

UNIVERSIDADE FEDERAL DA PARAÍBA

CENTRO DE CIÊNCIAS E TECNOLOGIA

CURSO DE MESTRADO EM ENGENHARIA QUÍMICA

SIMULAÇÃO DE MODELOS PARA PRODUÇÃO DE ETANOL ANIDRO VIA

DESTILAÇÃO EXTRATIVA

ROMILDO PEREIRA BRITO

Campina Grande - Paraíba

Julho de 1992

ROMILDO PEREIRA BRITO

SIMULAÇÃO DE MODELOS PARA PRODUÇÃO DE ETANOL ANIDRO VIA
DESTILAÇÃO EXTRATIVA

Dissertação apresentada ao curso de
mestrado em Engenharia Química da
Universidade Federal da Paraíba, em
cumprimento às exigências para a
obtenção do grau de mestre

ÁREA DE CONCENTRAÇÃO: Operações e Processos

PROFESSOR ORIENTADOR: Michel F. Fossy

PROFESSOR CO-ORIENTADOR: Kepler B. França

Campina Grande

1992



B862s Brito, Romildo Pereira
Simulacao de modelos para producao de etanol anidro via
destilacao extrativa / Romildo Pereira Brito. - Campina
Grande, 1992.
61 f. : il.

Dissertacao (Mestrado em Engenharia Quimica) -
Universidade Federal da Paraiba, Centro de Ciencias e
Tecnologia.

1. Etanol - 2. Etanol Anidro - I. Fossy, Michel
Francois, Dr. II. Franca, Kepler Borges, Dr. III.
Universidade Federal da Paraiba - Campina Grande (PB) IV.
Título

CDU 661.722(043)

SIMULAÇÃO DE MODELOS PARA PRODUÇÃO DE ETANOL ANIDRO VIA
DESTILAÇÃO EXTRATIVA

ROMILDO PEREIRA BRITO

DISSERTAÇÃO APROVADA EM 10.07.92


MICHEL FRANÇOIS FOSSY

Orientador


KEPLER BORGES FRANÇA

Co-orientador


ODELSIA LEONOR SANCHEZ DE ALSINA

Componente de banca


JOSE DUARTE ROCHA

Componente de banca

Campina Grande

Julho/92

DEDICATORIA

A Ademar Eloi de Brito e Maria Mirtes Pereira Brito, meus pais.

A Núbia Silva Dantas, minha esposa, e a Romildo Dantas Brito e Karoline Dantas Brito, meus filhos.

AGRADECIMENTOS

Aos professores Dr. Michel François Fossy e Dr. Kepler Borges França, não só pela orientação no planejamento do presente trabalho, mas também por terem acreditado desde o início na possibilidade de sua realização.

Ao professor Altair Marques da Silva, pela amizade, companheirismo e principalmente pelo fato de ter sido o responsável pelo meu retorno às pesquisas da Engenharia Química.

A Alclor Química de Alagoas, na pessoa do Dr. Francisco Ermi Ferrari, por ter me dado a oportunidade de conhecer o CHEMCAD II, instrumento este de importância fundamental no desenvolvimento do presente trabalho.

Aos pais da minha esposa pelo apoio e constante incentivo.

A coordenação do curso de Pós-graduação em Engenharia Química, nas pessoas de Maria José B. Cavalcanti e Maricé P. da Silva pela colaboração prestada no decorrer do curso.

A todas as pessoas que participaram comigo desta caminhada.

ABSTRACT

In this work a simulation study was carried out in order to obtain some parameters from a model to anhydrous ethanol production by extractive distillation. Reflux rate, stage number, solvent rate and others were studied.

With objective to study competitive level, azeotropic and low pressure distillation methods data from literature were compared with simulate result.

The simulate results shown consistency when was compared with these one, prevail the method UNIFAC with was used to calculate the vapour-liquid equilibrium. The extractive distillation method used the ethylene glycol as extractant shown as efficient method to obtain the ethanol anhydrous in terms of energy consumption and operation.

RESUMO

O presente trabalho visa, através de simulação, determinar os parâmetros de um modelo para produção de etanol anidro via destilação extrativa. Foram estudadas as seguintes variáveis; razão de refluxo, número de estágios, taxa de solvente e outros. Os resultados obtidos foram comparados com os dados apresentados na literatura, com o objetivo de estudar o nível de competitividade com outros métodos de destilação: azeotrópica e à pressão reduzida.

As simulações mostraram resultados de grande consistência quando comparados aos dados encontrados na literatura, principalmente quanto ao método UNIFAC, utilizado para cálculo do equilíbrio líquido-vapor. Em relação ao processo, a destilação extrativa utilizando o etileno glicol como agente de extração, destaca-se como um método eficiente para obtenção do etanol anidro com baixo consumo energético, principalmente quando é utilizado a integração térmica entre as correntes de processo, e apresentar uma forma simples de operação.

SIMBOLOGIA

- P - Pressão, Atm
- Cn - Coluna de destilação
- D - Decantador
- y - Fração molar na fase vapor
- x - Fração molar na fase líquida
- Po - Pressão de vapor, Atm
- T - temperatura, C
- Coeficiente de atividade
- R' - Parâmetro de volume para o UNIFAC
- Q' - Parâmetro de superfície para o UNIFAC
- N - Número de estágios
- S - Vazão de solvente, Kg/H
- E - Vazão de etanol na alimentação "fresh", Kg/H
- S/E - Taxa de solvente (Razão entre S e E)
- R - Razão de refluxo
- F1 - Alimentação "fresh", Kg/H
- F2 - Alimentação de solvente, Kg/H
- ai,j - Parâmetro de interação entre os grupos principais, K
- Q - Consumo energético, Kj/Kg de etanol anidro

ÍNDICE

CAPITULO I - INTRODUÇÃO	01
CAPITULO II - REVISAO BIBLIOGRAFICA	03
2.1 - AZEOTROPIA: FUNDAMENTOS TEORICOS	03
2.2 - METODOS USUAIS DE SEPARAÇÃO	04
2.2.1 - Destilação à pressão reduzida	04
2.2.1.1 - Fluxograma geral para destilação à pressão reduzida	05
2.2.2 - Destilação azeotrópica	06
2.2.1 - Fluxograma geral para destilação aze- otrópica	07
2.2.3 - Destilação extrativa	10
2.2.3.1 - Fluxograma geral para destilação extrativa	11
CAPITULO III - MATERIAIS E METODOS	14
3.1 - MATERIAL UTILIZADO	14
3.2 - METODOS UTILIZADOS	14
3.2.1 - Cálculos relativos a coluna de desti- lação	14
3.2.1.1 - Coluna de extração	16
3.2.1.2 - Coluna de recuperação	17
3.2.2 - Cálculo das frações vaporizadas	18
3.2.3 - Cálculo do equilíbrio de fases	20
CAPITULO IV - RESULTADOS E DISCUSSOES	24
4.1 - COLUNA DE EXTRAÇÃO	24
4.1.1 - Real versus teórico: comparativo	24
4.1.1.1 - Perfil de concentração	24

4.1.1.2 - Perfil de temperatura	27
4.1.2 - Parâmetros estudados	29
4.1.2.1 - Taxa de solvente (S/E)	29
4.1.2.2 - Razão de refluxo	29
4.1.2.3 - Prato de alimentação do solvente	31
4.1.2.4 - Prato de alimentação "fresh"	34
4.1.2.5 - Fração de vapor na alimentação "fresh"	34
4.1.2.6 - Temperatura do solvente	35
4.1.2.7 - Número de estágios	37
4.1.2.8 - Pureza do solvente	38
4.1.2.9 - Concentração da alimentação "fresh"	40
4.1.3 - Consumo energético	40
4.2 - COLUNA DE RECUPERAÇÃO	44
4.3 - MODELOS FISICOS PROPOSTOS	45
4.3.1 - Modelo padrão	46
4.3.2 - Modelos com integração térmica	48
CAPITULO V - CONCLUSOES	56
CAPITULO VI - SUGESTOES PARA PESQUISAS FUTURAS	57
REFERENCIAS BIBLIOGRAFICAS	58

1 - INTRODUÇÃO

A simulação é hoje uma das grandes aliadas da área científica. Nada mais conveniente e seguro do que analisar o comportamento de uma unidade industrial, diante de uma alteração no processo, sem no entanto submeter esta unidade a uma modificação prática. Da mesma forma, é muito mais sensato projetar um sistema utilizando computação, visto a grande rapidez e precisão nos resultados. É claro que a consistência dos resultados irá depender muito dos métodos de cálculo escolhidos pelo engenheiro.

O etanol industrial é obtido atualmente por dois processos: via fermentativa, a partir de matérias primas que contenham açúcares; e por hidratação catalítica do etileno. Em qualquer dos processos o produto obtido é uma mistura de etanol e água, que só pode ser separada por destilação simples até uma concentração de 96% em peso de etanol. Isto ocorre devido a formação de um azeótropo nesta concentração.

O método normalmente empregado nas destilarias nacionais para obtenção do etanol anidro é a destilação azeotrópica utilizando o benzeno como agente de arraste. Entretanto, este processo apresenta alguns inconvenientes, dentre os quais podemos citar a complexidade operacional, a exigência de um apurado controle de processo e a utilização de um produto cancerígeno.

Outro método empregado na obtenção do etanol anidro é a destilação à pressão reduzida. Porém, este método apresenta um elevado consumo energético, além dos equipamentos utilizados serem de grandes dimensões. A destilação extrativa é um método

também usado para a produção de etanol anidro. Entretanto este método tem sido considerado muito desfavorável devido ao elevado consumo energético.

Operando um sistema de modo que o condensador de uma corrente do processo seja o pré-aquecedor de outra, é um método conhecido de conservação de energia. Da mesma forma, introduzindo a alimentação de uma coluna como vapor, ao invés de líquido, conserva-se energia. Combinando estes dois conceitos com a finalidade de alcançar um sistema em que o produto final satisfaça as condições de mercado com um custo energético competitivo, várias simulações foram realizadas utilizando o simulador de processo CHEMCAD II. O equilíbrio líquido-vapor foi calculado a partir do método UNIFAC.

A escolha do sistema etanol-água , deve-se à grande importância para o país, em especial para a nossa região onde é grande o número de destilarias. O máximo conteúdo de água permitido no produto final depende das condições climáticas do país. No Brasil, este valor corresponde a uma mistura com 99.4% em peso de etanol. Neste trabalho a pureza do etanol foi fixada em 99.9% em peso.

2 - REVISÃO BIBLIOGRAFICA

2.1 - AZEOTROPIA : FUNDAMENTOS TEORICOS

Segundo Perry e Chilton (1980), azeótropo é uma mistura líquida que tem um ponto de ebulição máximo ou mínimo em relação aos pontos de ebulição das misturas com composições na vizinhança da sua. A ocorrência de temperaturas máximas ou mínimas é provocada por desvios negativos ou positivos, respectivamente, em relação à lei de Raoult. Entretanto, o desvio em relação à lei de Raoult não é suficiente para provocar a ocorrência de um azeótropo. Os pontos de ebulição devem estar próximos o suficiente para que haja a possibilidade de ocorrência de uma temperatura máxima ou mínima. Componentes com pontos de ebulições próximos, com pequenos desvios em relação à idealidade, podem formar azeótropos, enquanto outros compostos, que formam soluções muito pouco ideais, não podem apresentar azeotropismo em virtude da grande diferença entre os seus pontos de ebulição.

Dois tipos de azeótropos são comuns: homogêneo e heterogêneo. Em um azeótropo homogêneo somente uma fase líquida está em equilíbrio com a fase vapor. Um exemplo é o sistema formado pelo etanol e a água. Um azeótropo é heterogêneo quando duas ou mais fases líquidas, de líquidos parcialmente miscíveis, estão em equilíbrio com a fase vapor. Um bom exemplo é o sistema benzeno-água, no qual a água e o benzeno formam duas fases líquidas e uma fase vapor. Uma fase líquida é rica em água e a outra rica em benzeno.

Uma vez que os vapores produzidos a partir destes sistemas

apresentam a mesma composição do líquido inicial, a separação dos componentes constituintes do azeótropo é impossível de ser realizada por destilação simples, a não ser que se empregue algum meio especial para desviar o azeótropo.

2.2 - MÉTODOS USUAIS DE SEPARAÇÃO

2.2.1 - DESTILAÇÃO A PRESSÃO REDUZIDA

O fato da composição dos azeótropos variar em função da pressão, sugere que este seja um dos caminhos para promover a separação. No caso do sistema etanol-água, a composição do azeótropo, segundo Coates (1960), varia com a pressão de acordo com a Tabela 01.

P, em mmHg	Água no azeótropo, % em peso
14523.6	7.88
1451.3	4.75
1075.4	4.65
760.0	4.40
404.6	3.75
198.4	2.70
129.7	1.30
94.9	0.50
70.0	0.00

Tabela 01 - Efeito da Pressão sobre a Concentração do azeótropo Etanol-Água.

2.2.1.1 - FLUXOGRAMA GERAL PARA DESTILAÇÃO A PRESSÃO REDUZIDA

Neste caso o sistema é constituído apenas de uma coluna de destilação como mostra a Figura 01.

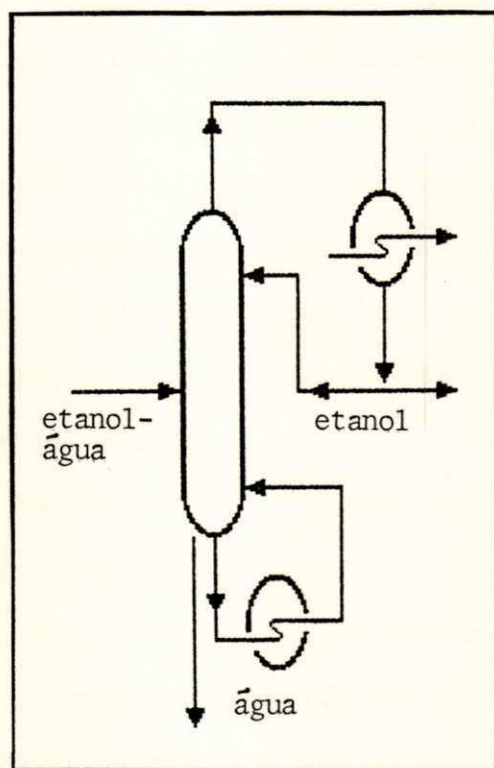


Figura 01 - Fluxograma geral para destilação à pressão reduzida.

De acordo com Black (1980), a viabilidade econômica deste processo é praticamente descartada devido às condições de projeto e processo. A coluna teria 60 estágios teóricos e um consumo energético de 5408 KJ/Kg de etanol, a uma concentração de 97.99% em peso.

Ainda segundo o mesmo autor, com 60 estágios teóricos, a

coluna real teria uma altura excessivamente elevada , associada ao fato de que as vazões internas, de líquido e de vapor, também bastante elevadas, exigiriam assim um alto valor para o diâmetro da coluna.

2.2.2 - DESTILAÇÃO AZEOTRÓPICA

Segundo Foust (1982), a destilação azeotrópica refere-se aos processos em que um componente externo é adicionado ao sistema com a finalidade de formar um novo azeótropo com um dos componentes iniciais. Este novo azeótropo é removido seja como produto de fundo, seja como produto de topo, dependendo do tipo do novo azeótropo que se forme: de máximo ou de mínimo. O componente que se adiciona é chamado de solvente ou agente de arraste. Normalmente este componente é adicionado na parte superior da coluna.

Vários métodos de seleção de solvente podem ser encontrados na literatura. Segundo Stichlmair e Fair (1989) o seguinte critério pode ser utilizado:

- 1) Para separar azeótropos de máximo
 - a - O solvente deve ter um alto ponto de ebulição ou;
 - b - Formar um novo azeótropo de máximo

- 2) Para separar azeótropos de mínimo
 - a - O solvente deve ter um baixo ponto de ebulição ou;
 - b - Formar um novo azeótropo de mínimo.

A separação de misturas azeotrópicas somente foi possível a

partir de 1902 quando o professor Sidney Young, citado por Guinnot e Clark (1938), conseguiu obter etanol anidro utilizando benzeno como agente de arraste num processo descontínuo.

Em 1923 Backus, Keyes e Stevens nos E.U.A. citado por Guinnot (1938), e Guinnot (1938) na França, desenvolveram, simultâneamente um processo contínuo para a produção de etanol anidro. Este foi o ponto de partida para utilização da destilação azeotrópica como um processo comercial.

2.2.2.1 - FLUXOGRAMA GERAL PARA DESTILAÇÃO AZEOTRÓPICA

O fluxograma para a destilação azeotrópica é mostrado na Figura 02. Pode-se observar a existência, entre as colunas de destilação, de um decantador (D) para separar as fase em equilíbrio. A presença deste decantador deve-se ao fato da principal exigência da destilação azeotrópica: o sistema em questão deve ser um azeótropo heterogêneo.

Quando o benzeno é utilizado, Guinnot (1938), como agente de arraste, há a formação do azeótropo ternário água-etanol-benzeno. O azeótropo ternário passa na cabeça da primeira coluna (C1), chamada de coluna azeotrópica, e o álcool anidro é obtido como produto de fundo. Os vapores de topo são condensados e vão para o decantador (D) onde se formam duas camadas líquidas. A camada superior é rica em benzeno e retorna à coluna azeotrópica como refluxo; a camada inferior é injetada na segunda coluna (C2) onde se recolhe o azeótropo ternário como produto de topo e uma mistura álcool-água, livre de benzeno, como resíduo de fundo. Este último produto é injetado na terceira coluna (C3), onde se

obtem, por destilação comum, um destilado de 96% em peso de álcool e um resíduo constituído por água quase pura. O volátil da terceira coluna (C3) é reciclado para a coluna azeotrópica (C1) para a remoção da água.

