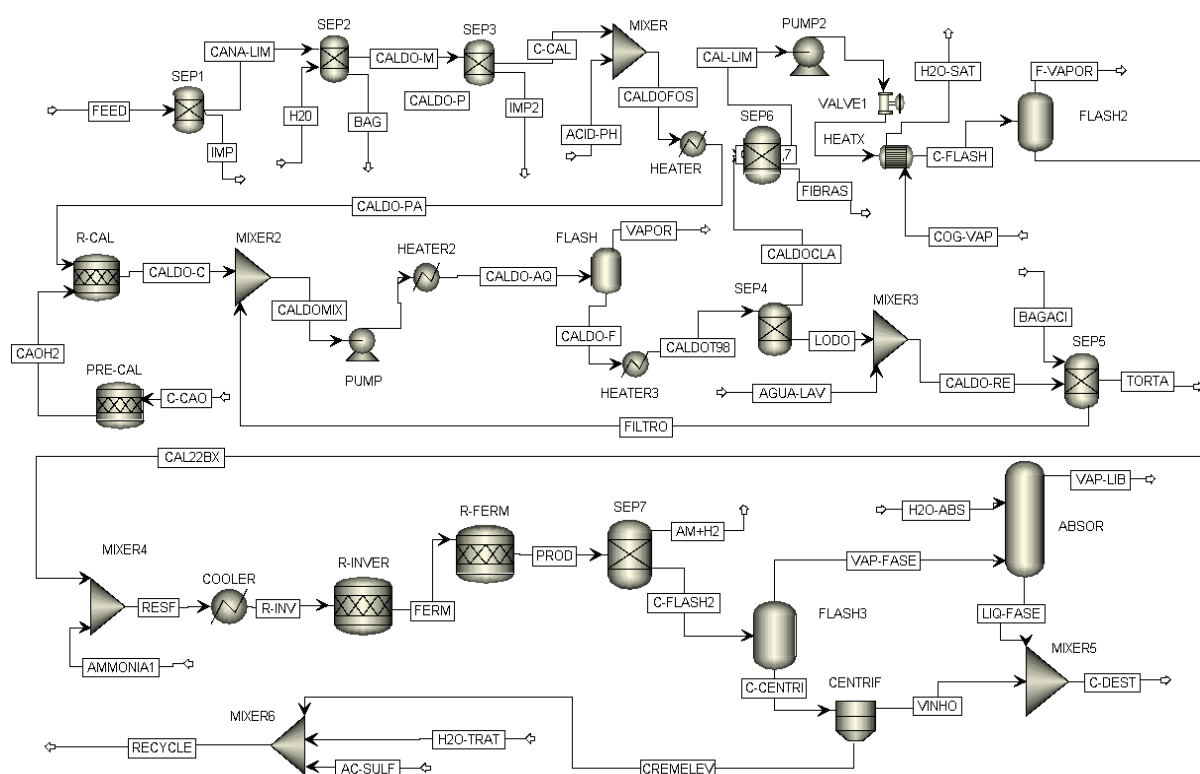


Figura 1 - Fluxograma do processo de produção de vinho a partir da cana-de-açúcar, compreendendo as etapas de limpeza e moagem da cana, tratamento e concentração do caldo, recuperação de lodo e fermentação.