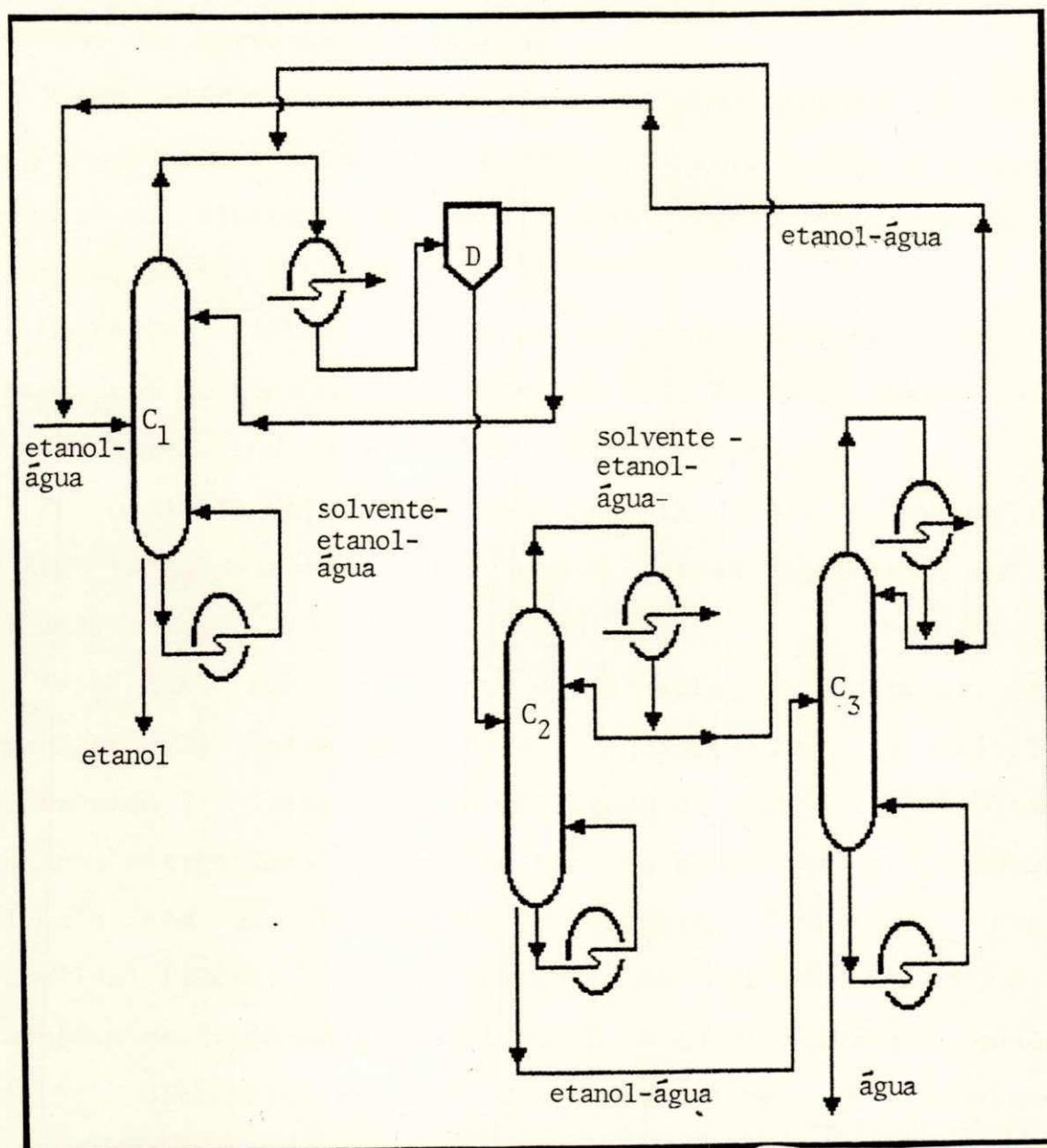


Figura 02 - Fluxograma geral para destilação azeotrópica.

Nesta situação, característica da maioria das destilarias

nacionais, o consumo energético é de 3563 KJ/Kg de etanol anidro, segundo Othmer e Wentworth (1940).

Outros líquidos podem ser utilizados como agente de arraste na produção de etanol anidro, tais como: ciclohexano, dietil éter e pentano. O modelo físico pode até variar, mas o princípio de operação são bastante semelhantes.

Black (1982) utilizando o pentano como agente de arraste chegou ao valor de 2619 KJ/Kg de etanol anidro, com o número de colunas do sistema reduzido a dois. Neste processo o novo azeótropo também é ternário.

Meirelles (1989) propôs o uso de ciclohexano como agente de arraste com um consumo específico de 3191 KJ/Kg de etanol anidro, com um sistema onde o número de colunas também era dois.

Com o dietil éter, Othmer e Wentworth (1940), o consumo ficou em 4690 KJ/Kg de etanol anidro com o sistema constituído de duas colunas.

Seja qual for o agente de arraste, a presença de um separador (D) entre as colunas é indispensável na destilação azeotrópica. O separador é utilizado de modo a minimizar o consumo energético, já que se tem uma separação preliminar do solvente sem que haja gasto de energia. Entretanto, segundo Meirelles (1988), o condensador e as colunas (C1, C2 e C3) encontram-se fortemente interligadas, o que implica que qualquer pequeno distúrbio em uma das suas partes é diretamente transmitido às outras por meio das correntes que estabelecem esta conexão. Além disto, o refluxo da coluna principal (C1) é fortemente dependente da concentração da alimentação. Por exemplo, uma variação de 0.15 a 0.17 em fração molar, exige um

aumento significativo na taxa de refluxo para garantir a concentração do produto de fundo. Assim, qualquer pequena alteração na composição da mistura azeotrópica etanol-água, obtida na unidade que antecede a instalação para desidratação, provocará perturbações nesta última. Devido às dificuldades citadas, surge a necessidade de um apurado controle de processo e que muitas vezes, segundo Prokopakis e Seider (1983), leva a uma baixa recuperação do álcool na coluna principal (C1) ou a perdas significativas do agente de arraste junto com o etanol anidro produzido.

2.2.3 - DESTILAÇÃO EXTRATIVA

A destilação extrativa, de acordo com Smith (1963), refere-se aos processos em que um solvente é adicionado ao sistema de modo a alterar as volatilidades relativas dos componentes a separar. A modificação das volatilidades é em virtude, (1) das semelhanças das pressões de vapor dos componentes da alimentação inicial ou (2) da presença de um azeótropo.

Como no caso da destilação azeotrópica, o agente de separação deverá ser não corrosivo, facilmente recuperável, não reativo e relativamente não volátil em comparação aos componentes a serem separados (1960). O solvente, em geral, ferve tão acima dos componentes do sistema que a formação de novos azeótropos é impossível. Por outro lado, quaisquer dos azeótropos perturbadores e presentes no sistema original desaparecem na presença do solvente. A ausência de azeótropos, combinada com a fácil recuperação do solvente, tornam a destilação extrativa um

processo mais simples e mais amplamente utilizado. Para alguns autores, Black (1980) e Lee e Pahl (1984), a destilação extrativa apesar de se apresentar como um método adequado à produção de etanol anidro, é considerada muito desfavorável com respeito ao consumo energético.

2.2.3.1 - FLUXOGRAMA GERAL PARA DESTILAÇÃO EXTRATIVA

A Figura 03 mostra o fluxograma geral para um processo de destilação extrativa. Alimenta-se a mistura a ser separada na primeira coluna, chamada coluna de extração (C1), da qual o componente mais afetado pela presença do solvente sai pelo topo. O solvente é alimentado próximo ao topo dessa coluna e "arrasta" o componente menos afetado para a base, de onde a mistura segue para o stripper de solvente (C2), que promove a separação.

Lee e Pahl (1984) mostraram que os glicóis em geral podem ser utilizados como agentes de arraste na produção de etanol anidro. No entanto, o etileno glicol é o que apresenta mais vantagem por alterar mais favoravelmente o equilíbrio de fases do sistema etanol-água, além de ter, em comparação a outros, ponto de ebulição relativamente baixo, 197 C à 1 ATM.

Black (1980) utilizando a equação de Van Laar modificada para prever o equilíbrio líquido-vapor do sistema etanol-água-etileno glicol, chegou a 10785 KJ/Kg de etanol anidro. Lee e Pahl (1984) questionaram este resultado em função do sistema considerado ser altamente polar. Mas apesar deste questionamento continuaram a considerar a destilação extrativa muito pouco atrativa. Lind e Grethlein (1984), com o auxílio de bombas de

calor, demonstraram que este processo pode também apresentar um consumo energético mais conveniente. A mesma conclusão foi referida por Linn e Hanson (1986), utilizando destilação extrativa com múltiplo efeito. Porém nestes estudos a alimentação inicial era muito pobre em etanol e o objetivo era a produção exclusivamente de etanol anidro.

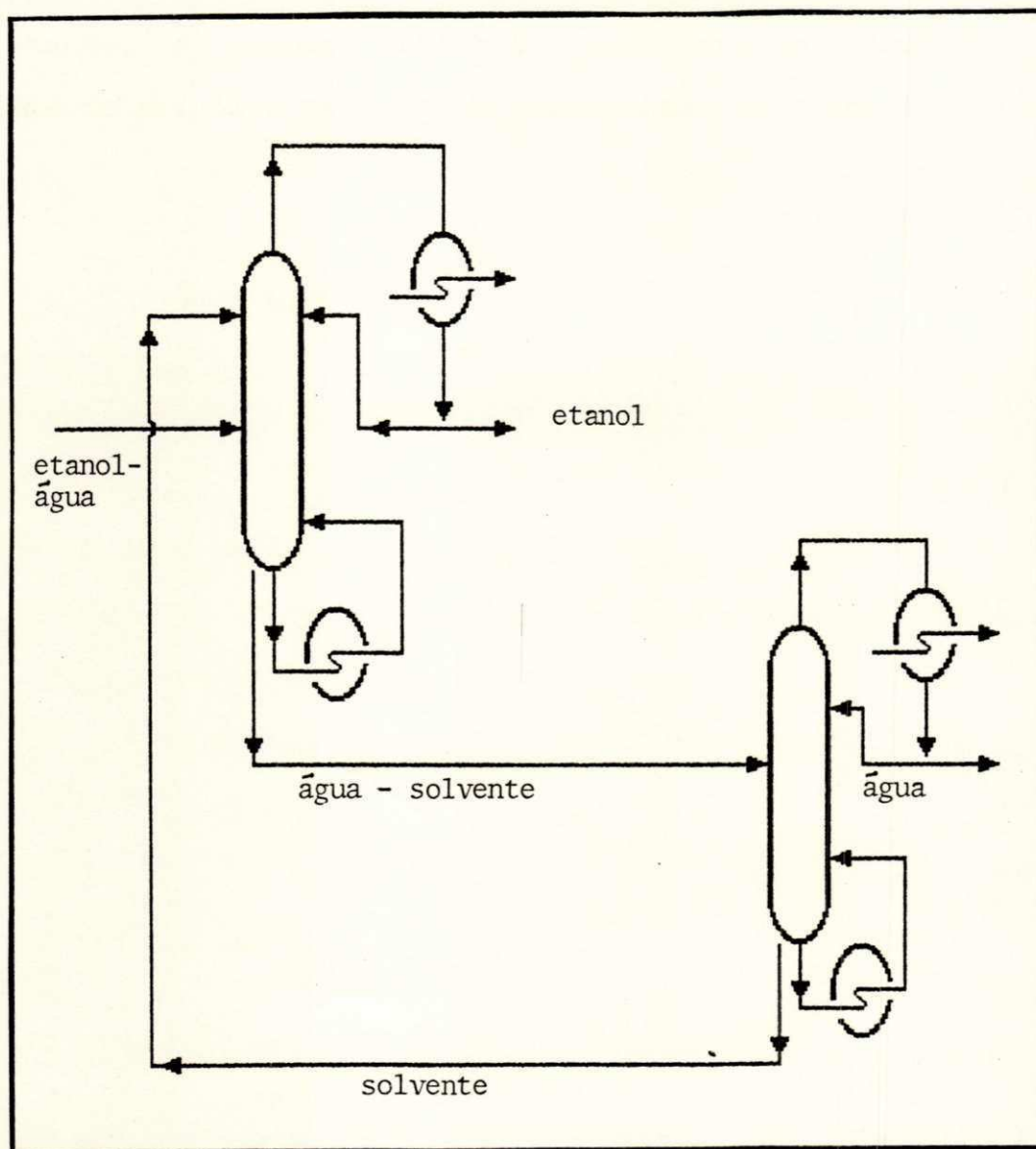


Figura 03 - Fluxograma geral para destilação extrativa.

Meirelles (1992) utilizando o método NRTL para cálculo do equilíbrio líquido-vapor, chegou a 1764 KJ/Kg de etanol a uma concentração de 99.8% em peso.

Uma outra alternativa para o agente de arraste é a gasolina (frações de petróleo). O consumo energético, segundo Scheller, citado por Leeper e Wankat (1982), é de 13771.23 KJ/Kg de etanol. Para Black (1980) este valor é de 2706 KJ/Kg de etanol. Entretanto, o produto obtido apresenta grande concentração de frações de petróleo passando a ser chamado de gasohol.

3 - MATERIAIS E MÉTODOS

3.1 - MATERIAL UTILIZADO

Para o desenvolvimento do presente trabalho, foi utilizado um simulador de processo, o CHEMCAD II - V. 2.2 desenvolvido pela Chemstation Inc.. O CHEMCAD II permite ao engenheiro calcular e projetar diversos equipamentos presentes em uma unidade industrial, inclusive todos os tipos de colunas de destilação.

O equipamento utilizado para executar o programa foi um computador tipo PC - XT com drive, winchester com 35 Mb de memória e co-processador matemático INTEL 8087.

3.2 MÉTODOS UTILIZADOS

Para a especificação de uma coluna de destilação, o CHEMCAD II utiliza um método rigoroso de cálculo, o Thiele-Geddes (1982) e a equação do UNIFAC (1975) para a descrição do equilíbrio de fases.

A sequência de cálculo dos equipamentos, colunas e trocadores, é feita de acordo com aquela determinada pelo usuário. Quando é alcançada a convergência de um equipamento, o programa automaticamente passa a executar o equipamento seguinte.

3.2.1 - CÁLCULOS RELATIVOS A COLUNA DE DESTILAÇÃO

Diversos métodos foram desenvolvidos para os cálculos estágio a estágio com as composições terminais desconhecidas. O método de

cálculo aqui utilizado está baseado no método original de Thiele-Geddes, mas foi ampliado e modificado por diversos autores. Este método exige a especificação do número de estágios de equilíbrio. O procedimento de cálculo principia com a escolha de uma razão de refluxo, fixação da pressão de operação e a estimativa de um perfil de temperatura ao longo da coluna. O perfil de temperatura é determinado pelo ponto de ebulição do líquido em cada estágio da coluna. Entretanto, o ponto de ebulição é dependente da composição do líquido que ainda não é conhecida. Por esta razão, é necessário admitir um perfil de temperatura inicial e depois calcular as composições e finalmente calcular um novo perfil de temperatura. Este novo perfil é usado, outra vez, para calcular as composições: o procedimento repete-se até que não ocorram modificações de temperatura ou de composição entre as tentativas.

O ponto de bolha do destilado deve ser mais ou menos próximo do ponto de bolha do componente mais volátil presente na alimentação "fresh"; por isso, este ponto de ebulição pode ser usado como primeira estimativa conveniente da temperatura de topo. Análogamente, o ponto de ebulição do componente menos volátil da alimentação "fresh" é mais conveniente para estimativa da temperatura de fundo. O perfil inicial de temperatura, pode ser considerado como sendo linear. Este procedimento leva a estimativas grosseiras do perfil de temperatura, mas é adequado para uma primeira tentativa; nas tentativas seguintes, ele é aperfeiçoado.

Antes do cálculo principiar, é preciso especificar de certa forma as composições terminais. É mais conveniente especificar a quantidade de destilado. Esta quantidade, juntamente com a razão

de refluxo, pressão e número de estágios, torna possível determinar as composições terminais.

Os cálculos são feitos de estágio a estágio, partindo de cada extremidade da coluna, avançando no sentido da injeção da alimentação "fresh". Vale salientar que, no caso da coluna de extração, partindo do topo para baixo, ao chegar no prato de alimentação do solvente, o balanço material irá se modificar, isto é, deve-se levar em consideração a vazão de solvente que alimenta a coluna.

Em virtude dos erros feitos nas estimativas iniciais da temperatura e das condições terminais, as composições no estágio da alimentação "fresh", calculadas a partir de cada extremidade, não coincidirão uma com a outra. E então preciso ajustar as temperaturas de estágio e repetir os cálculos até que as composições se ajustem no estágio de alimentação "fresh".

O método descrito acima é considerado rigoroso por levar em conta os balanços de entalpia no cálculo das vazões de líquido e vapor em cada estágio, para cada tentativa.

3.2.1.1 - COLUNA DE EXTRAÇÃO

No presente trabalho, a vazão de alimentação "fresh" foi fixada em 1000 Kg/h a uma concentração de 96 % em peso de etanol.

Para a coluna de extração, a vazão do destilado foi fixada em 960 Kg/h e, as temperaturas de topo e fundo estimadas em 78 C e 197 C, respectivamente, que são as temperaturas de ebulição do etanol e do etileno glicol.

Para a fixação da vazão de fundo foi necessário antes fixar a

vazão de solvente a ser utilizada na extração. A vazão de solvente variou de acordo com item apresentado no capítulo referente à Resultados e Discussões. A seguir o número de estágios, a localização das alimentações e a pressão de operação foram especificadas. De posse destes dados, o programa agora só precisava de uma razão de refluxo, de modo que pudesse estabelecer os três balanços materiais ao longo das secções da coluna: topo, intermediária e fundo; para principiar o cálculo estágio a estágio.

Vários valores foram atribuídos para a razão de refluxo, conforme será mostrado posteriormente, com o objetivo de alcançar um produto de topo com a especificação desejada. Isto por que, apesar da vazão de destilado ser conhecida, a sua composição não estava fixada.

A pressão de operação foi fixada em 1 ATM e, como não se pretendia fazer um estudo hidrodinâmico da coluna, a perda de carga ao longo desta não foi levada em consideração. Entretanto, isto não ocasiona maiores danos aos resultados obtidos uma vez que a perda de carga em uma coluna de destilação é bastante reduzida, tanto que, os diagramas de equilíbrio normalmente encontrados são construídos à pressão constante.

De acordo com o modelo em questão, o condensador de topo era especificado como sendo total ou parcial.

3.2.1.2 - COLUNA DE RECUPERAÇÃO

Para a coluna de recuperação, os procedimentos foram os mesmos que utilizou-se na coluna de extração. A vazão de

destilado foi fixada em 40 Kg/h e, as temperaturas de topo e fundo em 100 C e 197 C, respectivamente, que são as temperaturas de ebulição da água e do etileno glicol.

Devido ao fato de a temperatura de ebulição do etileno glicol ser razoavelmente elevada, foi necessário uma redução na pressão de operação desta coluna. Este procedimento, não só economiza energia como também reduz a probabilidade de degradação do produto de fundo, o que poderá causar problemas de entupimento no reboiler desta coluna.

A vazão de fundo da coluna de recuperação era fixada tomando como base a vazão de solvente utilizada na coluna de extração, valores estes que variaram conforme será descrito no próximo capítulo.

3.2.2 - CALCULO DAS FRAÇÕES VAPORIZADAS

De acordo com o modelo utilizado, era necessário a introdução de trocadores, visando o aproveitamento das calorias das correntes mais aquecidas. Estas calorias eram utilizadas para vaporizar parte de algumas correntes do processo. Vários modelos físicos foram propostos para alcançar uma diminuição do consumo de energia. Todos, variantes do modelo padrão, mostrado na Figura 21. Uma vez que não era objetivo do trabalho, os detalhes concernentes ao cálculo dos trocadores não foram levados em consideração.

O cálculo da fração vaporizada era feito, dependendo do trocador, da seguinte maneira:

1 - Aproveitamento das calorias da corrente de topo da coluna de extração.

Este trocador era utilizada para promover a vaporização parcial da alimentação "fresh", utilizando as calorias da corrente de topo da coluna de extração, etanol anidro sob a forma de vapor. Neste caso, era fixado que a corrente de topo, deveria na saída, se apresentar como um líquido saturado. Feito isto, à exceção da corrente de alimentação "fresh" na saída, todas as correntes estavam especificadas, consequentemente as suas entalpias também.

O cálculo da fração vaporizada era feito da seguinte forma:

- a - Calcular a quantidade de energia envolvida na condensação do vapor de etanol anidro.
- b - Supor uma fração vaporizada.
- c - Calcular a quantidade de calor necessária para alcançar tal fração. Este valor deve coincidir com o calculado no item 1. Caso contrário novo valor para a fração vaporizada é suposto.

2 - Aproveitamento das calorias da corrente de topo da coluna de recuperação.

Este trocador era utilizado para completar a vaporização da corrente de alimentação "fresh", aproveitando as calorias da corrente de topo da coluna de recuperação. O procedimento era exatamente o mesmo ao utilizado no aproveitamento das calorias da corrente de topo da coluna de extração.

3 - Aproveitamento das calorias da corrente de fundo da coluna de recuperação.

Neste caso, a condição requerida para os cálculos é que a corrente "fresh", parcialmente vaporizada, após passagem pelo trocador, deve obrigatoriamente estar sob a forma de vapor.

Nesta situação, a fração de vapor a ser vaporizada é conhecida, uma vez que é só fazer a diferença entre o valor final, 100 % vapor, e o valor inicial. A variável a ser calculada é a temperatura final da corrente de etileno glicol, fundo da coluna de recuperação. O programa calcula esta temperatura da seguinte forma:

- a - Calcular a quantidade de energia envolvida para completar a vaporização da alimentação "fresh".
- b - Supor uma temperatura final para a corrente de etileno glicol.
- c - Calcular a energia envolvida na variação de temperatura do etileno glicol. Este valor deve ser igual ao calculado no item 1. Caso contrário, novo valor para a temperatura é suposto.

3.2.3 - CÁLCULOS DO EQUILÍBRIO DE FASES

Para o projeto preciso de uma coluna de destilação, são indispensáveis dados termodinâmicos de boa qualidade sobre o equilíbrio líquido-vapor. Muitas vezes, estes dados podem ser diretamente medidos, porém, mesmo com sistemas binários, são difíceis e se tornam crescentemente tediosos à medida que o número de componentes aumenta.

O tratamento do equilíbrio líquido-vapor seria simples se todos os sistemas obedecessem à lei de Raout, o que não é o caso do sistema do presente trabalho, pois, nestas circunstâncias, não seria necessária qualquer informação a respeito das misturas contituíntes das fases. O fracasso da lei de Raout se deve, fundamentalmente, às diferenças entre as dimensões das moléculas e às interações entre as moléculas dos componentes. Estas considerações não são usualmente importantes em relação à fase vapor a baixa pressão. Devido às considerações acima, a lei de Raout deve ser modificada, aparecendo o termo que leva em conta os desvios da fase líquida:

$$y = \frac{x \cdot P_o \cdot \gamma}{P} \quad [1] \quad \text{onde:}$$

x - fração molar da fase líquida do componente i

y - fração molar da fase vapor do componente i

P_o - Pressão de vapor do componente i

P - pressão total

γ - coeficiente de atividade do componente i

Vários métodos podem ser utilizados para cálculo de . No presente trabalho optou-se por um método que leva em consideração as contribuições dos grupos das moléculas constituintes do sistema, o UNIFAC. No método UNIFAC, o coeficiente de atividade é separado em duas partes: uma parte para as contribuições devido às diferenças de tamanho das moléculas, e a outra para as contribuições devido às interações entre as

moléculas. A equação do UNIFAC é:

$$\ln \gamma_i = \ln \gamma_{ic} + \ln \gamma_{ir} \quad [2]$$

O c quer dizer combinatorial e o r residual. A parte combinatorial leva em consideração o tamanho das moléculas. Desta forma, é necessário o conhecimento dos parâmetros de volume e área superficial para cada grupo constituinte das moléculas. Neste trabalho, estes dados forma extraídos de tabelas do Reid (1988).

Comp.(i)	Nome	Gr. princ.	Gr. sec.	R'	Q'
Etanol(1)	CH ₃	1	1	0.9011	0.8480
	CH ₂	1	2	0.6744	0.5400
	OH	5	15	1.0000	1.2000
Água(2)	H ₂ O	7	17	0.9200	1.4000
Et. Gl.(3)	(CH ₂ OH) ₂	31	63	2.4088	2.2480

Tabela 02 - Parâmetros de superfície (Q') e volume (R') para o UNIFAC.

A parte residual leva em consideração as interações energéticas entre os grupos principais das moléculas. Estes valores também foram tirados do Reid (1988).

$a_{1,5} = 986.5$	$a_{1,31} = 3025.0$	$a_{5,31} = -318.9$
$a_{5,1} = 156.4$	$a_{31,1} = 140.0$	$a_{31,5} = 267.6$
$a_{1,7} = 1318.0$	$a_{5,7} = 353.5$	$a_{7,31} = 13.53$
$a_{7,1} = 300.0$	$a_{7,5} = -229.1$	$a_{31,7} = -142.1$

Tabela 03 - Parâmetros de interação energética entre os grupos principais, temperatura em K.

Vale salientar que os parâmetros de interação entre grupos principais iguais são nulos.

4 - RESULTADOS E DISCUSSÕES

4.1 - COLUNA DE EXTRAÇÃO

Para determinar qual a melhor condição de operação da coluna principal, a de extração, vários parâmetros foram analisados bem como a influência destes no consumo energético, conforme será mostrado a seguir. Antes porém, foi feito um comparativo entre os resultados apresentados pelo programa e os dados encontrados na literatura.

4.1.1 - REAL VERSUS TEÓRICO: COMPARATIVO

4.1.1.1 - PERFIL DE CONCENTRAÇÃO

Para verificar a consistência dos resultados apresentados pelo programa, foi feito um comparativo entre estes e os dados encontrados na literatura.

De acordo com o trabalho de Meirelles (1989), o perfil de concentração, para uma coluna de planta piloto contendo 60 estágios reais, tem a forma da Figura 04. O perfil mostrado pelo programa, tendo como base de cálculo do equilíbrio líquido-vapor o método UNIFAC (1975), se apresenta conforme a Figura 05. Pode-se observar uma boa concordância entre os dois resultados. Isto indica que o método UNIFAC (1975) se mostra bastante eficiente nos cálculos do equilíbrio líquido-vapor do sistema etanol-água-etileno glicol.

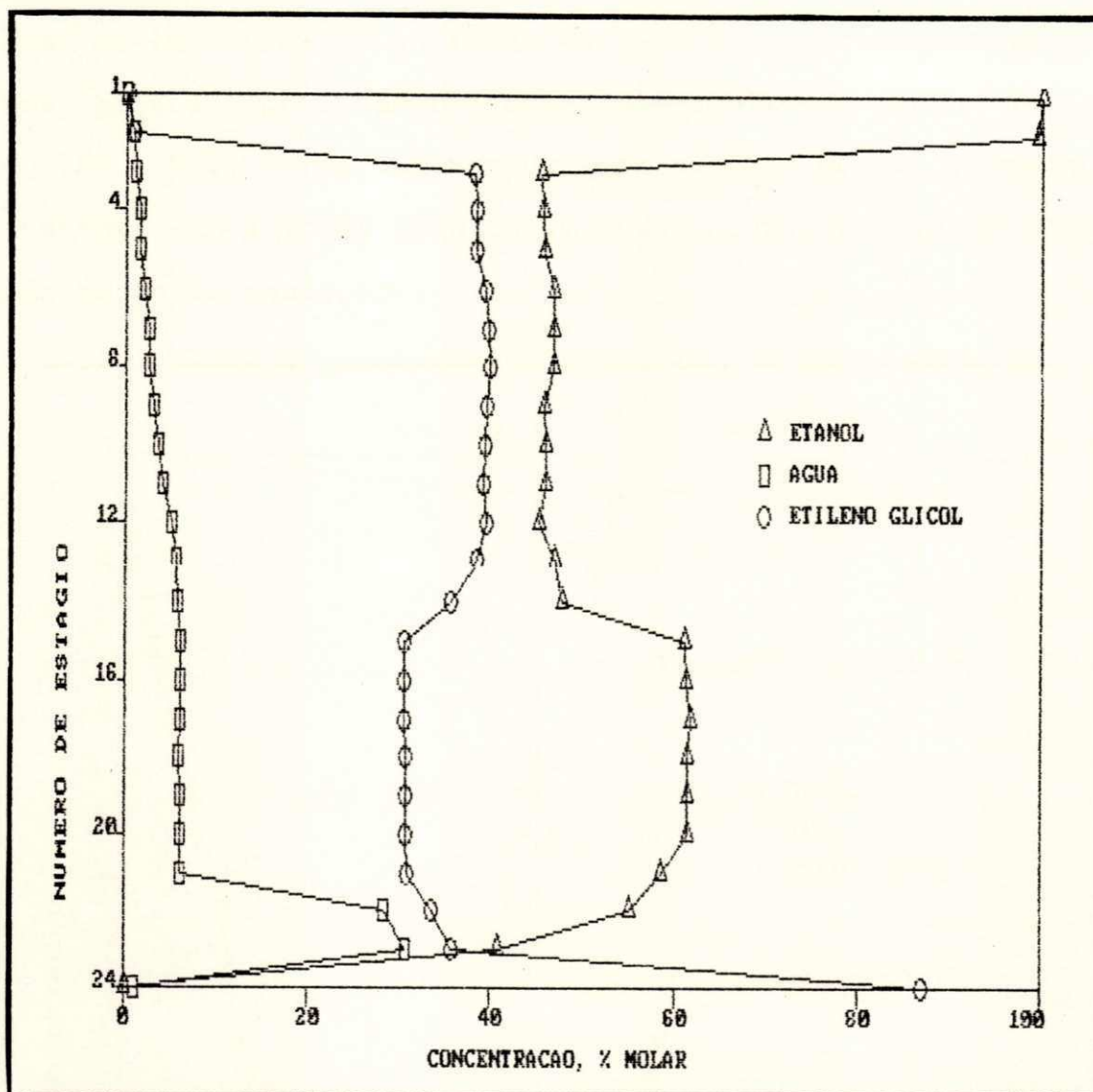


Figura 04 - Perfil de concentração real do sistema etanol-água-etileno glicol

A concentração do etanol sofre variações acentuadas no prato de alimentação do solvente, devido ao aumento da concentração deste último; bem como uma modificação menos acentuada no prato de alimentação "fresh", em consequência do aumento da vazão de etanol. A partir do prato de alimentação "fresh", a concentração tem uma queda suave na direção do fundo da coluna. Já a água tem

um aumento gradativo desde concentrações muito baixas no topo, com um máximo próximo ao fundo da coluna. A concentração de etileno glicol é praticamente constante abaixo do ponto de sua introdução. Este comportamento deve-se ao fato deste permanecer praticamente sob a forma líquida em toda coluna, por causa do seu elevado ponto de ebulição.

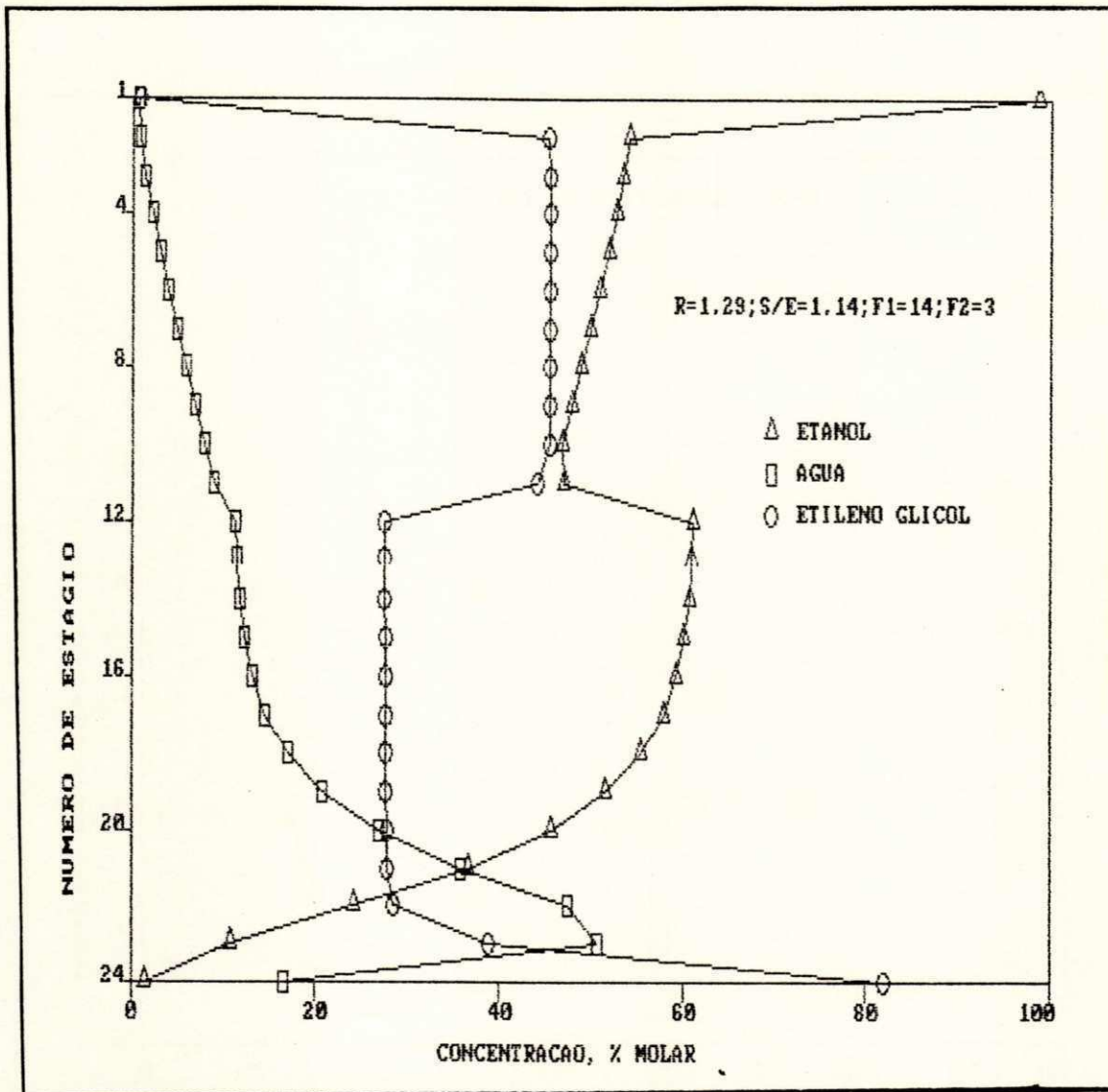


Figura 05 : Perfil de concentração teórico do sistema etanol-água-etileno glicol.

Os valores das concentrações de cada componente depende da

taxa de solvente S/E e da razão de refluxo R. Entretanto, a forma do perfil será sempre a das Figuras 04 e 05.

4.1.1.2 - PERFIL DE TEMPERATURA

Os perfis de temperatura obtidos, apresentam comportamento distinto em relação às colunas de destilação comum.

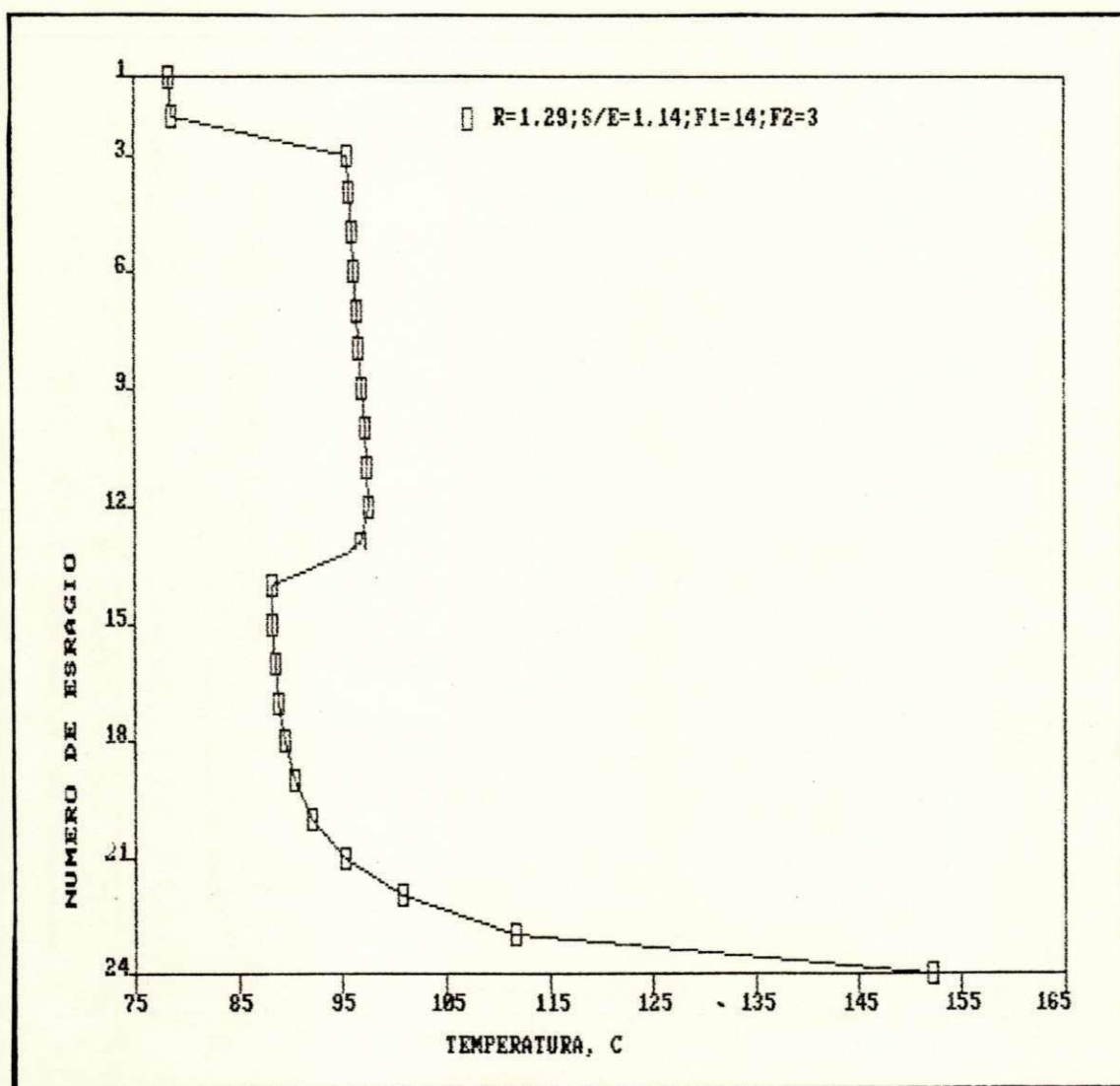


Figura 06 - Perfil de temperatura teórico do sistema etanol-água-etileno glicol.

No estágio de número três, onde é introduzido o solvente, há um súbito aumento de temperatura, a qual permanece praticamente constante até o estágio de número quatorze; localização da alimentação "fresh". A partir deste ponto a temperatura diminui para em seguida aumentar novamente.

Este comportamento, mostrado na Figura 06, é provocado pela maior concentração de solvente nestas regiões, uma vez que à pressão constante a temperatura é função apenas da concentração.