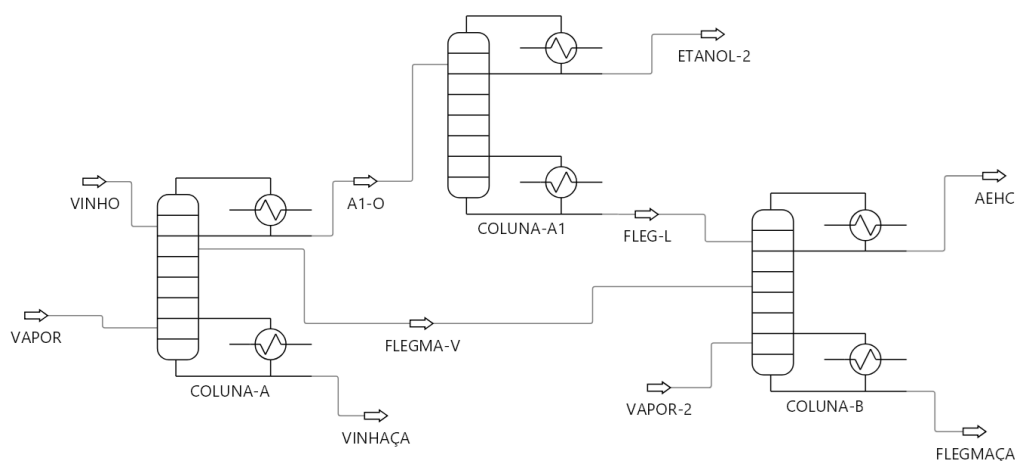


Figura 2 - Fluxograma do processo de obtenção do etanol hidratado.

Resultados e Discussão

A primeira etapa simulada foi a limpeza da cana-de-açúcar, removendo 70% da terra e impurezas com o bloco SEP1. Na moagem (SEP2), a biomassa lignocelulósica foi separada, incluindo celulose, hemicelulose, lignina e açúcares. O caldo de cana foi separado no bloco SEP3, representando peneiras industriais e hidrociclones.

Ácido fosfórico a 85% foi adicionado ao caldo para a calagem no bloco MIXER, promovendo a sedimentação das impurezas e facilitando a filtração. A calagem ocorreu no reator RSTOIC, produzindo $\text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2$ e o caldo calado, que foi misturado no bloco MIXER2 para obter o mosto misto. Este foi aquecido a 105°C e 2,5 bar no bloco FLASH, evaporando parte da água para obter mosto clarificado com 15° Brix no separador SEP4.

Na reciclagem, o lodo foi tratado para gerar um fluxo de filtragem contendo água e açúcares, reciclado e misturado ao caldo no bloco MIXER2. A concentração do caldo ocorreu no bloco FLASH2, aumentando o teor de açúcares para 22° Brix. O caldo concentrado passou por reações nos reatores R-INVER e R-FERM, convertendo sacarose em glicose e glicose em etanol e subprodutos.

O produto alcoólico foi centrifugado para remover parte da levedura, produzindo o fluxo VINHO, misturado ao fluxo LIQ-FASE contendo açúcares recuperados. O fluxo de vinho (C-DEST) resultante tinha 10,86% de etanol, adequado para destilação para produzir etanol hidratado, já que destilarias brasileiras obtêm vinho com 4°GL a 12°GL.

A Tabela 1 apresenta os resultados da simulação do processo de obtenção do vinho.

12º CONGRESSO BRASILEIRO DE PESQUISA E DESENVOLVIMENTO EM PETRÓLEO E GÁS

Tabela 1 - Resultados dos fluxos do processo de produção de vinho a partir da cana-de-açúcar, compreendendo as etapas de limpeza e moagem da cana, tratamento e concentração do caldo, recuperação de lodo e fermentação.