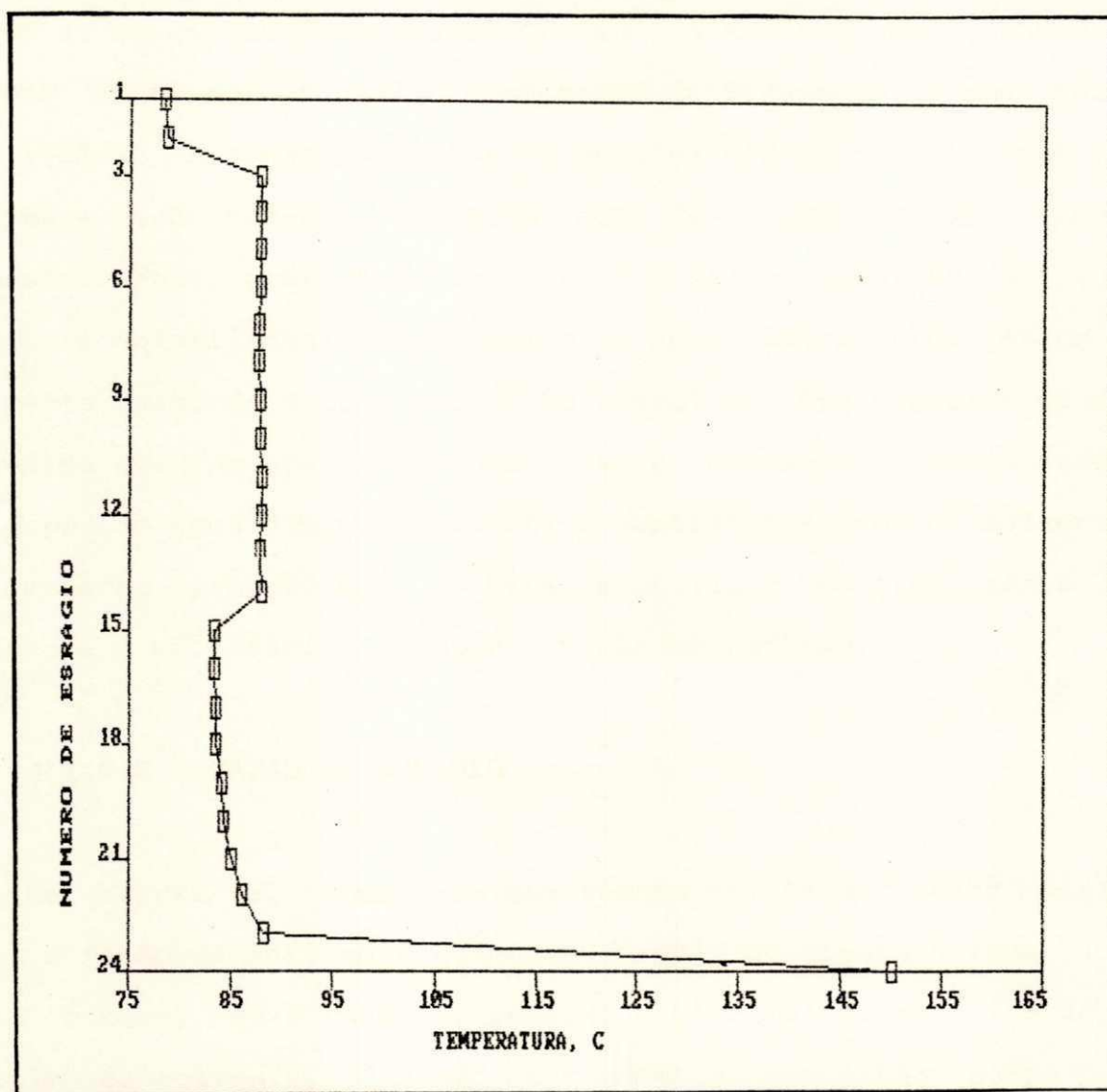


Figura 07 - Perfil de temperatura real do sistema etanol-água-etileno glicol.

Resultados semelhantes foram encontrados por Meirelles (1989), conforme mostra a Figura 07.

4.1.2 - PARAMETROS ESTUDADOS

4.1.2.1 - TAXA DE SOLVENTE (S/E)

A taxa de solvente representa a vazão de solvente sobre a vazão de etanol na alimentação "fresh". A sua influência sobre a pureza do etanol produzido é mostrado na Figura 08. A uma razão de refluxo R constante, observa-se que à medida que a taxa de solvente S/E aumenta, a concentração do etanol no topo também aumenta. Este comportamento deve-se a maior ação do solvente sobre as volatilidades do etanol e da água. Entretanto, atingido um certo valor de S/E , a pureza do etanol no topo começa a decair à medida que aumenta a taxa S/E . Isto é, enquanto a contaminação do topo com água diminui, aumenta a contaminação com o solvente, em maiores proporções. Para se utilizar maiores taxas de solvente é necessário aumentar a razão de refluxo.

4.1.2.2 - RAZAO DE REFLUXO

Na Figura 09, observa-se que também existe um valor máximo para a razão de refluxo R quando se mantém constante a taxa S/E . Isto porque, se a razão de refluxo cresce muito, esta tende a diluir o solvente, fazendo com que a sua ação sobre as volatilidades dos componentes da alimentação "fresh" diminua. Se faz necessário escolher uma razão de refluxo R adequada bem como

uma taxa de solvente S/E, de modo que a carga térmica do reboiler não seja elevada. O efeito da razão de refluxo e da taxa de solvente sobre a carga térmica do reboiler será avaliado mais adiante.

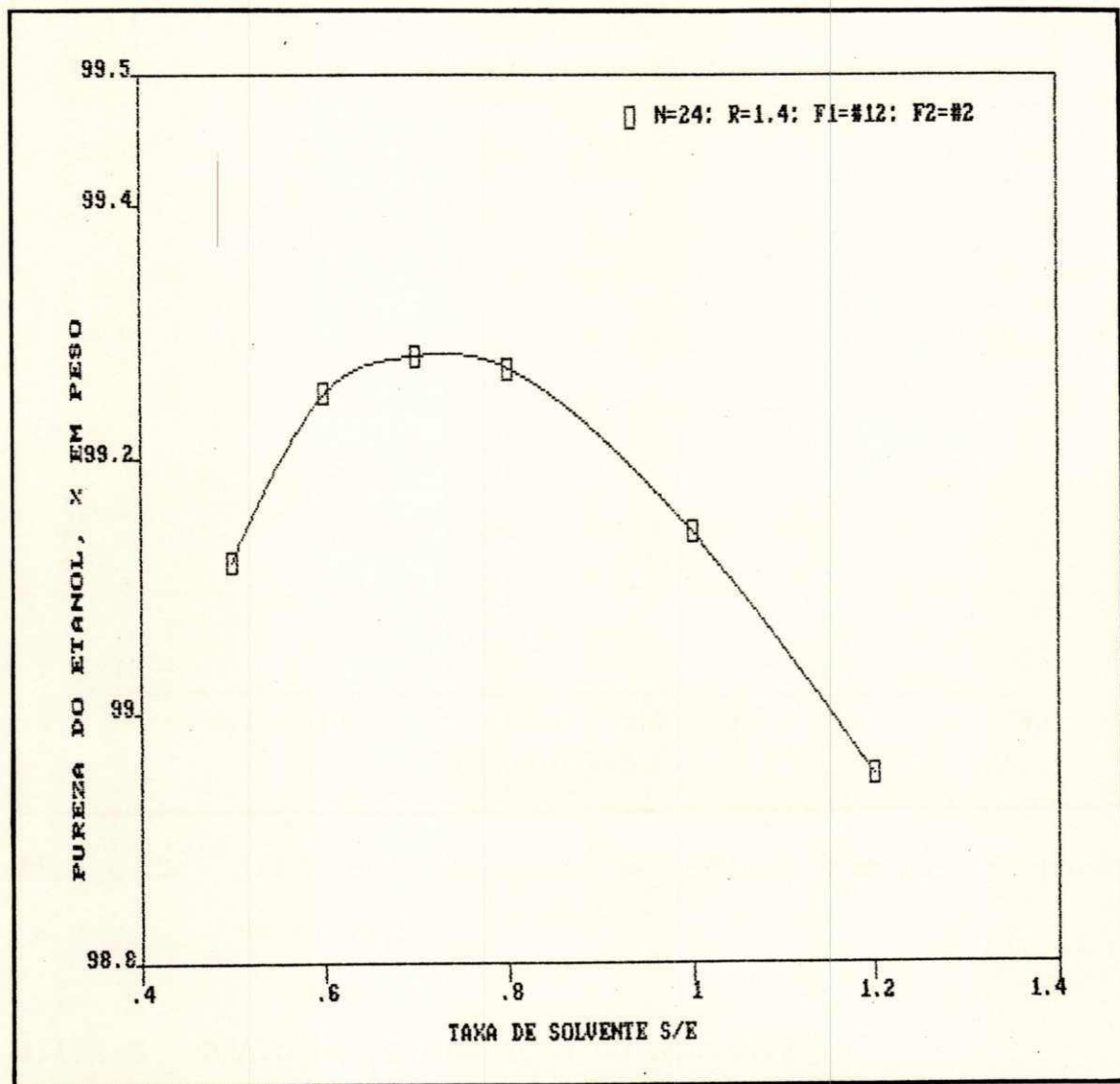


Figura 08 - Efeito da taxa de solvente S/E sobre a pureza do etanol.

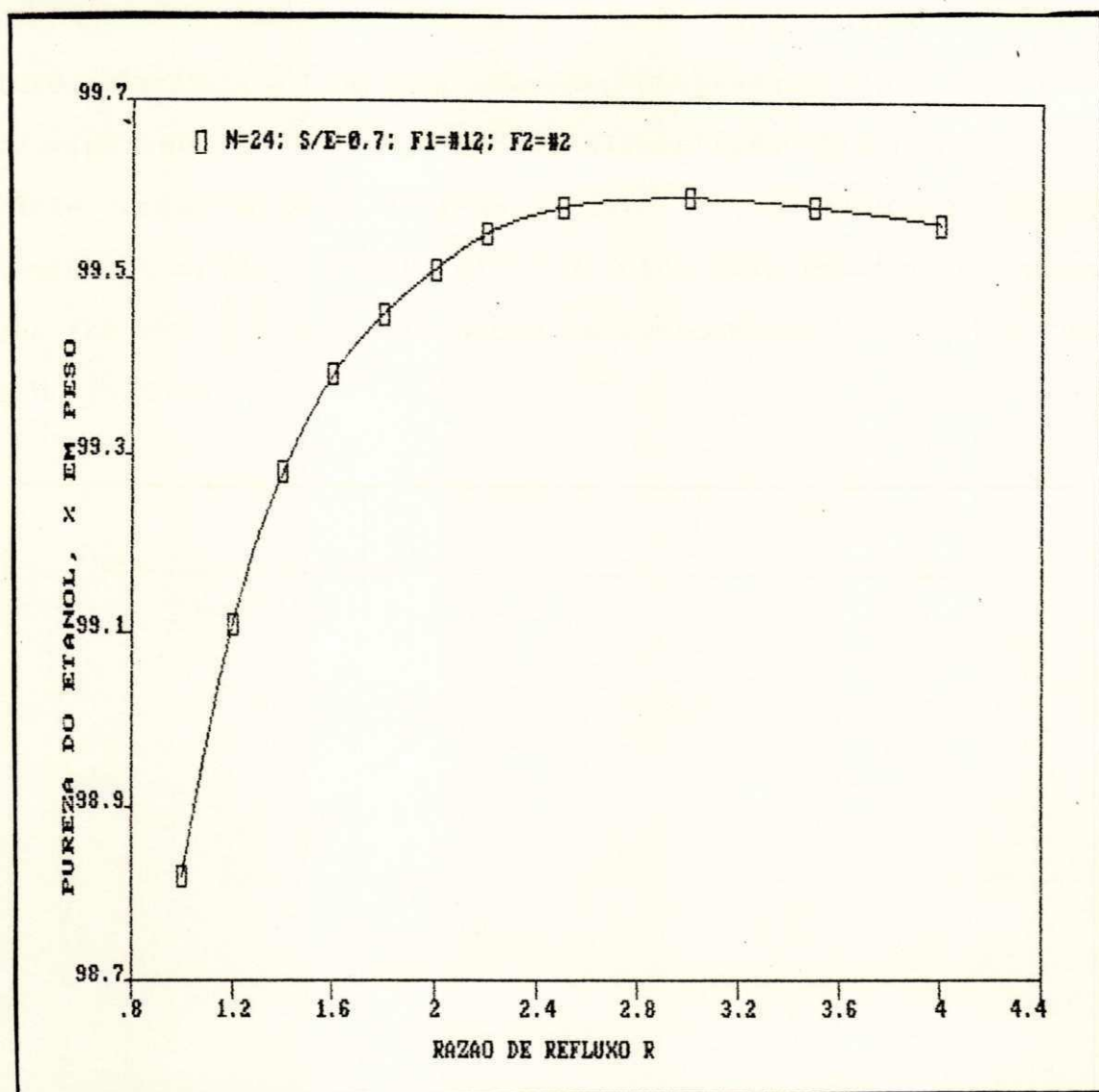


Figura 09 - Influência da razão de refluxo R sobre a pureza do etanol.

4.1.2.3 - PRATO DE ALIMENTAÇÃO DO SOLVENTE

O prato de alimentação do solvente é de fundamental importância para obtenção do etanol anidro. Na Figura 10 podemos observar que se a alimentação é feita logo nos pratos superiores, a pureza do etanol começa a diminuir. No caso extremo de se

alimentar o solvente no estágio número 1, juntamente com o refluxo, a pureza é bastante afetada, chegando mesmo a ser menor (aproximadamente 79 %) do que na alimentação "fresh".

Este comportamento, deve-se ao fato de que, além do solvente contaminar o produto final, ele é diluído pelo refluxo da coluna o que faz com que sua ação sobre os componentes da alimentação "fresh" diminua.

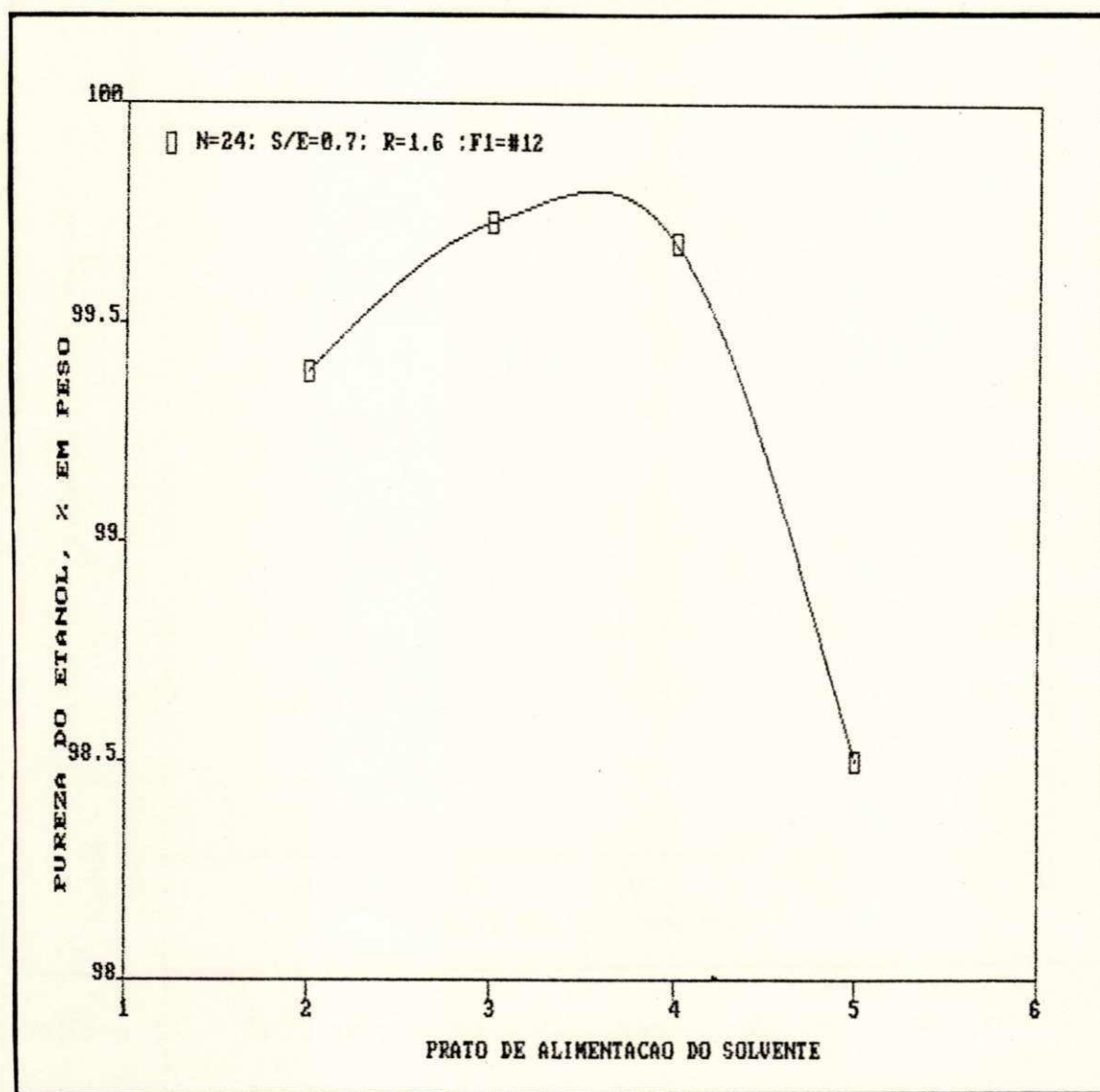


Figura 10 - Influência da localização do prato de carga do solvente.

Quando o solvente é alimentado muito abaixo do topo da coluna a pureza do etanol começa a baixar. Uma vez que o solvente não entra em ebulição, a tendência é escorrer ao longo da coluna, abaixo do prato de alimentação. Dessa forma, as baixas concentrações de solvente acima do prato de carga, são as responsáveis pela queda na pureza do etanol.

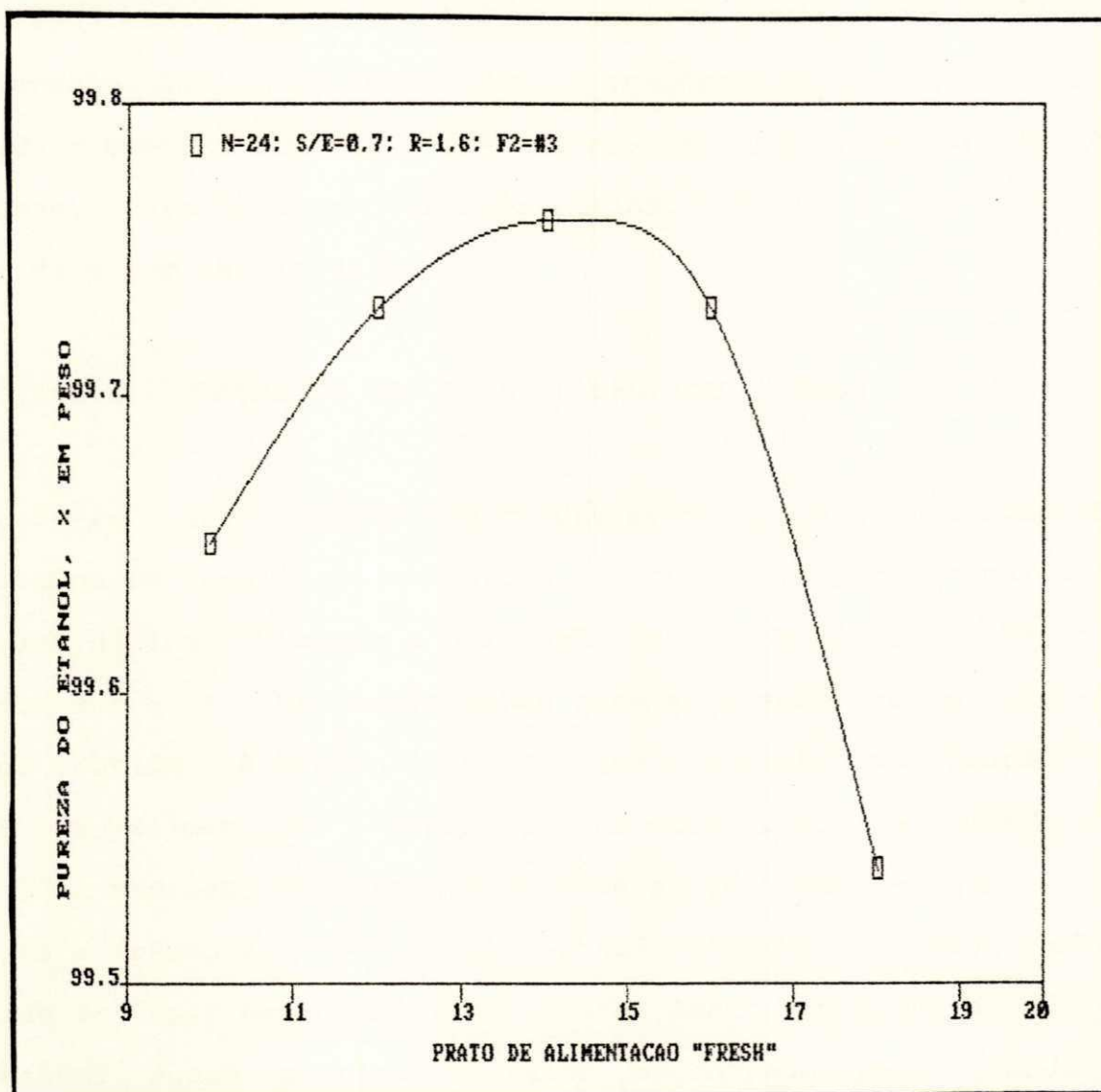


Figura 11 - Influência da localização do prato de carga da alimentação "fresh".

4.1.2.4 - PRATO DE ALIMENTAÇÃO "FRESH"

A Figura 11 mostra a influência da localização do prato da alimentação "fresh" sobre a pureza do etanol obtido. O máximo de pureza foi conseguido quando se alimentou a coluna no prato #14, contados a partir do topo. Acima deste prato, a pureza do etanol foi prejudicada pelo número insuficiente de bandejas para efetuar a separação. Abaixo do prato #14, a concentração de água é mais elevada o que faz com que a ação do solvente não seja suficiente, ou seja, para se alimentar mais abaixo, uma taxa de solvente maior deve ser utilizada.

4.1.2.5 - FRAÇÃO DE VAPOR NA ALIMENTAÇÃO "FRESH"

Sabe-se que o aumento da fração de vapor na alimentação de uma coluna de destilação extrativa faz com que a carga térmica do reboiler diminua. Visando a utilização deste conceito, foi feito o estudo sobre a influência deste parâmetro sobre a pureza do etanol obtido. A Figura 12 mostra que o aumento da fração de vapor da alimentação "fresh" altera muito pouco a pureza do etanol. A variação decrescente deve-se ao fato de que, quando se aumenta a fração de vapor na alimentação "fresh", aumenta também a vazão de vapor no interior da coluna. Assim, para que a pureza do etanol fosse mantida no valor encontrado para quando a alimentação "fresh" estava sob a forma líquida, uma maior taxa de refluxo deveria ser utilizada, conforme será visto no item 4.3.2.

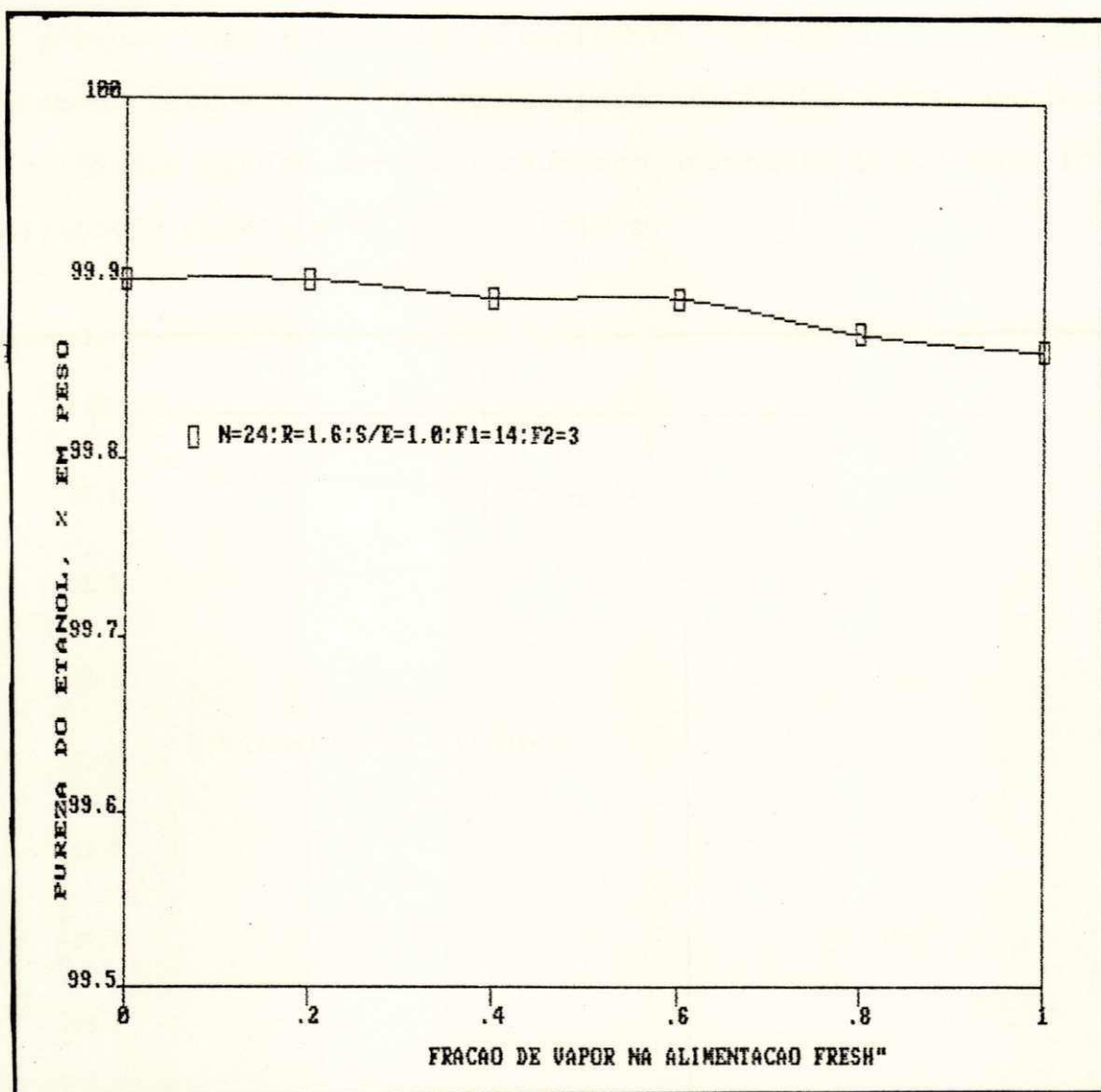


Figura 12 - Influência da fração de vapor na alimentação "fresh" sobre a pureza do etanol.

4.1.2.6 - TEMPERATURA DO SOLVENTE

O efeito da temperatura do solvente na pureza do produto final foi estudado em função das modificações de modelos físicos

propostos. Modificações estas que alteram a temperatura do solvente. Pela Figura 13, pode-se ver que a temperatura do solvente praticamente não influencia na pureza do produto final. Isto porque, na faixa de temperatura estudada, o solvente permaneceu sempre sob a forma líquida. Desta forma qualquer modelo físico poderá ser utilizado sem acarretar problemas para especificação desejada do etanol anidro.

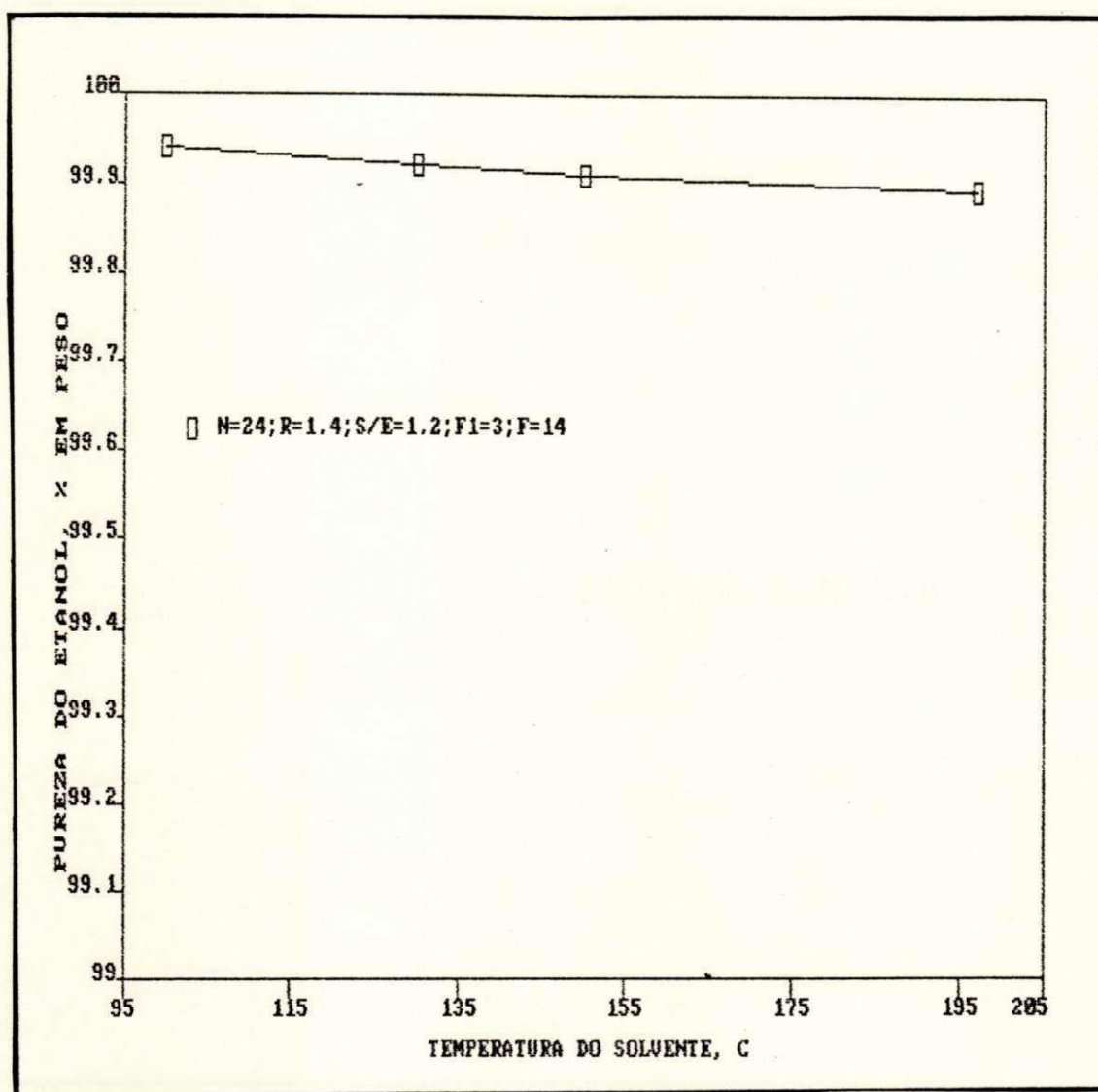


Figura 13 - Influência da temperatura do solvente sobre a pureza do etanol.

4.1.2.7 - NÚMERO DE ESTÁGIOS

A Figura 14 mostra o efeito causado pela variação do número de pratos na pureza do etanol. Como se pode observar acima de 24 pratos, o aumento da pureza é muito reduzido, o que inviabiliza tal investimento. Abaixo de 24 pratos é necessário a utilização de uma taxa de refluxo maior, o que implica em uma maior carga térmica para o reboiler.

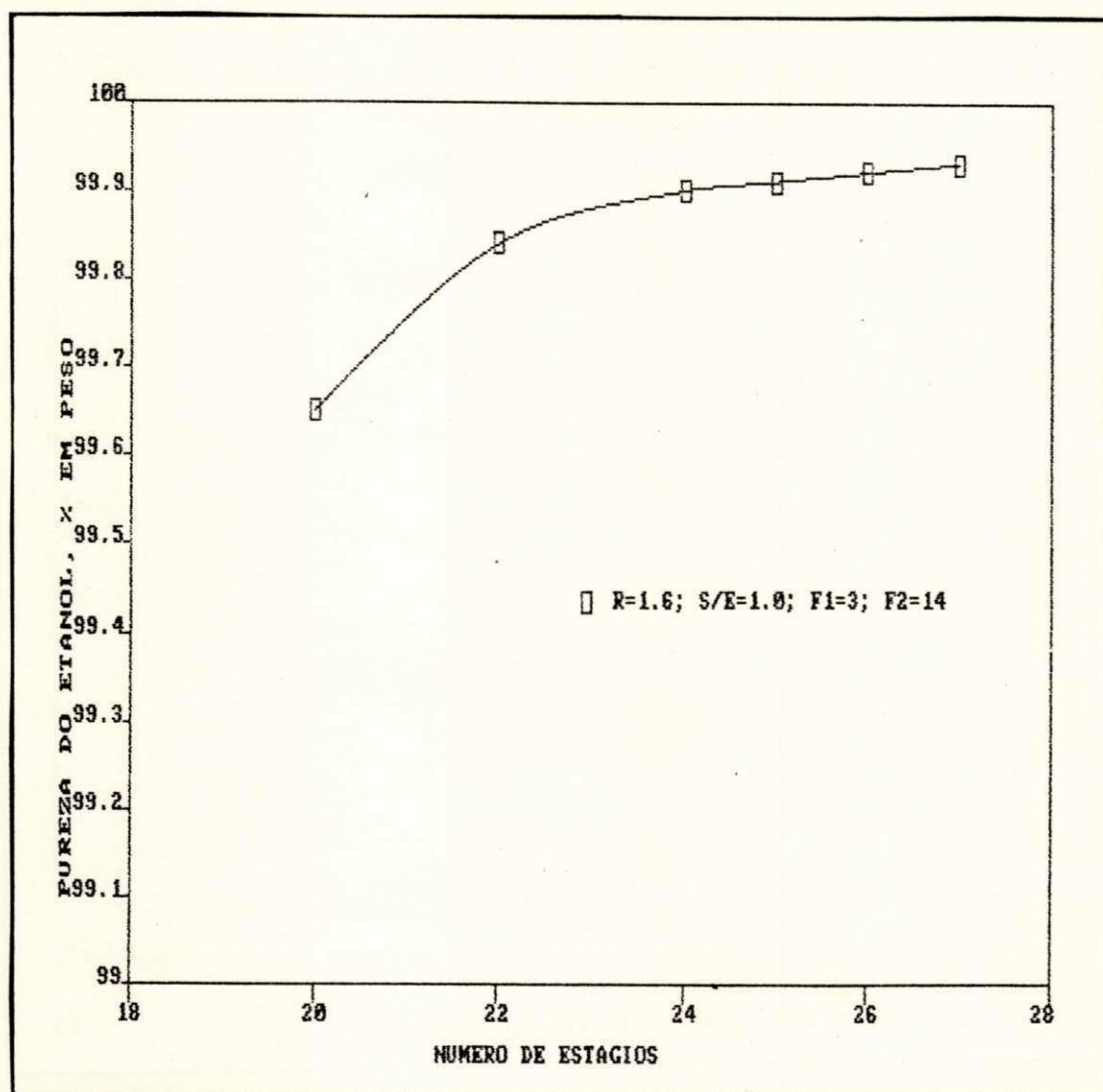


Figura 14 - Influência do número de estágios sobre a pureza do etanol.

4.1.2.8 - PUREZA DO SOLVENTE

Os resultados obtidos anteriormente foram realizados considerando o solvente como puro. O efeito da variação da concentração do solvente, em termos de água, pode ser observado na Figura 15.

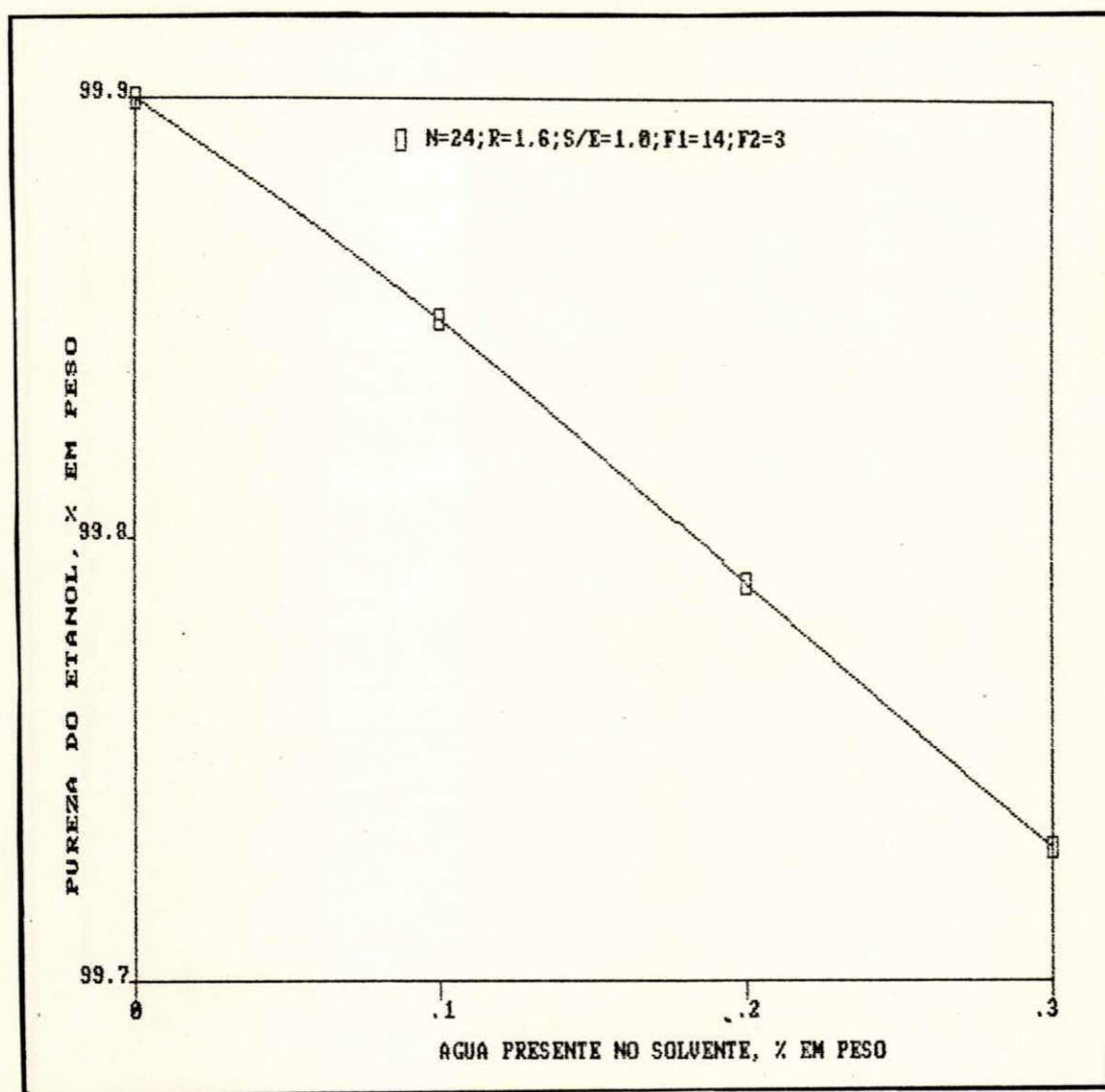


Figura 15 - Influência da concentração do solvente, em termos de água, sobre a pureza do etanol.