Correntes / Variáveis	FEED	BAG	CALDO-C	CALDO-F	CALDOCLA	TORTA	LODO
Temperatura (°C)	25,0	25,0	70,0	100,4	98,0	25,0	98,0
Pressão (bar)	1,013	1,013	1,013	1,013	1,013	1,013	1,013
Fluxo mássico (t/hr)	499,7	116,2	439,1	486,5	429,1	129616,3	57,4
Fração Mássica							
Água	0,7200	0,5141	0,8133	0,8330	0,8500	0,0000	0,7057
Ca(OH) ₂	0,0000	0,0000	0,0088	0,0080	0,0000	0,0000	0,0676
Glicose	0,0060	0,0008	0,0066	0,0060	0,0067	0,0000	0,0005
Sacarose	0,1300	0,0168	0,1421	0,1270	0,1426	0,0000	0,0108
Celulose	0,0500	0,1935	0,0011	0,0010	0,0003	0,4000	0,0061
Impureza (SiO ₂)	0,0060	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
Minerais (K ₂ O)	0,0050	0,0000	0,0057	0,0051	0,0000	0,0000	0,0435
Sais (KCl)	0,0070	0,0000	0,0080	0,0072	0,0000	0,1400	0,0609
Hemicelulose	0,0450	0,1742	0,0010	0,0006	0,0002	0,2200	0,0034
Ca ₃ (PO ₄) ₂	0,0000	0,0000	0,0129	0,0116	0,0000	0,0000	0,0983
Lignina	0,0260	0,1006	0,0006	0,0005	0,0002	0,2400	0,0032
Ácido orgânico	0,0050	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
Correntes / Variáveis	CAL22BX	FERM	PROD	C-FLASH	VAP-FASE	C-CENTRI	C-DEST
Temperatura(°C)	115,7	34,0	34,0	34,0	34,0	34,0	34,3
Pressão (bar)	1,700	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000
Fluxo mássico (t/hr)	291	291	291	291	19	272	287
Fração mássica							
Água	0,7800	0,7685	0,7689	0,7690	0,0213	0,8217	0,8328
Etanol	0,0000	0,0000	0,1069	0,1069	0,0256	0,1126	0,1086
Glicose	0,0099	0,2309	0,0007	0,0007	0,0000	0,0007	0,0007
Sacarose	0,2101	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
Ácido acético	0,0000	0,0000	0,0042	0,0042	0,0000	0,0044	0,0042
NH ₃	0,0000	0,0005	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
Glicerol	0,0000	0,0000	0,0074	0,0074	0,0000	0,0079	0,0075
H ₂	0,0000	0,0000	0,0001	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
H ₂ SO ₄	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
Levedura	0,0000	0,0000	0,0062	0,0062	0,0000	0,0067	0,0000
CO ₂	0,0000	0,0000	0,1057	0,1057	0,9531	0,0460	0,0461

Após a obtenção do vinho, este foi direcionado para os processos de destilação com o propósito de produzir bioetanol hidratado. A Figura 3 ilustra os resultados obtidos durante as análises de sensibilidade realizadas para o fluxograma apresentado na Figura 2. Nessas análises, foram destacadas as vazões de vapor e de etanol para as colunas A e B, respectivamente.

Com base nos ajustes efetuados a partir dos dados obtidos nas análises de sensibilidade, foi possível alcançar a produção de etanol hidratado com concentrações de 92,5% e 94,6% em massa, de acordo com as especificações da legislação vigente, na coluna B. Na coluna A1, obteve-se etanol de segunda com uma fração mássica de 92,3% em massa.

Esses resultados demonstram a eficácia dos ajustes realizados no processo de destilação e fornecem uma visão detalhada das performances das colunas no sistema de destilação estudado, refletindo a importância das análises de sensibilidade para a otimização dos parâmetros operacionais e a obtenção de produtos com as características desejadas.

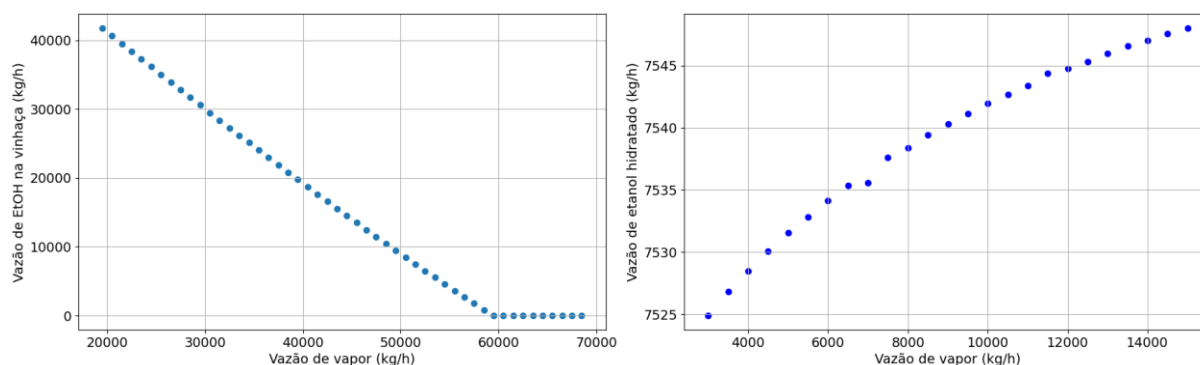


Figura 3 - Análise de sensibilidade para ajuste da vazão de vapor da coluna-A.