Concentrações de água no etileno glicol tão baixas quanto 0.3% já prejudicam a pureza do produto final. Isto porque o solvente é alimentado bem próximo do topo. Entretanto, isto não gera um problema maior porque a separação do etileno glicol da água, na coluna de recuperação, é facilmente alcançado, dado a grande diferença entre os pontos de ebulição deste dois compostos.

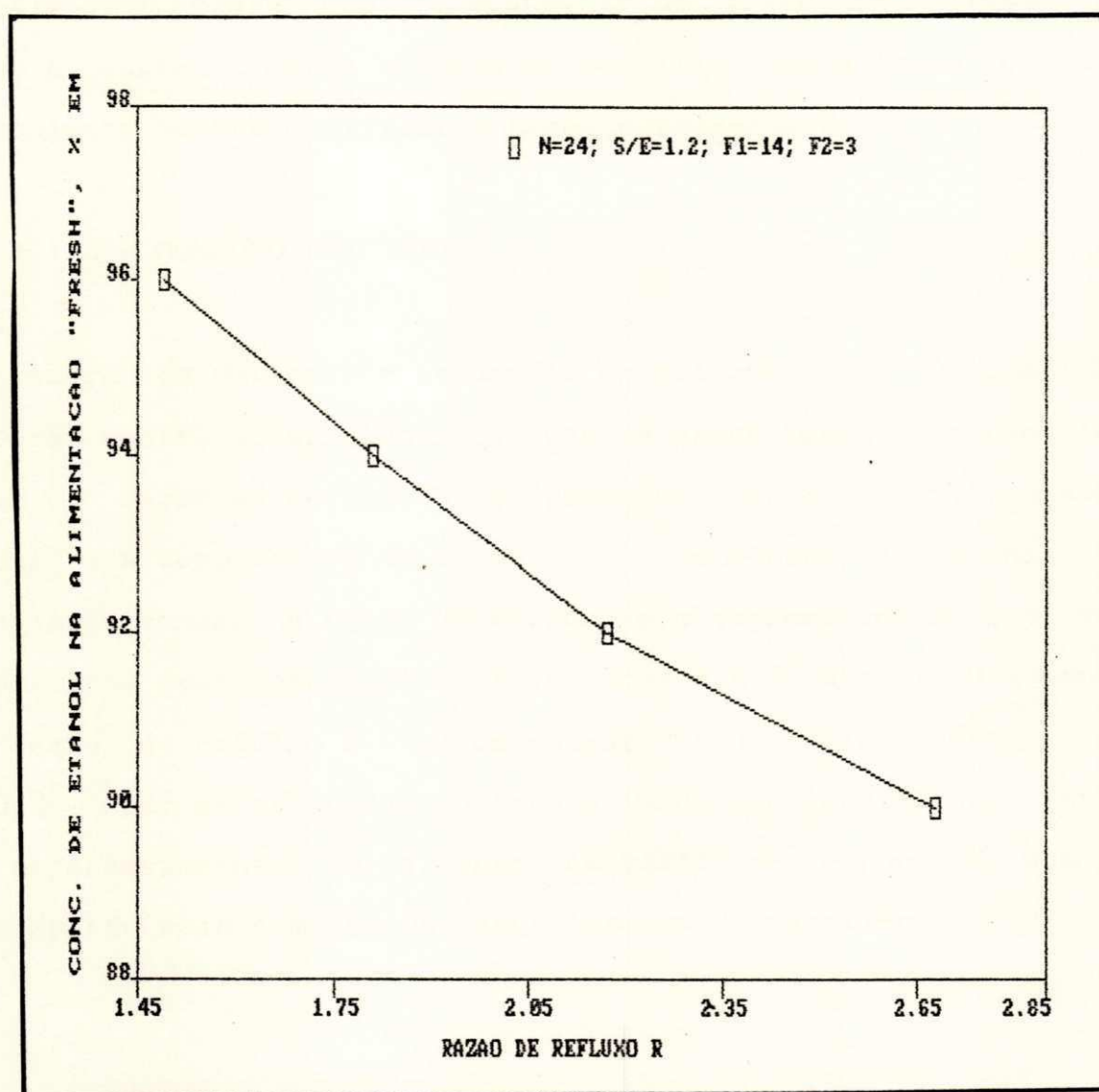


Figura 16 - Efeito da concentração da alimentação "fresh" sobre a razão de refluxo R.

4.1.2.9 - CONCENTRAÇÃO DA ALIMENTAÇÃO "FRESH"

Os cálculos realizados até agora foram para alimentação "fresh" como o azeótropo etanol-água. A Figura 16 mostra que, mesmo para concentrações de etanol inferior ao azeótropo o processo se mostra versátil. Para uma pureza de 99.9% em peso de etanol, basta alterar a razão de refluxo R, para se alcançar tal objetivo. É claro que com o aumento da razão de refluxo R, aumenta também a carga térmica do reboiler. Desta forma é mais conveniente tentar modificar a taxa de solvente S/E.

4.1.3 - CONSUMO ENERGÉTICO

Dentre os parâmetros estudados anteriormente os únicos que causaram modificações significativas na carga térmica do reboiler foram a razão de refluxo R, a fração de vapor na alimentação "fresh" e a temperatura do solvente. Semelhante às colunas de destilação comuns, a razão de refluxo e o consumo energético são diretamente proporcionais, conforme mostra a Figura 17. O aumento da razão de refluxo R implica no aumento da vazão interna de líquido. Como as retiradas de topo e fundo são constantes, então há necessariamente um aumento na vazão de vapor, o que é acompanhado pelo aumento da carga térmica do reboiler.

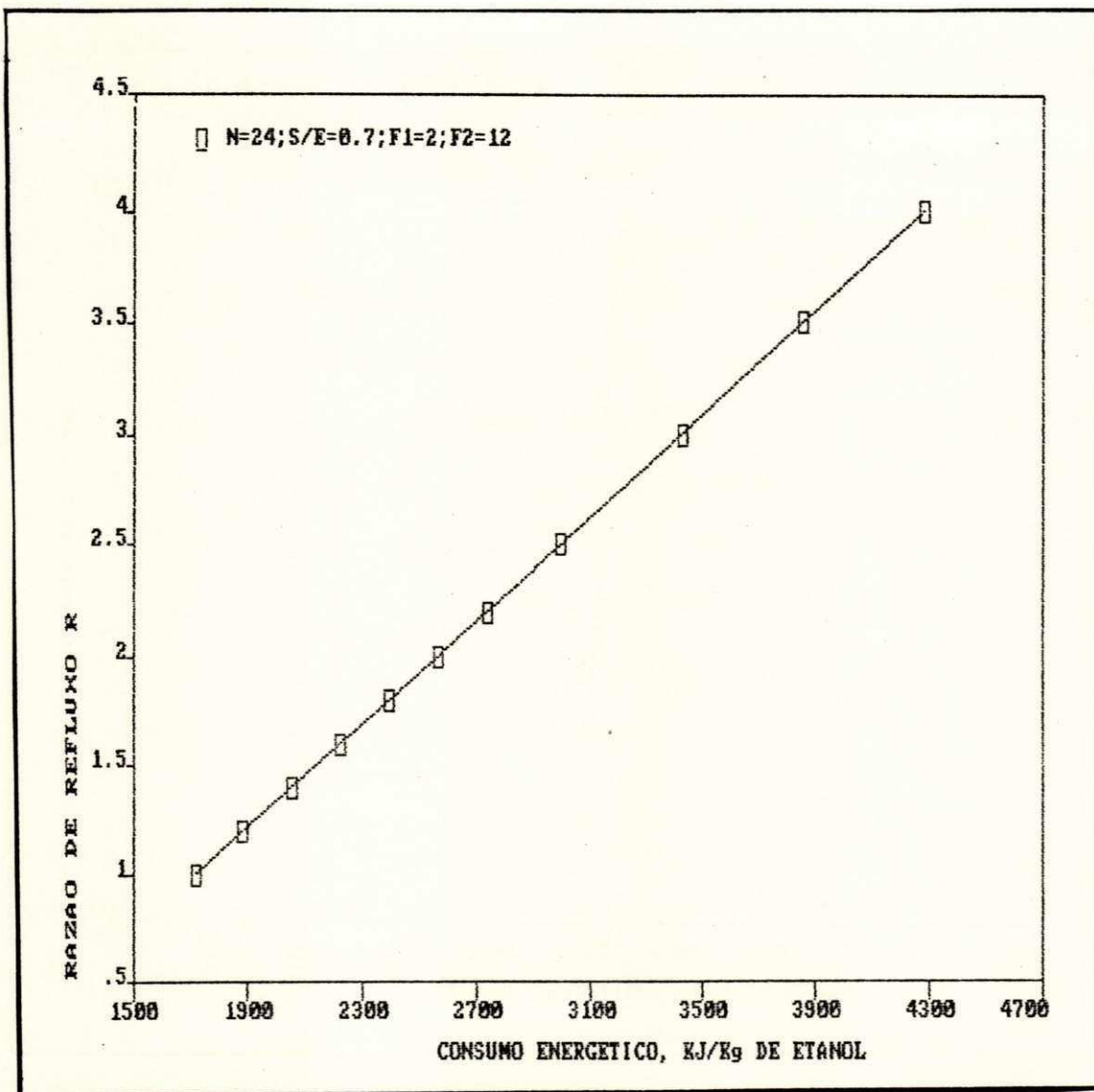


Figura 17 - Efeito da razão de refluxo sobre o consumo energético.

Contrário à razão de refluxo, a taxa de solvente S/E praticamente não causou alterações no consumo de energia, Figura 18. Com base nestes resultados, é preferível promover alterações na taxa de solvente para conseguir uma especificação desejada.

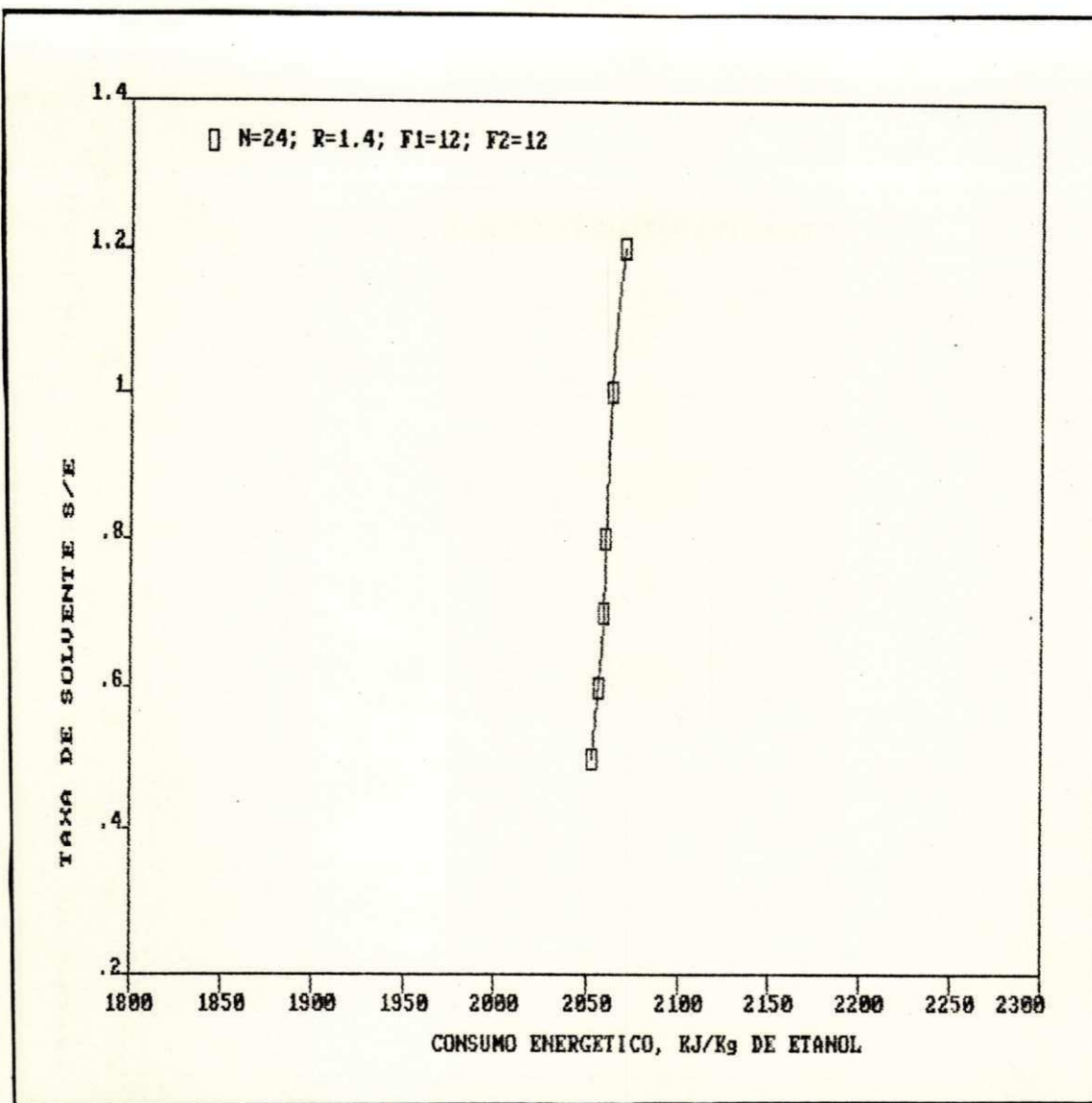


Figura 18 - Efeito da taxa de solvente S/E sobre o consumo de energia.

A alimentação "fresh" feita sob a forma de vapor diminui sensivelmente o gasto de energia no reboiler, em virtude dos componentes a serem separados já estarem vaporizados, como pode ser visto na Figura 19. Associado ao fato de causar pouco dano a pureza do etanol final, conforme item 4.1.2.5, os arranjos físicos para tornarem a alimentação "fresh" vapor, podem seguramente serem empregados.

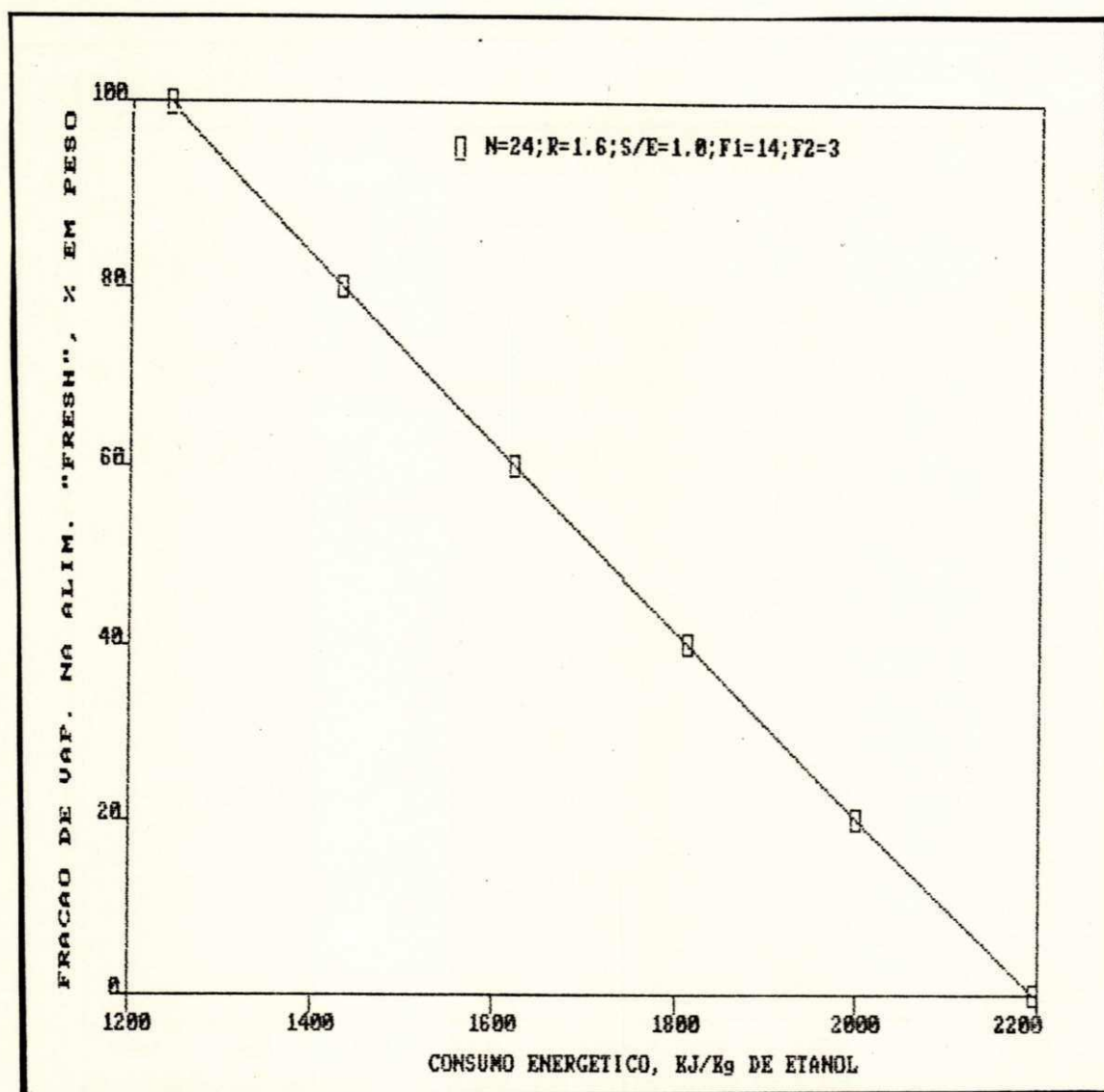


Figura 19 - Efeito da fração de vapor na alimentação "fresh" sobre o consumo energético.