Conclusões

Este estudo teve como objetivo simular o processo de produção de bioetanol hidratado a partir da cana-de-açúcar utilizando o software Aspen Plus. A simulação foi desenvolvida para replicar as principais fases do processo, incluindo limpeza, moagem, tratamento do caldo, fermentação e destilação.

Os resultados da simulação mostraram que as etapas de limpeza e moagem foram realizadas com sucesso, resultando na obtenção de um caldo com concentração adequada para a fermentação. A simulação da fermentação produziu um vinho com concentração de etanol de 10,86%, o que está dentro da faixa de 4°GL a 12°GL frequentemente encontrada em destilarias brasileiras.

Na etapa de destilação, foram realizadas análises de sensibilidade para ajustar as vazões de vapor e otimizar o processo. A partir desses ajustes, foi possível obter etanol hidratado com concentrações de 92,5% e 94,6% em massa na coluna de destilação B, atendendo assim às especificações regulamentares. Na coluna A1, o etanol de segunda apresentou uma fração mássica de 92,3% em massa.

Esses resultados confirmam a eficácia da simulação em reproduzir com adequada precisão o processo de produção de bioetanol, demonstrando a capacidade do modelo em prever e otimizar as condições operacionais para a obtenção de produtos com as características desejadas. A simulação forneceu *insights* valiosos sobre o desempenho das unidades de destilação e a eficiência do processo, validando a importância das ferramentas de modelagem e simulação para a melhoria contínua e inovação na produção de bioetanol.

Agradecimentos

Os autores agradecem o apoio financeiro da CAPES, do CNPq e do Programa de Formação de Recursos Humanos da Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis – PRH-ANP/FINEP via PRH 48.1/UFPE (Processo ANP N°48610.201019/2019-38), suportado com recursos provenientes do

investimento de empresas petrolíferas qualificadas na Cláusula de P, D&I da Resolução ANP N° 50/2015.

Referências Bibliográficas

ALBUQUERQUE, A. A.; NG, F. T. T.; DANIELSKI, L.; STRAGEVITCH, L. Phase equilibrium modeling in biodiesel production by reactive distillation. **Fuel**, v. 271, p. 117688, 2020.

ALBUQUERQUE, A. A.; NG, F. T. T.; DANIELSKI, L.; STRAGEVITCH, L. Reactive separation processes applied to biodiesel production from residual oils and fats: Design, optimization and techno-economic assessment of routes using solid catalysts. **Energy**, v. 240, p. 122784, 2022.

BAEYENS, J.; KANG, Q.; APPELS, L.; DEWIL, R.; LV, Y.; TAN, T. Challenges and opportunities in improving the production of bio-ethanol. **Progress in Energy and Combustion Science**, v. 47, p. 60–88, 2015.

CARLSON, E. C. Don't Gamble With Physical Properties For Simulations. **Chemical Engineering Progress**, v. 92, p. 35–46, 1996.

DIAS, M. O. S. 2008. **Simulação do processo de produção de etanol a partir do açúcar e do bagaço, visando a integração do processo e a maximização da produção de energia e excedentes do bagaço**. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química). Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP), Campinas.

OLIVEIRA, L. 2022. **Produção integrada de etanol de cana-de-açúcar e milho em usinas flex: Simulação e análise técnico-econômica e ambiental**. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química). Universidade Federal de São Carlos (UFSCAR), São Carlos.

SANTOS, M. C. et al. Alternative distillation configurations for bioethanol purification: Simulation, optimization and techno-economic assessment. **Chemical Engineering Research and Design**, v. 185, p. 130–145, set. 2022.