A medida que o solvente era resfriado a carga térmica do reboiler foi aumentando, Figura 20, o que é facilmente explicável. Apesar do solvente não entrar em ebulição, ele contribui no aquecimento do etanol no interior da coluna. Assim, quanto mais frio estiver, menos contribuição dará para vaporização do etanol, sendo então necessário o aumento da carga térmica do reboiler.

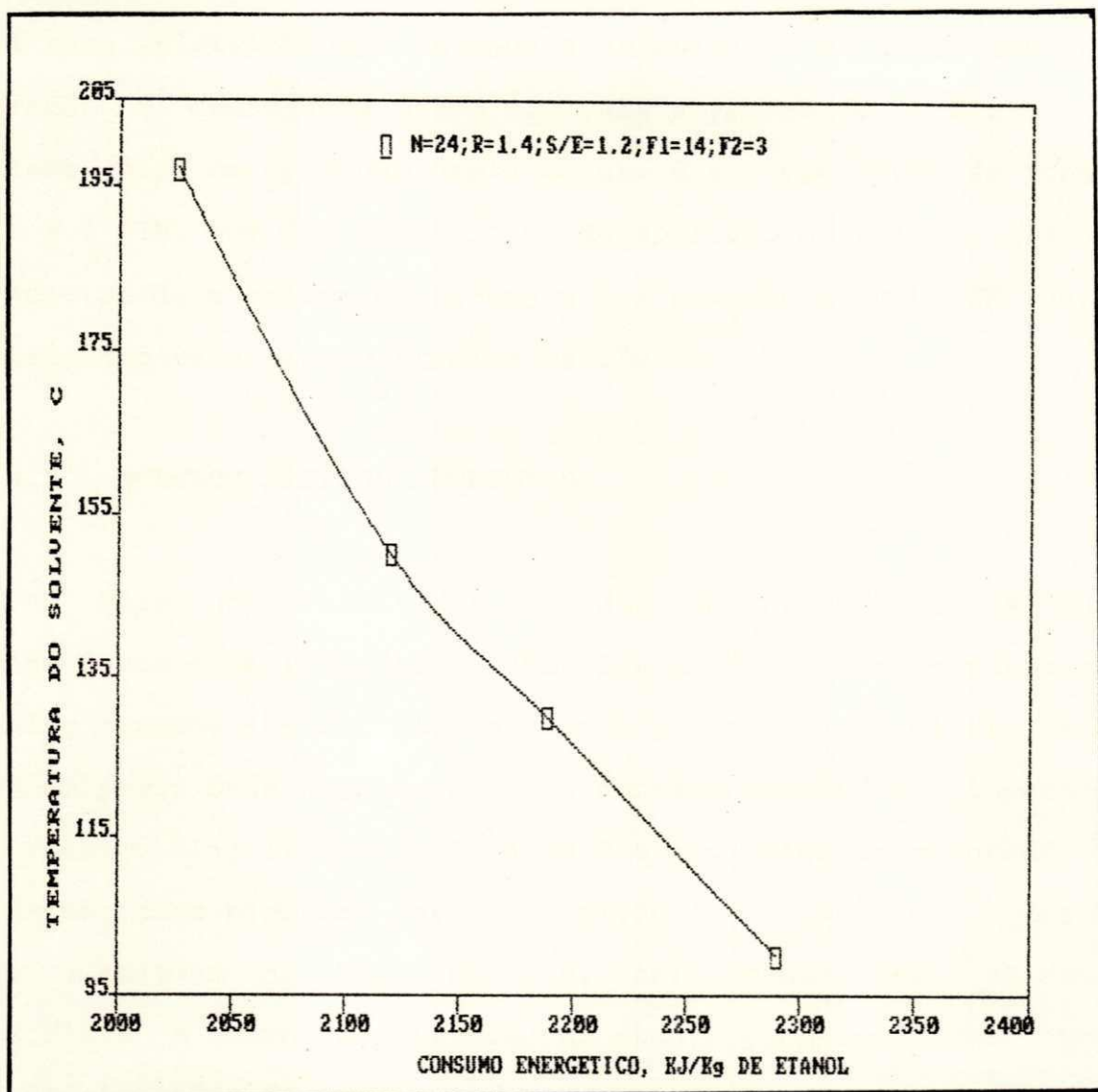


Figura 20 - Efeito da temperatura do solvente sobre o consumo energético.

4.2 - COLUNA DE RECUPERAÇÃO

A coluna usada para recuperar o etileno glicol tem doze estágios teóricos incluindo o condensador e reboiler. A alimentação é feita no terceiro estágio contado a partir do topo. Por se tratar de uma coluna de destilação comum, a sua

especificação é bastante simples. E em função da grande diferença entre as volatilidades da água e do etileno glicol, uma boa separação é conseguida mesmo com baixas razões de refluxo. Um problema grave na operação desta coluna é a temperatura de fundo, 197 C a 1 ATM, que é a temperatura de ebulição do etileno glicol. Por esta razão a coluna é operada a uma pressão de 0.5 ATM dando uma temperatura de fundo próxima de 170 C.

4.3 - MODELOS FÍSICOS PROPOSTOS

Com base nos resultados obtidos anteriormente, as duas colunas foram especificadas e interligadas de modo a operarem com um baixo consumo energético, estando a pureza do etanol fixada em 99.9% em peso. Duas hipóteses foram consideradas para alimentação "fresh": (1a) líquido frio à 40 C e (2a) líquido saturado.

Estas duas hipóteses para a condição da alimentação "fresh" estão baseadas no fato de que, normalmente nas unidades industriais a coluna de obtenção do azeótropo etanol-água opera com um trocador de topo que funciona apenas como condensador, visto que se for condensador-resfriador, a carga térmica do reboiler desta coluna irá aumentar bastante. Assim, o azeótropo só é resfriado antes de ir para a estocagem e, desta forma basta desviar o fluxo direto para a unidade de desidratação. Entretanto, havendo algum problema na unidade de obtenção do azeótropo, a alimentação da unidade de desidratação seria oriunda da estocagem de modo a não parar esta última. A temperatura de 40 C é uma aproximação razoável para o azeótropo estocado.

Vários modelos foram arranjados e os respectivos consumos

energéticos calculados. Em todo os modelos, a taxa de solvente foi fixada em 1.5

4.3.1 - MODELO PADRAO

O modelo padrão é composto de duas colunas com os respectivos condensadores e reboilers, como mostra a figura 21. Vale salientar que, neste modelo, os dois condensadores são totais, ou seja, o fluxo de tópo das duas colunas são líquidos saturados.

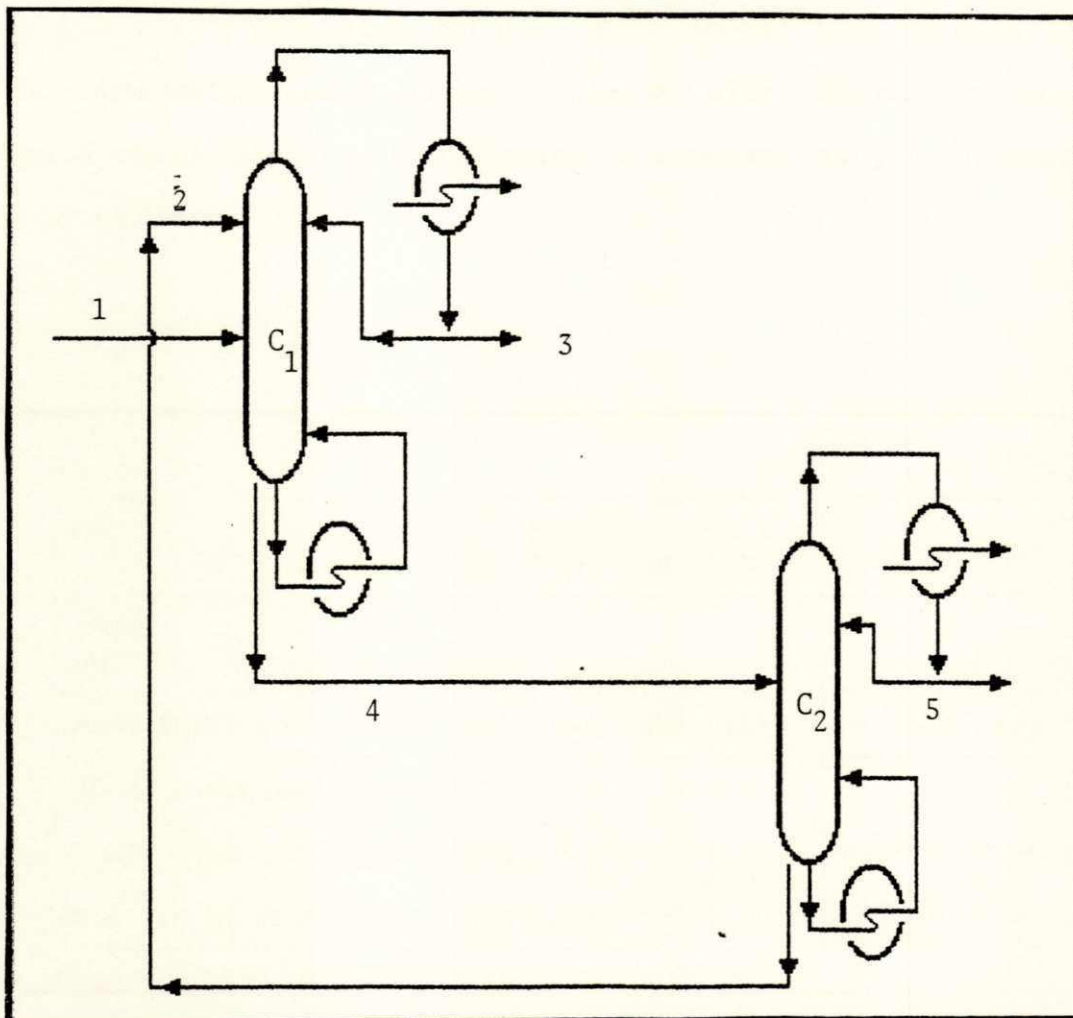


Figura 21 - Modelo padrão para a destilação extrativa

Utilizando a alimentação "fresh" como um líquido frio à 40 C,

o consumo específico foi de 2571 KJ/Kg de etanol, com uma razão de refluxo R de 1.42. Como líquido saturado, 2466 KJ/Kg de etanol e a razão de refluxo R em 1.42. Observa-se que a diferença entre os consumos não é muito significativa. Isto porque de líquido frio a líquido saturado somente calor sensível está envolvido

Com relação ao consumo de 1760 KJ/Kg de etanol encontrado por Meirelles (1989), apesar da taxa de solvente concordar de perto com o resultado experimental(0.64 p/ exp.; 0.6 teórico), a razão de refluxo R difere grandemente. Enquanto o experimental foi de 1.5 o teórico ficou em 0.5. Isto indica que na realidade o consumo energético será maior do que o valor citado acima, uma vez que a carga térmica do reboiler é diretamente proporcional à razão de refluxo.

CORRENTE	01	02	03	04	05	06	07	08	09	10
No	01	02	03	04	05	06	07	08	09	10
FRACAO VAPOR	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	-	-	-	-	-
COMPONENTE	KG/H	KG/H	KG/H	KG/H	KG/H	KG/H	KG/H	KG/H	KG/H	KG/H
ETANOL	960.0	0.0	959.0	1.0	0.95	-	-	-	-	-
AGUA	40.0	0.2	0.8	39.2	39.0	-	-	-	-	-
ET. GLICOL	0.0	1439.8	0.2	1439.8	.014	-	-	-	-	-

Tabela 04 - Características das correntes para o modelo da Figura 21. Alimentação "fresh" no estado de líquido frio.

CORRENTE No	01	02	03	04	05	06	07	08	09	10
FRACAO VAPOR	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	-	-	-	-	-
COMPONENTE	KG/H	KG/H	KG/H	KG/H	KG/H	KG/H	KG/H	KG/H	KG/H	KG/H
ETANOL	960.0	0.0	959.0	0.95	0.95	-	-	-	-	-
AGUA	40.0	0.2	0.77	39.22	39.0	-	-	-	-	-
ET. GLICOL	0.0	1439.8	0.18	1439.8	.014	-	-	-	-	-

Tabela 05 - Características das correntes para o modelo da Figura 21. Alimentação "fresh" no estado de líquido saturado.

4.3.2 - MODELOS COM INTEGRAÇÃO TERMICA

Com a integração térmica vários modelos podem ser arrançados visando a diminuição do consumo específico de energia. No modelo da Figura 22 observamos a introdução de um trocador de calor cujo objetivo é aproveitar as calorias da corrente de topo da coluna de extração, que neste caso se encontra sob a forma de vapor, isto é, o trocador de topo desta coluna é parcial. As calorias são utilizadas para vaporizar parte da alimentação "fresh" No caso da alimentação "fresh" se encontrar sob a forma de líquido frio, o consumo energético foi de 1766 KJ/Kg de etanol. A razão de refluxo R ficou em 1.48. Como líquido saturado 1682 KJ/Kg de etanol para R igual 1.52. Mesmo com o aumento da taxa de refluxo, o consumo energético foi sensivelmente menor, em relação ao modelo padrão. Isto indica que a fração de vapor na alimentação

"fresh" influencia muito mais a carga térmica do reboiler do que a razão de refluxo R.

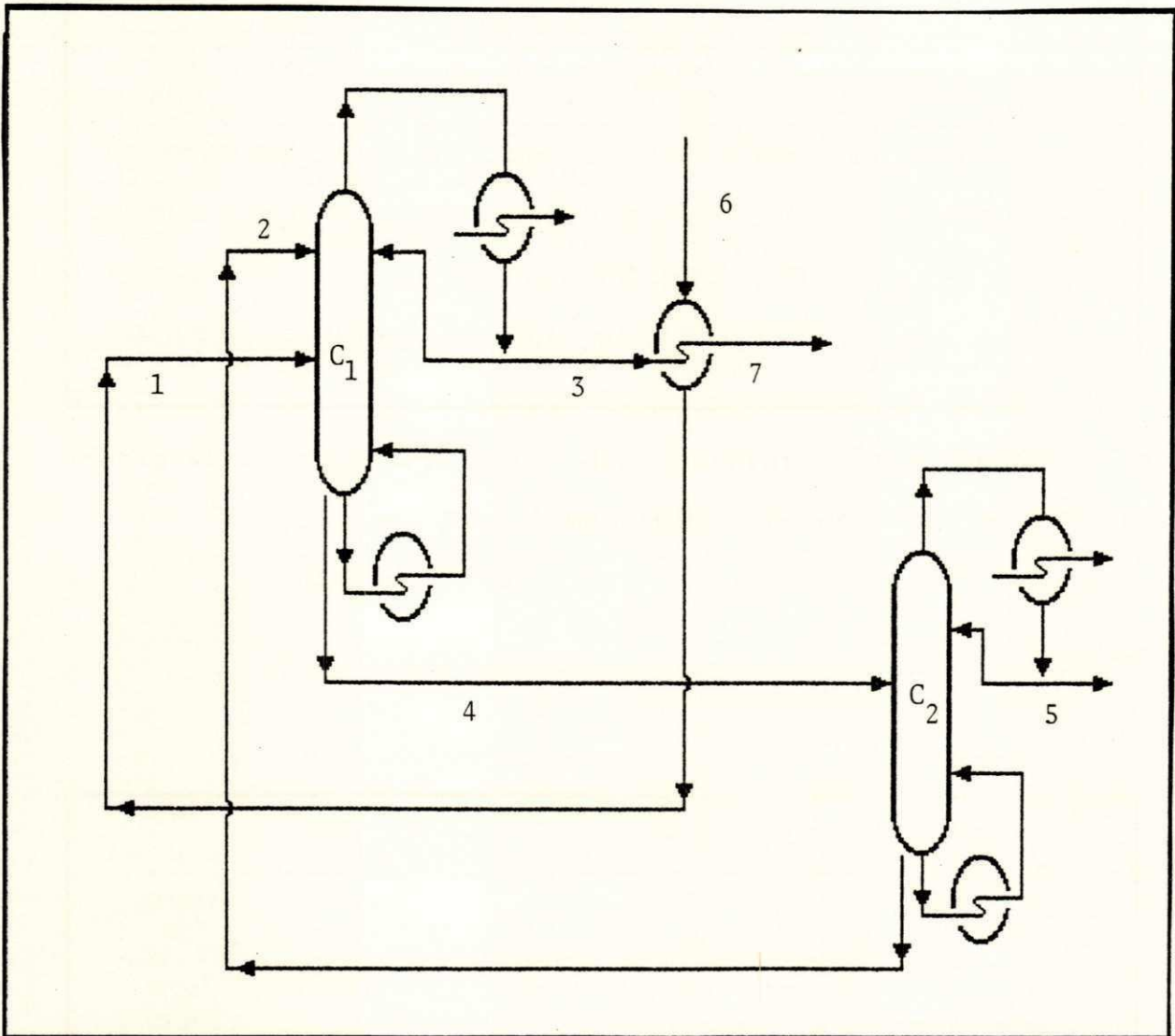


Figura 22 - Modelo 01 para integração térmica

Se observarmos a corrente de alimentação da coluna de extração, veremos que ela ainda não está completamente vaporizada: 90% para líquido saturado e 78% para líquido frio. Isto quer dizer que o consumo específico de energia poderá ser melhorado ainda mais. É este o objetivo do modelo da Figura 23.

CORRENTE No	01	02	03	04	05	06	07	08	09
FRACAO VAPOR	0.781	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	-	-
COMPONENTE	KG/H	KG/H	KG/H	KG/H	KG/H	KG/H	KG/H	KG/H	KG/H
ETANOL	960.0	0.0	959.03	0.958	0.958	959.99	959.03	-	-
AGUA	40.0	0.01	0.958	39.04	39.02	39.999	0.958	-	-
ET. GLICOL	0.0	1439.9	0.001	1439.9	0.016	0.0	0.002	-	-

Tabela 06 - Características das correntes para o modelo da Figura 22. Alimentação "fresh" no estado de líquido frio.

CORRENTE No	01	02	03	04	05	06	07	08	09
FRACAO VAPOR	0.899	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	-	-
COMPONENTE	KG/H	KG/H	KG/H	KG/H	KG/H	KG/H	KG/H	KG/H	KG/H
ETANOL	960.0	0.0	959.03	0.949	0.949	959.99	959.03	-	-
AGUA	40.0	0.01	0.96	39.04	39.02	39.999	0.96	-	-
ET. GLICOL	0.0	1439.9	0.001	1439.9	0.016	0.0	0.002	-	-

Tabela 07 - Características das correntes para o modelo da Figura 22. Alimentação "fresh" no estado de líquido saturado.

Nesta figura, 23, notamos a presença de mais um trocador visando o aproveitamento das calorías da corrente de fundo da coluna de recuperação, etileno glicol praticamente puro. Com esta modificação, a corrente de alimentação "fresh" após ser parcialmente vaporizada pela corrente de etanol anidro, segue para o novo trocador onde termina de ser vaporizada, ou seja, após a passagem ela se encontra totalmente sob a forma de vapor. Estando inicialmente como um líquido frio, o consumo energético ficou em 1616 KJ/Kg de etanol com R fixada em 1.31. Como líquido saturado, 1617 KJ/Kg de etanol com a razão de refluxo R em 1.44.

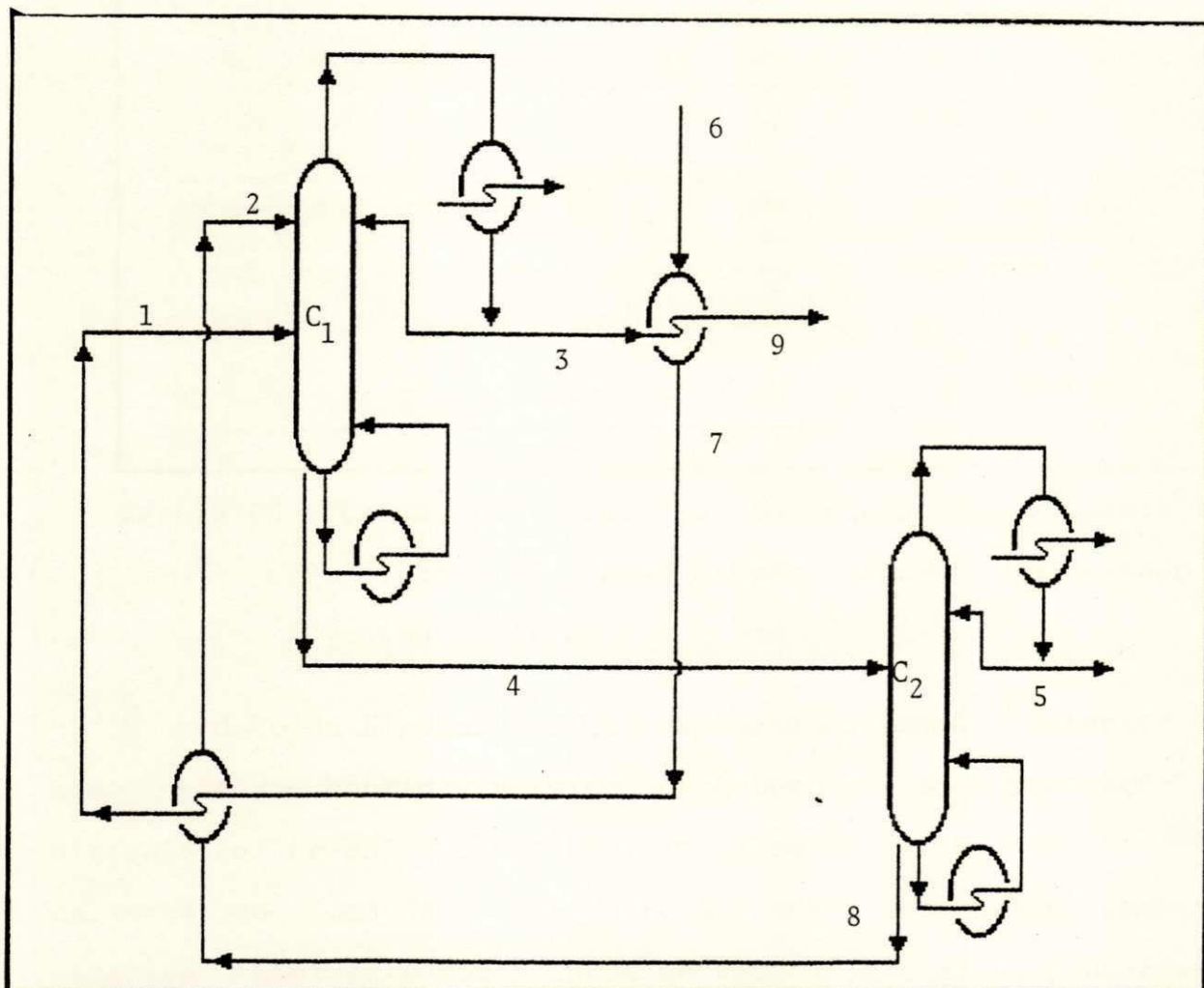


Figura 23 - Modelo O2 para integração térmica.

Mesmo com a razão de refluxo menor no caso da alimentação "fresh" como líquido frio, os consumos energéticos foram praticamente iguais. Isto porque, nesta situação a temperatura do solvente é bem menor, o que representa uma menor vazão interna de vapor. Nesta circunstância, uma menor razão de refluxo é exigida. Por outro lado, estando o solvente com uma temperatura mais baixa, menos contribuição ele dará para vaporização do etanol a ser destilado, exigindo assim uma maior carga térmica do reboiler.

CORRENTE No	01	02	03	04	05	06	07	08	09	10
FRACAO VAPOR	1.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.899	0.0	0.0	-
COMPONENTE	KG/H	KG/H	KG/H	KG/H	KG/H	KG/H	KG/H	KG/H	KG/H	KG/H
ETANOL	960.0	0.0	959.35	0.64	0.64	959.99	959.99	959.99	959.35	-
AGUA	40.0	0.03	0.64	39.37	39.34	39.999	39.99	39.99	0.64	-
ET. GLICOL	0.0	1439.9	0.001	1439.9	0.015	0.0	0.0	0.0	0.00	-

Tabela 08 - Características das correntes para o modelo da Figura 23. Alimentação "fresh" no estado de líquido frio.

O modelo da Figura 24 é uma variante do modelo anterior. O novo trocador continua servindo para terminar a vaporização da alimentação "fresh". No entanto, as calorias são provenientes da corrente de topo da coluna de recuperação, que neste caso se encontra totalmente sob a forma de vapor, isto é, o condensador desta coluna é parcial.

CORRENTE No	01	02	03	04	05	06	07	08	09	10
FRACAO VAPOR	1.0	0.0	1.0	0.0	1.0	0.0	0.78	0.0	0.0	-
COMPONENTE	KG/H	KG/H	KG/H	KG/H	KG/H	KG/H	KG/H	KG/H	KG/H	KG/H
ETANOL	960.0	0.0	959.35	0.64	0.64	959.99	959.99	959.99	959.35	-
AGUA	40.0	0.03	0.64	39.37	39.36	39.999	39.99	39.99	0.64	-
ET. GLICOL	0.0	1439.9	0.001	1439.9	0.015	0.0	0.0	0.0	0.00	-

Tabela 09 - Características das correntes para o modelo da Figura 23. Alimentação "fresh" no estado de líquido saturado.

Neste arranjo, considerando a alimentação "fresh" como líquido frio o consumo energético ficou em 1695 KJ/Kg de etanol com uma R de 1.51. Como líquido saturado 1615 KJ/Kg de etanol e R em 1.52. A diferença entre os consumos energéticos foi devido ao fato da vaporização apenas parcial, 88%, no caso da alimentação "fresh" como líquido frio.

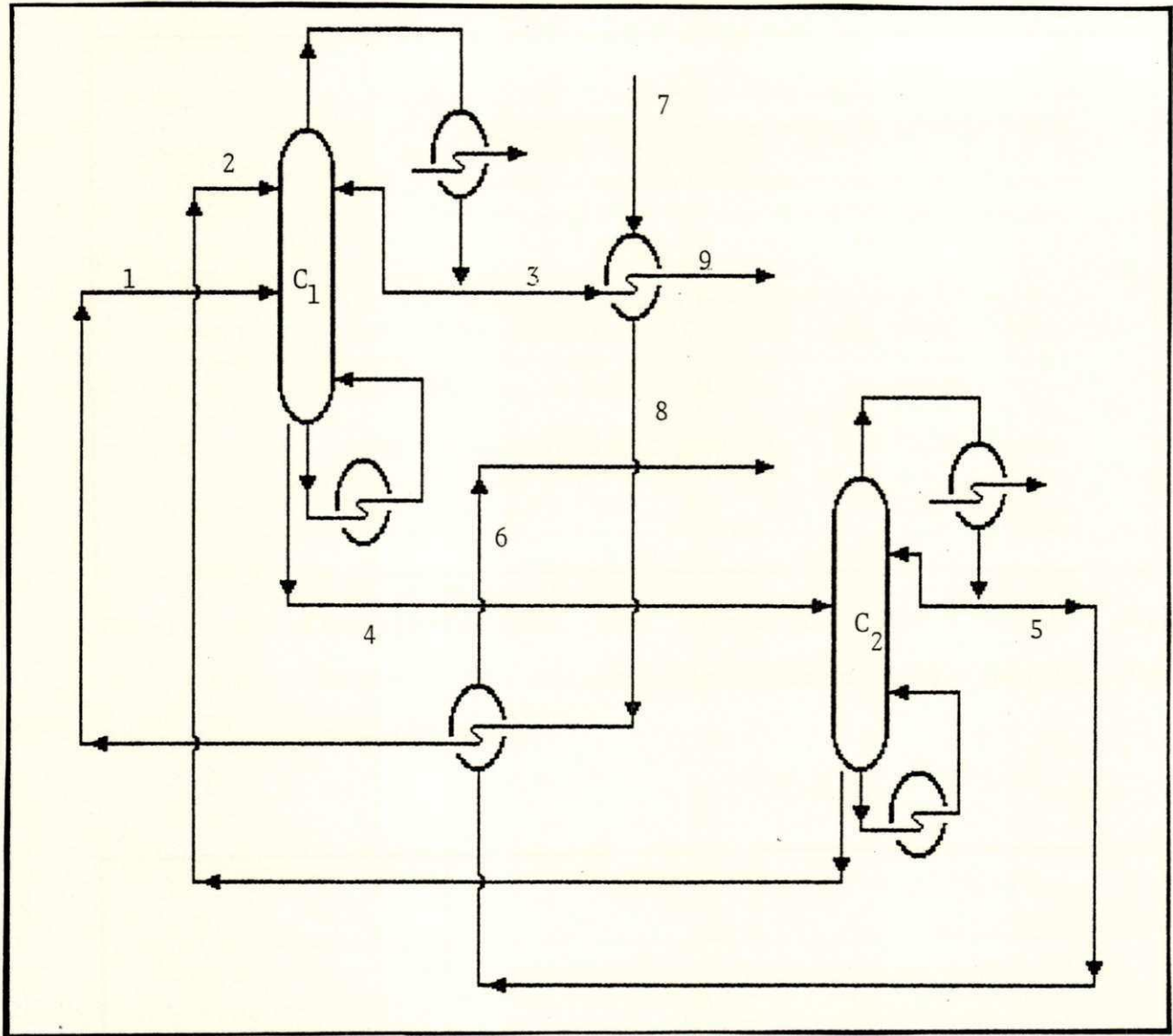


Figura 24 - Modelo 03 para integração térmica.

CORRENTE	01	02	03	04	05	06	07	08	09	10
FRACAO VAPOR	0.881	0.0	1.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.78	0.0	-
COMPONENTE	KG/H	KG/H	KG/H	KG/H	KG/H	KG/H	KG/H	KG/H	KG/H	KG/H
ETANOL	960.0	0.0	959.35	0.64	0.64	0.64	960.0	960	959.35	-
AGUA	40.0	0.015	0.64	39.37	39.370	39.36	40	40.0	0.64	-
ET. GLICOL	0.0	1439.9	0.001	1439.9	0.00	0.0	0.0	0.0	0.00	-

Tabela 10 - Características das correntes para o modelo da Figura 24 Alimentação "fresh" no estado de líquido frio.

CORRENTE	01	02	03	04	05	06	07	08	09	10
FRACAO VAPOR	1.0	0.0	1.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.899	0.0	-
COMPONENTE	KG/H	KG/H	KG/H	KG/H	KG/H	KG/H	KG/H	KG/H	KG/H	KG/H
ETANOL	960.0	0.0	959.35	0.64	0.64	0.64	960.0	960	959.35	-
AGUA	40.0	0.015	0.64	39.37	39.36	39.36	40	40.0	0.64	-
ET. GLICOL	0.0	1439.9	0.001	1439.9	0.00	0.0	0.0	0.0	0.00	-

Tabela 11 - Características das correntes para o modelo da Figura 24. Alimentação "fresh" no estado de líquido saturado.

5 - CONCLUSÕES

A destilação extrativa, mostrou-se como sendo um método viável para a obtenção do etanol anidro, dentro das especificações exigidas em nosso país, com um consumo energético bastante favorável. Para isso é necessário uma escolha adequada das condições operacionais, principalmente da razão de refluxo a ser utilizada, uma vez que o consumo energético mostrou-se mais dependente deste parâmetro do que qualquer outro.

Com tais condições, além de se obter um produto dentro dos padrões exigidos, a perda de etanol pelo fundo da coluna de extração, bem como a perda de solvente que sai através da corrente de produto final, foram muito reduzidas, o que favorece mais ainda o processo.

Com a utilização da integração térmica entre as correntes do processo, o consumo de energia pode ser bastante reduzido. A redução no consumo energético, será tanto maior, quanto maior for a fração vaporizada da corrente da alimentação "fresh".

O equilíbrio de fase é de fundamental importância em um processo de destilação, porque além de influenciar no número de estágios de uma coluna, causa modificações no cálculo do consumo energético. Entretanto, a equação do método UNIFAC, se apresenta bastante eficiente para o cálculo dos coeficientes de atividades, visto que os resultados obtidos, mostraram grande consistência em relação aos dados encontrados na literatura.

Por fim, vale enfatizar a simplicidade e flexibilidade operacional que a destilação extrativa oferece, em comparação com a destilação azeotrópica, mesmo nos trabalhos de simulação.

6 - SUGESTOES PARA PESQUISAS FUTURAS

Como não era objetivo do presente trabalho, os cálculos relativos à hidrodinâmica das colunas e aos trocadores de calor envolvidos nos processo, não foram levados em consideração, de forma que este seria um trabalho de grande importância para consolidar mais ainda o processo de destilação extrativa para obtenção do etanol anidro.

De posse destes resultados, poderia se pensar na montagem de uma planta piloto, mesmo que o modelo montado fosse o padrão, para levantamento das variáveis reais do processo.

Uma outra sugestão, seria a utilização de outro agente de extração, uma vez que, os glicóis em geral podem ser usados na destilação extrativa do etanol.

REFERENCIAS BIBLIOGRAFICAS

1 - Black, C., " Distillation Modeling of Ethanol Recovery and Dehydration Processes for Ethanol and Gasohol ", Chem. Eng. Progr., 76, 78-85, 1980.

2 - Black, C., " Simulation Applied to Special Industrial Problems ", Chem. Eng. Progr., 67, 53-60, 1982.

3 - Coates, J., " Azeotropic Separations ", Chemical Engineering, 121-136, 1960.

*

4 - Foust, A. S., Wenzel, L. A., Clump, W. C., Maus, L. e Andersen, L. B., " Princípios das Operações Unitárias ", Guanabara Dois, Segunda Ed., 116-132, 1982.

5 - Fredenslund, A., Jones, R. L. & Prausnitz, J. M., " Vapor-Liquid Equilibria Using UNIFAC ", AIChE J., 21, 1086, 1975.

6 - Guinot, H & Clark, F. W., " Azeotropic Distillation in Industry ", Transaction - Institution of Chemical Engineers, 189-199, 1938.

7 - Herfurth, H., Meirelles, A. J. & Weiss, S., " Azeotropdestillation von Ethanol-Wasser mit Cyclohexan als Schlepptmittel ", Chem. Techn., 39, 331-334, 1987.

8 - Knapp, J. P. & Doherty, M. F., " Thermal Integration of Homogeneous Azeotropic Distillation Sequences ", AIChE J., 36, 969-975, 1990.

9 - Lee, F. M. & Pahl, R. H., " Solvent Screening Study

Conceptual Extrative Distillation Process to Produce Anhydrous Ethanol from Fermentation Broth ", Ind. Eng. Chem. Proc. Des. Dev., 24, m 168-172, 1984.

10 - Leeper, S. A. & Wankat, P. C., " **Gasohol Production by Extraction of Ethanol from Water Using Gasoline as Solvent** ", Ind. Eng. Chem. Proc. Des. Dev., 21, 331-334, 1982.

11 - Lynd, L. R. & Grethlein, H. E., " **IHOSR/Extrative Distillation for Ethanol Separation** ", Chem. Eng. Progr., 81, 59-62, 1984.

12 - Lynn, S. & Hanson, D. N., " **Multiefect Extrative Distillation for Separation Aqueous Azeotropes** ", Ind. Eng. Chem. Proc. Des. Dev., 25, 936-941, 1986.

13 - Meirelles, J. A., Weiss, S. & Herfurth, H., " **Ethanol Dehydration by Extrative Distillation** ", J. Chem. Tech. Biotechnol., 53, 416-424, 1992.

14 - Meirelles, J. A., " **Etanol Anidro: Como Produzi-lo com Menor Consumo Energético** ", Publicação Resumida do Prêmio Jovem Cientista, 10-22, 1989.

15 - Meirelles, J. A., " **Destilação Extrativa: Uma Alternativa Viável na Obtenção do Etanol Anidro** ", Anais do VIII Congresso Brasileiro de Eng. Química, 1 volume, São Paulo, 1988.

16 - Moreira, J. A. e Goldemberg, J., " **O Programa Nacional do Alcool em 1988** ", Revista Brasileira de Energia, 1, 25-45, 1989.

17 - Othmer, D. F. & Trueger, E., " Recovery of Acetone and Ethanol by Solvent Extratction ", American Institute of Chemical Engeineers, 597-619, 1941.

18 - Othmer, D. F. & Wentworth, T. O., " Absolute Alcohol ", Industrial and Engineering Chemistry, 1588-1593, 1940.

19 - Perry, R. H. & Chilton, C. H., " Manual de engenharia Química ", Guanabara Dois, Quinta Ed., 13.1-13.50, 1980.

20 - Prokopakis, G. J. & Seider, W. D., " Feasible Specifications in Azaeotropic Distillation ", AIChE J., 29, 49-53, 1983.

21 - Reid, R. C., Prausnitz, J. M. & Poling, B. E., "The Propeties of Gases and Liquids ", McGraw-Hill, Fouth Ed., 314-332, 1988.

22 - Rush, F. E., " Energy Saving Alternatives to Distillation ", Chem. Eng. Progr., 65, 44-49, 1980.

23 - Smith, B. D., " Design of Equilibrium Stage Processes ", McGraw-Hill, 337-347, 1963.

24 - Smith, J. M. & Van Ness, H. C., " Introdução à Termodinâmica da Engenharia Química ", Guanabara Dois, Terceira Ed., 280-286, 1980.

25 - Stichlmair, J., Fair, J. R. & Bravo, J. L., " Separation of Azeotropic Mixtures via Enhanced Distillation ", Chem. Eng. Progr., 85, 63-69, 1989.

26 - Wentworth, T. O., Othmer, D. F. & Pohler, G. M., "

Absolute Alcohol, an Economical Method for its Manufacture. II
Plant Data ", American Institute of Chemical, 565-579, 1943.

27 - Winkle, M. V., " distillation ", McGraw-Hill, 434-476,
1967.